

**A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2016. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI**

I.

Matematika és természettudományok

**Budapest
2017**

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

Jenes Barnabás főosztályvezető

Kárpáti Mária
Koroknai Levente
Redler László

Idei Miklós

TARTALOMJEGYZÉK

Tartalomjegyzék.....	3
Előszó.....	6
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések.....	10
Matematikai és természettudományi kutatóközpontok és kutatóintézetek.....	12
MTA Atommagkutató Intézet.....	13
Az MTA Atommagkutató Intézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	27
MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont.....	30
Földrajztudományi Intézet.....	32
Földtani és Geokémiai Intézet.....	42
Geodéziai és Geofizikai Intézet.....	52
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet.....	62
Az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	72
MTA Energiatudományi Kutatóközpont.....	79
Atomenergia-kutató Intézet.....	80
Energia- és Környezetbiztonsági Intézet.....	91
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet.....	103
Az MTA Energiatudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	117
MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet.....	123
Az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	141
MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet.....	144
Az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	160
MTA Természettudományi Kutatóközpont.....	163
Anyag- és Környezetkémiai Intézet.....	168
Enzimológiai Intézet.....	184
Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet.....	204
Szerves Kémiai Intézet.....	212
Az MTA Természettudományi Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban..	221
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont.....	229
Részecske és Magfizikai Intézet.....	235
Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet.....	252
Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban.....	268

Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok	273
MTA–BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport.....	274
MTA-BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoport.....	277
MTA-BME Irányítástechnikai Kutatócsoport.....	280
MTA–BME Kompozittechnológiai Kutatócsoport	283
MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport.....	286
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport.....	289
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport	292
MTA-BME Sztochasztika Kutatócsoport	295
MTA-BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport.....	298
MTA-DE Egyenletek, Függvények, Görbék Kutatócsoport	301
MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport	303
MTA–DE Részecskefizikai Kutatócsoport	306
MTA-ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport.....	309
MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport	312
MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport.....	316
MTA–ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport	319
MTA-ELTE Geometriai és Algebrai Kombinatorika Kutatócsoport.....	322
MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport.....	325
MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport.....	328
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport	332
MTA–ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport.....	335
MTA–ELTE Vulkanológiai Kutatócsoport.....	338
MTA–ME Anyagtudományi Kutatócsoport.....	341
MTA–ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport	344
MTA–MTM–ELTE Paleontológiai Kutatócsoport.....	347
MTA–PE Levegőkémiai Kutatócsoport.....	350
MTA-PTE Molekuláris Kölcsönhatások az Elválasztás-Tudományban Kutatócsoport	353
MTA–PTE Nagyintenzitású Terahertzes Kutatócsoport.....	356
MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport	359
MTA-SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport.....	362
MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport.....	365
MTA–SZTE Fotoakusztikus Kutatócsoport.....	368
MTA-SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport.....	371
MTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport	374
MTA-SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport.....	377
MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport.....	380

A matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban	383
Matematikai és természettudományi egyetemi Lendület kutatócsoportok	420
MTA–BME Lendület Egzotikus KvantumFázis Kutatócsoport	421
MTA-BME Lendület Emberi Egyensúlyozás Kutatócsoport	424
MTA-BME Lendület Jövő Internet Kutatócsoport	425
MTA-BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport	428
MTA-BME Lendület Kiber-fizikai Rendszerek Kutatócsoport.....	431
MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport	434
MTA-BME Lendület Magneto-optikai Spektroszkópia Kutatócsoport.....	437
MTA-BME Lendület Spintronikai Kutatócsoport	440
MTA–BME Lendület Statisztikus Térelméleti Kutatócsoport.....	443
MTA-DE Lendület Funkcionálanalízis Kutatócsoport	446
MTA–ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport	449
MTA-ELTE Lendület CMS Részecske- és Magfizikai Kutatócsoport.....	451
MTA–ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport.....	454
MTA–ELTE Lendület EIRSA Asztrofizikai Kutatócsoport	457
MTA–ELTE Lendület Forró Univerzum Kutatócsoport	459
MTA-ELTE Lendület Katalízis és Szerves Szintézisek Kutatócsoport.....	461
MTA-ELTE Lendület Kémiai Szerkezet/Reaktivitás Kutatócsoport.....	464
MTA–ELTE Lendület Rácstérelméleti Kutatócsoport	467
MTA-PE Lendület Transzlációs Glikomika Kutatócsoport.....	470
MTA–SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport	473
MTA-SZTE Lendület Fotoelektrokémiai Kutatócsoport.....	475
MTA-SZTE Lendület Pórusos Nanokompozitok Kutatócsoport.....	478
A matematikai és természettudományi Lendület-kutatócsoportok főbb mutatói és pénzügyi adatai 2016-ban	481

ELŐSZÓ

A Magyar Tudományos Akadémiáról szóló 1994. évi XL. törvény szerint a kutatóintézet-hálózat évente – az egyes tudományterületeknek megfelelően (matematika és természettudományok, élettudományok, bölcsészet- és társadalomtudományok) három kötetben – közzéteszi az elért eredményeket, amelyeket adatokkal támaszt alá valamint ismerteti az elvégzett kutatások háttérét és körülményeit is.

2016 több kutatóintézet számára a költözés éve volt, ugyanis elkészült az MTA Humán Tudományok Kutatóháza, amely új otthont ad az MTA Bölcsészettudományi Kutatóközpont öt és az MTA Társadalomtudományi Kutatóközpont valamennyi intézete számára, illetve rövidesen szintén ide költözik a MTA Közgazdaság- és Regionális Tudományi Kutatóközpont két intézete is.

Martonvásáron új Agrár-innovációs Centrum létesül, amely magába foglalja a Magyar Tudományos Akadémia Agrártudományi Kutatóközpontjának új kutatótömbjét is. Az új centrumba, a Mezőgazdasági Intézet mellé költözik majd az MTA ATK jelenleg más telephelyen működő MTA Talajtani és Agrokémiai Intézete valamint az MTA Növényvédelmi Intézete is. Az épület felépítését 6 milliárd forinttal, a kutatási berendezéseket 3 milliárd forinttal támogatja a Kormány. A beruházás részét képezi a további 800 millió forint támogatásból megvalósuló látogatóközpont és a környezetében található Brunszvik-kert rekonstrukciója is. 2016-ban az MTA ATK keretein belül megalakult a teljes projekt lebonyolításáért felelős szervezeti egység és aláírták a Projektalapító Dokumentumot is. Megtörtént a teljes projektterület geodéziai felmérése, és a park projekt által érintett területén található értékes, megóvandó növények kijelölése, valamint a Kutatótömb épületére vonatkozó nyílt tervpályázati felhívás előkészítése.

2016-ban döntés született arról, hogy megújul az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézete is és 3,5 milliárd forintos kormány-támogatással új kutatóház épül a jelenlegi korszerűtlen épület helyett. A beruházás az MTA kormánytámogatásokat saját forrással kiegészítő programjának része, amelynek eredményeként a jelenleg költségesen működtethető ingatlanokban elhelyezett intézetek korszerű és kutatásra tervezett épületekben folytathatják a munkát. A KOKI új épületébe a tervek szerint 2019 év végén költözhetnek a kutatók.

Az MTA 2016-ban kutatóhálózatában a kiemelkedő tudományos tevékenység feltételeit biztosító kutatási infrastruktúra-fejlesztést 1504,7 millió forinttal támogatta. Ebből 100 millió forintnál magasabb összegű támogatásban nyolc MTA intézmény részesült: az MTA Atommagkutató Intézet, az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont, az MTA Energiatudományi Kutatóközpont, az MTA Ökológiai Kutatóközpont, az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet, az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont, az MTA Természettudományi Kutatóközpont és az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont.

A 2012-től működő új kutatóközpontok közül nyolc esetében, ezen kívül az Atommagkutató Intézetben az intézményvezetők vezetői megbízása lejárt 2015 decemberében. Az MTA elnöke – az akadémiai és közalkalmazotti törvény szerint – kiírta a pályázatokat a vezetői tisztségek betöltésére. 2016 januárjától négy kutatóközpontban az addigi főigazgató folytathatta tevékenységét. Új vezető került további négy kutatóközpont és az Atommagkutató Intézet élére.

2016-2017-ben került sor az akadémiai kutatóhálózat 2010-2015 közötti szakmai tevékenységének tudományos értékelésére, amelyről az Akadémiai Kutatóintézetek Tanácsa hozott határozatot még 2014 novemberében. Az akadémiai intézetek részletes értékelését a szűkebb szakterületek, diszciplínák képviselőiből álló 29 szakértői testület, valamint e testületek anyagaira támaszkodva három tudományterületi testület végezte. A mintegy kétszáz felkért értékelő tudós teljes értékelési munkája 2016 júniusától 2017 februárjáig tartott.

A szakmai felülvizsgálat alapvető célja volt, hogy az értékelés az egyes intézeteket korábbi teljesítményükhöz viszonyítsa, megvizsgálja és megállapítsa a hazai tudományosságon belüli helyüket, illetve felmérje az adott szakma nemzetközi trendjéhez viszonyított pozíciójukat. A kutatóintézet-hálózat 2012 óta új struktúrában működik, így a felülvizsgálat alkalmat adott az átalakítás előtti időszak utolsó két év, és az azóta eltelt négy év tevékenységének és feltételrendszerének összehasonlítására is. A kutatóhálózati értékelés hozzá kíván járulni ahhoz is, hogy az MTA megtehesse a szükséges egyeztetéseket kutatóhelyeinek középtávú tudományos kutatási, fejlesztési és innovációs stratégiájáról, és ehhez kellő humán- és pénzügyi forrásokat rendeljen a szakmai felülvizsgálat eredményeire és tanulságaira alapozva. A tudományterületi testületek egyetértettek abban, hogy nem tartják szükségesnek és indokoltnak a 2012 évi szerkezeti átalakítással létrejött jelenlegi kutatóhálózati struktúra lényegi (MTA-törvényt érintő) megváltoztatását. Az értékelési munka tapasztalatai alapján közös javaslatokat fogalmaztak meg a jövőre vonatkozóan.

Az MTA 2016. évi Közgyűlése határozatban kérte fel az MTA elnökét, hogy az akadémiai kutatóhálózatban 2012-ben történt átalakítások hatásának elemzésére bizzon meg egy kilenctagú bizottságot. A Bizottság a rendelkezésre álló kutatóhálózati szakmai és pénzügyi beszámolók alapján értékelte az átalakítás eredményeit, illetve javaslatot tett az esetleges korrekciókra a kutatóhálózat működésének hatékonyabbá tétele érdekében. A Bizottság 2016. július 5-e és 2017. január 10-e között hat alkalommal tartott ülést, amelyeken áttekintette a rendelkezésére bocsátott háttéranyagokat. Ezt követően kérdőíves formában kérte ki a főigazgatók, az intézetigazgatók, illetve kutatóközpontként 5-6, reprezentatíván kiválasztott kutatócsoport-vezető véleményét. A megkérdezettek elsősorban a működéssel, a kutatási körülményekkel, az intézeti tanácsokkal, a döntési folyamatokkal kapcsolatban fejtették ki véleményüket. A Bizottság számos megállapítást és javaslatot fogalmazott meg a kutatóhálózat átalakításának hatásaival kapcsolatban, hogy a kutatóhelyek hatékonyabban, a vezetési- és gazdasági problémák csökkentésével folytathassák tevékenységüket.

A két testület – a kutatóhálózat hosszú távú tevékenységének átfogó szakmai felülvizsgálatát végző, illetve az intézethálózat átalakításának elemzésére létrehozott szakértői bizottság – elnökei és képviselői az MTA elnökének felkérésére közösen tárgyalták meg a tevékenységük eredményeképpen született javaslatokat és fogalmaztak meg közös ajánlásokat az Akadémia elnöke és az Elnökség számára.

Az MTA intézményeiben foglalkoztatottak átlagléttszáma 2016-ban 5 517 fő volt, ez 2,5 %-kal magasabb, mint a 2015. évi adat. A kutatók (beleértve a támogatott kutatócsoportok kutatóit is) száma 3 350 fő, ez 9%-kal magasabb a 2015. évinél. Az elmúlt években jelentősen fiatalodott az Akadémia kutatói állománya, amelyhez hozzájárultak a fiatalabb generációt támogató kutatási pályázatok is.

Az MTA fejezet 2016 évi jóváhagyott költségvetési támogatása 37 393,2 millió Ft volt – ami főként a Humán Tudományok Kutatóháza beruházási támogatásának csökkenése miatt – 6%-kal alacsonyabb volt az előző évinél. Ebből a költségvetési szervek (intézmények) támogatása

27 254,8 millió Ft, a fejezeti kezelésű támogatás összege 10 138,4 millió Ft volt. 2016-ban a tervezett bevétel 18 801,6 millió Ft volt, azonban a tényleges saját bevétel 57 693,3 millió Ft, ami ötödével magasabb az előző évinél.

A tavalyi év kiemelkedően sikeres volt a magyar kutatók – köztük az MTA szakemberei – számára az Európai Kutatási Tanács (ERC) pályázatain. A kutatói kiválóság egyik mércéjének számító pályázaton 2016-ban 12 hazai kutató nyert támogatást, egyenként mintegy 1,5-3,5 millió euró összegben. A program 2007. évi indulása óta ez a legjobb magyar eredmény. A nyertesek közül kilencen az akadémiai kutatóhálózatban dolgoznak, hatan az MTA Lendület programjának korábbi nyertesei. Az eredmények a Lendület program és a célzott rásegítő támogatások hatékonyságát támasztják alá a magyar kutatók pályázati sikereinek tükrében.

A magyar kutatók voltak a legsikeresebbek 2016-ban az EU Horizont 2020 legnagyobb presztízsű együttműködési pályázatán, a „Teaming” kutatási kiválósági programban. A 27 országból 169 pályázat érkezett be, 10 nyertest hirdettek ki, köztük két konzorciumot, amelyben MTA kutatóhely vesz részt (MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet, Budapest, 1,6 milliárd Ft, futamidő: 7 év; MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Szeged, 0,68 milliárd Ft, futamidő: 4 év).

A 2012. évi átalakítások óta 2016 volt a legsikeresebb pályázati év az MTA kutatóhálózata számára. A 2015 év végén megnyílt, európai uniós források támogatásával meghirdetett hazai pályázati lehetőségek komoly esélyt biztosítottak az MTA intézményei számára újabb kutatási források megszerzéséhez.

2016-ban az akadémiai kutatóintézetek összesen 262 kutatási pályázatot nyertek, 217 hazai (139 NKFIH-OTKA, 14 NKA, 52 NGM/GINOP, 4 NGM/egyéb strukturális, 8 egyéb), és 45 nemzetközi pályázatot. Tíz akadémiai kutatóhely összesen 26,496 milliárd forint támogatásban részesül különböző kutatás-fejlesztési célok megvalósítására a Gazdaságfejlesztési és Innovációs Operatív Program pályázatai révén. Az MTA Agrártudományi Kutatóközpont hat (4,03 milliárd Ft), az MTA Atommagkutató Intézet hat (4,363 milliárd Ft), az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont három (1,288 milliárd Ft), az MTA Ökológiai Kutatóközpont négy (2,0 milliárd Ft), az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont huszonnyolc (11,241 milliárd Ft), az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet kettő (1,88 milliárd Ft), az MTA Természettudományi Kutatóközpont három (0,616 milliárd Ft), az MTA Társadalomtudományi Kutatóközpont egy (0,217 milliárd Ft), a Wigner Fizikai Kutatóközpont kettő (0,380 milliárd Ft) valamint az EK egy (0,479 milliárd Ft) pályázata volt sikeres az EU Strukturális Alapjaiból támogatott pályázatokon.

Az akadémiai kutatóintézet-hálózatban 2016-ban valamivel kevesebb tudományos publikáció született, mint 2015-ben. Az egy évvel ezelőtti adatokhoz képest a publikációk száma az élettudományok területén gyakorlatilag változatlan, a humán- és társadalomtudományok terén 10,5%-kal, míg a matematikai és természettudományok területén 7,5%-kal csökkent. A folyamat hátterét a kutatóközpontok, illetve az önálló kutatóintézetek 2015-ben elindított hosszú távú értékelése, valamint célzott elemzések során tárjuk fel, figyelemmel a minőségi szempontokra is.

A felsőoktatásban oktató kutatóintézet-hálózati kutatók száma a matematika és természettudományok területén szignifikánsan nőtt, a másik két tudományterületen

lényegében változatlan. 2016-ban a kutatóintézet-hálózati kutatók 40,5 %-a oktatott felsőfokú oktatási intézményben (2015-ben ez a mutató 38,6% volt). Azon doktori iskolák száma, ahol a vezető az MTA intézethálózatának kutatója, 21-ről 25-re nőtt. Az MTA közfeladatai megvalósításában továbbra is fontos partnerként tekint az egyetemekre, hiszen az együttműködés erősítése mindkét fél számára előnyökkel jár.

A 2016. év folyamataiból a Magyar Tudományos Akadémiának fontos feladatai származnak, hiszen a hat éves kutatási tevékenységet felölelő szakmai értékelés tanulságait felhasználva több változtatás is szükséges lehet a kutató-hálózat működésének, tudományos stratégiájának meghatározásában. A 2017. évi közgyűlés áttekinti az MTA Alapszabályát és ezt követően születhetnek meg a szükséges változásokat támogató Alapszabály módosítások. Az MTA kutatóközpontok 2012. évi létrehozásával és működésével kapcsolatos tapasztalatok is eredményezhetnek kisebb változtatásokat a központok szervezeti működésében, ami az intézmények SZMSZ-einek módosítását vetíti előre.

Az MTA kiemelt feladata továbbra is a 2016 májusában az MTA koordinálásával elindult Nemzeti Víztudományi Kutatási Program végrehajtása. A Program része lesz a készülő Nemzeti Vízstratégiának (Kvassay Jenő Terv) és ennek keretében méri fel, hogy milyen tematikával és szervezeti háttérrel végezhető a környezeti és víztudományi kutatások. A munka célja, hogy jó ökológiai állapotban és minőségben őrizzük meg hazai vízkészletünket.

Az egyes tudományterületeknek megfelelő kötetek áttekintést nyújtanak a Magyar Tudományos Akadémia kutatóhálózatának 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredményeiről, kiemelve, hogy az adott eredmény hogyan járul hozzá Magyarországi versenyképességének javításához.

Budapest, 2017. április 05.

Török Ádám
főtitkár

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

A táblázatban szereplő adatok egy részét a központok, az intézetek vagy a csoportok adták meg. A központok és az intézetek pénzügyi és létszámadatait a Fejezeti és Intézményi Pénzügyek Osztálya, a csoportokét pedig a Támogatott Kutatócsoportok Irodája (TKI) szolgáltatta a pénzügyi beszámolók alapján. A publikációs és idézettségi adatokat a Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) adatbázisából való lekérdezés alapján közöljük. Az idézettségi adatok – a nemzetközi gyakorlatra áttérve – a beszámolási évet megelőző évre (most 2015-re) vonatkoznak. Többéves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg került feltüntetésre.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

¹ Az éves gazdasági beszámolóban szereplő átlagos statisztikai állományi létszám.

² A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2016. évi tényleges átlagléttszáma. Az átlagléttszámba beletartoznak a részmunkaidőben foglalkoztatottak is. Ezekben az esetekben a részmunkaidősök létszáma a ledolgozott órák alapján lett teljes munkaidős létszámra átszámítva. Az átlagléttszám a havi átlagos létszámadatok egyszerű számtani átlaga, vagyis éves átlagszámítás esetén 12-vel kell elosztani a havi átlagos létszámadatok összegét.

³ Itt tájékoztatásul külön megadjuk azoknak az akadémikusoknak a tényleges számát, akik a kutatóhellyel munkaviszonyban nem állnak ugyan, de tudományos munkájuk kapcsolódik a kutatóhely tevékenységéhez.

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

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

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

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

⁷ A 2016-os összesített impaktfaktorhoz a folyóiratok legutóbbi (2016-ban közzétett, de a 2015-ös évre vonatkozó) impaktfaktorát használjuk.

⁸ A kutatóhelyhez rendelt összes eddigi publikációra 2015-ben kapott (a megjelenési év: 2015) hivatkozások száma.

⁹ A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

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

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

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

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

¹⁴ Mindazon személyek száma, akik hazai felsőoktatási intézményben rendszeresen (nem feltétlen heti rendszerességgel), tantervi keretek között oktatnak. A külföldi egyetem számára végzett oktatási tevékenységet, a felkérésre tartott előadásokat és a szakdolgozat, diplomamunka, PhD-téma vezetését a beszámoló III., illetve IV. pontjában találjuk. Az adatok a 2015/2016-os tanév második és a 2016/2017-es tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

¹⁵ A 2016. évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatás.

¹⁶ 2016. december 31-én az MTA-keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyeken foglalkoztatottak száma.

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

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

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONTOK ÉS
KUTATÓINTÉZETEK**

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az intézet fő feladata az atomfizikai, magfizikai, nukleáris asztrofizikai és részecskefizikai alap kutatások területén a nemzetközi kollaborációkkal összehangolt élvonalbeli kutatások végzése volt a nagy nemzetközi kutatóközpontok és a saját kutatási infrastruktúra kiegyensúlyozott használatával. Az infrastrukturális fejlesztések között kiemelt jelentőségű volt a tandemtron beruházás második fázisának megvalósítása. Az intézeti infrastruktúra fejlesztésében óriási lehetőségeket nyitnak meg az év folyamán elnyert GINOP pályázatok. Az Atomki 2016-ban is jelentős szerepet vállalt az egyetemi oktatásban, a PhD képzésben, a nemzetközi szakemberképzésben és a tudomány népszerűsítésében.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Elméleti fizika

A kvantum informatika terén egy kétrészes összefonódott hibrid kvantumrendszert vizsgáltak, ahol a rendszer egyik fele egy jól karakterizált, míg a másikat fekete doboznak tekintették. Az „EPR steering” jelensége akkor figyelhető meg, amikor a fekete doboz rendszeren méréseket hajtunk végre, amelynek eredményeként a mérések a jól karakterizált rendszer állapotát befolyásolni tudják. Ezt a jelenséget Schrödinger írta le először 1936-ban, amelyet Wiseman és társai öltöttek modern kvantuminformáció-elméleti formába 2007-ben, és amelyet azóta számos kvantumoptikai kísérletben sikerült igazolni. Az „EPR steering” jelenséget szimulálták olyan módon, hogy a két rendszer összefont kvantumrészecskéit klasszikus kommunikációval helyettesítették. Egyik fő eredményként sikerült megmutatni, hogy bármely tiszta kétkubites összefont kvantumállapot egzakt szimulációjához végtelen bit klasszikus kommunikáció szükséges.

Az N-kubites W-állapot nemlokalitásának robusztusságát vizsgálták részecskevesztésből származó zaj esetén. A W-típusú kvantumállapotok a kvantumhálózatokban, azon belül pedig a kvantummemóriákban játszanak kulcsszerepet. Sikerült résztvevőnkénti két mérés esetén analitikus alsó és felső határt találni a kritikus részecskeszámra, ami feletti veszteség esetén a kvantumrendszer már nem mutat nemlokális tulajdonságot. Az eredmények a W-típusú állapotok fotonvesztés esetén történő kitűnő zajtűrését támasztják alá, ami kvantuminformatikai alkalmazásokban előnyös tulajdonság.

Az atommag szerkezetének elméleti leírása során egy új szimmetria lehetőségét fedezték fel, mely összeköti az atommagok kis energiás héjmodell állapotait a nagy energiás fűrtösödött (klaszter) állapotokkal. Ez a klaszter-héj dinamikai szimmetria a sokcsatornás szimmetriának egy új válfaja. Segítségével egységesen írható le a magok spektruma az alapállapottól az igen magasan gerjesztett rezonanciáig. Szerencsés esetben az alacsonyan fekvő állapotokból akár megjósolhatók a nagy energiás gerjesztések. Úgy tűnik, hogy a természetben megvalósul ez az új szimmetria. Erre utal a ²⁸Si atommagra végzett vizsgálatok eredménye. A kis energiás

magállapotok kvartetmodell-leírásából megjósolták a $^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$ fűtődött (klaszter) állapotok teljes spektrumát, igen jó egyezésben a kísérleti adatokkal. Ez az első elméleti munka, ami a két tartományt egységesen tárgyalja, ráadásul a nagy energiás gerjesztések teljes egészében elméleti előrejelzésként adódtak. A modell magába foglalja az újonnan felfedezett szuperdeformált sávot is (melynek tulajdonságait korábban megjósolták). E vizsgálat azt a régi sejtést is igazolja, hogy a $^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$ molekuláris állapotok a szuperdeformált völgy, vagyis az energia második minimumához tartozó potenciálvölgy gerjesztései.

Részecskefizika

A Wuppertali Egyetem és az ELTE kutatóival együttműködve becslést adtak az axion nevű hipotetikus részecske tömegére. Az axion, amennyiben létezik, a részecskefizika két, hosszú ideje megoldatlan, alapvető kérdésére is választ adhat. Több évtizede ismert, hogy az erős kölcsönhatás elvileg sérthetné az időtükrözési szimmetriát, azonban rejtélyes módon ez a szimmetriasértés kísérletileg kimutathatatlan. Erre a rejtélyre adhatna természetes és egyszerű magyarázatot az axion létezése. Másrészt jó esély van arra, hogy nagyrészt axionokból áll a sötét anyag, melynek létezésére gravitációs hatásából következtethetünk, azonban összetételét mindmáig nem sikerült meghatározni. Az axion kimutatásának egyik legnagyobb nehézsége, hogy tömegéről semmit nem tudunk. A jelen munkában az axion tömegére adott becslés fontos szerepet játszhat a részecske kimutatására irányuló jövőbeli kísérletek tervezésében. A munkából készült publikáció a *Nature*-ben jelent meg.

Korábbi eredményeikre alapozva vizsgálták azt az effektív modellt, amely sikeresen leírja az erősen kölcsönható anyagban a magas hőmérsékletű, kvark-gluon plazma fázisban kialakuló lokalizált kvarkállapotokat. A modell érdekessége, hogy nem csak a kvark-gluon plazma, hanem az alacsony hőmérsékletű hadronikus fázis, valamint a kettő közötti átmenet leírására is alkalmas. A modell kritikus pontjának közelében végzett részletes vizsgálatokkal kimutatták, hogy ez az effektív modell a QCD véges hőmérsékletű átmenetének minden lényeges aspektusáról képes számot adni. Ez, és az előző pontban ismertetett kutatás az MTA Lendület programja által támogatott MTA Atomki Lendület Rács Kvantum-szindinamika Kutatócsoportjának keretében valósult meg.

2016 során részt vettek a CMS pixel detektor kalibrációiban és működésének folyamatos kiértékelésében, amellyel gondoskodtak a detektor határfokának és felbontásának maximalizálásáról. Ezen eredmények hozzásegítettek a Nagy Hadronütköztető (LHC) pixel detektor alapú luminozitás méréseihez is. Mindezek mellett a szimulációt beállították úgy, hogy jól reprodukálja a pixel detektoron mért határfokokat.

A csoportot felkérték, hogy vizsgálja meg az endcap helyzetmeghatározó rendszer állapotát, további működtetésének lehetőségét, valamint az adatkiértékelés esetleges átvételét. A korábbi évek nyers mérési adatait elemezve kiderült, hogy a mérések megbízhatósága nem megfelelő, a hibás mérések magas száma nem teszi lehetővé az endcap helyzetének geometriai rekonstrukcióját. Ebből a konklúzióból kiindulva javaslatot dolgoztak ki egy új rendszer megépítésére, amely a megbízhatóan és kellő pontossággal méri a GE2/1 jelű új műondetektor pozícióját.

A CMS műondetektorok helyzetmeghatározásával kapcsolatos második tevékenység a GE1/1 jelű, új detektorkamrák pozíciójának mérésével kapcsolatos munka. Az elmúlt évben javasolt rendszer kulcseleme egy a csoport által kidolgozott távolságmérő szenzor, amely a CMS-ben már kiterjedten használt száloptikás FBG szenzorok egy új, innovatív alkalmazása. Ebben az

évben elkészült a szenzor prototípusa, amely az ellenőrző mérések során igazolta a várakozásokat, egyben megmutatta, milyen továbbfejlesztések, módosítások szükségesek.

2015-ben jött létre a Mátra Gravitációs és Geofizikai Laboratórium (MGGL). A laboratórium egy Gyöngyösorszi közelében levő, használaton kívüli bányában, 88 m-rel a felszín alatt létesült, azzal a céllal, hogy vizsgálható legyen a helyszín alkalmassága egy jövőbeli gravitációshullám-detektor befogadására. A laborban többek közt egy Atomkiben kifejlesztett infrahang monitorozó rendszert is üzembe helyeztek az infrahang, mint lehetséges zajforrás vizsgálatának céljából.

Magfizikai alapkutató

Egy Debrecenben épített elektron-pozitron spektrométerrel vizsgálták a nagy energiás atommagátmenetekben keletkező elektron-pozitron párok szögkorrelációját. A szögkorrelációk elvileg jól leírhatók egy sima lefutású görbével. A ^8Be 18,15 MeV-es átmenete esetén azonban nagy szögeknél szignifikáns, csúcyszerű eltérést tapasztaltak, amit a jelenlegi magfizikai ismeretek alapján nem lehet értelmezni. Ez ugyanakkor összhangban van egy új, kis tömegű semleges részecske feltételezésével, aminek a tulajdonságai jól egyeznek bizonyos elméletek sötét fotonra vonatkozó jóslataival. Az úgynevezett sötét foton a sötét anyag részecskéi közötti kölcsönhatás leírására vezették be – az elektromágneses kölcsönhatás közvetítő részecskéjének az analógiájára. Eredményeiről *Physical Review Lettersben* számoltak be, amire a *Nature* is rövid idő után nagyon pozitívan reagált.

Az Atomki kutatói a GSI-ben nemzetközi együttműködésben vizsgálták a vas izotópok szerkezetét. A kétneutron-kilökéses reakcióban előállították az ^{54}Fe nagyon hosszú életidejű gerjesztett állapotát is annak ellenére, hogy ezen állapot szerkezetének a kialakításában négy nukleon vesz részt. Megmutatták, hogy ez az állapot csak úgy populálódhatott, hogy a mag egyik neutronja is gerjesztődött a nagy energiás ütközési folyamatban. A megfigyelt metastabil magállapot a nukleongerjesztés következménye.

Az atommagok királis forgásában megnyilvánuló spontán szimmetriasértés során fellépő többszörös kiralitás jelenségének vizsgálatában is új eredményt értek el. A ^{78}Br atommagban egy pozitív és egy negatív paritású sávpárt, és ezek "yrast"-sávjait összekötő nyolc erős elektromos-dipól átmenet azonosítottak. A sávok tulajdonságait összevetve „mikroszkopikus többdimenziósan-korlátozott kovariáns sűrűségfüggő elmélet” és „triaxiális részecske-rotor modell” számítások eredményeivel, azokat okkupál korrelációkat mutató többszörös királis sávpárokként azonosították. Ezzel elsőként mutatták ki királis geometria előfordulását egy okkupál deformációval szemben „puha” atommagban, ami egyben arra utal, hogy a magfizikai kiralitás az okkupál korrelációk mellett is stabilan fennmaradhat. A kérdéses atommag új nívósémája a *Physical Review Letters* címlapjára került.

A LUNA nemzetközi együttműködés mélyen földalatti gyorsítójának egyedi lehetőségeit kihasználva a $^{17}\text{O}(p,\alpha)^{14}\text{N}$ reakció asztrofizikai szempontból legfontosabb, alacsony energiás rezonanciájának erősségét nagy pontossággal mérték meg. Az előrehaladott hidrogénégési folyamatok e kulcsreakciója különböző asztrofizikai körülmények között is lejátszódik és meghatározza többek között a természetben található stabil oxigénizotópok arányát. Az új mérések alapján a reakció mintegy kétszer nagyobb sebességgel játszódik le a korábban számítottnál, ami közvetlen hatással van az izotóparányokra. Az új eredmények birtokában megmagyarázhatóvá válik bizonyos csillagporszemcsék összetételének eddig rejtélyes eredete.

Egy igen ritka nemesgázizotópon, a ^{124}Xe -on végeztek el első ízben (α,γ) és (α,n) reakcióhatáskeresztmetszet mérést az Atomki ciklotron gyorsítójának és egy, az Atomkiben kifejlesztett aktivációs gázcellának a segítségével. Az eredmények alapján megszorítást adtak a ^{124}Xe szupernóva-robbanások során való keletkezésének lehetséges módjaira.

Az utóbbi évek nehéz elemek szintézisével kapcsolatos kutatásainak egyik legfontosabb eredménye az alacsony energiás alfa-mag optikai potenciál fontosságának és nem kielégítő leírásának felismerése. Az optikai potenciál pontosítása érdekében a $^{64}\text{Zn}+\alpha$ rendszer átfogó vizsgálatát végezték el rugalmas és rugalmatlan szórási, valamint α -indukált reakciók hatáskeresztmetszetének mérésével. Nagy pontossággal igazolták a szórási és közbelsőmag-reakciókból származtatott teljes hatáskeresztmetszetek azonosságát, valamint igazolták, hogy a nemrégiben az Atomki kutatói által kifejlesztett új globális potenciál megfelelően írja el a vizsgált folyamatokat alacsony, asztrofizikailag lényeges energiákon.

Magfizikai alkalmazások

Vékony (50-500 nm) szilícium-nitrid fóliákat nagy stabilitásuk miatt a magfizikában gyakran alkalmaznak céltárgyként hatáskeresztmetszet mérésekhez, de ezek a filmek szolgálnak vákuumból levegőre kilépő ablakként is. Ezekhez a kísérletekhez fontos ismerni a fólia fizikai és kémiai tulajdonságait. Ionnyaláb-analitikai módszerek és profilometria alkalmazásával meghatározták kereskedelmi forgalomban kapható SiN fóliák sűrűségét, vastagságát és pontos összetételét. Megállapították, hogy a fóliák sűrűsége jelentősen (15-20%) eltér a gyártók által megadott, és a SRIM szoftverbe beépített értékektől.

A részecskeindukált γ -kibocsátás (PIGE) az ionnyaláb-analízis (IBA) egyik módszere. Standardnélküli, kvantitatív PIGE analízis kivitelezéséhez megbízható és pontos hatáskeresztmetszet adatokra van szükség. Az IBA nemzetközi adatbázisának, az IBANDL-nek a fejlesztéséhez értékelni kell a meglévő hatáskeresztmetszet adatokat, és pontos hatáskeresztmetszet méréseket kell végezni. A jelen munkában ^{12}C , ^{14}N és ^{16}O magokon (d,p γ) reakciókban mért differenciális γ -kibocsátási hatáskeresztmetszet adatsorokat származtattak standardnélküli PIGE analízisekhez.

Mikrofluidikai eszközöket terveztek cirkuláló ráksejtek humán vérből történő kiszűrésére. Az alkatrészeket PDMS polimerből készítették, Protonnyalábos mikromegmunkálással folyékony PDMS rezisztben hozták létre egyenes és döntött mikrostruktúrákat. Ezeket a mikrostruktúrákat az együttműködő partnerekkel integrálták PDMS alapú mikrofluidikai rendszerekbe. A MTA-PE Transzlációs Glikomika Lendület kutatócsoportja ezen mikrofluidikai eszközök hatékonyságát és hidrodinamikai karakterisztikáját élesztősejtekkel tesztelte.

Hat méréssorozatot végeztek a H2020 IPERION CH (*Integrated Platform for the European Research Infrastructure ON Culture Heritage*) projekt keretében. Meghatározták bizánci és itáliai üvegminták elemösszetételét, kovaköveket vizsgáltak a Pireneusok területéről, folytatták a vallásos témájú textilekkel kapcsolatos kutatásokat. Hozzájárultak a Nemzeti Múzeumban őrzött ezüstletről szóló ismeretanyag kibővítéséhez. Megadták számos, hazai múzeumokban fellelhető arany és bronztárgy elemösszetételét. Szisztematikusan vizsgálták egyes érzékeny anyagok ionnyalábokkal szembeni ellenálló képességét.

Módszert dolgoztak ki ^{52}Mn radioizotóp elválasztására, besugárzott fém krómból. A módszer kloro-komplexek eltérő stabilitásán alapul. A króm-klorokomplex kölcsönhatás nélkül folyik

át az ionkromatográfias oszlopon, míg a mangán-klorokomplex visszatartása mintegy 3 holtterfogatnak felel meg. Eddig mintegy 60 %-os kinyerést sikerült elérni, melyben kimutatható szennyező ^{51}Cr radioizotópot nem találtak. A ^{52}Mn , mint PET radioizotóp nagyon ígéretes az in situ PET-MRI vizsgálatok számára, ahol a paramágneses mangánnal váltják ki a korábban használt, de mérgezőnek bizonyult gadolínium kontrasztanyagokat.

A vékonyréteg-aktiváció során kifejlesztették az alacsony részarányú mintaösszetevők alapján történő kopásvizsgálatot, eddig még nem használt radioizotópok felhasználásával. A mintákban többféle besugárással több ponton különböző izotópokat hoztak létre, ami lehetővé tette egy minta több helyen való kopásának követését, valamint több összetartozó minta egyidejű kopásvizsgálatát. Ehhez további hatáskeresztmetszeteket határoztak meg a vékonyréteg-aktiváció céljaira, beleértve az eddig csak ritkán használt α - és ^3He részecske indukált reakciókat, és ezekkel a NAÜ töltött részecske-aktivációs adatbázisait is bővítették.

Ritkaföldfémeket vizsgáltak radioizotópok előállításának optimalizálására. Új kísérleti reakció-hatáskeresztmetszeteket határoztak meg referencia adatbázisokhoz, a megfelelő elméleti modellek kidolgozásához, illetve az adatok gyakorlati alkalmazásához. A vizsgált target anyagok: Al, Ti, Ca, Cd, Cu, Mo, Sc, Sr, Ti, Tm, Y, Zn. Új terápiás radiofarmakonokat állítottak elő (^{67}Cu , ^{186}Re , ^{47}Sc). A stabil réz előállítását vizsgálták ^{64}Cu termelése során, proton és deuteron reakciókban. $^{\text{nat}}\text{Gd}+d$ magreakciókat vizsgáltak a ^{155}Tb és a ^{161}Tb orvosi célú radioizotópok termelési körülményeinek kidolgozására.

A KSTAR fúziós reaktornál (Dél-Korea) felaktiválódott kerámiák aktivitását mérve detektálták a plazmákból kiszökő fúziós termékeket. Bebizonyították, hogy az $30\text{Y}_2\text{O}_3 \cdot 30\text{P}_2\text{O}_5 \cdot 40\text{SiO}_2$ üvegkerámia por termolumineszcens választ ad gyorsneutron- és gamma-dózisra, ami a jövő nukleáris technológiáihoz használandó üvegkerámiák sugárkárosodásának mérését teszi lehetővé.

SiPM eszközök sugárkárosodását mérték széles spektrumú p+Be neutronok kevert neutron-gamma mezőjében. A sötétáram a neutronfluxus függvényében nőtt, és függött a hőmérséklettől. A letörési feszültség változása nem volt szignifikáns a $\Phi \leq 10^{12} \text{ n/cm}^2$ tartományban.

Atom- és molekulafizika

Metán és vízmolekulák ionizációját vizsgálták a bombázó ion perturbációerősségének függvényében, az ionbesugárzásos daganatterápia szempontjából hasznos töltés- és lövedékenergia-tartomány felmérése céljából. Az 1 MeV-es H^+ , He^+ és 650 keV-es N^+ lövedékionokkal mért differenciális elektronemissziós hatáskeresztmetszetek elemzésével meghatározták a különböző ionizációs mechanizmusok abszolút hozamát és felmérték szerepüket a különböző ionlövedék-típusoknál. Megmutatták, hogy nitrogénion-bombázás esetén a többszörös ionizáció és többszörös elektronszórás folyamatok meghatározóvá válnak, és a molekulák erősen ionizált fragmentumokra esnek szét. A kapcsolódó elméleti munka során mind a klasszikus, mind a kvantummechanikai leírás szintjén jelentős eredményeket értek el a korábbi ion-atom ütközési modelleknek a molekuláris céltárgyakra történő kiterjesztésében.

Az Atomki kutatóit meghívták a BESSY II szinkrotronhoz (Berlin) egy általuk választott téma elektron-spektroszkópiai vizsgálatára. A He 1s és a Ne 2s fotoelektronok 3 dimenziós szögeloszlását határozták meg. Ez alapvető jelentőségű a fotoionizációs elméletek ellenőrzése

szempontjából. Megmérték továbbá a biológiai szempontból (DNS dozimetria) fontos tetrahidrofurán molekulában a C atomok K-fotoelektron emissziójának anizotrópiáját a fotonenergia függvényében. E mérésekben először határozták meg fotoelektronok teljes 3D szögeloszlását, így a folyamat szimmetriáit eddig egyedülálló módon, elméleti előfeltevésektől mentesen tanulmányozhatták.

Az infravörös tartományban ionizáció csak több, kis energiás foton elnyelése révén következhet be. Az MTA Wigner Lendület Ultragyors Nanooptika Kutatócsoporttal együttműködve Xe gázon mérték ilyen, sokfotonos ionizációval kiváltott fotoelektronok szögeloszlását. Az általuk épített, 3D szögeloszlás felvételére alkalmas elektronspektrométert az RMI-ben rendelkezésre álló femtoszekundumos lézer nyalábjára telepítették. Méréseik során több multifotonos ionizációs csúcsot azonosítottak. Vizsgálták a mért spektrumoknak a lézernyaláb paramétereitől való függését, és ezzel az intenzív terekben lejátszódó más folyamatokat is. Fundamentális jelentőségű méréseik az ELI-ALPS melletti munka előkészítését is szolgálják.

Olasz (INFN-LNS, Catania) együttműködésben vizsgálták az ECR ionforrás plazmája által kibocsájtott röntgensugárzás tulajdonságait. Az ionforrás paramétereitől (mágneses tér, RF teljesítmény, RF frekvencia) függő spektrális változásokat SSD és HPGe típusú detektorokkal mérték, a plazma szerkezeti változásait pedig speciális röntgen kamerával rögzítették. A nagy mennyiségű adat feldolgozását követően 2016-ban a térfogati emissziós mérések eredményeit, a technikai hátteret és az alkalmazott kísérleti eszközöket több folyóiratcikkben mutatták be. A munkát az EU Horizon 2020 program 654002 (ENSAR2-MIDAS) számú projektje is támogatja.

Felületfizika

Grafitból preparált grafén-oxid mintákat redukáltak különböző redukáló ágensekkel és különböző hőmérsékleteken, mikrohullám alkalmazásával, az elemi és oxigén-csoport összetevők felületi koncentrációjának, valamint a réteges nanoszerkezetekben a grafén rétegek átlagos számának a meghatározására. Megállapították, hogy a különböző redukáló módszerek változó C/O és oxigén-csoport/(C sp² kötés) arányokat, továbbá átlagos grafén rétegszámot eredményeztek. A C sp²/sp³ kötésarányra jellemző D paraméter meghatározására szén nanoanyagok elektronállapot-sűrűségeit tükröző röntgen-gerjesztésű C KLL Auger spektrumok analízisét végezték el. A C sp²/sp³ kötésarányok, melyeket a különböző módon előállított szén nanoanyagok széles körére határoztak meg, általában egyeznek a C 1s fotoelektron-spektrumok alakjának illesztéséből kapott értékekkel. Azonosították a kísérletileg mért D paraméterek analíziséből kapott kötésarányok meghatározásának fő hibaforrásait is.

Fémfelületek Zn(Ti) védőréteggel való bevonása jól ismert eljárás korrózióvédelemre. A kutatás célja a korrózióvédelem hatékonyságának a növelése. Termodinamikai számolást végeztek a védőréteg belső szerkezetének a leírására és a rétegben lejátszódó fizikai/kémiai jelenségek pontos feltárására. A számolások eredményeit tömegspektrometriai és elektronspektroszkópiai analízis eredményeivel vetették össze. Meghatározták a védőrétegben kialakult kémiai állapotok rétegszerkezetét. Megállapították, hogy a teljes bevonati réteg vastagsága csökken a folyadékfürdő hőmérsékletével, de a tényleges korrózióvédelmet biztosító titán-dioxid réteg vastagsága nő. A bevonati réteg színét optikai interferencia határozza meg és nem a kémiai állapot.

Porlasztáson alapuló mélységprofil-analízissel nanométeres vastagságú rétegszerkezeteket vizsgáltak. Egyrészt különböző módszerek közötti összehasonlító méréseket végeztek a legjobb mélységi feloldás megvalósítására SiGe rendszerekben, másrészt kis energiás porlasztást kísérő részecskekiválás jelenségét vizsgálták PbTe kristályokon. A porlasztott felület morfológia vizsgálatából megállapították, hogy kis energiás porlasztás (<160 eV porlasztási energia) esetén a kiporlasztott részecskék nem távolodnak el a felülettől jelentős mértékben. Ez lehetőséget biztosít arra, hogy a Pb és Te részecskék ismét kiváljanak a felületre jellegzetes kristálystruktúra növekedés kíséretében.

Környezettudomány

Környezetrégészeti módszerekkel vizsgálták a Dunaszekcsői lösz üledéksor rétegeinek korát faszén minták és 10 féle fajból származó kagyló/csigá maradványból, összesen 64 db AMS ^{14}C mérést végezve. A faszén eredmények előkészítési módszertől függően szisztematikusan eltérő ^{14}C kort mutattak. A korok eltérése az idősebb és kevésbé jó megtartású minták esetén egyre jelentősebb volt. Kimutatták, hogy bizonyos csiga/kagyló fajok esetében a faszénnel azonos ^{14}C korok nyerhetőek. Ezért ezen csiga/kagyló fajok kormeghatározási szempontból jó alanyai az üledékvizsgálatoknak az elmúlt akár 40 ezer év fejlődéstörténetéhez is.

Barlangi cseppkövek és egyéb karbonátkiválások utólagos átalakulásának folyamatait vizsgálták izotópanalitikai és környezetrégészeti módszerekkel. A változások detektálása és azok mértéke nagy jelentőséggel bír a klímakutatások szempontjából, ahol gyakran használják a múltból származó cseppkövekből nyerhető információkat. A tanulmány keretében fiatal cseppkövek kormeghatározását végezték el radiokarbonos módszerrel, laminaszámlálással kombinálva, felhasználva az 1960-as években mért légköri atombomba-csúcsot. Az eredmények alapvető jelentőségűek lehetnek a cseppkövek stabilizotóp-változásainak megértésében és azok klímarekonstrukciós felhasználása során.

Meghatározták a Kárpát-medence legfiatalabb vulkánja, a Csomád vulkán fiatalabb kráterében keletkezett Szent Anna-tó kormodelljét ^{14}C módszerrel. Vizsgálataik célja feltérképezni a Szent Anna-tó tavi üledékében megőrződött környezeti változásokat a vulkánkitöréstől napjainkig. Ehhez alapvető fontosságú a tavi üledék korának ismerete, melynek meghatározására egy viszonylag új módszert vezettek be, a pollen alapú radiokarbon kormeghatározást. A vizsgálatok alapján a tavi üledékből az elmúlt mintegy 27 ezer év környezetváltozásai határozhatóak meg.

Magyarország két legnagyobb beszivárgási területe a Nyírség és a Duna-Tisza-közi Hátság. Ezeken a területeken sikerült több helyen is meghatározni, hogy mekkora a maradó beszivárgás mértéke. Sekély talajvíz $^3\text{H}/^3\text{He}$ kormeghatározásával, a bombacsúcs helyzetét felhasználó korolással és modellszámításokkal kimutatták, hogy egyes beszivárgási területeken a lehulló csapadék 7-11 %-a az, amely a felszín alatti víz utánpótlását biztosítja. Ezek a módszerek az utóbbi néhány évtized viszonyaira engednek következtetni, ám a kutatók sikeresen alkalmaztak egy új megközelítést: homoktalaj esetén a pórusvíz közvetlenül a beszivárgó csapadékból áll. Kimutatták, hogy a háromfázisú zónában a víz csak 18-24 hónapot tölt el.

A Tisza hullámtéri holtágaiban felhalmozódott üledék megőrizte az árhullámok nyomait. Az üledékben lévő nehézfémek (Pb, Cu, Zn) koncentrációváltozásait korreláltatni lehetett a vízállás adatokkal. Ez alapján a meder feliszapolódására lehet következtetni. Az eredményeket ^{137}Cs kronológiával erősítették meg. Az eredmények két szempontból fontosak:

(1) nyomon lehet követni az utolsó 100 év nagyobb nehézfém-szennyezéseit; (2) meg lehetett határozni a holtmedrek feliszapolódásának mértékét. A Tisza élővilágát jelentősen befolyásoló nehézfém-szennyezések rendszeresen előfordultak már az Osztrák-Magyar Monarchia idejében is. A feliszapolódás sebessége elérheti a 2-4 cm/évet, ezért számolni kell a hullámtéri medrek feltöltődésével, megszűnésével.

Újszerű mintavételi technikával vettek mintákat a Retyezát hegységben (Déli-Kárpátok, Románia) lévő hegyi tavakból. A tavi üledék szerves és szervetlen alkotói, növények maradványai viszonylag háborítatlanul megőrzik az elmúlt évezredek klíma- és környezetváltozásainak nyomait. A közel 8200 évvel ezelőtt bekövetkezett hirtelen lehűlés nyomát sikerült megtalálni a Taul dintre Brazi tó üledékében. A Taul dintre Brazi és a Lia tavak esetében sikerült rekonstruálni az erdőtüzek gyakoriságát, melyek jó része természetes okokra volt visszavezethető. Az erdőtüzeket követő talajeróziós folyamatokat az üledék szervesanyag- és hamutartalom-vizsgálata segítségével mutatták ki.

Esettanulmány keretében vizsgálták a levegő minőségét energiahatékony, passzívház-technológiával épült otthonokban és egy hagyományos technológiával épült házban. A várakozással ellentétben azt találták, hogy a passzív házakban a levegő minősége nem volt jobb, mint a hagyományos épületben. A szállópor-koncentráció átlagos értéke a passzív házakban magasabb volt. A 2,5 µm-nél nagyobb részecskék sokkal nagyobb koncentrációban voltak jelen a passzív házakban. Ez arra utal, hogy az akkumuláció jelentős a zárt térben, és a szellőztető rendszer nem tudta ezeket a részecskéket hatékonyan eltávolítani. Eszerint a külső levegő jó hatásfokú szűrése és a belső levegő tisztítása elsődleges fontosságú a passzívház-technológiával készült épületekben.

Az elemanalizátorral összekapcsolt stabilizotóp-arány tömegspektrométeres (EA-IRMS) mérés technikát adaptálták valós aeroszol minták teljes széntartalmának mérésére, oly módon, hogy ezzel egy időben a $d^{13}C$ izotóparányukat is megmérték. A teljes széntartalom meghatározásra vonatkozóan összemérést végeztek egy off-line égetéses módszerrel. A széntartalom mérésével egy időben történő stabilizotóp-arány mérések $d^{13}C$ eredményei igazolták, hogy nem volt mérhető izotópfractionálás. A kétféle módszerrel nyert eredmények rendkívül jól korrelálnak, így ezek biztonságosan alkalmazhatók ismeretlen összetételű aeroszol minták teljes széntartalmának mérésére, mely nagyban segíti az aeroszlok széntartalmának automatizált, reprodukálható mérését.

A Püspökszilágyi Radioaktív Hulladék Feldolgozó és Tároló (RHFT) teljes kúthálózatára kiterjedő, a talajvizek szervetlen és összes széntől származó radiokarbon aktivitásának meghatározását, továbbá talaj-, illetve légköri minták méréseit végezték el. A kutatás legfontosabb eredményeként kimutatták, hogy a szervetlen frakció meghatározásán alapuló jelenlegi monitoring gyakorlatával a talajvíz teljes radiokarbon aktivitásának csak kevesebb, mint 30 %-a detektálható az RHFT egyes terheltebb kútjaiban. Megállapították, hogy az RHFT környezeti ellenőrzése során a pontosabb kibocsátás-ellenőrzés és dózisbecslés érdekében indokolt lenne a talajvíz teljes oldott széntartalmának radiokarbon koncentrációját mérni, nem csak a szervetlen frakciókét.

b) Tudomány és társadalom

Az Atomki a 2016. év folyamán a következő rendezvényekkel érte el a nagyközönséget: *Kutatók Éjszakája*, *Science on Stage* magyarországi előválogató, *Fizikusnapok* és látogatócsoportok fogadása.

A Kutatók Éjszakája (2016. 09. 30.) alkalmával az Atomkiben folyó kutatásokkal ismerkedhettek meg az érdeklődők „*A múltban is voltak izotópok? - Paleohőmérsékleti rekonstrukció izotópokkal*” című előadás keretében. A múlt folyamatait geológiai lenyomatok tanulmányozásával érthetjük meg. Ennek egyik módja a lenyomatban lévő izotópok, elemek, nyomelemek pontos koncentrációjának vagy pontos arányának meghatározásában rejlik. Az előadás több példán keresztül bemutatta a korlási lehetőségeket, valamint a múltbeli hőmérséklet rekonstrukciójára vonatkozó módszereket. A közönség létszáma 88 fő volt.

A *Science on Stage* magyarországi előválogatója (2016. 10. 7-9.) Debrecenben az Atomki társrendezésében valósult meg. A rendezvény a nemzetközi *Science on Stage* fesztivál előkészítéseként, a szervezőknek tapasztalatgyűjtésként is szolgált, mert 2017-ben Debrecen rendezi meg a nemzetközi versenyt. A rendezvény célja, hogy a természettudományok, a matematika és informatika területén oktató általános és középiskolai tanárok megoszthassák egymással legjobb tanítási ötleteiket. A nagyközönség érdeklődésére is számot tartó esemény ezen tudományok népszerűsítésére törekszik. A hazai válogatón csaknem 100 pályázó mutatta be pályaművét, közülük 40 vehet részt a nemzetközi versenyen.

A *Fizikusnapokat* 37. alkalommal rendezte meg az Atomki (2016. 11. 21-25.), ezúttal a sötét anyag és sötét energia jegyében. Négy napon keresztül hangzottak el előadások ebben a témában, melyre általános iskolástól nyugdíjas korúig jöttek érdeklődők, összesen 392 fő. A hét folyamán a délelőtti órákban csoportok érkeztek összesen 21 iskolából, Debrecenből és egészen távoli településekről, hogy a meghirdetett 24-féle rendhagyó óra valamelyikét meghallgassák; 57 rendhagyó óra hangzott el, melyen összesen 1715 látogatóórát töltöttek az intézetben. Utolsó este az Atomki látogatóközpontja nyílt meg az egyéni érdeklődők előtt, akik a radioaktivitásról szerezhettek alapvető ismereteket; a létszám 14 fő volt. Az egyhetes esemény révén az intézet részt vett a *Magyar Tudomány Ünnepe* keretében futó *Kutatóhelyek Tárt Kapukkal* programban.

Fentiekén kívül az év során 18 csoportban 346 fő érkezett az intézetbe (általános és középiskolások, egyetemisták, felnőtt érdeklődők) és összesen 763 látogatóórát töltöttek el. A program összeállítása a csoportok ismeretszintjének figyelembe vételével történik, és kísérletekkel tarkított előadásokat és intézeti laborlátogatásokat tartalmaz. A látogatóközpontban a radioaktív sugárzás tulajdonságaival és kimutatásával, a hidegfizikai bemutató alkalmával pedig az alacsony hőmérsékleten lejátszódó jelenségekkel ismerkednek az érdeklődők.

Az Atomki ismeretterjesztő tevékenységének elsődleges közönsége az iskolások és az érdeklődő laikus felnőttek csoportja, de az intézet minden lehetőséget megragad további közönség bevonására is. Ilyen lehetőség adódott 2016. június 5-én, amikor az Atomki az MKB Professzori Klub jubileumi rendezvényének vendégeként egész napos programot biztosított az egyik helyszínen. A közönség ismeretterjesztő előadások és kísérleti bemutatók mellett a tudományhoz köthető zenei és színpadi produkciókat is élvezhetett, illetve meghallgathatott egy beszélgetést a tudományos ismeretterjesztés nem szokványos módszereiről is.

Az Atomki weblapján keresztül megtekinthetők az intézet kutatói által írt ismeretterjesztő cikkek. Ezekből 2016-ban összesen 4 jelent meg a *Fizikai Szemle*, a *Debreceni Szemle* és a *Magyar Tudomány* oldalain.

A *Kutatók Éjszakája* és a *Fizikusnapok* ismeretterjesztő előadásairól készült felvételek elérhetők a legnépszerűbb fájlmegosztó portálon. A visszajelzések alapján a tanárok főleg az Atomki *Utazó Fizika* programja keretében néhány évvel ezelőtt létrehozott négy előadást tudják hasznosítani a tanórákon, amelyek címe *Víz, Földünk természetes védelmi rendszerei, Hideg-meleg, illetve Energia*.

2016 során 375 hazai média-megjelenésben szerepeltek az Atomki és munkatársai. Ebből több mint száz megjelenés a sötét anyaggal kapcsolatba hozható kísérleti eredményről szóló hírnek volt köszönhető. További két népszerű téma volt a gravitációs hullámok felfedezése és a nukleáris asztrofizikában elért eredmények, melyeket nemzetközi együttműködések tagjaiként jegyez az Atomki.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Az intézet együttműködésben folytatott kutatásai hagyományosan egyrészt a nagy nemzetközi kollaborációk (pl. CERN-CMS, LIGO-EGRG, LUNA, stb.) keretében valósulnak meg, másrészt pedig különféle szintű kétoldalú kapcsolatokon alapszanak. Az utóbbiak köre 2016-ban elsősorban a környező országok partner akadémiáival kötött megállapodásokkal bővült (Lengyelország, Csehország, Szlovákia), de új megállapodások születtek távoli kontinensek egyetemeivel és más intézményeivel is (Japán, Kína, Irán, Mexikó, Egyiptom). Európán belül együttműködés kezdődik az INFN Frascati (Olaszország) laboratóriummal, illetve a Bukarestben épülő Extreme Light Infrastructure – Nuclear Physics (ELI-NP) kutatóintézettel is. Az ELI tagintézményei közül a szegedi Extreme Light Infrastructure – Attosecond Light Pulse Source (ELI-ALPS) esetében is évről évre bővülnek az Atomki kapcsolatai. A Nagyvárad Egyetemmel kötött megállapodás értelmében romániai diákok és tanárok jöhetnek az Atomkibe szakmai gyakorlatra Erasmus program keretében.

Új hazai együttműködések elsősorban a nagy kutatóegyetemekkel alakított ki az intézet (Debreceni Egyetem, ELTE, Szegedi Egyetem, Pécsi Egyetem). Az akadémiai szférában hagyományosan a Wigner Fizikai Kutatóközponttal a legszorosabbak az Atomki kapcsolatai, de külön figyelmet érdemel, hogy több Lendület kutatócsoport is az új partnerek között említhető. A vállalati szférából továbbra is az MVM Paksi Atomerőmű Zrt. a legjelentősebb együttműködő.

2016-ban az Atomki három nemzetközi műhelytalálkozónak adott otthont, de az intézet kutatói számos további tudományos rendezvény szervezésébe is bekapcsolódtak. Ezek között megemlítendő az Atomki által is szponzorált, Budapesten rendezett *EPS Young Minds Leadership Meeting*, amely az Európai Fizikai Társaság egyik projektje keretében adott lehetőséget arra, hogy fiatal fizikusok szervezeteinek vezetői osszák meg tapasztalataikat egymással.

Az Atomki Külső Tanácsadó Testülete 2016. november 7-én tartotta ülését az intézetben, ahol egyebek mellett az új mátrix szervezeti struktúra kialakításáról kapott tájékoztatást.

A felsőoktatásban való részvétel 2016-ban is fontos szerepet töltött be az intézet kutatóinak tevékenységében. Az Atomki munkatársai 58 elméleti és 37 gyakorlati kurzust hirdettek meg. A beszámolási időszak folyamán 18 PhD, 19 Msc, 27 BSc és 9 TDK-hallgató dolgozott az intézetben. Az intézetben folytatódott a kutatóhallgatói ösztöndíjas program, amelynek keretében egyetemisták vállalnak részt a kutatómunkában. A tavaszi és az őszi félévben is 7

ösztöndíjas vett rész ebben a programban. Doktori képzésben 49 Atomkis kutató volt érdekelt, köztük heten doktori iskolai törzstagként. Közülük öt a Debreceni Egyetem fizikai, kettő pedig az informatikai doktori iskolájának törzstagja.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az elkövetkező évek során az Atomki több kutatási irányára meghatározó hatása lesz a 2016-ban elnyert hat GINOP pályázatnak. Ezek mellett két NKFIH (OTKA) és négy nemzetközi projekt indult az elmúlt évben.

IKER: Recens és paleo környezetgeokémiai kutatás-fejlesztési irányok megerősítése, GINOP-2.3.2-15-2016-00009, 48 hónap, 1966 141 E Ft

Világszínvonalú kutatói környezet kialakítása az ATOMKI új Tandetron laboratóriumában, GINOP-2.3.3-15-2016-00009, 36 hónap, 941 251 E Ft

Regionális Anyagtudományi Kiválósági Műhely-kutatási program és infrastruktúra, GINOP-2.3.2-15-2016-00041, 36 hónap, 279 278 E Ft

Egzotikus magfolyamatok kutatása itthon és ESFRI roadmap intézetekben, GINOP-2-3.3-15-2016-00034, 36 hónap, 568 779 E Ft

Újszerű ipari integrált irányítási szoftver keretrendszer kutatása és alkalmazása kísérleti fizikai nagyberendezésekre, GINOP-2.2.1-15-2016-00012, 36 hónap, 185 500 E Ft

Az MTA Atomki Örökségtudományi Laboratóriumának kiépítése - felkészülés az E-RIHS szerepre, GINOP-2.3.3-15-2016-00029, 36 hónap, 421866 E Ft

Ionnyalábok az anyagmódosításban és a mikro- és nanomegmunkálásban, OTKA PD-121076, 36 hónap, 15 087 E Ft

Nagypontosságú nukleáris asztrofizikai mérések, OTKA K 121666, 48 hónap, 48 000 E Ft

CRP on Nuclear Data for Charged-particle Monitor Reactions and Medical Isotope Production, IAEA projekt, 17438/RO, 12 hónap, 4000 EUR

Use of Long-lived Radionuclides for Dating Very Old Groundwaters, IAEA projekt, 20533, 36 hónap, 18 000 EUR

Nuclear Data for Accelerator Production of ^{67}Cu , ^{186}Re and ^{47}Sc , IAEA projekt 3, 20584, 60 hónap, 20 000 EUR

European Nuclear Science and Application Research 2 — ENSAR2, ENSAR projekt, 654002, 48 hónap, 47 500 EUR

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Nagy S, Vértési T: EPR Steering inequalities with Communication Assistance. Scientific Reports, 6: 21634 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/srep21634>
2. Diviánszky P, Trencsényi R, Bene E, Vértési T: Bounding the persistency of the nonlocality of W states. Physical Review A, 93: 042113 (2016) <https://arxiv.org/abs/1605.05846>

3. Cseh J, Riczu G: Quartet excitations and cluster spectra in light nuclei. *Physics Letters B*, 757: 312-316 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.physletb.2016.03.080>
4. Pál G, Jánosi Z, Kun F, Main IG: Fragmentation and shear band formation by slow compression of brittle porous media. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics*, 94: 053003 (2016) <http://real.mtak.hu/28024/>
5. Borsanyi S, Fodor Z, Guenther J, Kampert K-H, Katz SD, Kovacs TG et al. (13): Calculation of the axion mass based on high-temperature lattice quantum chromodynamics. *Nature*, 539: 69-71 (2016) <https://arxiv.org/abs/1606.07494>
6. Giordano M, Kovács TG, Pittler F: An Anderson-like model of the QCD chiral transition. *Journal of High Energy Physics*, 2016: (6) 07 (2016) [http://dx.doi.org/10.1007/JHEP06\(2016\)007](http://dx.doi.org/10.1007/JHEP06(2016)007)
7. Krasznahorkay A, Csatlós M, Csige L, Gácsi Z, Gulyás J, Hunyadi M, et al. (14): Observation of Anomalous Internal Pair Creation in ^8Be : A Possible Indication of a Light, Neutral Boson. *Physical Review Letters*, 116: 042501 (2016) <https://arxiv.org/abs/1504.01527>
8. Podolyák Z, Shand CM, Lalović N, Gerl J, Rudolph D, Dombrádi Zs, et al. (64): Role of the Δ Resonance in the Population of a Four-Nucleon State in the $^{56}\text{Fe} \rightarrow ^{54}\text{Fe}$ Reaction at Relativistic Energies. *Physical Review Letters*, 117: 222302 (2016) http://epubs.surrey.ac.uk/813076/1/54fe_isomer_resubmitted_14sept2016.pdf
9. Liu C, Wang SY, Bark RA, Zhang SQ, Meng J, Qi B, Nyakó BM, et al. (47): Evidence for Octupole Correlations in Multiple Chiral Doublet Bands. *Physical Review Letters*, 116: 112501 (2016) <http://real.mtak.hu/44699/>
10. Bruno CG, Elekes Z, Fülöp Zs, Gyürky Gy, Somorjai E, Szücs T, et al. (35): Improved Direct Measurement of the 64.5 keV Resonance Strength in the $^{17}\text{O}(\text{p},\alpha)^{14}\text{N}$ Reaction at LUNA. *Physical Review Letters*, 117: 142502 (2016) <https://arxiv.org/abs/1610.00483>
11. Halász Z, Somorjai E, Gyürky Gy, Elekes Z, Fülöp Zs, Szücs T, Kiss GG, (10): Experimental study of the astrophysical γ -process reaction $\text{Xe } 124(\alpha,\gamma)\text{Ba } 128$. *Physical Review C*, 94: 045801 (2016) <http://real.mtak.hu/46882/>
12. Ornelas A, Gyürky Gy, Elekes Z, Fülöp Zs, Halász Z, Kiss GG, et al. (15): α scattering and α -induced reaction cross sections of Zn 64 at low energies. *Physical Review C*, 94: 055807 (2016) <http://real.mtak.hu/46884/>
13. Csedreki L, Halász Z, Kiss ÁZ: Assessment of experimental d-PIGE γ -ray production cross sections for ^{12}C , ^{14}N and ^{16}O and comparison with absolute thick target yields. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, 380: 1-10 (2016) <http://real.mtak.hu/46887/>
14. Rajta I, Huszánk R, Szabó AT, Nagy GUL, Szilasi S, Fürjes P, et al. (13): Tilted pillar array fabrication by the combination of proton beam writing and soft lithography for microfluidic cell capture: Part 1 Design and feasibility. *Electrophoresis*, 37: (3) 498-503 (2016) <http://real.mtak.hu/32039/>

15. Szikszai Z, Angyal A, Csedreki L, Furu E, Huszánk R, Kertész Zs, et al. (13): Trans-National Access in the field of heritage science at the Laboratory of Ion Beam Applications, MTA Atomki. *Techne: Research in Philosophy and Technology*, 43: 59 (2016) <http://real.mtak.hu/28008/>
16. Ditrői F, Tárkányi F, Takács S, Hermanne A: Activation cross-sections of proton induced reactions on vanadium in the 37–65 MeV energy range. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, 381: 16-28 (2016) <https://arxiv.org/abs/1610.03954>
17. Ditrői F, Tárkányi Z: Thermodynamic model for electron emission and negative- and positive-ion formation in keV molecular collisions. *Physical Review A*, 94: 022707 (2016) <https://arxiv.org/abs/1608.05303>
18. Kovács TS, Herczku P, Juhász Z, Sarkadi L, Gulyás L, Sulik B: Ionization of small molecules induced by H⁺, H e⁺, and N⁺ projectiles: Comparison of experiment with quantum and classical calculations. *Physical Review A*, 94: 012704 (2016) <http://real.mtak.hu/31853/>
19. Loreti A, Kadokura R, Fayer SE, Kövér A, Laricchia G: High-Resolution Measurements of e⁺ + H₂O Total Cross Section. *Physical Review Letters*, 117: 253401 (2016) <http://real.mtak.hu/44700/>
20. Sarkadi L, Fabre I, Navarrete F, Barrachina RO: Loss of wave-packet coherence in ion-atom collisions. *Physical Review A*, 93: 032702 (2016) <http://real.mtak.hu/43934/>
21. Sarkadi L, Nagy D: Forward electron emission in collisions of He²⁺ ions with Ar atoms with simultaneous capture of two electrons. *Physical Review A*, 94: 042709 (2016) <http://real.mtak.hu/43932/>
22. Tőkési K, Varga D: Energy distribution of elastically scattered electrons from double layer samples. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, 369: 109-121 (2016) <http://real.mtak.hu/28025/>
23. Lévai G, Godzsak M, Hakl J, Takats V, Csik A, Vad K, et al. (8): Designing the color of hot-dip galvanized steel sheet through destructive light interference using a Zn-Ti liquid metallic bath. *Metallurgical and Materials Transactions A-Physical Metallurgy and Materials Science*, 47A: (7) 3580-3596 (2016) <https://arxiv.org/abs/1701.01616>
24. Zayachuk DM, Slynko EI, Slynko VE, Csik A: Oscillations and huge preferences of PbTe crystal surface sputtering under Secondary Neutral Mass Spectrometry conditions. *Materials Letters*, 173: 167-169 (2016) <https://arxiv.org/abs/1701.01597>
25. Shvetsov-Shilovski NI, Lein M, Madsen LB, Räsänen E, Lemell C, Tőkési K et al. (8): Semiclassical two-step model for strong-field ionization. *Physical Review A*, 94: 013415 (2016) <https://arxiv.org/abs/1604.05123>
26. Újvári G, Molnár M, Páll-Gergely B: Charcoal and mollusc shell ¹⁴C-dating of the Dunaszekcsó loess record, Hungary. *Quaternary Geochronology*, 35: 43-53 (2016) <http://real.mtak.hu/40865/>

27. Karátson D, Wulf S, Veres D, Magyari EK, Gertisser R, Hubay K, et al. (15): The latest explosive eruptions of Ciomadul (Csomád) volcano, East Carpathians: a tephrostratigraphic approach for the 51–29 ka BP time interval. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 319: 29-51 (2016) <http://real.mtak.hu/47599/>
28. Pál I, Magyari EK, Braun M, Vincze I, Pálffy J, Molnár M, et al. (8): Small-scale moisture availability increase during the 8.2-ka climatic event inferred from biotic proxy records in the South Carpathians (SE Romania). *Holocene*, 26: (9) 1382-1396 (2016) <http://real.mtak.hu/46162/>
29. Simon E, Harangi S, Baranyai E, Braun M, Fábrián I, Mizser Sz, et al. (8): Distribution of toxic elements between biotic and abiotic components of terrestrial ecosystem along an urbanization gradient: Soil, leaf litter and ground beetles. *Ecological Indicators*, 60: 258-264 (2016) <http://real.mtak.hu/28026/>
30. Janovics R, Kelemen DI, Kern Z, Kapitány S, Veres M, Jull AJT, Molnár M: Radiocarbon signal of a low and intermediate level radioactive waste disposal facility in nearby trees. *Journal of Environmental Radioactivity*, 153: 10-14 (2016) <http://real.mtak.hu/28013/>

**AZ MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI
ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Atommagkutató Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	174	Ebből kutató ² :	115
PhD, kandidátus:	64	MTA doktora:	15
		Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			33

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	348	
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	346	
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	3	
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	8	
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	273	
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	276	
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven: 1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven: 0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	1028,111	Összes független hivatkozás száma (2015):	8301
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			12 094

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	119		
poszterek száma:	102		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	39	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :	14		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	63		
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	27
Diplomamunka (MSc):	19	PhD:	18

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	1099 466	E Ft		
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	15	Teljes saját bevétel:	4644 224	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			16	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		77 005	E Ft	
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		18 967	E Ft	
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			40	
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :		4401 529	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			16	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		6841	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		139 882	E Ft	

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Atommagkutató Intézet

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1099 466	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	4644 224	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	77 005	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	18 967	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	4395 455	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	6074	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	6841	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	139 882	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	0	E Ft

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

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

telefon: (99) 508 343; fax: (99) 508 350

H-1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 15-17.

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

H-1112 Budapest, Budaörsi út 45.

e-mail: szarka.laszlo@csfk.mta.hu, honlap: www.csfk.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2016-ban

2016. évi eredmények

Az MTA CSFK 2016-ban szakmailag eredményes (európai kiválósági és hazai nagypályázatokban kiemelkedően sikeres), ugyanakkor pénzügyileg is rendezett évet zártak. A kutatási eredményeket az intézeti beszámolók tartalmazzák. A 2016 őszi akadémiai értékelés óta két lényeges fejlemény történt: (1) Két intézet (CSI és FGI) tudományometriai csúcsokat döntöttek meg, (3) a kutatóközpont intézetei (a CSI mellett a GGI és az FTI) kiemelkedő pályázati sikereket értek el. Két nyertes ERC (egy StG és egy CoG), egy tematikus H2020-, három GINOP- és egy NKVP-16 pályázat tartozik a legnagyobb tételek közé. Mindezek (valamint a beadott nagypályázatok, pl. a H2020 „Center of Excellence” esetleges sikeressége) jelentősen meghatározzák a kutatóközpont jövőjét. 2016-ban a következő évekre az éves akadémiai költségvetési támogatással összemérhető nagypályázati projekt támogatást szereztek.

A tudományos, pályázati és infrastruktúra-fejlesztési eredményeik elsősorban az intézetek hosszú éveken át tanúsított elkötelezett következetességének az eredményei. Az MTA pályázatain 2016-ban is jól szerepelt a CSFK (az infrastruktúra-fejlesztési pályázaton pl. 3D asztrofizikai vizualizációs berendezést és légköri infrahangállomást kapott a kutatóközpont), és kiválóan éltek a kutatók a 2016-tól elérhető új forrásszerzési lehetőségekkel.

A társadalom felfokozott csillagászati-környezettudományi érdeklődését a CSFK kutatói 2016-ban is magas színvonalon, elhivatott módon, a tudomány társadalmi szerepét komolyan véve elégítették ki. A kutatóközpont számos nemzetközi és hazai megemlékezés szervezésében vett részt a 2016-2017-es Konkoly-emlékév keretében is. (A Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet és az egész CSFK alapításának időpontját 1899. május 16. jelenti, amikor Konkoly ógyallai birtokát a magyar államnak ajándékozta.)

Vezetés és adminisztráció

A tudományszervezés terén mindenekelőtt a kutatóközponti ügyvitelt igyekeztek hatékonyabbá tenni, a korábbi működési modell megtartása (az intézetek tudományos autonómiájának tiszteletben tartása) mellett. 2016 elején mintegy felére (kb. másfél tucatra) csökkentették az intézeti kutatócsoportok számát. Az MTA segítségével 2016 őszén ugyan emelkedtek a kutatói illetmények, de az év folyamán kidolgozták az ún. „Kiváló CSFK Kutató” elismerés 2017 eleji bevezetését, amely a kiemelkedő kutatói teljesítmények jutalmazásának eszközeként szolgál.

Az információáramlást rendszeres vezetői (IT) értekezletek és havi főigazgatói hírlevelek segítik. 2016. július elsejétől mind a négy intézet igazgatója 2019. június 30-ig szóló új vezetői megbízást kapott. Pályázati nyilvántartást vezettek be, vagyonfelmérést rendeltek el. Időszerű lett az Alapító Okirat és a SzMSz módosítása is. Ez utóbbi – a kívánatos, illetve a körülmények által megkövetelt működési modelltől függően – mélyebb átgondolást kíván.

Megújult a külső tanácsadó testület és a közalkalmazotti tanács is. Igyekeztek betarthatóvá tenni a belső szabályzataikat, a kutatói munkarendet. Ez jelentős kockázati tényezőt is jelent. A működési modelljüket is az ehhez való igazodás határozta meg. 2016-ban a jogi-szabályozási környezet (a Kjt és a Kbt) nem lett könnyebb. A kutatóközponti folyamatlista tökéletesítése 2017-es feladat maradt.

A Csillagászati Intézet épületének 2015. évi felújítását követően 2016-ban elkezdődött Sopronban a Geodéziai és Geofizikai Intézet külső-belső épület-felújítási projektje. Amennyiben az MTA, mint tulajdonos megválna a Budaörsi úti Kutatóháztól, a Földrajztudományi Intézet, valamint a Földtani és Geokémiai Intézet új elhelyezést kíván. 2016 folyamán több iterációban igyekeztek az összes szóba jöhető lehetőség közül a szakmailag és pénzügyileg is optimális megoldást megtalálni. Ennek érdekében az FTI helyigényét – egy szakmai egyesülettel folytatott hosszas vitát követően – az év végére 324,3 m²-nyi könyvtárterülettel csökkentették.

A debreceni és gyulai napfizikai megfigyeléseket – amelyek valójában évekkel ezelőtt abbamaradtak – 2016-ban hivatalosan is megszüntették. A debreceni csoport feladata a korábban létrehozott napfizikai adatbázis fejlesztése. Jelentős adminisztrációs erőfeszítést kívánt többek között három megvalósíthatatlannak bizonyult 2015. évi akadémiai pályázati projekt korrekt lezárása.

Az MTA CSFK következetesen nyitott (de nem kezdeményező) volt az átszerveződő minisztériumi intézetekből olyan kutatók, kutatócsoportok átvételére, amelyeknek inkább az „akadémiai” szférában lenne a helye. (2016-ban egy kutatót vettek át.)

Kevésbé látványos háttérmunkák (pl. a Nemzetközi Litoszféra Program magyar nemzeti bizottsága előkészítése és a Milankovics emléktábla-avatás előkészítése terén) is folytak.

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

A kutatómunka az intézetekben folyt.

MTA CSILLAGÁSZATI ES FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FÖLDRAJZTUDOMÁNYI INTÉZET

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az intézet 2012 óta a Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont egyik intézeteként végzi tudományos tevékenységét. A kutatóhely hosszú távú, kiemelt alapkutatási feladata az ország és a Kárpát-medence természeti környezetében rövid- és hosszútávon várható változások kutatása, továbbá a társadalmi-gazdasági térszerkezet átalakulási folyamatainak vizsgálata. Ezek egyaránt kapcsolódtak nemzetközi pályázatok során elnyert kutatási projektekhez (IVF, Syngenta), a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (OTKA, NKFIH, TÁMOP).

A hon- és nemzetismeret terén 2016-ban kiemelkedő tudományos eredmény volt a Magyarország Nemzeti Atlasza című országos hatáskörű MTA projekt vezetése. A készülő atlaszmű átfogó képet ad hazánk természeti-társadalmi környezetének jelenlegi helyzetéről és múltbeli alakulásáról. A projekt a hazai tudományos élet tekintélyes képviselőit toborozta soraiba a készülő atlaszmű megvalósításához.

Az FTI-ben dolgozó természetföldrajzi kutatásokat végző kollégák – más hazai földtudományi kutatóhelyekkel karöltve – évtizedek óta foglalkoznak a hazai árvizek, felszínmozgásos folyamatok (földcsuszamlások, bánya- és folyópartomlások, talajpusztulás), geomorfológiai és hidrogeográfiai okainak feltárásával. További, nemzetközi szinten is perspektivikus kutatások zajlanak paleo- és recens talajtani, valamint eolikus felszínformálási témakörökben is.

A társadalomföldrajzi kutatócsoportok munkatársai korunk aktuális problémáit, kihívásait vizsgálják, így a nemzetközi migrációt, a hagyományos és kreatív gazdaságot, a fenntartható városfejlődést, valamint etnikai-, politikai-, turizmus- és városföldrajzi témákat.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Társadalomföldrajzi kutatások

Etnikai-, politikai földrajzi és migrációs kutatócsoport

A „Cross-border cooperation at the time of crisis on neighbor's soil” című nemzetközi kutatás keretében a kutatócsoport tagjai rámutattak arra, hogy Ukrajna válsága jelentősen növelte a Kárpátaljáról való elvándorlást mind Magyarországra, mind a többi V4 országba és Nyugat-Európába. A magyar nemzetpolitika szerepe ellentmondásos e folyamatban, és hatással van a magyar lakosság elvándorlására. A kutatók elsőként reflektáltak olyan kérdésekre (pl. ukrán munkaerő Magyarországra csábítása), amelyek 2016 folyamán jelentős figyelmet kaptak a hazai és kárpátaljai sajtóban.

A BM és MTA közötti együttműködés keretében a kutatócsoport folyamatosan elemzi az Európába irányuló nemzetközi migráció térbeli sajátosságait. 2016-ban vizsgálta a jelenlegi

migrációs válság globális, regionális és lokális motivációit, irányait, a műszaki határzárak létesítésének és a migrációs útvonalak változásának összefüggéseit. Elemezte az egyes európai célterületekre nehezedő migrációs nyomás területi sajátosságainak változását. Az Európa felé irányuló afro-ázsiai migrációkat kiváltó globális és regionális okok, egymásra épülő, halmozott válságok közép távon sem fognak megszűnni, csakúgy mint a feltartóztatathatlan nemzetközi migráció sem.

Gazdaságföldrajz kutatócsoport

Sikeresen lezárult a „Magyarország láthatatlan turizmusa” OTKA K100953 (2012-2016) projekt. Ennek keretében az úgynevezett nem-konvencionális turisztikai magatartás néhány archetípusát sikerült azonosítani, valamint tér- és időbeli sajátosságait feltárni. A regisztrált szálláshely igénybevétele nélkül, vagy az utazásszervező kiiktatásával bonyolító társas utazások igen jelentős forgalmat generálnak, áruk és szolgáltatások igénybevételevel párosulnak. Ilyenek például a rokonok és barátok felkeresése, a bevásárló utak, a kulturális és sporteseményeken való részvétel, a tanulmányi kirándulások, a 65 év feletti utazása és a magánszálláshely adás (különösen az airbnb). Ezeknek az utazásoknak csupán töredéke kerül statisztikailag rögzítésre, azonban, több száz milliárd forint bevételt hoz a magyar gazdaságnak.

A „Mapping of Complex Rural Geographical Patterns” című kutatás keretében igazolást nyert, hogy a periferezáció nem csak a dualitás, a centrum–periféria rendszer mentén értelmezhető, hanem egy több szintű, több rétegű folyamatot jelent. (1) A termelő vidék fokozatosan szolgáltató vidékké alakul át Magyarországon; (2) a nagyvárosi agglomerációkban érvényesülő üdülőfunkció alapvetően a Budapesti agglomerációban tudott kiteljesedni, Győr, Miskolc és Pécs esetében jelentősen koncentráltabb, a hagyományos turizmus és az üdülőfunkció kevés helyen fedik egymást.

Az 1956-os forradalom és szabadságharc 60. évfordulója nyújtott aktualitást, a Corvin-köz turisztikai szerepének értékelésére. Többek között megállapítást nyert, hogy Budapest VIII. kerületének kitüntetett városrésze nincs becsatornázva a magyar főváros turisztikai vérkeringésébe. Az 1990 után megvalósuló emlékezetpolitika kiteljesedését vélhetően még mindig blokkolja a szocializmus korának felejtéspolitikája.

Urbanizációs és településkörnyezeti kutatócsoport

A kutatócsoportnak sikerült mérnie a szuburbanizáció és városi szétterülés területhasználatra gyakorolt hatásait a budapesti városrégióban. Az adatok alapján megállapítható volt, hogy a művi felszín kiterjedése a budapesti nagyvárosi térségben 1959 és 1990 között $718,8 \text{ km}^2$ -ről $941,6 \text{ km}^2$ -re (11,8%-ról 15,5%-ra) nőtt. A természetes felszín zsugorodása a rendszerváltozás után tovább gyorsult, 1990 és 2012 között a városi felszín kiterjedése $941,6 \text{ km}^2$ -ről $1173,4 \text{ km}^2$ -re nőtt, s 2012-ben a várostérség csaknem 20%-a urbanizálttá vált. A művi felszín növekedése térben és időben roppant egyenlőtlen volt, ennek vizsgálata során számos új tudományos eredményt sikerült leírni.

Új eredményeket értek el a kreatív gazdaság helyi viszonyainak feltárására terén Budapest és Pécs összehasonlító vizsgálata során. A kutatás esettanulmányokon, illetve statisztikai adatelemzésen alapult. Mindkét városban bebizonyosodott, hogy a kreatív gazdaság pozitív hatás gyakorol a lakónegyedek társadalmi és gazdasági környezetnek fejlődésére. A világgazdasági válság hatása a kreatív gazdaság szempontjából eltért a két városban. Míg Budapest erősíteni tudta országos előnyét a kreatív tevékenységek terén, addig Pécsen a város kreatív cégeinek száma, illetve szektorban foglalkoztatottak aránya közel egy évtizede

csökken. A kutatási eredmények segítséget nyújthatnak helyi gazdaságpolitikai célok megfogalmazásához.

A városfelújítás és a nyomában járó népességcsere (t. i. dzsentrifikáció) dinamikáját öt hazai nagyváros (Budapest, Miskolc, Debrecen, Szeged, Pécs) kiválasztott negyedeiben vizsgálva jelentős eltérések mutathatók ki a vizsgált városok és negyedeik között a folyamat résztvevői, térbeli eredményei és társadalmi-gazdasági hatásai tekintetében. Ezek a különbségek részben a városok mértével (t.i. városhierarchiában játszott szerep) részben útfüggő fejlődésükkel voltak magyarázhatóak. A dzsentrifikáció klasszikus formái Budapesten jelentkeztek leginkább, ahol a városfelújítás és a nyomában járó népességcsere is a legelőrehaladottabb. A vidéki nagyvárosokban a studentifikálódás volt inkább jellemző.

Természetföldrajzi kutatások

Negyedidőszak és felszínfejlődési folyamatok kutatócsoport

Az interglaciálisokra vonatkozó por-felhalmozódási adatok meglehetősen ritkák a térségünkben. Az Aeolian Research című folyóiratban megjelent cikk a saharai por interglaciális kori paleotalajok kialakulásában játszott szerepét taglalta, melyek rétegtani és üledéktani adatokon, in-situ mérési eredményeken, valamint numerikus modellek porfluxus adatain alapultak. Kimutatták, hogy egyes paleotalajok esetében a finomszemcsés komponensnek akár 20-30%-a is saharai eredetű lehet.

A Kárpát-medence negyedidőszaki felszínfejlődésének témakörében elért geoinformatikai és petrográfiai eredmények alapján a klasszikus teraszelmélet egyes részeit módosítani kell. A lösz-sorozatok vizsgálatában új módszer került kidolgozásra, amelyet a kutatócsoport tagjai összevetettek más ismert mutatókkal.

A főbb kutatási témák közül több foglalkozott a hazai folyók (Duna, Tisza, Dráva, Kőrös) fejlődéstörténetével, aktuális geomorfológia kérdéseivel és azzal, hogy a különböző történelmi korokban milyen volt az ember és a folyó környezetének kapcsolata. A Duna holocén történetét a folyó szigetei feltárt régészeti lelőhelyek adatainak felhasználásával elemezték. Kutatták a holocén klímaingadozások által befolyásolt hidromorfológia változásokat és ezek kapcsolatát a folyó menti területeken való emberi megtelepedéssel.

Természetföldrajzi kutatócsoport

A kutatócsoport a szénnek (mint az egyik legjelentősebb üvegházhatású gáz fő alkotóelemének) a talajokban való megkötődését vizsgálja. Kiemelt figyelem irányul az emberi hatás (tájszerkezet és a mezőgazdasági hasznosítású területek vizsgálata), illetve az erózió szerepének a kutatására.

Publikációikban a kutatócsoport tagjai bemutatták, hogy a talaj-légkör széndioxid forgalom kulcstényezőjének, a talaj szerves szénnek (SOC) eróziója, szállítódása és lerakódása/eltemetődése szelektív folyamat. Ebben a talaj szerves anyagának (SOM, ill. más terminológia szerint humuszanyagok) a molekulamérete a vezérlő tényező. Változatos domborzatú területen az SOM (humusz) mérete által befolyásolt területi SOM eloszlás még a folyamatosan átkevert szántóföldek esetében is megfigyelhető. A talajok szerkezeti elemeit összetartó nagyméretű humuszanyagok csak kis távolságokra képesek mozogni, ill. azok a feltalajban maradnak. A kisméretű humuszanyagok ezzel ellentétben nemcsak nagyobb távolság (a felszíntől függően akár több kilométer) megtételére képesek, de a talaj mélyebb szintjeibe is hatékonyabban szivárognak be.

A fentiek alapján eredmények azt mutatják, hogy a feltalaj folyamatos szántása a felszín anyagának átkeverésében a korábban gondoltnál jóval csekélyebb szerepet játszik. Másrészt a talaj humuszvesztésének csökkentésében (kisméretű SOM) fontos szerepe lehet a tagolt területszerkezet kialakításának, ill. homogén táblák gyepes sávokkal való tagolásának.

Térképészeti – regionális földrajzi kutatások

Kartográfiai és geoinformatikai munkacsoport

A 2016 februárjában létrejött Kartográfiai és geoinformatikai munkacsoport kettős céllal alakult. Ennek megfelelően – a Magyarország Nemzeti Atlasz kutatócsoport utódjaként – elsődlegesen az MNA szerkesztését irányítja, emellett pedig a CSFK FTI kutatási- és publikációs tevékenységéhez kötődő kartográfiai feladatokat végzi.

Az MNA projekt keretében befejeződött az atlasz topográfiai alapját jelentő Kárpát-medence és Magyarország kivágratra tervezett teljes méretarányos szerkesztése. Az atlaszmű alaptérképének méretaránya 1 : 500 000, ez azonban csak az elektronikus változatban fog megjelenni. Az analóg atlaszban ennek levezetett méretarányai találhatóak. Ezzel egyidejűleg jelentős előrehaladás történt a tematikus térképek szerkesztésében, folyamatban van a „Természeti környezet” c. kötet grafikai megjelenítésének kivitelezése (közel 200 db tematikus térkép kartografálása).

A munkacsoport – a korábbi évekhez hasonlóan – 2016-ban is részt vett a CSFK FTI kutatói tudományos munkájához szükséges kartográfiai munkák kivitelezésében. Ez többek között a publikációs tevékenységben, illetve a külsős projektekhez szükséges beszámolóknak is megjelent (pl. „Belarus in Maps”; „Geomorfológiai kockázatok értékelése a BAF mélységi tároló felszíni létesítményeinek telepítése szempontjából”). A fentiekén túl a munkacsoport részt vett a Hungarian Geographical Bulletin kartográfiai szerkesztésében.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet munkatársai az utóbbi évek gyakorlatának megfelelően egyre aktívabban vesznek részt az elért kutatási eredmények kommunikációjában a társadalom és a döntéshozók felé. Ennek formái sokfélék: tudományos konferenciák szervezése és azokon való részvétel, sajtótájékoztatók, tudományt népszerűsítő rendezvények, médiaszereplés, szakértői tevékenység, iskolai versenyek szervezése, erdei iskolák programjaiban való részvétel, terepi bemutatók tartása, vagy épp blogok és honlapok üzemeltetése (pl. porvihar.blogspot.hu; aeoliandust.blogspot.com; varosrehabilitacio.net), illetve a közösségi média (FB, Researchgate, Academai.edu, LinkedIn) aktív használata.

Az intézet munkatársai 5 nemzetközi és 4 hazai konferencia, workshop szervezésében vettek részt. Ezek közül a 2016. május 31. és június 2. között az MTA székházában az intézet munkatársainak közreműködésével megrendezett "International Conference on Conservation Agriculture and Sustainable Land Use (CASLU)" nemzetközi konferenciát kell kiemelni. A rendezvényen 35 ország 102 kutatója vett részt szóbeli és poszter előadásokkal. Meghívott előadóként nemzetközi szinten is kiemelkedő kutatók voltak jelen, és a FAO is vezető tanácsadóival képviseltette magát. A konferenciát élénk szakmai eszmecsere és építő vita jellemezte. Az intézet munkatársainak előadásait és a terepi napon a kísérleti állomás bemutatását a résztvevők elismerése kísérte, nemzetközi együttműködések ötletei merültek föl. A rendezvény a téma szelleméhez hűen „fenntartható konferenciaként” lett megrendezve, s a szervezők minden részletben igyekeztek kerülni, illetve csökkenteni a környezetterhelést.

Az intézet kutatói tudománynépszerűsítő tevékenységük során 2016-ban 11 ismeretterjesztő előadást tartottak, 16 nyilvános esemény megszervezésében vettek részt. Az intézet igazgatója főként a hon- és nemzetismerettel kapcsolatos kutatási eredmények széles körű ismertetéséhez járult hozzá, főként a hazai és a határon túli magyar médiában (többek között Pannon TV karpatalja.ma, biharinaplo.ro, kepesujtag.com, mno.hu), másik kutatóprofesszoruk pedig a Délmagyar c. napilapnak adott interjút Lázár János miniszter Szeged és Hódmezővásárhely között 2026-re vizionált 300 ezres agglomerációjával kapcsolatban. Az intézet kutatói emellett szakértőként nyilatkoztak a Gazdasági Rádió műsoraiban. Széles közönséget érnek el a Földgömb magazinban megjelenő ismeretterjesztő cikkek is.

Az intézet kutatói a Magyar Földrajzi Társaság tagságának és vezetőségének oszlopos tagjai: két alelnök mellett többen a választmány tagjai és aktívan részt vesznek a nagy múltú civil szervezet tevékenységében.

Az intézet munkatársai a társadalom egészét érintő kérdésekben is aktív véleményformáló szerepet vállalnak, ehhez köthetően vettek részt a *Végvesélyben a Földrajz a (köz)oktatásban* c. petíció megfogalmazásában és a közösségi médiában való terjesztésében. Az ügy háttérében a szakgimnáziumok tantervi reformja és a természettudományos tárgyak (köztük a geográfia) háttérbe szorítása állt. A petíció ügyét a Magyar Földrajzi Társaság karolta fel. Ugyancsak a földrajzoktatás megnyirbálásával kapcsolatban vettek részt annak a tiltakozó levélnek a szövegezésében, amelyet Áder János Köztársasági Elnöknek juttattak el.

Az intézet hírnevét és elismertségét jelzi, hogy az akadémikus intézetigazgató, a Magyar Érdemrend tisztikeresztje kitüntetést kapott az Országházban augusztus 20-án több évtizedes atlaszkartográfiai tevékenységének elismeréseként.

2016-ban az intézet munkatársai együttműködést alakítottak ki a Pop Art Industries csapatával. Az együttműködés keretében Collateral Damage címmel pályázatot adtak be az OFF-BIENNÁLÉ szervezetéhez. (Az Off két évente megrendezendő kortárs művészeti esemény, amely művészek, alkotócsoportok, kurátorok, művészetszervezők, galériások és műgyűjtők kezdeményezésére, önkéntes együttműködésében valósul meg. Olyan civil kezdeményezés, melynek célja, hogy a szélesebb közönséghez közelebb hozza a kultúra egy szeletét, a kortárs művészetet.) A Collateral Damage egy multidiszciplináris képzőművészeti projekt, amely a 2008-as világgazdasági válság okait, lefolyását és következményeit, valamint magyarországi specifikumait elemzi. Ennek keretében egy képzőművészeti kiállítást tervez a csapat 2017 nyarán annak érdekében, hogy az emberek tudományos művek ihlette képzőművészeti műtárgyak segítségével jobban megértsék a makrogazdasági trendeket és folyamatokat.

Az intézet egyik főmunkatársa 2013 óta szervezője és lebonyolítója a 4Cities (4cities.eu) nemzetközi programnak, amely 4 helyszínen (Brüsszel, Bécs, Koppenhága, Madrid) folytat gyakorlatorientált képzést. Ennek keretében 2016-ban a Bécsi Egyetem Földrajz és Regionális Kutatás Intézetéből 20 hallgató érkezett Budapestre az intézet főmunkatársa által szervezett szakmai programra.

2016. május 13-án első alkalommal szervezték meg az „MTA Geonap” című rendezvényét az MTA székházában, amin az intézet is kiállítóként vett részt. Az intézet kollégái két ismeretterjesztő előadással, játékos feladatokkal, különféle kísérletekkel és sok szeretettel várták az érdeklődőket. 2016. május 21-én a Millenárison került megrendezésre a „Felfedező Napja” című rendezvény. Ezen 2015-höz hasonlóan az MTA CSFK FTI minden kutatócsoportja és a könyvtár is képviseltette magát színes kiállítással. 2016. november 12–13-án a Természettudományi Múzeumban került sor a „Földtudományos Forogtag”-ra. Mindhárom rendezvényen a CSFK Földrajztudományi Intézet „Földrajz az egész világ” címet viselő standjánál az intézet természet- és társadalomföldrajzi kutatócsoportjainak kollégái a

szakterületükön zajló terepi munkához kapcsolódó játékos feladatokkal, vizsgálatokkal, érdekességekkel (pl. különleges kőzetek, talajminták, mikroszkóp, térképek) várták a kilátogató családokat. 2016. november 25-én a Magyar Tudomány Ünnepe rendezvénysorozat keretében nyílt napot tartott az intézet a Budaörsi úti kutatóházban. Az intézet tevékenységét négy előadás mutatta be, továbbá a látogatók bepillanthattak a készülő Magyar Nemzeti Atlasz egyes munkafázisaiba, illetve megismerkedhettek a könyvtár történetével, szolgáltatásaival és könyvritkaságaival is.

A terepi bemutatók közül azt a 8 szakmai bemutatót kell kiemelni, amit az intézet szentgyörgyvári kísérleti állomásán folyó kutatásokról rendeztek a munkatársak. A célközönség igen változatos volt: egyetemisták, talajtani szakmérnökök, megyei hatósági emberek, bolgár minisztériumi látogatás, növénytermesztési szakemberek.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

2016-ban a hazai tudományos kapcsolatok terén kiemelkedő jelentőségű volt a „Magyarország Nemzeti Atlasza” c. országos hatáskörű, közfeladatként végzett MTA projekt folytatása, melyet az MTA CSFK Földrajztudományi Intézet koordinál, az intézeti igazgató, mint szerkesztőbizottsági elnök vezetésével. A projekt főbb partnerei: ELTE ITK Térképtudományi és Geoinformatikai Tanszék, ELTE TTK Földrajz- és Földtudományi Intézet, Magyar Földtani és Geofizikai Intézet, Magyar Bányászati és Földtani Hivatal, Országos Meteorológiai Szolgálat, Országos Vízügyi Főigazgatóság, MTA ATK Talajtani és Agrokémiai Intézet, MTA ÖK Ökológiai és Botanikai Intézet, DE TTK Földtudományi Intézet, BM Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság, ME MFTK Földrajz-Geoinformatikai Intézet, SZTE TTK Földrajzi és Földtani Tanszékcsoport, PTE TTK Földrajzi Intézet.

Az intézet természetföldrajzi kutatásaiban a főbb partnerek: ELTE, MTA ATK Talajtani és Agrokémiai Intézet, Szent István Egyetem, Magyar Földtani és Geofizikai Intézet, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, MTA TTK Reprodukció Rendszerbiológiája Lendület Kutatócsoport. A külföldi kapcsolatok közül kiemelkedik a University of Wolverhampton, valamint az ECONOS (H2020) proposal szervezése kapcsán az intézet 11 partnerrel működik együtt.

A társadalomföldrajzi kutatásokban a főbb külföldi partnerek 2016-ban a Charles Darwin University (Ausztrália), a University of Warsaw, Centre of Migration Research, a Kínai Tudományos Akadémia Földrajzi Intézete, az Institute of European and American Studies, Academia Sinica (Tajvan), a University of Roma Tor Vergata intézete, valamint az Arizona State University.

Az intézet egyik legfontosabb üzleti partnere a Syngenta Magyarország Kft, akikkel talajkímélő és hagyományos művelési technikák környezeti hatásainak vizsgálata zajlik. A Műszer Automatika Kft számára hővédő bevonatok alapanyagainak morfológiai, optikai paramétereinek, valamint méreteloszlásának meghatározását végzi az intézet. A Huminsz Kft-vel való kapcsolatban a feladat az extrakciós technikák hatékonyságának meghatározása huminsav és fulvosav extraktumok fejlesztéséhez. A Mecsekérc Zrt-vel két szerződése is van az intézetnek, amelyek az új atomerőművi blokk(ok) telephelyengedélyének megszerzéséhez kapcsolódnak. Fontos nemzetközi partner a Syngenta Corp Protection AG (Basel, Svájc), akikkel a csapadékvíz beszívargás és lefolyásdinamikájának meghatározása folyik kímélő és hagyományos művelésű szántókon esőszimulátoros kísérletekkel.

A nyertes NVKP projekt keretében olyan vállalatokkal működik együtt az intézet, mint az Aquaprofit Zrt., UTB Envirotec Zrt., Magyar Telekom.

2016-ban együttműködési megállapodást kötöttek a Rendőrség Tudományos Tanácsával, amelynek folyamodványaként újabb együttműködési megállapodásra került sor a Nemzeti Közszolgálati Egyetemen a „Turizmusbiztonság és versenyképesség” elnevezésű Államtudományi Kutatóműhely létrehozása érdekében.

Az intézet kutatóit 10 esetben kérték fel tanácsadónak. 36 opponensi (ebből 1 külföldre), 53 egyéb szakértői (ebből 4 külföldi felkérésre), 58 szaklektori (ebből 21 külföldre) véleményt készítettek.

Az intézet széleskörű hazai és nemzetközi kapcsolatainak egy része oktatási-kutatási kapcsolat, de hasonlóan nagy jelentőségűek a különféle társasági, szerkesztőbizottsági tagságok is. Az intézet kutatóihoz összesen 7 nemzetközi tudományos bizottsági tagság kötődik, közülük két fő nemzetközi tudományos bizottság(ok) vezetője, továbbá 17 nemzetközi és 22 hazai földrajzi szakfolyóirat szerkesztőbizottsági tagság kapcsolható az intézethez. Az MTA CSFK FTI munkatársai összesen 45 hazai tudományos bizottságban tagok, ebből 7 vezetői tisztség.

Az intézet munkatársai közül 9 fő lát el oktatói feladatokat hazai felsőoktatási intézményekben (BGE, ELTE, SZTE, ME, NyME, SZIE, Corvinus), közülük heten doktori iskolában is oktatnak, négyen doktori iskolai törzstagok, egy fő vezetője doktori iskolának. 2016-ban az FTI munkatársai 23 elméleti kurzust és 14 gyakorlatot vezettek. Témavezetőként segítettek 3 OTDK, 32 BSc és 13 MSc dolgozat elkészültét és 26 PhD dolgozat munkálatait.

Az Intézet kutatóinak 2016 folyamán 183 közleménye jelent meg, ebből 6 monográfia és 47 szócikk, amin belül 13 impaktfaktoros tanulmány. Ezek összesített impakt értéke 27,631 volt. A 2016-os megjelenésű független hivatkozások száma 568, a 2016-ban talált összes független hivatkozásé pedig 834.

2016 során az intézet kutatói összesen 43 előadással és 27 poszterrel jelentek meg nemzetközi konferenciákon, míg hazai rendezvényeken 67 előadással és 8 poszterrel képviselték az intézetet. A nemzetközi konferenciák közül kiemelkedik az AAG San Francisco, IGU Peking, EGU Bécs, RSA Graz, az International Conference on Land Use and Rural Sustainability, Hszian (Kína), APA Sydney, Urban Transitions Global Summit, Sanghaj, CBTS Brunico (Olaszország), míg a hazaiak közül kiemelkedik az egri VIII. Magyar Földrajzi Konferencia. Fontos eseménye volt az évnek az intézet munkatársainak szervezésében Budapesten megrendezett „International Conference on Conservation Agriculture and Land Use” című nemzetközi konferencia, amelynek előkészítő és szervezőbizottságában több intézeti kutató vett részt, és ahol fontos szakmai kapcsolatok alakultak ki. Az év során együttműködési keretszerződés és szándéknyilatkozat került aláírásra az Ivane Javakishvili Egyetemen (Tbiliszi, Georgia) és az International University of Sarajevo-val (Bosznia-Hercegovina).

Az intézet az év során öt vendégkutatót látott vendégül rövidebb időszakra a Távol-Keletről (Tajvan: National Taiwan University, ill. Academia Sinica) és Ukrajnából (Ukrán Tudományos Akadémia Földrajzi Intézete).

Az intézet kutatói közül hatan külföldi felsőoktatási vagy akadémiai intézeteknél (Ivane Javakishvili University, Tbiliszi, University of Haifa, Izrael, Taras Shevchenko National University, Kijev, Ukrán Tudományos Akadémia Földrajzi Intézete, Kijev, Universität Wien, Institut für Angewandte Geographie, Raumforschung und Raumordnung, Universität Leipzig, Leibniz-Institut für Länderkunde, Lipcse, Kínai Tudományos Akadémia Földrajzi Intézete, Peking, Academia Sinica, Tajvan, Charles Darwin University, Northern Institute, Ausztrália) folytattak rövidebb vendégkutatói vagy vendégoktatói tevékenységet.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

„A budapesti várostérség tisztított és nem tisztított kommunális szennyvizeiben található egyes EDC szermaradványok vízminőségi, ökológiai és élelmiszer-biztonsági kockázatai és kockázatcsökkentő fejlesztések” című projekt (NKFIH, 2016. december 1-től 36 hónap; a pályázat összköltségvetése meghaladja az egymilliárd Ft-ot, amelyből a CSFK részesedése 459 872 ezer Ft) a budapesti várostérségre (az agglomeráció és az ingázási zóna) fókuszál, ahol 3,2 millió fő, az ország lakosságának 32%-a él. A projektben a környezetbe kerülő tisztított és tisztítatlan kommunális szennyvíz egyes hormonhatású anyagainak (endokrin diszruptorok, EDC-k) térbeli mozgását, feldúsulását, lebomlását, megkötődését vizsgálják, mert ezek az élelmiszer-láncba bekerülve kockázatot jelentenek az ökoszisztéma és a lakosság számára hazánk legurbanizáltabb térségében.

„A fenntartható városfejlődés kihívásai Magyarországon” (NKFIH, 19,7 millió HUF, 2016. november 1-től 36 hónap). A kutatás elsőként kívánja alkalmazni a fenntartható fejlődés koncepcióját a hazai urbanizációs folyamatok vizsgálatában. A projekt olyan jelentős nemzetközi kutatási irányzatok és módszerek hazai meghonosítására törekszik, mint a városi metabolizmus mérése, az ökológiai lábnyom koncepciójának városrégiókra történő alkalmazása, az élhető városi környezettel kapcsolatos lakossági elvárások meghatározása. Mindezek alapján a projekt szakpolitikai javaslatokat fogalmaz meg a helyi és országos döntéshozók számára, hogy a városok versenyképességét fejleszthessék.

„Regionális folyamatok és globális kihívások Ukrajnában és Magyarországon a 2008-as válság óta” című MTA-Ukrán akadémiai mobilitási pályázat (MTA, 2016. január 1-től 36 hónap, támogatás 1,6 millió HUF). A projekt általános tudományos célkitűzése annak megválaszolása, hogy a 2008-as válság óta valóban egy új, a poszt-szovjet éra utáni időszakról beszélhetünk-e? Az elmúlt évek ukrainai geopolitikai eseményei és ezek hatása Magyarországra különösen fontossá teszik az ukrán szakmai partnerekkel folytatott folyamatos, naprakész együttműködést, információcserét és konzultációt. A kutatómunka az aktuális folyamatokat állítja fókuszába, így 2016 folyamán a kutatók a Kárpátaljához kötődő migrációs folyamatokat vizsgálták.

„Belarus in Maps” (MTA EUHUNKPT, elnyert támogatás 5.995 ezer Ft, 2016. december 20-tól 6 hónap). Pályázat-előkészítő tevékenység végzése, amelynek eredményeképp a Berni Egyetem Földrajz Intézete és a Belarusz Állami Egyetem Földrajzi Kara nyújt be közös pályázatot a „Belarus in Maps” kiadvány megjelentetésére.

„Paks környéki erózió veszélyeztetettségi térképének elkészítése” (Magyar Földtani és Geofizikai Intézet, 500 ezer Ft+Áfa, 2016. március 1-től 2 hónap). A projektben az intézet munkatársai a kijelölt 60x60 km-es vizsgálati területen, a Duna jobb partjára eső vízmosásainak digitális adatbázisát készítették el.

Syngenta 2016: „Szántásos és talajkímélő művelések talajeróziós vizsgálata” (Syngenta Kft., 10.700 ezer Ft+Áfa, 2016. január 1-től 12 hónap) és „Szántásos és talajkímélő művelések vizsgálata esőszimulátoros mérésekkel” (Syngenta AG., 6.595 ezer Ft+Áfa, 2016. január 1-től 12 hónap). Az intézet feladata a két műveléstechnológia összehasonlítása a talajerózió szempontjából a Szentgyörgyváron kialakított mintaterületen. Az eredményeket bemutatókon tárták az érintett döntéshozók, gazdálkodók elé.

„Geomorfológiai kockázatok értékelése a BAF (Bodai Agyagkő Formáció) mélységi tároló felszíni létesítményeinek telepítése szempontjából” c. projekt. (Mecsekérc Zrt., 15.500 ezer Ft+Áfa, 2016. március 4-től 13 hónap). A munka célja a magyarországi nagy aktivitású és hosszú élettartalmú radioaktív hulladékok, valamint kiégett üzemanyag kazetták geológiai

tárolókban való elhelyezésére alkalmas térrész vagy térrészek geomorfológiai kutatása, a vizsgált 112 km²-nyi terület felszínformáinak felmérése, térképezése, minősítése, a BAF mélységi tároló felszíni létesítményének elhelyezési lehetőségeinek vizsgálata, illetve a telepítés geomorfológiai kockázatainak értékelése.

„Paleokörnyezet-rekonstrukció hullóporos eredetű üledékek szemcseméret és szemcsealak elemzése alapján.” (NKFIH, 14,997 millió Ft, 2016. október 1-től 48 hónap). A kutatás célja a környezeti kutatások homlokterében álló hullóporos eredetű üledékeket felépítő ásványi szemcsék méretének és alakjának új szempontú elemzése, valamint mindezen paraméterek eloszlásán alapuló új paleokörnyezeti indikátorok kifejlesztése és alkalmazása. Az alkalmazott módszerek köre a leggyakrabban alkalmazott lézer-diffrakciós szemcseméret elemzéseken túl, automata mikroszkópos képfeldolgozáson alapuló szemcseméret és szemcsealak meghatározási vizsgálatokat is magában foglal.

„A Duna mederváltozásai és folyószabályozás előtti vízrajza” (Mecsekérc Zrt., 700 ezer Ft+Áfa, 2016. január 1-től 6 hónap). A munka „Az új atomerőművi blokk(ok) telephelyengedélyének megszerzéséhez szükséges, kutató magfúrások alapján történő földtani kutatási vizsgálatok és program végrehajtása, azon belül általános földtani, geofizikai, geotechnikai és hidrogeológiai vizsgálatok végrehajtása, és térinformatikai adatbázis létrehozása” program részeként valósult meg. A munka fő célja az elmúlt évszázadokban történt mederváltozások, folyószabályozási munkák megismerése, a terület ármentesítés előtti mederhálózatának és geomorfológiai adottságainak és fejlődéstörténetének bemutatása volt a Dunaegyháza és Sükösd közötti folyószakaszon.

„Vizek klorid tartalmának változása a jelenkori földrengések vizsgálata szempontjából” (Mecsekérc Zrt., 700 ezer Ft+Áfa, 2016. május 1-től 2 hónap). A munka magában foglalta a Paksi Atomerőmű telephely középponttal meghatározott 60×60 km élhosszúságú területre vonatkozóan a rendelkezésre álló archív, ill. az FKP keretében nyert új elemzési adatokból származtatott Cl-koncentráció térképnek és az eredményeket bemutató szöveges állománynak az elkészítését. Fő cél volt a területre vonatkozó legújabb mélyszerkezeti ismeretek, ill. az összegyűjtött és feldolgozott Cl-koncentrációk térinformatikai rendszerben történő együttes értelmezése, szintézisbe helyezve az emberi történelemben észlelt (és kipattanási helyét tekintve megfelelő biztonsággal meghatározható) földrengésekkel.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Chen Y, Chang K-t, Hana F, [Karacsonyi D](#), Qian Q: Investigating urbanization and its spatial determinants in the central districts of Guangzhou, China. Habitat International, 51: 59-69 (2016) [ScienceDirect](#), [DOI](#)
2. Egedy T, Kovács Z, Kondor ACs: Metropolitan region building and territorial development in Budapest: the role of national policies. International Planning Studies, InPress: 1-16 (2016) [DOI](#)
3. [Egedy T](#), Smith MK: Old and new residential neighbourhoods as creative hubs in Budapest. Mitteilungen Der Osterreichischen Geographischen Gesellschaft, 158: 85-108 (2016) [REAL](#)
4. Eröss Á: „In memory of victims”: Monument and counter-monument in Liberty Square, Budapest. Hungarian Geographical Bulletin, 65: 237-254 (2016) [DOI](#)

5. Jakab G, Szabó J, Szalai Z, Mészáros E, Madarász B, Centeri Cs, Szabó B, Németh T, Sipos P: Changes in organic carbon concentration and organic matter compound of erosion-delivered soil aggregates. *Environmental Earth Sciences*, 75: 1-11. (2016) [REAL](#), [DOI](#)
6. Kiss E: W-Crisis in Hungarian industries: effects and strategies from the viewpoint of enterprises. In: Wilson-Flores O: *Economic crises: Risk Factors, Management Practices and Social Impacts*. Hauppauge: Nova Science Publishing. 45-81 (2016)
7. Kocsis K, Molnar Sansum J, Kreinin L, Michalkó G, Bottlik Zs, Szabó B, Balázs D, Varga Gy: Geographical characteristics of contemporary international migration in and into Europe. *Hungarian Geographical Bulletin*, 65: 369-390 (2016) [DOI](#)
8. Kovács Z, Szabó B: Urban restructuring and changing patterns of socio-economic segregation in Budapest. In: Tammaru T, Marcińczak S, Ham M van, Musterd S: *Socio-Economic Segregation in European Capital Cities: East meets West*. London; New York: Routledge. 238-260 (2016) [Scopus](#)
9. Madarász B, Juhos K, Ruszkiczay-Rüdiger Zs, Benke Sz, Jakab G, Szalai Z: Conservation tillage vs. conventional tillage: long-term effects on yields in continental, sub-humid Central Europe, Hungary. *International Journal of Agricultural Sustainability*, 14: 408-427 (2016) [REAL](#), [DOI](#)
10. Régi T, Rátz T, Michalkó G: Anti-shopping tourism: a new concept in the field of consumption. *Journal of Tourism and Cultural Change*, 14: 62-79 (2016) [DOI](#)
11. Szalai Z, Szabó J, Kovács J, Mészáros E, Albert G, Centeri Cs, Szabó B, Madarász B, Zacháry D, Jakab G: Redistribution of soil organic carbon triggered by erosion at field scale under subhumid climate, Hungary. *Pedosphere*, 26: 652-665 (2016) [DOI](#)
12. Udvardi B, Kovács IJ, Fancsik T, Kónya P, Bátori Mné, Stercel F, Falus Gy, Szalai Z: Effects of particle size on the attenuated total reflection spectrum of minerals. *Applied Spectroscopy*, 70: 1-12 (2016) [DOI](#)
13. Újvári G, Kok JF, Varga Gy, Kovács J: The physics of wind-blown loess: Implications for grain size proxy interpretations in Quaternary paleoclimate studies. *Earth-Science Reviews*, 154: 247–278 (2016) [REAL](#), [DOI](#)
14. Varga Gy, Cserháti Cs, Kovács J, Szalai Z: Saharan dust deposition in the Carpathian Basin and its possible effects on interglacial soil formation. *Aeolian Research*, 22: 1-12 (2016) [DEA](#), [Teljes dokumentum](#), [DOI](#)

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

FÖLDTANI ÉS GEOKÉMIAI INTÉZET

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az intézet fő feladata a litoszféra anyagát, folyamatainak jobb megismerését célzó alapkutatások végzése, amelyek az ásvány-, kőzet-, és fluidum-képződés, az izotópgeokémia, a környezetgeokémia és a szerves geokémia területén folynak.

A geokémia belső fejlődése, továbbá a természetes környezet állapotának megismerése, megőrzése és az életminőség javítása szempontjából egyre nagyobb jelentőségű környezettudományi vonatkozású kutatások folytatása határozta meg az intézet 2016. évi tevékenységét. Ennek keretében folytatták a geoszféra határfelületein végbemenő geokémiai folyamatok kutatását. Ezek közül elsősorban a Kárpát-medence és tágabb környezete múltbéli és jelenkori környezetállapotát és annak változásait vizsgálták. Tanulmányozták továbbá a talajok geokémiai és ásványtani sajátosságait is.

Az emberiség tárgyi emlékeinek archeometriai kutatásában kiemelt szerepet kapott a Seuso Kutatási Projekt archeometriai alprojektjének koordinálása, amellyel az archeometriai kutatás továbbra is az intézet kiemelt kutatási területe volt.

A fenti tevékenységek mellett az utóbbi időben jelentősen háttérbe szorult a korábban nagy hagyományokkal rendelkező, a nemzetközi tudományos közösség által is elismert földtani alapkutatás. Ezek a kutatások a litoszférát felépítő, a geodinamikai folyamatok rekonstrukcióját lehetővé tevő fontos magmás, metamorf és üledékes kőzettípusok és velük együtt előforduló fluidumok képződési folyamatainak pontosabb megismerését célozták. Ezen kutatási területen belül azonban továbbra is meghatározó az egyes hazai ásványi nyersanyagaink képződését, migrációját és felhalmozódását eredményező, illetve befolyásoló geokémiai folyamatok vizsgálata.

Tovább folytatódott a Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont megalakulásával beindított, a csillagászat és a földtudományok közti határterületek kutatása: több intézet munkatársai közösen végeztek kutatásokat a laboratóriumi asztrofizika területén.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Paleoklimatológiai és környezetrekonstrukciós kutatások

A világon elsőként sikerült kimutatni a barlangi csepegővízben amorf kalcium-karbonát képződését. A felfedezés jelentősége abban rejlik, hogy az amorf karbonát metastabil és a képződést követően nanokristályos kalcitá alakul, ami a karbonátkiválást követő csaknem egy évszázadon keresztül folyamatosan kristályosodik át. A folyamat a cseppkövek diagenézisre való érzékenységét növeli, és ezáltal az eredeti, paleoklimatológiai kutatásban széleskörűen alkalmazott geokémiai összetételek megváltozását eredményezi.

A Baradla és Béke-barlangokban végzett monitoring jellegű kutatás alapján megállapították, hogy a beszivárgó víz viszonylag hosszú ideig (>1 év) tartozódik a karsztban. A csepegővíz

dominánsan a téli csapadékot reprezentálja, és az éves szinten kiváló karbonátok jelentős része a hideg félévben képződik, amikor a széndioxid-koncentráció lecsökken. A kisebb beszivárgási időszakokban már a barlang feletti karszt repedéseiben, üregeiben is történhet karbonátkiválás, befolyásolva a későbbiekben képződő cseppkövek összetételét.

Nagy felbontású U-Th koradatok alapján a Baradla barlang egyik cseppköve az utolsó, kb. 130-115 ezer évvel ezelőtti interglaciálisban képződött. A cseppkő komplex stabilizotópeokémiai elemzése az interglaciálisra jellemző klímaingadozási folyamatokat tárta fel. A kárpát-medencei adatok és a tágabb atlanti-mediterrán régióból származó rekordok összevetésével az interglaciális során fennálló távkapcsolatokat és az atlanti óceáni rendszerben létrejövő fluktuációk hatását sikerült kimutatni.

A Baradla-barlang cseppköveiből kinyert oxigén- és szén stabilizotóp adatsorok statisztikai vizsgálata során kidolgozásra került egy módszertan, amellyel egyenlőlépcsőűvé lehetett tenni a stabilizotópos idősorokat és egyúttal objektíven eltávolítani az adatbepótlás által okozott zajt. Így kimutathatóvá vált egy szignifikáns kapcsolat az Észak-Atlanti Oszilláció indexe és a cseppkő oxigén és szén stabilizotópos adatsorai között.

Löss üledékekből mintázott szerves maradványok és több csigafaj héján elvégzett radiokarbonos kormeghatározás alapján vizsgálták ezen módszerek alkalmazhatóságát a löszanyag korolására. Ennek jelentősége, hogy megértsük, az Észak-atlantikumi gyors klímaváltozások milyen hatással voltak a Kárpát-medence ökoszisztémájára az utolsó eljegesedés során. Eredményeik szerint bizonyos csigafajok (*Succineidae* sp., *Chondrula tridens*, *Trochulus hispidus*, *Clausiliidae* család) héjai statisztikusan megkülönböztethetetlen kort adnak a faszenek korával, tehát ezek jól használhatók lösz kronológiák kidolgozásához. Az így nyert Monte Carlo kormodellek 95%-os valószínűség melletti bizonytalansága a dunaszekcsői feltárásban 500-800 évek közé esik, ami egy nagyságrenddel pontosabb eredményt ad, mint ami a lumineszcens korolással jelenleg elérhető. Fontos módszertani eredmények születtek a faszenekből történő radiokarbon vizsgálatokkal kapcsolatban is.

A lösz szemcseméret-eloszlását és a származtatott indikátorokat széles körben alkalmazzák negyedidőszaki környezetrekonstrukciókban, azonban ezek interpretálása sokszor csak a portranszport folyamatait veszi figyelembe a mobilizálódás és kiülepedés ignorálása mellett. Ez olyan leegyszerűsítés, amely egy sor folyamat hatását figyelmen kívül hagyja a szemcseösszetétel vonatkozásában. A dunaszekcsői feltárás adatainak segítségével kimutatták, hogy a szemcseösszetétel több, gyakran sztochasztikus folyamat által befolyásolt, így többféle lehetséges interpretációt hordoz. Tehát a szemcseösszetételi proxy-k változásainak egy faktor (pl. szélesség) révén történő interpretálása nagy valószínűséggel helytelen és pontatlan.

Az édesvízi mészkövek és mésztufák környezetjelző szerepének kutatásával kapcsolatban kiemelkedő eredmény, hogy a kutatók által felállított stabil oxigénizotópos és „clumped” izotópos („kapcsolt” szén- és oxigénizotópos) termométer kalibrációja a svájci ETH Zürich laboratóriumának kalibrációjaként is szolgál a jövőben.

Részletes szedimentológiai, stabilizotópos, „clumped” izotópos és U/Th soros kormeghatározások készültek a Gerecsében található vértesszőlősi paleolit telep középső-pleisztocén mésztufa képződményén is, amelyek érintették a *Homo heidelbergensis* maradványokat tartalmazó kultúrréteget is. A radiometrikus korvizsgálatok alapján a vértesszőlősi mésztufa 418-268 ezer évvel ezelőtt képződött, és a tarkócsont-maradványt tartalmazó réteg kora 315 ± 73 ezer év. A „clumped” izotóp termométerrel meghatározott hőmérsékletek követik a jégmagfúrások és egyéb globális paleoklimatológiai görbék által rekonstruált hűlést a MIS 9 interglaciális és a MIS 8 interglaciális között, ami rámutat mind a módszer alkalmazhatóságára, mind pedig a mésztufák paleoklimatológiai jelentőségére.

Az intézetben működő *MTA-Lendület 2ka Paleoklíma Kutatócsoport* kutatásai keretében dendrokronológiai és radiokarbon elemzésekkel vizsgáltak a Suceava (Románia) folyóból előkerült szubfosszilis tölgymaradványokat. Eredményeik szerint az anyag a ~700 és ~7000 évvel ezelőtti időtartomány jelentős részét reprezentálhatja. A radiokarbon módszerrel korolt minták időbeli eloszlását a szomszédos folyók (Szeret, Moldova) hasonló leleteihez hasonlítva egyidejű uszadékfa felhalmozódási eseményeket sikerült azonosítani 0.8-0.9 ka cal BP és ~3.7-3.6 ka cal BP körül. Ezek a minták az egyik fontos pillérét képezhetik a régészetileg fontos közép-európai és mediterrán tölgy zónák között kapcsolatot létesítő tölgykronológia jövőbeli építésének.

A Retyezát-hegység utolsó eljegesedését követő jégvisszahúzóds vizsgálata tovább folytatódott a hegység déli oldaláról származó minták alapján. A helyben keletkező kozmogén ^{10}Be koncentrációkból számolt kitétségi kor adatok alapján a legnagyobb kiterjedésű jégárak az Utolsó Eljegesedési Maximum (LGM) idején voltak a hegység mindkét oldalán, kb. 21 ezer éve. Ekkor az Egyensúlyi Vonal Magassága (ELA) a hegység déli oldalán lényegesen alacsonyabban húzódott, mint északon. Ez a különbség a késő glaciális jégvisszahúzóds során fokozatosan csökkent, majd a hegységben észlelt legkisebb, kb. 14 ezer évvel ezelőtti eljegesedésre teljesen eltűnt. Ez alapján az LGM során a Déli-Kárpátokban délies irányú uralkodó szélirány rekonstruálható, mely fokozatosan adja át helyét a nyugatias szeleknek a késő glaciális során.

A Gerecse-hegység területén található Duna-teraszok kozmogén ^{10}Be izotópos mélységprofilos kitétségi kor- és $^{26}\text{Al}/^{10}\text{Be}$ betemettségi kormeghatározások eddigi eredményei alapján elmondható, hogy a területen a Duna negyedidőszaki bevágódási rátája 0.1-0.2 mm/év volt, mely eredmény jól összevethető a területen mért OSL korokból számított rátákkal. A Gerecse édesvízi mészkő előfordulásainak Th/U kor adatait összegezve azonban az körvonalazódik, hogy e képződmények csak nagyon korlátozottan használhatók a Duna bevágódásának számszerűsítésére, ugyanis nagy valószínűséggel lerakódásuk nem köthető az egykori erózióbázishoz. Így a Gerecse kiemelkedés-történetének vizsgálatakor az édesvízi mészkövekből származó kronológiai adatok használata nem ajánlott.

Egy korábbi vendégkutatói posztdoktori projekt keretében végzett kutatás eredménye lett a Balti régió sekély felszínalatti talajvizének stabil oxigénizotóp összetételéről készített geostatistikai modell. A nagy térbeli felbontás (1×1 km) és a csekély mértékű hiba megfelelő alapot ad, hogy az adatbázist hidrogeológiai, ökológiai és törvényszéki alkalmazásokban referenciaként lehessen használni.

Az Atlanti-óceán északi medencéjének déli részén a *G. glycymeris* kagylók növekedése és a tengervíz felszíni hőmérséklete közötti kapcsolat bonyolult és nem közvetlen. Az északi populációkkal ellentétben itt a tengervíz alacsony hőmérséklete nem akadályozza a kagylók növekedését. A felszíni víz klorofill-koncentrációja februárban és márciusban éri el a maximumot, ekkor a legintenzívebb az átkeveredés és a felszíni vízhőmérséklet ekkor a legalacsonyabb. A kagylók növekedési indexe ezen hónapok átlagos felszíni tengervíz hőmérsékletével mutatta a legerősebb negatív korrelációt.

Az antarktisi makro régió hó/firn oxigén stabilizotóp adatsorainak geostatistikai vizsgálata rámutatott azon területekre a régióon belül, melyeket a jelenlegi jégfurat-hálózat térbeli variációjára nem fed le, illetve minden eddiginél pontosabb tájképet nyújtott a terület hó/firn oxigén stabilizotóp variációjáról.

Archeometriai kutatások

A Seuso Kutatási Projekt archeometriai alprojektjének koordinátor-intézményeként folytatták a Seuso kincs tárgyainak geokémiai elemzését. Megállapították, hogy a tárgyak nagy tisztaságú ezüsből készültek (94-96%), amelynek ötvöző anyaga a réz. Bizmuttartalmuk alapján a tárgyak három csoportba sorolhatók, amely eltérő öntecs felhasználását jelzi. Kimutatták, hogy a Seuso tál és a Geometrikus tál niellója ezüst-szulfid összetételű. Két késő-római lelet (augurbot és ezüst övgarnitúra) viszont a homogén ezüst-szulfid nielló mellett inhomogén ezüst-réz-szulfid niellóval is díszített, ami felveti azt a lehetőséget, hogy a kétféle fém szulfidjából készült niellót az eddig gondolthoz képest 300 évvel korábban is használták. A tárgyak aranyozásainak elemzése során kimutatott higany túzi aranyozásra utal, a forrasztásban megjelenő ón- és ólomtartalom pedig lágyforrasztás használatát jelzi. A Seuso üst ezzel szemben nagy tisztaságú rézből készült, amelyben kis mennyiségű ólmot is kimutattak. Az üstön megjelenő korróziós termékek két fő csoportba sorolhatók: (1) passzív korrózió (kuprit, malachit fázisok), mely az eltemetődés során képződött; (2) aktív korrózió (nantokit, atacamit/paratacamit, brochantit fázisok), mely a felszínre kerülés után képződött.

Folytatták a habán (anabaptista-hutterita) ónmázás kerámiák készítés-technikájának rekonstrukciójára és származási helyének meghatározására irányuló kutatásokat is. Több készítési központból származó régészeti kerámia leletanyag ásványtani és geokémiai vizsgálata alapján kimutatták, hogy az ónmázás kerámiák többségének alapteste – a várakozásoknak megfelelően – meszes agyagból készült, ugyanakkor egyes központok leletanyagában megjelenik nem meszes (mészszegény) alaptestű ónmázás kerámia is. A meszes alaptestű kerámiák közül az alvinci (jelenleg Vințu de Jos, Románia) leletek alaptestük ásványos és kémiai összetétele alapján jól azonosítható, különálló csoportot alkotnak.

Hazánk rendkívül gazdag régészeti leletekben, ezen belül üvegből vagy részben üvegből készült tárgyakban. A sárga opak üveget több évezreden keresztül ólom-antimonáttal színezték. A Kr.e. 6–5. század közé keltezhető, Mezőtúr-Újváros-Mészárosstelepen előkerült szkíta dudoros pávaszemes gyöngyök sárga testének tanulmányozásakor kimutatták, hogy az ólom-antimonát pigment vastartalma szignifikánsan nagyobb, mint az üvegmátrixé. További kérdés, hogy szándékosan adagolták-e a vasat a színező pigmenthez, vagy természetes szennyezőről van szó. Azonban bármelyik eset legyen a valóság, sikerült azonosítani egy olyan jellemzőt, ami lehetővé teszi egy új technológiai eljárás vagy egy adott lelőhelyről származó nyersanyag alkalmazásának nyomon követését és ezen keresztül népek közti kereskedelmi kapcsolatok feltárását.

A Besztercebányán és Észak-Magyarországon több lelőhelyről előkerült jellegzetes, magas színvonalat képviselő középkori mázas kályhacsempe-anyag petrográfiai és ásványtani vizsgálataival 3 fő csoportot különítettek el. Eredményeik szerint a Magyarország területén és Besztercebányán előkerült leletek a nyersanyag és készítés-technika szempontjából eltérnek egymástól: a magyarországi minták illites-kloritos, míg a besztercebányai minták karbonáttartalmú, illites nyersanyagból készültek. A magyarországi mintáknál bizonyítható szándékos soványítás, ami a besztercebányai mintáknál nem kimutatható. A besztercebányai és a magyarországi leletek tehát nem egy műhelyben, nem egy mester által készültek, azonban a nagyfokú mintakincsbeli hasonlóság miatt a technológiai ismeretek átadása valószínűsíthető.

Környezetásványtani és -geokémiai kutatások

A kevert szerkezetű agyagásványok nagyon gyakori alkotói talajainknak, adszorpciós tulajdonságaik ismerete így különösen fontos számunkra. Számos erdőtalaj vizsgálata alapján megállapították, hogy a talajvermikulit gyakran kevert szerkezetű formában jelenik meg illittel, vagy klorittal közberétegződve. Laboratóriumi adszorpciós kísérletek feltárták, hogy ez az ásvány jelentős mennyiségű toxikus kadmiumot képes megkötni. Ezt azonban befolyásolja a vermikulit talajbeli átalakulása: az uralkodóan még kloritos jellegű ásványszemcsék kevesebb kadmiumot kötnek meg, mint az erőteljes vermikulitosodásnak indult kloritok. Ez az Al-tartalom és Cd együttes növekedésével nyomozható. Megállapítható tehát, hogy a klorit vermikulittá történő átalakulása növeli a szorpciós kapacitást. E hatást azonban felülírhatja a vas, nevezetesen a vastartalommal növekszik a megkötött Cd mennyisége. Ugyanakkor podzolosodást mutató talajban nem mutatható ki releváns agyagásványtani hatás. Ennek oka az agyagásványos karakterben keresendő, mely összefügg a talajképző közzel: az uralkodóan öröklött és viszonylag inaktív csillám, illit határozza meg az agyagásványtani jelleget.

Vízhatású talajokban megjelenő vas- és agyagásvány előfordulások nehézfém-megkötésben játszott szerepét vizsgálták laboratóriumi körülmények között. Nem várt módon a vasfelhalmozódással jellemzett oxidatív talajszintek réz-megkötő képessége kisebb volt, mint a kevesebb vasat tartalmazó reduktív szinteké. A talajalkotó ásványszemcsék elektronmikroszkópos vizsgálatával megállapították, hogy a réz megkötésében a vasásványok játszanak döntő szerepet, a kis rétegtöltésű duzzadó szmektitek kisebb szorpciós képességgel rendelkeznek. A különböző szintekben megjelenő vasásványok (goethit/ferrihidrit illetve vivianit) közötti jelentős szorpciós különbséget a kísérlet során történő ásványos átalakulással magyarázták. A redukált környezetben lévő talajvas oxidált körülmények között olyan gyengén kristályosodott magas foszfát-tartalmú vas-(oxi)hidroxiddá alakul, mely a jobban kristályosodott goethitnél nagyobb nehézfém-megkötő képességgel rendelkezik.

A levegőben szállított porban található toxikus fémek kémiai formájának ismerete elengedhetetlen a kapcsolódó kockázatbecslésekhez. A Pb, Zn (és Cu) közvetlen ásványtani módszerekkel kimutatható hordozófázisai közül a magnetit, az agyagásványok és a karbonátok a legfontosabbak a városi környezetben. A magnetit elsősorban a (recens) emberi tevékenység hatására kerül a poranyagba, míg az agyagásványok a korábbi (esetleg már inaktív) források toxikus elemeit hordozzák, és a városi talajok felporzásából származnak. Kémiai kioldásos vizsgálataik szerint nagyon mobilis formában (vízoldható, felületen megkötött, karbonátként) a legtöbb toxikus fém jelen lehet, de ez leginkább a Zn és Cd elemekre jellemző. Az ólom is gyakori karbonátként, de a magnetit átalakulásával létrejött kevésbé ellenálló vasoxidokban is dúsulhat. A Cu leginkább a poranyag szerves összetevőikhez kötődik. A nagyon ellenálló oxidfázisokban (pl. magnetit, egyéb fém-oxidok) elsősorban a Cr és Ni dúsul, de jelentős mennyiségű Pb és Zn is kötődik ezen fázisokhoz. Ez utóbbiak csak lassan alakulnak át, így toxikus elemtartalmuk nem tud gyorsan mobilizálódni. A magnetiteken gyakran megfigyelt átalakulás viszont azt sugallja, hogy az ezekhez kötődő fémek sem tekinthetők teljes mértékben immobilisnak. Az említett mobilis formák alkotják elsősorban a levegőben szállított por környezeti veszélyt jelentő fém-összetevőit.

A hazai ásványi nyersanyagok kutatása

Pontosították az úrkúti mangántelep és a kapcsolódó feketepala képződmény keletkezési körülményeit. A feketepala valójában egy szerves anyagban szegény szürke pala, amely

döntően helyben keletkezett ásványokból áll (beleértve az agyagásványokat is), szemben az egyéb feketepalák jelentős arányú törmelékeny ásványfázisaival. A szervesanyag-tartalom és a diagenézis során kialakuló anoxikus állapot a mikrobiális és plankton szerves anyag gyors betemetődéséből származik, amely a hidrotermás rendszerre települő mikrobiális felvirágzás eredménye. Ehhez kapcsolhatók a Mn és Fe oxidációjának megindulása is a fekély képződés hatására, ami azonban az oxigénhiányos környezet miatt nem tudott kiteljesedni. Sőt a szuboxikus rendszer később anoxikussá vált, amit a palában megjelenő biomatok sorozata bizonyít. Összességében egy agyagos, nagy szervesanyag-tartalmú üledék halmozódott fel, amelyben a megfelelő oxigén ellátottságú időszakokban azonnal megjelent az emzimatikus Mn oxidáció és Mn oxid (majd később diagenetikus Mn karbonát) rétegecskék keletkeztek. Amikor az oxigén-ellátottság hosszabb ideig fennállhatott, akkor keletkeztek a gazdaságilag is jelentős értelepek az Úrkúti Mangánérc Formáción belül. Ásványos összetétel és geokémiai sajátosságok alapján a karbonátos érc és a pala nagyon hasonló, azonban jelentősen eltér a Tethys epikontinentális selfjein található feketepaláktól. Ezek a mangánérc és indikációk a Tethys területén komplex árkosodási rendszerek kialakulását, majd elhalását igazolják. A karbonátos érc alatt a bányabeli munkálatok kisebb-nagyobb mértékben visszaoldott mészkő fekélyben Fe-Mn-oxidos kiválásokat tártak fel. A vizsgálataik szerint ezek peremi forráscentrumok lehettek, ahol lokálisan jelentősen emelkedett hőmérsékletű oldatbeáramlás nyomai mutatkoztak, szintén sztramatolitos szerkezetben.

Laboratóriumi asztrofizikai kutatások

A marsi üledékes képződmények földi analógiákon történő vizsgálatát célzó projekt keretében megkezdtek különböző szél és víz által szállított üledékminták szemcséinek morfológiai vizsgálatát. A kétféle üledéktípus szemcséi jól elkülöníthetők az átmérő és átmérő/kerület arány alapján. Érdeklődés eredmény jött ki az ásványfázis meghatározások alapján is, mely alapján elmondható, hogy a fluviális homokokban többféle ásványtípus található, mint az eolikus homokokban.

Vizsgálták továbbá a szenes kondritok és marsi meteoritok másodlagos átalakulási folyamatait, valamint a Csátalja, és Zagami meteoritok sokk-metamorf folyamatait.

b) Tudomány és társadalom

A 2014 áprilisában Magyarországra került késő római Seuso-kincs kutatásához kapcsolódóan a Magyar Tudományos Akadémia égisze alatt indított Seuso Kutatási Projekt keretében az intézet folytatta az öt éves archeometriai kutatási terv megvalósítását. A támogatás mértéke 2016-ban 25 M Ft volt.

Az intézet munkatársai nagy lelkesedéssel vettek részt a 2016-ban megrendezett GEONAP-on és a Földtudományos Forratagon. A kutatók a nagy látogatottságú rendezvényeken több száz érdeklődőnek mutatták be az intézet munkáját és eredményeit ismeretterjesztő előadások és interaktív bemutatók segítségével.

A fenti rendezvényeken túl az intézet munkatársai 13 ismeretterjesztő előadást tartottak egyéb rendezvényeken, középiskolákban.

Ebben az évben több média-anyag is megjelent (pl. Élet és Tudomány) a grönlandi jégmagfúrások poranyagának származása vonatkozásában, illetve az ExoMars rover 2020-as küldetését segítő, földi felsivatagi/sivatagi környezetekben zajló (Marokkó) Mars-analóg kutatásokról is.

Ezen felül az „Antropocén” földtörténeti időskálára történő esetleges bevezetése kapcsán is több interjú került több rádióadásba (pl. Class FM, Szigma: a holnap világa).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatásaikat a korábbi és újonnan szervezett hazai és nemzetközi kapcsolataik keretében folytatták.

Új együttműködések

Új szlovén-magyar kutatási együttműködés indult az MTA-Lendület 2ka Paleoklíma kutatócsoport és a ljubljanai Jozef Stefan intézet részvételével a csapadékvíz izotópok térbeli eloszlásának vizsgálatára az Adria-Alföld páraáramlási útvonalon. A kutatást magyar részről az NKFIH támogatja.

Az intézet egy kutatója részt vett a DANUBIUS-RI pán-európai projekt előkészületi munkálataiban az IIC (International Initiative Committee) tagjaként, amely felvétel nyert az Európai Bizottság ESFRI (European Strategy Forum on Research Infrastructures) 2016-os Roadmap-jébe, és elnyert egy H2020-INFRADEV-2016-2 pályázatot az előkészítési fázisra.

Tudományos együttműködési megállapodás, illetve kutatási megbízás keretében számos kutatóintézettel (Ruder Boskovic Institute, Croatian Geological Survey, Magyar Földtani és Geofizikai Intézet, MTA BTK Régészeti Intézet, SzTE, Szépművészeti Múzeum, Magyar Nemzeti Múzeum) és ipari céggel (Mecsekérc Zrt., Tiszafüredi Thermal Kft., D-Tech Aqua Kft., HYD Kft., Extralko Kft., Horizonkomplex Kft., Budavári Ingatlanfejlesztő és Üzemeltető Nonprofit Kft., Consall Team Kft, Aquiris Kft) álltak kapcsolatban.

Vendégkutatók

Az év folyamán egy PhD hallgatót fogadtak 1 hónapos szakmai gyakorlatra, aki korábban külső tagként csatlakozott a Lendület kutatócsoporthoz, a suceava-i Stefan cel Mare Egyetemről (Románia).

Az intézet egy kutatója két hónapot töltött a Bécsi Tudományegyetem Litoszféra Kutató Tanszékén egy bilaterális projekt keretében, melynek célja egy olyan eljárás kidolgozása volt, amellyel kis mennyiségű (<10 mg) poranyagból lehet kombinált Sr-Nd-Hf izotóp összetételt meghatározni.

Meghívások, felkérések

Egy kutató meghívott előadóként tartott előadást a 13th Geochronological Conference „Dating of Minerals and Rocks XII” című konferencián a lengyelországi Lublinban.

Egy másik kutatót a bécsi Univerzität für Bodenkultur kért fel egy tudományos előadás megtartására.

Részvétel tudományos bizottságokban

Az intézet 5 kutatója nemzetközi, 11 kutatója pedig hazai tudományos bizottság tagja, ebből négyen egy-egy hazai bizottságban vezető tisztséget töltenek be. Az intézet 10 kutatója nemzetközi, egy kutató hazai folyóiratok szerkesztőbizottságának tagja.

Részvétel a felsőoktatásban

Az intézet 6 kutatója vett részt a felsőoktatásban, összesen 22 elméleti és 16 gyakorlati kurzus megtartásával számos hazai egyetemen. Az intézet kutatói 2016-ban összesen 9 PhD, 7 MSc, 8 BSc és 8 TDK témavezetésben vettek részt.

Ipari kapcsolatok

Fontos kiemelni az intézet Paks-2 projektben végzett munkáját (megbízó: Mecsekérc Zrt.). A kutatófúrások magmintáinak ásványtani, agyagásványtani, petrográfiai vizsgálatát végezték. Eredményeik hozzájárulnak a jelentős gazdasági és társadalmi hatású beruházás számára lényeges földtani háttér minél alaposabb és körültekintőbb megismeréséhez.

Szintén nagy jelentőségű a potenciális nagy aktivitású radioaktív hulladéktároló földtani kutatásában történő részvétel (megbízó: Mecsekérc Zrt.), amit az eddig ásványtani-geokémiai vizsgálatok mellett a tárgyévben kiterjesztettek a Nyugati-Mecsek antiklinálisának kozmogén ¹⁰Be izotópos lepusztulás-vizsgálatára is.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az intézetben dolgozó kutatók vezetésével az alábbi kutatási projektek nyertek támogatást az NKFIH-tól:

A „Víz izotópok térbeli eloszlása európai csapadékban - különös tekintettel az Adria-Alföld páraáramlási útvonalra” című, 3 éves szlovén-magyar kutatási projekt (SNN 118205) teljes támogatási összege 20,979 M Ft. A kutatás során a csapadékvíz oxigénjében és hidrogénjében található nehéz és könnyű izotópok, valamint a radioaktív hidrogén izotóp arányának segítségével értékelik a szárazföldi párolgás/párolgotatás részarányának változását az Adria-Alföld páraáramlási útvonal mentén. Hasonló számításokat végeznek más európai területekre, hogy megbecsüljék a regionális vízkörzés sérülékenységet.

A „Marsi üledékes képződmények vizsgálata földi analógiák alapján és kapcsolódás európai űrprogramhoz” című, 4 éves kutatási projekt (NN-116927) teljes támogatási összege 17,991 M Ft. A kutatási projekt célja az európai ExoMars (EXM) rover számára hasznos fúrások végzése és a fúrási anyag optikai, infravörös és röntgenanalitikai elemzésének értelmezése Mars analóg területeken Magyarországon, Marokkóban és Izlandon a tervezés és a műszerhasználat optimalizálásának elősegítésére és a marsi üledékes környezetek keletkezésének értelmezése céljából. Az eredményeket az EXM műszereinek laboratóriumi változataival hasonlítjuk össze, hogy az a küldetéssel kompatibilis legyen.

A „Holocén éghajlati és környezeti változások rekonstrukciója magyarországi és horvátországi cseppkövek komplex geokémiai vizsgálata alapján” című posztdoktori kutatás (PD-121387) teljes támogatási összege 15 M Ft. A tervezett kutatás egy összetett paleoklimatológiai munka, amelynek középpontjában a cseppkövekben megőrződött és a holocén során bekövetkezett éghajlati változások vizsgálata áll különös tekintettel Közép-Európára.

Konzorciális partnerként az intézet részt vesz a „Kárpát-medencei vörösgyagok többoldalú vizsgálata a származási környezet, az üledékképződés és kora, a késő-kainozoos klíma- és ökoszférai változások vonatkozásában” (K-120213) című, 4 éves futamidejű kutatásban is.

A fenti projekteken túl az intézet kutatói két jelentős, 2016-ban elnyert projektben vesznek részt konzorciális partnerként az elkövetkezendő négy évben. Az NKFIH GINOP keretben finanszírozott projekt összesen kb. 200 M Ft forrást biztosít az intézet kutatómunkájára az

MTA Atomkival való együttműködésben. A projekt célja tömegspektrométeres laboratóriumi fejlesztés és annak teljes körű geokémiai alkalmazása, ami kiterjed az intézet által végzett csaknem minden kutatási területre. Az MTA CSFK által elnyert NKFIH NKVP projekt keretében induló kutatás pedig kb. 60 M Ft forrást biztosít elsősorban szerves anyag-agyagásvány kölcsönhatást vizsgáló kutatásokra.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Demény A, Czuppon G, Kern Z, Leél-Ossy S, Németh A, Szabó M, Tóth M, Wu C-C, Shen C-C, Molnár M, Németh T, Németh P, Óvári M: Recrystallization-induced oxygen isotope changes in inclusion-hosted water of speleothems - Paleoclimatological implications. *Quaternary International*, 415: 25-32 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.quaint.2015.11.137>
2. Demény A, Németh P, Czuppon Gy, Leél-Össy Sz, Szabó M, Judik K, Németh T, Stieber J: Formation of amorphous calcium carbonate in caves and its implications for speleothem research. *Scientific Reports*, 6: 39602 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/srep39602>
3. Kern Z, Németh A, Horoszné Gulyás M, Popa I, Levanic T, Hatvani IG: Natural proxy records of annual temperature- and hydroclimate variability from the Carpathian-Balkan Region for the past millennium: review & recalibration. *Quaternary International*, 415: 109-125 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.quaint.2016.01.012>
4. Polgári M, Németh T, Pál-Molnár E, Futó I, Vigh T, Mojzsis JS: Correlated chemostratigraphy of Mn-carbonate microbialites (Úrkút, Hungary). *Gondwana Research*, 29: 278-289 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.gr.2014.12.002>
5. Polgári M, Hein JR, Bíró L, Gyollai I, Németh T, Sajgó C, Fekete J, Schwark L, Pál-Molnár E, Hámmor-Vidó M, Vigh T: Mineral and chemostratigraphy of a Toarcian black shale hosting Mn-carbonate microbialites (Úrkút, Hungary). *Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology*, 459: 99-120 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.palaeo.2016.06.030>
6. Ruszkiczay-Rüdiger Z, Kern Z, Urdea P, Braucher R, Madarász B, Schimmelpfennig I: Revised deglaciation history of the Pietrele-Stanisoara glacial complex, Retezat Mts, Southern Carpathians, Romania. *Quaternary International*, 415: 216-229 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.quaint.2015.10.085>
7. Ruszkiczay-Rüdiger Zs, Kern Z: Permafrost or seasonal frost? A review of paleoclimate proxies of the last glacial cycle in the East Central European lowlands. *Quaternary International*, 415: 241-252 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.quaint.2015.07.027>
8. Ruszkiczay-Rüdiger Zs, Braucher R, Novothny Á, Csillag G, Fodor L, Molnár G, Madarász B: Tectonic and climatic control on terrace formation: Coupling in situ produced ^{10}Be depth profiles and luminescence approach, Danube River, Hungary, Central Europe. *Quaternary Science Reviews*, 131: 127-147 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.quascirev.2015.10.041>

9. Sipos P, Balázs R, Bozsó G, Németh T: Changes in micro-fabric and re-distribution of Fe and Mn with nodule formation in a floodplain soil. *Journal Of Soils And Sediments*, 16: 2105-2117 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/10.1007/s11368-016-1393-6>
10. Sipos P, Choi C, May Z: Combination of single and sequential chemical extractions to study the mobility and host phases of potentially toxic elements in airborne particulate matter. *Chemie Der Erde-Geochemistry*, 76: 481-489 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemer.2016.08.005>
11. Újvári G, Kok JF, Varga G, Kovács J: The physics of wind-blown loess: Implications for grain size proxy interpretations in Quaternary paleoclimate studies. *Earth-Science Reviews*, 154: 247-278 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.earscirev.2016.01.006>
12. Újvári G, Molnár M, Páll-Gergely B: Charcoal and mollusc shell ¹⁴C-dating of the Dunaszekcsó loess record, Hungary. *Quaternary Geochronology*, 35: 43-53 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.quageo.2016.05.005>

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

GEODÉZIAI ÉS GEOFIZIKAI INTÉZET

9400 Sopron, Csatkai u. 6-8.; 9401 Sopron, Pf. 5.
telefon: (99) 508 343; fax: (99) 508 355

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A intézetben folyó geodéziai és geofizikai alap kutatások tárgya a Föld bolygó fizikai állapotának és folyamatainak megfigyelése, modellezése, értelmezése, valamint az ezekhez kapcsolódó elméleti (matematikai, fizikai) és kísérleti módszerek, vizsgálati eszközök fejlesztése. Az alaptevékenység körébe tartozó közfeladatok a szilárd Föld és a Föld körüli térség folyamatos obszervatóriumi megfigyelése (geodinamika, geomágneses tér, aeronómia), a nemzeti szeizmológiai hálózat és szolgálat fenntartása, a nemzetközi együttműködésekkel járó adatszolgáltatási feladatok ellátása, valamint időszakos megfigyelőrendszerek működtetése. Az intézet közvetlen gazdasági jelentőségű tevékenysége a természeti erőforrások kutatása, földtani-földfizikai kockázatok elemzése.

Az intézet nemzetközi összehasonlításban is hagyományosan sikeres kutatási témái a geomágnesség, a mélyszerkezet-kutatás, a szeizmológia, az aeronómia és a geodinamika. Az MTA Széchenyi István Geofizikai Obszervatórium szélessávú elektromágneses méréseivel obszervatóriumi világhálózatok és a Föld felső légkörét, plazmakörnyezetét diagnosztizáló nemzetközi projektek meghatározó szereplője.

A 2016-ban elnyert pályázati források új kutatási irányok elindítását és a meglévő kutatási infrastruktúra korszerűsítését teszik lehetővé. A Széchenyi István Geofizikai Obszervatóriumban létesítendő Mágneses nulltér laboratórium c. *GINOP pályázat* az interplanetáris mágneses térnek megfelelő erőter laboratóriumi előállításával olyan űrfizikai, anyagtudományi kísérletek elvégzését fogja szolgálni, amelyek normál földi körülmények között nem vizsgálhatók. A Kozmikus hatások és kockázatok c. *GINOP pályázat* keretében a Föld plazmakörnyezetének megfigyelésére szolgáló ionosféra radar kerül beszerzésre. *MTA infrastruktúra pályázatból* valósul meg a földi atmoszféra 3D-s tomográfias leképezését megvalósító infrahangállomás, ami új lehetőségeket nyit az atmoszféra dinamika vizsgálatában. Az *MTA Infrastruktúra fejlesztési támogatásból* került beszerzésre egy SeismoWave infrahangállomás légkörtomográfiai vizsgálatok céljára és hangrobbanások helymeghatározására. Az *MTA Európai Unió és hazai kutatóintézeti pályázatok* támogatásával indulhatott el a Kárpátok – Pannon-medence – Dinaridák tektonikai egység mélyszerkezet-kutatása és a recens geodinamikai folyamatainak ürgeodéziai megfigyelése, a földi plazmakörnyezet, a sugárzási övekben lezajló folyamatok elméleti leírása és műszeres megfigyelése, valamint a földtudományi kutatási infrastruktúrák integrálását célzó EPOS (European Plate Observing System) program magyarországi roadmap-jének kidolgozása.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Magnetoszféra-fizika

Az MMS (Magnetospheric Multiscale Mission, NASA) szonda mágneses, elektromos és plazma adatait felhasználva vizsgálták ion- és elektron-skálakon struktúrák kialakulását kvázi-

parallel lökéshullám mögött a földi magnetosheath-ben. A nagy felbontású MMS adatok első ízben tették lehetővé az elektron-skálák vizsgálatát, ami elengedhetetlenül szükséges az ütközésmentes plazma-turbulencia és a mágneses erővonal átkötődés (rekonnekció) teljesebb megértéséhez. Az adatok elemzése részben megerősítette az elméleti várakozásokat és a numerikus szimulációk eredményeit, melyek szerint a mágneses rekonnekció ún. szeparatrix zónája összefüggésbe hozható a részecskék gyorsításával és a plazma fűtésével. Ennek eléréséhez az MMS adataiból közvetlenül meghatározták az általánosított Ohm-törvény elemeit és a részecskeeloszlási függvények aszimmetriáit. Vizsgálták a napszél behatolását a magas szélességű lobe-ban rekonnekció folyamán, a sarki kürtőtől csóva irányban északi irányú bolygóközi mágneses tér (IMF) esetén. Az IMF B_x és B_z komponensének szerepét elemezték a napszél mágneses csóvába való behatolásában a geomágneses dipólus különféle hajlásszögei esetén. A napszél behatolásának aszimmetriáját az északi és déli lobe-ba a földi mágneses tér hajlásszögének változása magyarázhatja, mivel hatással van a rekonnekció helyére a magas szélességű magnetopauzában. Másrészt az IMF B_x szintén hatással van a napszél behatolási gyakoriságára. Ennél fogva a napszél lobe-okban való behatolásának észak-déli aszimmetriája egyaránt függ a geomágneses dipólustól és az IMF B_x összetevőjétől.

Új módszert dolgoztak ki a plazmaszférabeli elektronsűrűség meghatározásához. A módszer tesztelésére mérési tervet készítettek a Van Allen Probes műholdpárra, melyet a NASA elfogadott és a mérések megvalósultak. A módszer mesterséges VLF impulzusok észlelésén és a terjedés inverzióján alapul, alkalmas lehet a hagyományos whistler-inverzió során használt erővonal menti elektronsűrűség-profil modellek validációjára, továbbá kiterjesztheti a plazmasűrűség mérési tartományát más műholdas módszerekhez képest.

Aeronómia, légkörfizika

Ionoszférikus Alfvén rezonanciához (IAR) köthető jeleket azonosítottak a nagyeceni és Hylaty-i (Lengyelország) állomás Schumann-rezonancia észak-déli és kelet-nyugati mágneses komponens adataiban. Az IAR-hoz kapcsolódó jelek az ULF tartomány (0.3 Hz-3 Hz) felső és az ELF tartomány (3 Hz-3KHz) alsó részében jelennek meg. Az IAR-ra jellemző spektrális rezonancia struktúrákat sikerült azonosítaniuk egyidejűleg mindkét állomás regisztrátumában a vizsgált időszakban. Az IAR-ok gerjesztési forrása főként a közepes és alacsony szélességeken létrejövő zivatar-tevékenység. A megfigyelt esetek mindegyikében észlelhető volt villámaktivitás, de a zivatarok minden esetben legalább 100 km-re helyezkedtek el a megfigyelő állomástól. Vizsgálták az ionoszféra állapotát a jelenség kialakulásának időszakaiban. Kimutatták, hogy az f_oE_s paraméter magasabb értékű az események alatt, mint a referencia időszakban.

A Széchenyi István Geofizikai Observatóriumban (NCK) természetes eredetű tranziens ELF rádióhullám csomagok (Q-burst) terjedését vizsgálták és a globális villámdetektor hálózat (World Wide Lightning Location Network, WWLLN) segítségével azonosították azok forrásait. A villámkiszülések és az ELF észlelések irányának eltérését a földkéreg anizotróp vezetőképesség eloszlásával magyarázták.

Budapest földrengés-veszélyeztetettsége és mikrozonációja

A főváros területén vizsgálatokat végeztek a földrengések helyi módosító hatásának megismerésére. Mikroszeizmikus háttérzaj mérések alapján meghatározták a rezonanciafrekvenciákat és a H/V arányok azimutfüggő irányítottságát. A H/V görbék irányítottságának vizsgálatával a topográfiaiból eredő laterális módosító hatást mutattak ki. A felületi hullámok diszperziós tulajdonságain alapuló, aktív és passzív szeizmikus méréseket végeztek a vizsgált terület felső rétegeiben az S hullám sebességeloszlás meghatározására. Az egymást kiegészítő különböző mérések (MASW, ReMi, ESAC, H/V) együttes inverziójával

meghatározták az S-hullám sebességeloszlását. Vizsgálták a mikroszeizmikus zaj keresztkorrelációján alapuló módszer lokális alkalmazhatóságát. Megállapították, hogy a módszer alkalmazhatósága főként a zajforrások eloszlásától függ.

Szerkezetkutatás, szeizmikus zajtomográfia

A mikroszeizmikus zaj alapú felületihullám-tomográfia alkalmazásával meghatározták a Pannon-medencére vonatkozó, a Rayleigh-hullám fundamentális módusához tartozó csoportsebesség-eloszlás térképeket a magyarországi permanens szeizmológiai hálózat, valamint a környező országok 37 állomásának felhasználásával a 7–26 s közötti periódusidőkre közelítőleg 70 km-es horizontális felbontást biztosítva. Meghatároztak egy, a Pannon-medence területére vonatkozó átlagos, négyréteges S-hullám-sebességprofil. Eszerint a réteghatárok, melyek rendre az üledékréteg, a felső kéreg és az alsó kéreg alsó határát jelölik, közelítőleg 3, 11 és 27 km-es mélységben helyezkednek el. A legfelső rétegben 2,34 km/s, a középsőben 3,10 km/s, az alsóban 3,53 km/s, a legfelső köpenynek megfelelő feltérben pedig 4,16 km/s az S-hullám terjedési sebessége. A csoportsebesség térképek által definiált virtuális diszperziós görbék inverziójával meghatározták a Pannon-medence háromdimenziós S-hullám-sebességterét közelítőleg 35 km-es mélységig. Az eredmények jól tükrözik az ismert, nagy léptékű geológiai szerkezeteket. Ezen túlmenően számos területen sikerült leképezni a Moho mélységét (kéreg-köpeny határ) is. Diszperziós görbék felhasználásával különböző periódusidőkre meghatározták az azimutális anizotrópia gyors tengelyének irányát és az anizotrópia nagyságát. Kimutatták, hogy a gyors tengely azimutja növekvő periódusidővel egyre keletiesebb irányt vesz fel. A csoportsebességek alapján meghatározott anizotrópia mértéke 6,2–9,6% közé esik a 10–30 s periódusidő tartományban. Az átlagos S-hullám-sebességprofil felhasználásával számított érzékenységi görbe alapján megállapítható, hogy ezen eredmények a kéreg és a legfelső köpeny anizotrópia viszonyait tükrözik.

Elméleti szeizmológia

Kis földrengések momentumtenzorának hullámforma-inverzióval történő meghatározása nehéz, mivel a regisztrált szeizmogramok jel/zaj aránya csupán ~0.5 Hz feletti frekvenciákra kielégítő, miközben a magasabb frekvenciájú (~1-2 Hz-es) hullámformákat csak relatíve közeli állomásokra (néhányszor 10 km-nél kisebb epicentrális távolságokra) lehet modellezni. Kidolgoztak egy probabilisztikus eljárást, amely hullámformák, valamint P és S hullámok polaritás adatainak együttes inverziójával határozza meg a gyenge lokális földrengések DC (dupla erőpáros) mechanizmusát. Az eljárás pusztán polaritás adatok inverziójával a lehetséges fészekmechanizmus megoldások széles skáláját adja. Ha az inverzió a hullámformák bevonásával történik, akkor az eredményül kapott fészekmechanizmus bizonytalansága jelentősen csökken. Ez a módszer nemcsak az eredmény megbízhatóságát növeli, hanem lehetőséget biztosít a skaláris momentum becslésére is.

A szeizmikus hullámok csillapodása fontos paraméter a forrásparaméterek, a talajmozgások, a szeizmikus veszélyeztetettség számítása esetén. A csillapodást a jósági tényező (quality factor, Q) jellemezi. A frekvenciafüggő jósági tényező becslésére a coda normalizációs módszert alkalmazták. A módszer során mind P, mind S hullámok esetén az amplitúdót normálták a coda hullámok amplitúdójával. Az amplitúdó arányok logaritmusai lineárisan függenek a hipocentrális távolságtól adott frekvencia esetén. Ebből meghatározták az adott frekvenciára jellemző csillapodást. A vizsgálataik során a 2005–2014 között kipattant 274 földrengés Magyarországon regisztrált 1968 szeizmogramját használták fel. A számításokat elvégezték mind a kelet-nyugat, mind az észak-dél irányú csatornák esetében.

AlpArray projekt

Az AlpArray projekt 2016. január 1-jével indult, és az adatgyűjtés fázisában van. A projekt időtartam alatt 24 európai intézet biztosítja a kutatások háttérét képező AlpArray Backbone Seismic Network fenntartását, az MTA CSFK Geodéziai és Geofizikai intézet 23 szélessávú szeizmológiai állomással vesz részt a projektben. A kitűzött tudományos célok elérésének feltétele magas minőségű adatok regisztrálása és folyamatos továbbítása az EIDA node (European Integrated Data Archive) adatközpontokba. 2016-ban elkészültek az állomásokra vonatkozó zajspektrumok. Ennek alapján az intézet a legjobb minőségű adatszolgáltató kategóriájába (Core Group) került. A projekt tudományos programjának tervezése folyamatban van különböző munkacsoportok (WG) alakulásával. Az intézet munkatársai tagjai a tagjai a felületi hullám tomográfiás vizsgálatokra létrehozott *Surface Wave WG*-nek és kezdeményezték az *Earthquake Catalogue* munkacsoport létrehozását, amely a nagy állomássűrűségű hálózat észleléseivel földrengés paraméterek, lokális feszültségterek minél pontosabb meghatározását célozza. Előkészítés alatt van a projekt gravitációs és műholdgeodéziai kiterjesztése, ami az alpi orogenezis interdiszciplináris vizsgálatát biztosítja.

Űrgravimetria, nehézségi erőter időbeli változása

A GRACE műholdak mérései által előállított nehézségi erőter modellek tömegátrendeződéssel járó folyamatok, így a sarki jégtakaró oladási és gyarapodási folyamatainak meghatározására is használhatók. A sarki jégtakarók esetében a jégtakaró változása mellett számos egyéb folyamat is jelentős tömegátrendeződéseket okozhat. Az Antarktisz esetén a legutóbbi jégkorszakot követő izosztikus kiegyenlítődés (Glacial Isostatic Adjustment; GIA) során felúszó lemez okozta tömegátrendeződés számottevő. Megvizsgálták, hogy mekkora a GIA modellek tapasztalati megbízhatósága, 9 ismert GIA modell összehasonlítása alapján. Eredményeik azt mutatják, hogy a GIA modell korrekciója a kontinens túlnyomó részén a jégtakaró változásának nagyságrendjébe eső hibával terhelt, így a GRACE alapján számolt jégtakaró-változások nem megbízhatók. Megbízható becslésűnek mondható a Nyugat-Antarktisz területén tapasztalható gyorsuló ütemű oladási folyamat.

A Pannon-medencében a gravitációs árapály geodinamikai megfigyelésére az elmúlt években 6 különböző graviméterrel, 5 helyszínen végzett 3-9 hónap hosszúságú regisztrátumok feldolgozását végezték el a napos (O1) és fél napos (M2) hullámhosszú tagok meghatározására. A viszonylag elavult műszerezettség (rugós graviméter) ellenére a regisztrátumok minősége és a meghatározott amplitúdó tényezők teljesítik azt az 1 μGal -os pontossági követelményt, amelyet az elméleti árapály vizsgálatok és az árapály paraméterek helytől függő vizsgálata megkövetel. Meghatározták a G949 rugós graviméter skálatényezőjének időbeli változását valamint elvégezték a műszer tömegmozgató berendezéssel történő abszolút és más, korszerűbb graviméterekkel történő együttmérés során a relatív kalibrálását. Ezzel lehetővé vált a különböző helyszíneken a G949 műszerrel mért regisztrátumokból az ETERNA árapály elemző programmal meghatározott árapály amplitúdók közvetlen összehasonlítása. Eredményeik azt mutatják, hogy nyugatról kelet felé haladva néhány tized százalékot nő az O1/M2 arány, ami kapcsolatba hozható az óceáni terhelés hasonló irányú csökkenésével. Ez ugyanis éppen az M2 összetevő értékét csökkenti a partoktól távolodva.

Környezetgeofizikai vizsgálatok

Numerikus szimulációkon és analóg modellezésen alapuló átfogó vizsgálatokat végeztek a különböző elrendezésű geoelektromos kutató módszerek, mint a hagyományos Wenner- α és β , Wenner-Schlumberger, Dipól-Dipól, Pól-Dipól; a négyelektródás optimalizált Stummer valamint a $\gamma_{11n, (n=2-7)}$, γ_{q0} és a γ_{313} elrendezések kimutathatósági mélységének és horizontális felbontóképességének meghatározására. Eredményeik azt mutatják, hogy a hagyományos elrendezések közül a Wenner- β elrendezés leképezési tulajdonságai bizonyultak a legjobbnak

a vizsgált modellekre. A γ -típusú elrendezések kimutathatósági mélysége nagyobbak bizonyult a hagyományos elrendezéseknél a vizsgált modellek esetében, illetve a horizontális felbontóképesség vizsgálat során is az összes vizsgált hatót el tudták különíteni egymástól, míg a hagyományos elrendezések erre nem voltak képesek. Kimutatták, hogy a $\gamma_{11n, (n=2-7)}$ elrendezések esetében kevesebb zavaró álanómia jelenik meg az invertált elektromos fajlagos ellenállás szelvényeken és pontosabban visszaadják a vizsgált modellt, ha azt tükrözött változataival együtt alkalmazzák.

Azt tapasztalták, hogy a γ -típusú elrendezések a kis hatók, illetve monitoring vizsgálatok esetében szolgálhatnak többlet információval a hagyományos elrendezésekhez képest, így kiegészíthetik azokat.

Űrgeodézia

Az Európai Űrkutatási Ügynökség (ESA) Copernicus programja a földmegfigyelés új fejezetét nyitotta meg a Sentinel műholdakon keresztül. A Sentinel-1 műholdpár szintetizált apertúrájú radar (SAR) felvételeinek interferometrikus feldolgozása a felszínmozgások nagy pontosságú megfigyelését teszi lehetővé nagy időbeli felbontással (6 nap) és viszonylag nagy területre nagy térbeli felbontással (100 m²).

Integrated Sentinel-1 PSI and GNSS technical facilities and procedures for determination of 3D surface deformations caused by environmental processes ESA pályázat keretében vizsgálták az űrgeodéziai módszerek és fejlesztések felhasználását a tektonikus folyamatok megfigyelésében. Elvégezték a mesterséges szórópontok (backscatter) tervezését, amelyek lehetővé teszik a felszínmozgások mm pontosságú meghatározását. A backscatter-ek elektromágneses tulajdonságainak optimalizálását analóg, analitikus és numerikus vizsgálatok alapján végezték. Meghatározták a különböző sarokreflektor típusok (háromszög - TT, négyzetes – ST és negyed kör –CT alapú) hatásos radarkeresztmetszetét. A Sentinel-1 műhold paramétereit (felbontási cella mérete, besugárzás szöge, hullámhossz) valamint a különböző felszínborítások reflexiós tulajdonságait figyelembe véve meghatározták a háttérreflexió (clutter) értékét. Kimutatták, hogy C-sávú mikrohullámú távérzékelés esetén az 1 mm pontosságú elmozdulások detektálásához 20 dB, a 0.1 mm hibájú műhold irányú (LOS) deformációk meghatározáshoz 40 dB SCR (Signal-to-Clutter Ratio) érték szükséges. Megállapították, hogy a háttér reflexiójából dominánsan kiemelkedő objektumok 34-44 dBm² hatásos radarkeresztmetszettel kell, hogy rendelkezzenek a Sentinel-1 műhold esetében. A kívánt 40 dB-es hatásos radarkeresztmetszetet biztosító élhosszúságok a vizsgált trihedrális backscatterek esetén: 1,66 m a TT, 1,19 m az ST és 0,96 m a CT típusú reflektorok esetén. Numerikus szimulációk alapján meghatározták a vizsgált reflektor típusok közel konstans (-3dB) hatásos radarkeresztmetszetet biztosító tartományát. Eredményeik szerint a háromszög alapú sarokreflektor (TT – triangular trihedral) rendelkezik a legnagyobb irányélességi tartománnyal, ezzel a reflektor kevésbé érzékeny a műhold irányba való pontos tájolásra. Ugyanazt a hatásos radarkeresztmetszetet a TT reflektor a legnagyobb élhosszúsággal adja a vizsgált típusok közül, azonban a reflektor központi része biztosítja a szóró keresztmetszetet. Ezért numerikus modellezéssel vizsgálták a reflektor csonkítási lehetőségét növelve ezzel a reflektorból kialakított pontjel robusztusságát, ellenállását a mechanikai hatásoknak. Kimutatták, hogy 0,3 m élhosszúságú csonkítás nem csökkenti jelentősen az elektromágneses reflexiót és a csonkított reflektor irányélességi tartománya közel azonos, mint a csonkítatlan TT reflektoré. Az 1:5 szerinti leskálázott modelleken végrehajtott analóg modellezés célja a különböző típusú reflektorok valós környezetben való reflexióinak vizsgálata volt. Eredményeik azt mutatják, hogy a tervezett csonkított TT reflektor ideális a hosszú időállandójú tektonikus folyamatok Sentinel-1 műhold alapján történő megfigyelésére.

Légköri sugárzás-átviteli vizsgálatok

Az üvegházhatás sugárzástani szempontból történő vizsgálatához matematikai modellt állítottak fel a földi légkörben a radiatív fluxus terjedésére, valamint alsó és felső korlátot vezettek le a légkör által befogott radiatív fluxusra. Mért és számított fluxusok alapján kiszámították az üvegházhatású gázok radiatív járulékát a Föld 1880-2010 között tapasztalt melegedésére vonatkozóan.

Geomágnesség

A geomágneses tér szekuláris változásának vizsgálata és Föld külső magjában zajló magnetohidrodinamikai (MHD) folyamatok közvetett megfigyelése céljából direkt és inverz modellszámításokat kezdtek. A kiindulási modell a köpeny-mag határon elhelyezett - ekvivalens dipólussal is helyettesíthető - változó méretű és irányú vortex volt. A kiindulási modellt sikerült különböző rácsponthoz elhelyezett vortex-rendszerrel továbbfejleszteni. Ez a megoldás stabilabb inverziós paraméterbecslést eredményezett, ami már alkalmas lehet a külső mag áramrendszereinek leképezésére a szintetikus adatokon végzett számítások szerint.

Az Einstein-teleszkóp megvalósíthatóságának vizsgálata Magyarországon

A közelmúltban a LIGO gravitációshullám-detektor (GW) áttörő sikere újabb, nagyobb felbontású detektorok megvalósítását inspirálta. Az Einstein-teleszkóp (ET) egy, a LIGO-ét tízszeresen meghaladó érzékenységgel, széles spektrumú, ún. harmadik generációs gravitációshullám-detektor koncepciója, ami új perspektívákat nyithat a GW asztronómiában. Az ET spektrumának alacsony frekvenciájú (1-40 Hz) sávja egybeesik a globális mikroszeizmikus zaj és az energikus természetes elektromágneses aktivitás (ELF-ULF) tartományával. Ezért az ET megvalósításának előfeltétele a szeizmikus és elektromágneses zajok minimalizálása, a beágyazó közet fizikai paramétereinek (rugalmas paraméterek, elektromos, mágneses tulajdonságos, csillapítás) ismerete. A Wigner Fizikai Kutatóközpont 2016-ban a szimultán zajvizsgálatok céljából létrehozta a földalatti Mátra Gravitációs és Geofizikai Laboratóriumot. A GGI a laboratóriumban és a Piszkestetői Observatóriumban egyidejű elektromágneses és szeizmológiai megfigyeléseket végez a zajspektrum, ill. a felszíni és a földalatti állomás közötti közeg átviteli függvényének meghatározására.

b) Tudomány és társadalom

A szeizmotektonika, a sérülékeny földtani szerkezetek, képződmények és a Nap-Föld fizikai eredetű veszélyhelyzetek elemzése, megelőzésük és előrejelzésük lehetőségeinek vizsgálata az intézet alapfeladata. Kiemelt közfeladat a Nemzeti Szeizmológia Szolgálat fenntartása és a Föld körüli térség diagnosztizálása is. A Föld plazmakörnyezetében napkitörések következtében fellépő szélsőséges állapotváltozások, geomágneses viharok valódi, és egyre növekvő kockázatot jelentenek a korszerű telekommunikációs technológiákra, navigációs- és energiaátviteli rendszerekre. A Geodéziai és Geofizikai Intézet folyamatos adatszolgáltatási és szakértői feladatokat lát el a BM Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság részére a szeizmotektonikai eseményekkel kapcsolatban.

Az intézet munkatársai a Kossuth Rádió Tér-Idő című ismeretterjesztő műsorában az ez évi olaszországi földrengés sorozat kapcsán adtak interjút. A két részes műsor keretében bemutatták az MTA CSFK GGI Kövesligethy Radó Szeizmológiai Observatóriumot, ismertették a földrengések kutatásának módszerei, műszerei, valamint a hazai földrengés-kutatás történetét a 19. századtól napjainkig. A riport kitért a földrengések előre jelezhetőségének kérdésére illetve hogy hogyan detektálhatók a bekövetkezett földrengések az űrből.

A Magyar Tudomány Ünnepe idén az „Oknyomozó tudomány” mottót viselte, jelezve, hogy a tudományos kutatómunka aprólékos, egymást követő generációk által kidolgozott módszereken alapuló tevékenység. A rendezvény keretében az érdeklődők az intézet által szervezett „Földrengések furcsaságai, avagy milyen jelek előzhetik meg és kísérhetik a földrengéseket?” interaktív előadáson vehettek részt. A látogatók a földrengéseket megelőző és kísérő rendkívül érdekes természeti jelenségek mellett megismerkedhettek a szeizmográfok felépítésével és maguk is kelthettek földrengéseket.

A *Szeizmológia az iskolában* program keretében egy székesfehérvári általános iskolában installálásra került egy suliszeizmográf. A program sikeressége, a diákok és tanárok érdeklődése jól mutatja, hogy egy fizikai kísérletet megvalósító eszköz, mérések értelmezése közelebb hozza a természettudományok világát a diákokhoz.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

School of Earth and Environment, University of Leeds, BME Szélessávú Hírközlési és Villamosságtan Tanszék: műholdradar interferometria, Sentinel-1 misszió, mikrohullámú műholdradar reflektorok méretezése;

Conrad Observatorium, Ausztria: nagy érzékenységgű dőlésmérők tektonikai folyamatok megfigyelésére;

Massachusetts Institute of Technology: aeronómia, Schumann-rezonancia kutatása;

The Catholic University of America, NASA Goddard Space Flight Center: napszél-magnetoszféra energiacsatolás;

Thunderstorm effects on the Earth-Ionosphere System (TEA-IS) European Science Foundation Research Networking Programme: aeronómia, felsőlégköri elektro-optikai emissziók megfigyelése és elemzése;

Laboratoire de Physique et Chimie de l'Environnement et de l'Espace (LPC2E) / CNRS; Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, Université de Toulouse: magnetoszféra-vizsgálatok, magnetohidrodinamikai kutatások;

INTERMAGNET: nemzetközi geomágneses obszervatóriumi hálózat;

AlpArray Steering Committee: ETH Zürich, University of Vienna, University of Berlin, National Institute of Oceanography and Experimental Geophysics (OGS), ISTERre Grenoble, Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia, Prague IG ASCR, GeoForschungsZentrum Potsdam, MTA CSFK Geodéziai és Geofizikai Intézet

ELTE TTK Litoszféra Fluidum Kutató Laboratórium: magnetotellurikus mélyszerkezet-kutatás és köpeny eredetű xenolitok vizsgálata litoszféra-asztenoszféra határ kutatása céljából.

Hazai rendezvények szervezése

X. Geomatika Szeminárium, MTA CSFK Geodéziai és Geofizikai Intézet, Sopron, 2016. november 10-11.

A rendezvény célja a korszerű földtudományi célú adatgyűjtési és adatfeldolgozási módszerek, az ahhoz kapcsolódó felhasználói rendszerek elméleti és gyakorlati vonatkozásainak ismertetése, továbbá a geodézia, a geofizika, a műszertechnika, a fotogrammetria, a távérzékelés, a térinformatika, a geometematika, a nehézségi erőtér modellezése, a kozmikus geodézia, a GNSS rendszerek és a geodinamika legújabb kutatási eredményeinek bemutatása.

Nemzetközi rendezvények szervezése

Preparatory Meeting of the Geodynamics of the Carpathians Bend Interior, MTA CSFK Geodéziai és Geofizikai Intézet, Sopron, 2016. március 23-25.

TOPO-TRANSSYLVANIA meeting, Brassópolyána, 2016. október 13-15.

A projekt célja az európai litoszféra lemez tektonikailag legérdekesebb részének, a kárpáti szubdukciónak, a szubdukcióhoz kapcsolódó vulkánosságnak valamint a vulkáni tevékenység sótektonikára gyakorolt hatásának komplex úrgeodéziai, magnetotellurikus és szeizmológiai alapú tomográfiai megfigyelése és modellezése. A projektvezető GGI mellett a kezdeményezéshez az ELTE, a Román Földfizikai Intézet, a Román Geodinamikai Intézet, a Sapientia Tudományegyetem, a Babes-Bolyai Tudományegyetem és a litoszféra-dinamika világvezető központjának számító Utrechti Egyetem csatlakozott.

2016 márciusában egy előkészítő megbeszélésre került sor Sopronban, októberben Brassópolyánán a projektben részt vevő intézetek együttműködési megállapodást írtak alá és a projekt tudományos programját körvonalzták. A projektben tervezett vizsgálatok lehetővé teszik a European Science Foundation TOPO-EUROPE programjába alprogram kezdeményezését.

Oktatási tevékenység

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (eseti):
Habilitációs Bizottság, PhD védés 2 fő.

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (rendszeres):
ELTE TTK: 6 elméleti kurzus, 2 gyakorlati kurzus;
NyME (EMK, KTK, FMK): 6 elméleti, 4 gyakorlati kurzus.

Külföldi egyetemen végzett oktatási tevékenység:
BBTE, Kolozsvár: 2 elméleti kurzus, 1 gyakorlati kurzus.

Doktori iskolában törzstag:

NyME EMK Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola: 1 fő;

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

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

Doktori iskolában oktatás:

BME Vásárhelyi Pál Doktori iskola: Inertial Structure of the Earth, Geofizikai adatfeldolgozás.

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

NYME Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola: Geodinamikai folyamatok modellezése, A GNSS rendszerek környezettudományi alkalmazásai, Környezeti mozgások mérése, A tudományos kutatás módszertana, Naptevékenység és időjárás, Geomágnesség, Űridőjárás és -klíma, Légköri elektrodinamika, A Föld szerkezete és folyamatai.

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

Témavezetés (TDK-dolgozat):

ELTE Természettudományi Kar: 1 fő,

ÓE Alba Regia Műszaki Kar: 3fő.

Témavezetés (BA, BSc diploma):

ELTE Természettudományi Kar: 2 fő,
NYME Simonyi Károly Műszaki, Faanyagtudományi és Művészeti Kar : 1 fő,
ÓE Alba Regia Műszaki Kar : 9 fő.

Témavezetés (MA, MSc diploma):
BME Építőmérnöki Kar : 1 fő;
ELTE Természettudományi Kar: 4 fő.

Témavezetés (PhD disszertáció):
ELTE Földtudományi Doktori Iskola: 3 fő;
NYME (EMK, KTK, FMK): 6 fő.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Mágneses nulltér laboratórium létrehozása (GINOP-2.3.3-15), 2017-2019, konzorciumvezető, projekt költsége: 435 M Ft, GGI: 175,4 M Ft

A projekt célja egy elektromágnesesen „tisztá” laboratóriumi kamra kialakítása, amelyben a statikus és a változó geomágneses tér kikompenzálásával, és a maradék tér hatékony árnyékolásával a földi mágneses tér mintegy 5 nagyságrenddel lecsökkenthető és az interplanetáris térben jellemző mágneses környezet hozható létre.

Kozmikus hatások és kockázatok (GINOP-2.3.2-15), 2016-2020, Kiss László (Konkoly Obszervatórium) projektjén belül a GGI alprojekt: 159,8 M Ft

A bolygónkat a világűrben fenyegető veszély valós felméréséhez az első lépés a Föld közelébe kerülő égitestek megismerése, feltérképezése. A közelünkben elhaladó kisbolygók és a Holdba becsapódó meteoritok megfigyelése mellett cél egy olyan monitoring rendszer kialakítása, amely a föld légkörében fellépő kozmikus eredetű tranziens jelenségek, mint a meteoritok, vagy szoláris eredetű, geomágneses viharok következtében fellépő plazma-irregularitások megfigyelésére alkalmas.

Infrahangállomás létrehozása a piszkéstetői obszervatóriumban (MTA Kiemelkedő tudományos tevékenység feltételeit biztosító kutatási infrastruktúra), 88 M Ft

Az ARISE H2020-as projekt célja egy olyan infrastruktúra megteremtése, ami különböző technológiákat használó állomáshálózatok adatait integrálja annak érdekében, hogy egy komplex, 3D képet alkosson a földi atmoszféráról, a felszíntől egészen a mezoszféráig. A támogatásból kialakított infrahangállomás lehetővé teszi a légkör szerkezetének tomográfias meghatározását és Magyarország csatlakozását az európai kezdeményezéshez.

Pályázati felkészülés

Belső Kárpát-kanyar litoszféra dinamikája (megbeszélések szervezése, integrált geodinamikai alappontok legyártása, telepítése)

AlpArray - Steering Committee munkájában való részvétel, fúróluk szeizmométer az üledékkel fedett alföldi terület pontosabb szeizmikus leképezésére

FETOPEN kiírásra pályázat előkészítő költségei – plazmaszféra monitorozása műholdas VLF adóval

ESA 4000118850/16/NL/SC (Integrated Sentinel-PSI and GNSS technical facilities and procedures for the determination of 3D structure deformations caused by environmental processes) pályázat kiegészítő költségei

Elnyert támogatás összesen: 21,5 M Ft;

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bór J, Ludván B, Novák A, Steinbach P: Systematic deviations in source direction estimates of Q-bursts recorded at Nagycenk, Hungary. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 121: 5601-5619 (2016) <http://real.mtak.hu/40464/>
2. Facskó G, Honkonen I, Zivkovic T, Palin L, Kallio E, Agren K, Opgenoorth H, Tanskanen E, Milan S: One year in the Earth's magnetosphere: A global MHD simulation and spacecraft measurements. *Space Weather: The International Journal of Research and Applications*, 14: 351-367 (2016) <http://real.mtak.hu/45655/>
3. Bányai L, SM Abdel-Monem, Szücs E, Aboaly N, Mousa A, Khalil HA: The relationship between global plate motion and intra-plate deformation analysis of Cairo network: Case study with simulated data. *Arabian Journal of Geosciences*, 9:(1) Paper 76. 10 (2016) <http://real.mtak.hu/32033/>
4. Sátori G, Williams E, Price C, Boldi R, Koloskov A, Yampolski Y, Guha A, Barta V: Effects of Energetic Solar Emissions on the Earth-Ionosphere Cavity of Schumann Resonances. *Surveys in Geophysics*, 37: 757-789 (2016) <http://real.mtak.hu/44704/>
5. Szanyi Gy, Grácz Z, Győri E, Kaláb Z, Lednická M: Ambient Seismic Noise Tomography of a Loess High Bank at Dunaszekcső (Hungary). *Pure and Applied Geophysics*, 173: 2913-2928 (2016) <http://real.mtak.hu/44998/>
6. Wéber Z: Probabilistic waveform inversion for 22 earthquake moment tensors in Hungary: new constraints on the tectonic stress pattern inside the Pannonian basin. *Geophysical Journal International*, 204: 236-249 (2016) <https://www.scopus.com/record/display.uri?origin=inward&eid=2-s2.0-84958656506>
7. Wéber Z: Source parameters for the 2013–2015 earthquake sequence in Nógrád county, Hungary. *Journal of Seismology*, 20: 987-999 (2016) <http://real.mtak.hu/38718/>
8. Závoti J, Kalmár J: A comparison of different solutions of the Bursa–Wolf model and of the 3D, 7-parameter datum transformation. *Acta Geodaetica et Geophysica* 51:(2) 245-256 (2016) <http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs40328-015-0124-6>
9. Yordanova E, Vörös Z, Saito Y et al.: Electron scale structures and magnetic reconnection signatures in the turbulent magnetosheath. *Geophysical Research Letters*, 43: 5969-5978 (2016) <http://real.mtak.hu/43645/>
10. Telesca L, Tóth L: Multifractal detrended fluctuation analysis of Pannonian earthquake magnitude series. *Physica A - Statistical Mechanics and Its Applications*, 448: 21-29 (2016) <dx.doi.org/10.1016/j.physa.2015.12.095>

MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 15-17.
telefon: (1) 391 9322; fax: (1) 275 4668
e-mail: kiss.laszlo@csfk.mta.hu; honlap: www.konkoly.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A beszámolási időszakban az intézet az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont alapító okiratában a Csillagászati Intézet számára rögzített feladatoknak megfelelően alapkutatást végzett, több egyetemen részt vett a felsőfokú oktatással kapcsolatos feladatok ellátásában, valamint jelentős aktivitást fejtett ki a tudományos eredmények disszeminációjában. Az intézet az alábbi témakörökben folytatott eredményes kutatómunkát:

A csillagok és a Nap fizikája, belső szerkezete, fejlődése

A csillagok belső szerkezete és pulzációja

Aktív jelenségek csillagok légkörében

Napaktivitás

A csillagokat és a Napot övező tér kutatása

Csillag- és bolygókeletkezés, az intersztelláris anyag fizikája

Exobolygórendszerek

A Naprendszer égitestjei

Nukleáris asztrofizika

Laboratóriumi asztrofizika

Műszerfejlesztés

Az intézet munkáját számos pályázat támogatta: a folyó Lendület-kutatások mellett 2016-ban két elnyert ERC-grant, és két nagy összegű GINOP-pályázat, valamint egy Junior Prima díj emelendő ki.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A csillagok belső szerkezete és pulzációja

RR Lyrae csillagokat kerestek a CoRoT archívumban. A szisztematikus munka eredményként kilenc olyan RR Lyrae adatsort találtak, amit még senki sem vizsgált meg. Ezek közül hét változócsillag teljesen új felfedezés, három pedig Blazskó-effektust is mutat. Első ízben sikerült bizonyítani egy RR Lyrae csillag pulzációjáról, hogy az nem szigorúan periodikus, hanem véletlenszerű fluktuációt mutat. A fénygörbét leíró Fourier-paraméterek segítségével megbecsülték a teljes CoRoT RR Lyrae minta csillagainak alapvető fizikai paramétereit, mint a tömeg, luminozítás, fémtartalom.

A KIC 8462852 jelű csillag egyedülálló módon a Kepler-mérések teljes hossza alatt irreguláris és nem periodikus elhalványulásokat mutatott, melyek mélysége a fluxus 20%-át is elérte. A kutatók részt vettek az objektum felfedezését bejelentő cikk munkálataiban, és a csillag első behatóbb vizsgálataiban. Kiderült, hogy egy teljesen átlagos F3 színképtípusú fősorozati csillagról van szó. Sorra vették az elhalványodások lehetséges magyarázatait, amit

nehezít, hogy infravörös többletet nem sikerült kimutatni a csillag körül. A legvalószínűbb – de közel sem tökéletes – magyarázat szerint a jelenséget egy korábbi, egyszeri fragmentálódási eseményhez köthető üstökös család vagy egy bolygókezdemény darabjai okozhatták. Az „Univerzum legréjtélyesebb csillaga” hatalmas médiafigyelmet kapott: még az is komolyan felmerült, hogy az elhalványodásokat idegen civilizációk hatalmas építményei okozzák. A végső szót a jelenség természetes okának megtalálására indított multispektrális, hosszú időt lefedő nemzetközi megfigyelési kampányok fogják kimondani.

Két ZZ Ceti típusú pulzáló fehér törpe saját megfigyelési anyagait dolgozták fel. A G 207-9-nél hét független módust találtak, melyekből öt nem volt ismert korábban. Az LP 133-144 esetében a hat detektált módusból három új felfedezés. A G 207-9 esetében összehasonlítva az 1975-ös és a 2007-es megfigyelések eredményeit, évtizedes időskálán amplitúdóváltozásokat találtak. Az új módusok segítségével modelleket is számoltak és illesztettek. A G 207-9 esetében a legjobb modellek fizikai paraméterei közel esnek a spektroszkópiai úton meghatározottakhoz, 12 000–12 400 K-es effektív hőmérsékletet és 0,855–0,870 naptömeget adva. Az LP 133-144-nél azonban a modellek a spektroszkópiai úton meghatározottnál legalább 0,1 naptömeggel nagyobb tömeget sugallnak. Az LP 133-144 rotációs periódusát is sikerült meghatározni a frekvenciák felhasadása révén, melyre kb. 42 óra adódik.

Új algoritmust fejlesztettek ki a δ Scuti csillagok frekvenciakülönbségeinek vizsgálatára. A módszert először az egyik legjobban tanulmányozott δ Scuti csillag, az FG Vir segítségével kalibrálták, majd egy 90 csillagot tartalmazó CoRoT-mintára alkalmazták. Az eljárás nagy segítséget jelent az automatikus analízishez sok csillagot tartalmazó minta esetén. Hetvenhét csillagnál találtak legalább egy reguláris frekvenciasorozatot, míg 22 csillagra a sorozatok közül legalább kettő eltolódást mutat a frekvenciaközök felével, ami váratlan eredmény a nem-aszimptotikus tartományban pulzáló δ Scuti csillagokra. Harmincegy esetben a pulzációs frekvenciák rotációs felhasadásából a csillag forgási periódusára következtek. Jó egyezést kaptak a megfigyelési adatokból és az elméleti modellekből is származtatható kapcsolatra az átlagos sűrűség és a fő frekvenciakülönbség (nagy szeparáció) között.

A Gaia küldetés az Európai Űrügynökség tudományos programjának egyik alapköve. A 2013-ban felbocsátott űreszköz egy milliárd csillag égi pozícióját és mozgását fogja extrém pontossággal megmérni az öt évre tervezett működése alatt, ami Galaxisunk kialakulásának és fejlődésének pontosabb megismerését teszi lehetővé. A kutatók részt vettek az első 14 hónap során gyűjtött adatok feldolgozásában, és az első, fényes csillagokat tartalmazó asztrometriai és fotometriai katalógusok előkészítésében. Az első Gaia-katalógusok tartalmazzák az ekliptikai pólusok körül nagy gyakorisággal megfigyelt háromezer cefeida és RR Lyrae csillag fényváltozását és adatait is, melyek adatainak feldolgozásához szintén hozzájárultak a magyar kutatók. Ennek azért van nagy jelentősége, mert a kozmikus távolságskála egyik első lépcsőfoka pont ezen csillagokon alapul.

Aktív jelenségek csillagokon

A Doppler-leképezés a legrészletesebb felszíni rekonstrukciós eljárás, ami információt nyújt a csillagok felszínén a foltok eloszlásáról. A Napnál jóval aktívabb csillagok felszínén a foltosodás mértéke is nagyobb, sőt a foltok olykor magas szélességeken, akár a póluson is megfigyelhetők. A poláris foltokkal kapcsolatban azonban felmerült, hogy esetleg a Doppler-leképezés tökéletlenségéből eredő mesterséges formák lehetnek. A Nature-ben publikált cikkben első alkalommal bizonyították be közvetlen módon, nagyfelbontású optikai-infravörös interferometria eszközével, hogy a mágnesesen aktív ζ Andromedae felszínén két időszakban is poláris folt figyelhető meg, továbbá, hogy a csillag felszínén a foltok eloszlása hemiszférikus aszimmetriát mutat, amely eltérő a két megfigyelt időszakban. Ez utóbbi

megfigyelés arra enged következtetni, hogy a ζ And aktivitásáért felelős mágneses dinamó működése eltér a Napon megismert napdinamótól.

A gyorsan forgó teljesen konvektív V374 Pegasi jól ismert célpontja a stabil mágneses tereket vizsgáló kutatásoknak. A kutatók a mágneses tér egyik hatását: a csillag fényváltozásait, és annak stabilitását vizsgálták. Többszín-fotometria és spektroszkópiai adatok alapján megmérték a flerek és korona-anyagkidobódások (CME-k) gyakoriságát. A fénygörbe csaknem merevtest-forgásra, illetve mintegy 16 éven át stabil foltkonfigurációra utal. Az erősebb flerek a kisebb aktív régió környékén gyakoribbak, bár kisebb kitörések minden fázisban láthatóak. A spektroszkópiai adatok egy komplex CME eseményre utalnak kidobódó és később (részben) visszahulló anyaggal. A megfigyelt CME gyakoriság alacsonyabb, mint ami a Napon megfigyelték alapján várható lenne.

A Mount Wilson obszervatórium 36 éves adatsorát felhasználva a Nap-típusú csillagok többéves időskálájú, mágneses eredetű változásait vizsgálták. Idő-frekvencia analízissel tárták fel az adatsorokban az aktivitási ciklusok szerkezetét, meghatározták időbeli lefolyásukat, beleértve a többszörös és időben változó ciklusokét is. A 29 vizsgált csillag közül 28-on találtak legalább egy aktivitási ciklust. A csillagok két jól elválasztható csoportot alkotnak. Tizenkét csillag, melyeknek hosszabb, átlagosan 40 napos rotációs periódusuk van, egymáshoz hasonló, nagyjából 10 év hosszú egyszerű, sima ciklusokat mutatnak (ide tartozik a mi Napunk is). A többi 16 csillag átlagosan sokkal gyorsabban forog, és többszörös, komplex, olykor erőteljesen változó ciklusokkal rendelkeznek kissé rövidebb időskálán. Az idősebb és fiatalabb csillagok közti választóvonal úgy 2-3 milliárd év körül van, mely Vaughan-Preston úrként is ismert. Ez a szétválás az aktivitás motorjának, a csillagdinamó megváltozásának a következménye, ami a csillagok rotációs fékeződése miatt következik be.

Napaktivitás

Különböző földi és űrbeli megfigyelések alapján egy több mint 140 évet lefedő egységes, homogén napfolt-adatbázist hoztak létre. Az adatbázist kiegészítették a történelmi magyar obszervatóriumok, Ógyalla és Kalocsa (1872-1919) teljes-korong napészleléseivel, valamint a Mount Wilson Observatory napfolt polaritás-rajzaival (1917-1976). A napfolt-relatívszám két komponenséért (foltok és foltcsoportok) különböző fizikai mechanizmusok felelősek, melyek a bizonytalanság forrásai lehetnek. Ez a bizonytalanság a könnyebben mérhető, felemelkedő mágneses fluxusmennyiség használatával kiküszöbölhető lenne. A debreceni napfolt adatok alapján a naptevékenység jelenleg elfogadott mérőszáma helyett egy újabb, annak bizonytalanságait kiküszöbölő indexet javasoltak a napfolttevékenység mérésére. A debreceni napfoltkatalógusok a foltcsoportok területei mellett az egyes foltok mágneses teréről is információval szolgálnak, így egyedülálló lehetőséget teremtenek a felbukkanó fluxusmennyiség értékének meghatározására.

A korábban publikált, tizenkét napfoltcikluson kimutatott, 2x4 Schwabe-ciklusos aszimmetria megfigyelhetőségét vizsgálták a közben megjelent nyolc teljes előző ciklust lefedő adatokon. Ez az aszimmetria abban nyilvánul meg, hogy négy ciklusban az északi, majd a következő négy ciklus alatt a déli félgömb játszik időbeli vezető szerepet a napfolttevékenységben. Eredményeik szerint ez az aszimmetria nem ismerhető fel teljes megbízhatósággal az újabb adatokon. Lehetséges, hogy ebben szerepet játszik az adatok sporadikussága is. Ezek mellett vizsgálták a félgömbi mágneses terek pólusváltásában megnyilvánuló időbeli fáziseltolódást is, mely a 12-23. ciklusok alatt jól követi a napfolttevékenységben megfigyelt fáziseltolódást; ezzel arra utalva, hogy ez az aszimmetria a dinamómechanizmus hosszú távú memóriájáért felelős folyamat egyik lehetséges komponense.

A napkitörések általános hely-idő eloszlását vizsgálták a fler-előrejelzések pontosítása érdekében a RHESSI és GOES műholdak adatait felhasználva, valamint bevezettek két numerikus paramétert, amik azt jellemzik, hogy az aktív régiók milyen mértékben fler- és koronakidobódás gyanúsak. A két paraméter az aktív régiókon belül lévő pozitív és negatív mágneses polaritások keveredtségének mértékét határozza meg. Az analízis szerint a flerek több mint 60 százaléka azokból a foltcsoportokból fejlődik, amelyek közel vannak az aktív hosszúsághoz. A hely-időbeli eloszlását kutatták azoknak a kis energiájú (előzmény-) flereknek is, amelyek egy nagy, energetikus (X- vagy M-osztályú) fler előtt történnek. Azt találták, hogy a X-osztályú flerek előtt történő kevésbé energetikus flerek fél nappal a nagy fler előtt a napfoltcsoport területén belül bárhol előfordulhatnak. Fél napon belül viszont arra a helyre koncentrálnak, ahol a nagy fler bekövetkezik. Az M-osztályú flerek esetében nem találtak ilyen tulajdonságot. Az előzmény-flerek távolsága a nagy flerhez képest egy log-normális eloszlást ír le attól függetlenül, hogy milyen időintervallumot választunk ki. Ezekkel az eredményekkel megállapításokat tehetünk a foltcsoportban előforduló összes rekonstrukció energetikai mérlegére a nagy fler bekövetkezése előtt és után.

Csillag- és bolygókeletkezés, az intersztelláris anyag fizikája

A HBC 722 (V2493 Cyg) egy 2010 óta kitörésben lévő fiatal, eruptív, FU Orionis-típusú csillag, a szokásosnál kisebb kitörésbeli luminozitással. Tanulmányozták az objektum optikai és infravörös fénygörbéit, és egy akkréciós korong-moddal illesztették a spektrális energia-eloszlást különböző időpontokban a kitörés során. Megvizsgálták a csillag spektrális tulajdonságainak fejlődését is új optikai és közeli infravörös spektrumokat felhasználva és korábbi spektrumokkal összevetve. Képet alkottak a HBC 722 környezetéről milliméteres hullámhosszakon. Azt találták, hogy a kitörés első csúcsa 2010 szeptemberében az akkréciós ráta megnövekedésének köszönhető a rendszer belsejében. Ezután egy hosszabb időskálájú folyamat következett, melynek során a fényesedés oka a növekvő akkréciós ráta és a sugárzó terület növekedése. A HBC 722-t nem detektálták milliméteres kontinuumban, de felfedeztek egy molekuláris gázból álló lapult struktúrát körülötte. Az első csúcs a fénygörbén úgy értelmezhető, mint a felgyülemlt anyag hirtelen ráhullása a belső korongról a csillagra, az ezt követő monoton fényességnövekedés egy forró komponens kifelé terjedésére utal. A HBC 722-vel kapcsolatos vizsgálatok azt jelzik, hogy FUor-kitörések még nagyon alacsony korongtömeggel rendelkező objektumokban is végbemehetnek.

A Naprendszerünk környezetében fellelhető fiatal csillagok jelentős része különböző mozgási halmazokhoz tartozik. Ezen csillagok kormeghatározása jóval pontosabb, mint az egyedi mezőcsillagoké, így ezek ideális, közeli célpontjai a csillagok illetve a csillag körüli korongok korai fejlődését vizsgáló kutatásoknak. Egy, a *Herschel Űrobszervatóriummal* távoli infravörös hullámhosszakon végzett felmérésben öt különböző fiatal halmaz 31 tagjánál kerestek törmelékkorongokat. Hat célpontnál találtak csillagkörüli port, négy esetben ez teljesen új felfedezésnek számít. Az új adatbázist korábbi irodalmi adatokkal kombinálva megvizsgálták a kiválasztott mozgási halmazok Naphoz hasonló csillagai körül a törmelékkorongok gyakoriságát és jellemző tulajdonságait. A HD 38397 és HD 48370 jelű, Naphoz nagyon hasonló fiatal csillagok körüli korongokat sikerült felbontani a *Herschel* 70 μ m-es felvételein. Mindkét korong nagyjából 180 CsE átmérőjű és a már régóta ismert HD 61005 körüli koronggal karöltve a közeli, fiatal mozgási halmazok legnagyobb tömegű, G színképtípusú csillagok körüli korongjai.

A Lynds 1340 közepes tömegű csillagkeletkezési régiót vizsgálták optikai és infravörös hullámhosszakon. Az SDSS adatokból létrehozott új extinkciós térkép ritka, erősen fragmentált szerkezetű felhőt mutat. A felhő becsült tömege mintegy 3700 naptömeg, a felhőben született legnagyobb tömegű csillag kb. 5 naptömegű. Revideálták a felhő távolságát

is. Hetvenöt hidrogén alfa emissziós csillagot találtak, amelyek közül 58 nem szerepelt korábbi felmérésekben. Meghatározták a csillagok spektrális energiaeloszlásait, és fősorozat előtti fejlődési modellek segítségével a tömegeiket. A hidrogén alfa vonal ekvivalens szélességéből és az SDSS u magnitúdók segítségével akkréciós rátákat számoltak. Spektrális energiaeloszlásuk és infravörös színindex-kritériumok alapján 242 különböző fejlődési állapotban lévő fiatal csillagot azonosítottak. Több esetben többes protocsillag-rendszereket, és új Herbig-Haro objektumokat találtak, illetve meghatározták azok gerjesztő forrásait. A fiatal csillagok felületi eloszlásában, a molekuláris gáz eloszlásához hasonlóan, három laza csoport látszik. A legfiatalabb protocsillagok eloszlása követi a 850 μ m-tel feltérképezett hideg por filamentáris szerkezetét. A csillagkeletkezés határfoka az új felmérés alapján mintegy 3%. A sűrű gáz és a fiatal csillagok eloszlásának vizsgálata azt sugallja, hogy a L1340-szerű csillagkeletkezési régiók különösen rövid élettartamúak.

A TMC-1 filamentáris molekulafelhő morfológiájának és fejlődésének megértése érdekében megvizsgálták annak sebesség-, sűrűség- és hőmérséklet-eloszlását az ammónia (1,1) és (2,2) hiperfinom átmeneteinek segítségével. Feldolgozták a Herschel SPIRE távoli infravörös hullámhosszú térképezését is a Planck hideg csomókról a környező régióban, majd többféle csoportkeresési módszerrel részekre osztották a filamentumot. A kinetikus hőmérséklet tipikusan igen alacsony (9 K), míg maximuma az IRAS 04381+2540 protocsillag pozícióján található, 13,7 K értékkel. A kinetikus hőmérséklet a porhőmérsékletéhez hasonlóan változik, annak ellenére, hogy a gáz és a por közötti csatolás ezeken a sűrűségeken még nem zajlik le. Négy szub-filamentumot különítettek el a felhőben, melyek tömege 20-46 naptömeg. Alacsony turbulens sebességszórás jellemzi őket, és közel állnak a gravitációs egyensúlyhoz.

Megvizsgálták a Wide-Field Infrared Survey Explorer űrtávcső AllWISE elnevezésű katalógusát, és fiatal csillagszerű objektumokat (YSO) azonosítottak. A többdimenziós teret egy kifinomult statisztikai módszerrel, a tartóvektor-géppel (SVM) tárták fel. Egy új, teljes égboltot lefedő, 133980 db fiatal csillagszerű objektum-jelöltet tartalmazó katalógust készítettek. A SIMBAD alapján készített tanulóminták segítségével a megbecsülték a minta szennyezettségét, és azt 1%-nál kisebbnek találták. Az SVM segítségével a tanulómintában több YSO-t sikerül azonosítani, mint a szín-szín és szín-fényesség diagramok alapján. A YSO-k eloszlása a Taurus-Auriga-Perseus területen jól korrelál a Planck űrtávcső által detektált hideg felhőmagok eloszlásával.

Exobolygórendszerek

Megbecsülték, hogy milyen pontosságú mérések kellene ahhoz, hogy a jeges exoholdak okkultációját fotometriai mérésekkel meg lehessen figyelni. Sikeres mérések esetén az exohold visszavert fénye elkülöníthető, és az exohold méretének ismeretében annak albedója becsülhető. A magas albedó érték a felszíni vízjég-borítottságra utalhat. Megmutatták, hogy a vörös törpecsillagok ígéretesebb célpontok a Naphoz hasonló csillagoknál, és hogy a J sávban érdemes méréseket végezni, ám ezek a megfigyelések még a következő generációs űrteleszkópok számára is kihívást jelentenek.

HATNet és K2 adatok felhasználásával megvizsgálták azt a kérdést, hogy lehet-e növelni a jel detektálás hatékonyságát egy olyan modell alkalmazásával, amelyben a jel minden összetevőjét (korrelált zaj és a valós jel) egyszerre illesztjük az adatokhoz (korábbi szerzők néhány munkája azt sugallta, hogy ezáltal növekedhet a detektálás valószínűsége). Meglepő módon azt tapasztalták, hogy a tradicionális megközelítés („szisztematikus zajszűrés először, majd pedig jelkeresés”) szignifikánsan jobb eredményre vezet, mint a teljes modell egyidejű illesztése. Ez azzal magyarázható, hogy a szisztematikák által dominált esetekben a teljes

modell alkalmazása nem teszi lehetővé a valós jel és a szisztematikák hatékony szétválasztását, mert a szisztematikák egy része jelként értelmeződik a modell illesztésénél.

A Naprendszer égitestjei

Átfogó analízis során elemezték a második legtávolabbi Neptunuszon túli objektum, a (225088) 2007 OR₁₀ hősugárzási és forgási adatait. A vizsgálat során K2 optikai adatokra, illetve a Herschel űrtávcső távoli infravörös adataira támaszkodtak. Az eredmények azt mutatják, hogy ez az objektum nagyobb és sötétebb felszínű, mint amit a korábban gondoltak. Nevezetesen, az általuk megállapított átmérő 1535 km-nek adódott, ami ezt az égitestet a három legnagyobb Neptunuszon túli objektum közé emeli. Ehhez az átmérőhöz tartozó fényvisszaverő képesség mértékére 8,9%-ot kaptak. Az optikai fénygörbe további analízise alapján az égitest forgási periódusára 44,81 órát kaptak. Ezt a forgási periódust csak néhány hasonló dinamikai osztályú égitest múlja felül. Az objektum alakja méreténél és lassú forgásánál fogva legvalószínűbben egy MacLaurin-ellipszoid, azaz ezen fénygörbe-változásokat a különböző fényvisszaverő-képességű felszíni struktúrák okozzák. Az eredményeinket a NASA is méltatta: ehhez a kutatáshoz kapcsolódó hír a szervezet fő weboldalán is elérhető volt.

Megvizsgálták az elmúlt másfél évtizedben Piszkestetőről észlelt ötven hosszúperiódusú üstökös aktivitását, illetve az aktivitásuk változását. Jelentős különbséget találtak a dinamikailag új, és a visszatérő üstökösök között. Az Oort-felhőből származó vándorok sokkal magasabb, akár 3-4-szer nagyobb aktivitást mutatnak, kómájuk is sokkal szimmetrikusabb, ami izotróp anyagkiáramlásra utal. A visszatérő kométák ezzel szemben, jóval aszimmetrikusabb kómával jellemezhetők, a felületi fényesség meredekség-paraméter értéke esetenként negatív, ami hirtelen kitörésekre, az anyagtermelés gyors változására utal. A vizsgált égitestek morfológiai megjelenése változatos, gyakran jól fejlett porcsóvát mutatnak, de ez nem korrelál az üstökösök abszolút fényességével.

Új modellt dolgoztak ki a Mars cirkumpoláris vidékein tavasszal megjelenő folyásnyomokra, amely kompatibilis a megfigyelésekkel és az elméleti háttérismeretekkel. Eszerint az ősszel a légkörből lerakódó hulló por alkotta laza rétegben fellépő napi ciklusú hőtágulós feszültség képes lehet annyira összekavarni a szemcsék és a jég együttesét, hogy a szemcsék felületén megjelenő mikroszkopikus folyékony réteg az egész anyaghalmozatot meggyengíti, amely folyásos kinézetű mozgást kezd. Új felvételek elemzésével rámutattak, hogy a CO₂-jégtakaró alól előtörő gázkifúvós jelenség során a felszínre hullott közetszemcsék vízzel vannak beborítva, és jelentősen megemelik a helyi H₂O koncentrációt, méghozzá a kifúvás lerakódásának térbeli jellege szerint.

Az egyedülálló Rosetta üstökös program során a naprendszerkutatás történetében először vált lehetővé egy üstökös mag közvetlen és hosszú időtartamú részletes vizsgálata, ami lehetőséget ad az üstökös mag felszíni részletei, belső szerkezete és az aktivitási mechanizmusának megismerésére. A 67P/Churyumov-Gerasimenko üstökös magjának színében napi változásokat sikerült kimutatni, ami a vízjég szublimációjának és rekondenzációjának a következménye. Több, mintegy 1500 négyzetméteres jégben gazdag foltot találtak, amelyek kb. 10 nap alatt eltűntek, ami a mag nagy skálájú heterogenitását mutatja. Vékony zúzmarás területek szublimáltak néhány percig a visszahúzó árnyékok pereménél és azokon a területeken gyors színváltozásokat lehetett megfigyelni a terminátor közelében. Ezek ciklikus folyamatok és elterjedtek az egész mag felszínén, ezért folyamatosan változtatják a felszínt.

Nukleáris asztrofizika

A korai Naprendszer proton-gazdag radioaktív atommagjait vizsgálták. A protonban gazdag radioaktív atommagok forrásainak azonosításával távolabbi események időpontjait tudják meghatározni a Naprendszer születése előtti időszakban, és független megszorításokat tehetnek arra a molekulafelhőre nézve, amelyből a Nap született.

Két független vizsgálat keretében számolt atommag-keletkezési rátákat publikáltak: az elsőt az aszimptotikus óriáság csillagainak összetételére, amelyben először vették figyelembe a Napnál magasabb fémtartalmú modelleket. A másodikban olyan modelleket számoltak - szintén elsőként - amelyekben aszimptotikus óriásági és nagy tömegű csillagok is szerepeltek. Ezek a mennyiségek segítenek megérteni a csillagszél és a szupernóva-robbanások hatását a kozmosz kémiai evolúciójára. Közzétették egy új típusú neutron-befogási folyamat első modelljeit, melyeket különböző módszerekkel számoltak, és amiket alacsony fémtartalmú halo-csillagok megfigyeléseivel is összehasonlítottak. Megtalálták a folyamat nyomait a spektroszkópiai megfigyelések adataiban, ami azt jelzi, hogy pontosabb modellek szükségesek a folyamat jobb megértéséhez és csillagon belüli lokalizálásához.

A Naprendszerben a vason túli elemek kis hányada protonban gazdag atommagokból, az un. p-magokból áll. Ezek keletkezése a nukleáris asztrofizika egyik legnagyobb kihívása. A p-magok fontos információt hordoznak a szupernóva-robbanások során lezajló nukleoszintézisről. Keletkezésükre a legelfogadottabb forgatókönyv a γ -folyamat, melynek során nehezebb elemekből fotodezintegráció révén keletkeznek. A kutatók leírták a γ -folyamatban létrejövő nehéz, proton-gazdag izotópok keletkezését, és a legmodernebb kísérleti eredmények felhasználásával feltárták a csillagokban működő nukleoszintézis folyamatait.

Laboratóriumi asztrofizika

Optikai, infravörös és Raman módszerekkel laboratóriumi vizsgálatokat, valamint Magyarországon és Marokkóban terepi kutatómunkát végeztek az ExoMars rover számára a folyóvíz és a szél szállította homokfrakciójú szemcsék elkülönítésének megkönnyítésére. Folytatták marsi meteoritok (Nakhla, Governador Valedares, Lafayette) laboratóriumi elemzését is. A munka keretében másodlagos ásványokat azonosítottak a meteoritokban.

Műszerfejlesztés

Jelenleg a Légyszem-kamerarendszer a Piszkéstetői Observatóriumban a számára épített termikusan stabilizált burkolatban található és autonóm méréseket végez, amikor az időjárási feltételek megfelelőek. Ennek eldöntése valós idejű időjárás adatokon alapul. Bemutatták, hogy az általuk választott optikai rendszerrel az égboltkövetés pontossága eléri a millimagnitúdós szintet fényes csillagokra, míg halvány forrásokra 15 magnitúdó is elérhető r sávban. A fő cél, hogy az 5 Sloan szűrővel folyamatos adatsorokat biztosítsanak számos csillagászati jelenségről a Naprendszerbeli objektumoktól az aktív csillagok fényváltozásain át a fedési exobolygók és fényes extragalaktikus fedésekig. A kamera rendszer kiegészítő adatsorokkal járul hozzá a nagy szinoptikus felmérésekhez (pl. LSST) mivel ezen eszközök szaturációs határa közel van a Légyszem által még megfigyelhető halvány objektumokhoz.

b) Tudomány és társadalom

A csillagászat azon kevés természettudományok egyike, amelyre a szélesebb közvélemény is figyel. Eredményei rendre megjelennek a nyomtatott és elektronikus sajtóban. Az érdeklődés fenntartásában, az új eredmények szélesebb megismertetésében és a külföldi szakmai eredmények szakszerű tolmácsolásában az intézet kutatói tudatosan és nagy elkötelezettséggel vesznek részt. Ennek szellemében (1) folytatták a csoportvezetéssel összekötött rendszeres nyitva tartást a Pizskéstetői Observatóriumban; (2) vezették a www.csillagaszat.hu csillagászati híroldalt; (3) távcsöves bemutatót tartottak a Merkúr átvonulás napján (2016. 05. 09); (4) Utazó Planetáriummal és előadásokkal vettek részt a Természettudományi Múzeumban rendezett Földtudományi Forгатagon. Folytatták ismeretterjesztő és sajtóbeli megjelenéseket (évente százas nagyságrendben ismeretterjesztő előadások tartása, riportok, interjúk). Speciális szaktudást igénylő szakértői feladatokat is elláttak (pl. bírósági ügyekben).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai: A beszámolási időszakban rendkívül eredményes intézményi kapcsolatokat tartottak fent hazai csillagászati kutatóhelyekkel: Szegedi Tudományegyetem, Bajai Csillagvizsgáló, ELTE Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék, ELTE szombathelyi Gothard Asztrofizikai Observatóriuma, Nyugat-Magyarországi Egyetem és a debreceni Atommagkutató Intézet. A beszámolási időszakban is részt vettek az egyetemi oktatásban és a doktori képzésben, meghirdetett előadásokkal, gyakorlatok tartásával, szakdolgozati, tudományos diákköri és doktori témavezetéssel. A 2016-os tanévben az alábbi kurzusokat tartották, illetve vettek részt előadásokkal: ELTE: A Mars földrajza és geológiája; Asztrostatisztika I-II.; Az asztrofizika megfigyelési módszerei; Bevezetés a csillagászatba; Csillagászati műszertechnika; Csillagkörüli korongok fejlődése; Csillagászati észlelési gyakorlatok; Csillagok világa; Galaktikus csillagászat; Observációs csillagászat; Pulzációelmélet; A Naprendszer peremén; Űrfotometria; DE: Bevezetés a csillagászatba, SZTE: Pulzációelmélet; Űrcsillagászat; Csillagászat-történet; Elméleti asztrofizika; Csillagászati spektroszkópia; Galaktikus csillagászat. Nemzetközi: Tovább folytatták gyümölcsöző nemzetközi együttműködéseiket a CoRoT, Herschel, Gaia, KASC, TASC, CHEOPS, PLATO, LUNA, JINA, JUNA, Rosetta, HATNet, Matisse, MIDI projektekben. 2016-ban is számos esetben sikerült elnyerni észlelési időt csillagászati nagyműszerekre (APEX, ALMA, Subaru, IRAM, K2, Spitzer, ESO VLT, VLA, WHT) nemzetközi együttműködésben.

Rendezvények, mobilitás: Az év során több jelentős hazai és külföldi találkozó és szakmai workshop megrendezésében vettek részt az intézet kutatói: *PACS Photometer Workshop*, (MTA CSFK CSI 2016. febr. 15-17); *From star and planet formation to early life* konferencia (Vilnius, Litvánia 2016. ápr. 25-28); *Hungary and the European Southern Observatory* ülés (MTA CSFK CSI, 2016. jún. 1.); *Young eruptive stars* mini-workshop (MTA CSFK CSI, 2016. jún. 1-3); *Episodic accretion in star formation* European Week of Astronomy and Space Science (Athens, Greece, 2016. júl. 4-8); *Konkoly Spektroszkópiai Nyári Iskola* (MTA CSFK CSI, 2016. Júl. 18-22) *The XII Torino workshop and IV CSFK Astromineralogy workshop* (Budapest, 2016. júl. 31. – aug. 5.); *Blowing in the wind* konferencia (Quy Nhon, Vietnam, 2016. aug. 7-13.); *ELFT Fizikus Vándorgyűlés* (Szeged, 2016. aug. 24-27); *Missing links from disks to planets* (MTA CSFK CSI, 2016. okt. 10-13); *STFC Advanced Summer School in Solar System Physics* (Sheffield, UK, 2016. szept. 4-9); Emlékezés Konkoly Thege Miklós tiszteletére, halálának 100. évfordulója alkalmából (MTA, Budapest, 2016. nov. 7).

Az intézet kutatói több hosszabb tanulmányutat tettek a Bécsi Egyetemen (Ausztria), a Sheffield-i Egyetemen (Egyesült Királyság), a Heidelbergi Elméleti Asztrofizikai Intézetben, (Németország), az IPAC/Caltech intézetben (Egyesült Államok), a granadai Instituto de Astrofísica de Andalucíában (IAA-CSIC, Spanyolország), a Cambridge-i Egyetemen (Egyesült Királyság), a Bordeaux-i Obszervatóriumban (Franciaország), Puerto Varasban (Chile), a Leibniz Asztrofizikai Intézetben (Potsdam, Németország), a Leideni Obszervatóriumban, A Leideni Egyetemen és a Leideni ALMA Regionális központban (Hollandia), az MPI für Extraterrestrische Physik és Astronomie intézetekben (Heidelberg, Németország), az MPI für Radioastronomie-ban (Bonn, Németország), a nizzai Côte d'Azur Obszervatóriumban (Franciaország) és a Zürichi ETH-n (Svájc). Vendégkutatókat fogadtak Japánból, az Egyesült Királyságból, Németországból, Spanyolországból, Ausztriából, Chiléből, Svájcban, Svédországból, Franciaországból és az Egyesült Államokból.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

ERC Starting Grant SACCREED 2017-22 (PI: Kóspál Á.), 425 MFt; ERC Consolidator grant RADIOSTAR 724560, *Radioactivities from Stars to Solar Systems* (PI: Lugaro, M.) 2017-22 535 MFt; GINOP-2.3.2-15-2016-00003 *Kozmikus hatások és kockázatok* 2016-20 (PI: Kiss L.) 941 MFt; GINOP 2.3.2-15-2016-00033, *Tranziens Asztrofizikai Objektumok* 2017-21 (PI: Vinkó J.) 687 MFt; European COST Action Proposal OC-2016-1-20829 *ChETEC: Chemical Elements as Tracers of the Evolution of the Cosmos* (alelnök: Lugaro, M.) 2017-21 186 MFt; H2020 Opticon No. 730890 *Optical Infrared Coordination Network for Astronomy* 2017-20 (PI: Ábrahám, P.) 44,74 MFt; NKFIH K-119993, *Örvénykeltette bolygókeletkezés*, 2016-19, (PI: Regály Zs.) 9,552 MFt; MTA Infrastrukturális pályázat, *3D numerikus asztrofizika labor* (PI: Regály Zs.) 32,5 MFt; COOP-NN-116927 *Marsi üledékes képződmények vizsgálata földi analógiák alapján és kapcsolódás európai űrprogramhoz* 2016-19 (Co-I: Kereszturi Á.) 2,9 MFt; *Mars analogue drills and laboratory analysis at dry, salty terrains to support ExoMars rover's activity, workflow optimization and later interpretation* (PI: Kereszturi Á.) (EuroPlanet 2020 RI TA, 10586 projekt) 915 eFt; OMAA pályázat *Stellar Pulsation in 1-2-3 Dimension* (PI: Kovács G.) 2061 eFt; OMAA pályázat *Charakterisierung des Weltraumwetters in extra-solaren* (PI: Vida K.) 2442 eFt; OMAA pályázat, *Selbstkonsistente Modellierung der Entstehung und Evolution von Planeten II*, (PI: Regály Zs.) 1,823 MFt;

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Az év során 106 ISI impakt faktoros szakcikket publikáltak, melyek összesített hatástényezője 595 felett van. Az alábbi válogatás reprezentatív áttekintést ad a művelt szakterületekről:

1. Bognár Zs, Papará M, Molnár, L, Pápics, P I, Plachy E, Verebélyi E, Sódor Á: G 207-9 and LP 133-144: light-curve analysis and asteroseismology of two ZZ Ceti stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 461: 4059-4070 (2016)
OA: arXiv:1606.09506
2. Dobos V, Kereszturi Á, Pál, A, Kiss LL: Possibility for albedo estimation of exomoons: Why should we care about M dwarfs? *Astronomy & Astrophysics*, 592: A139 (2016)
OA: arXiv:1606.01846
3. Fornasier S, Mottola S, Keller HU, Barucci MA, Davidsson B, Tóth I, et al.: Rosetta's comet 67P/Churyumov-Gerasimenko sheds its dusty mantle to reveal its icy nature. *Science*, 354: 1566-1570 (2016)

4. Gaia collaboration: Brown GA, Vallenari A, Prusti T, ..., Molnár L, ..., Plachy E, ..., Szabados, et al.: Gaia Data Release 1. Summary of the astrometric, photometric, and survey properties. *Astronomy & Astrophysics*, 595: A2 (2016) OA: arXiv:1609.04172
5. Gyenge N, Ludmány A, Baranyi T: Active Longitude and Solar Flare Occurrences. *The Astrophysical Journal*, 818: 127 (2016) OA: arXiv:1512.08124
6. Kóspál Á, Ábrahám P, Kun M, Moór A, ..., Kriskovics L, Marton G, Molnár L, Pál A, Sárneczky K, Sódor Á, Szakáts R, ..., Tóth I, Vida K, Vinkó J: Multiwavelength study of the low-luminosity outbursting young star HBC 722. *Astronomy & Astrophysics*, 596: A52, (2016) OA: arXiv:1607.05925
7. Kun M, Wolf-Chase G, Moór A, Apai D, Balog Z, O'Linger-Luscusk J, Moriarty-Schieven G H: The Young Stellar Population of LYNDs 1340. An Infrared View. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 224: 22 (2016) OA: arXiv:1602.08053
8. Lugaro M, Pignatari M, Ott U, Zuber K, Travaglio C, Gyürky Gy, Fülö Zs: Origin of the p-process radionuclides ^{92}Nb and ^{146}Sm in the early solar system and inferences on the birth of the Sun. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113: 907-912 (2016) OA: arXiv:1601.05986
9. Moór A, Kóspál Á, Ábrahám P, Balog Z, Csengeri T, Henning Th, Juhász A, Kiss Cs: New Debris Disks in Nearby Young Moving Groups. *The Astrophysical Journal*, 826: 123 (2016), OA: arXiv:1606.09179
10. Pál A, Kiss Cs, Müller TG, Molnár L, Szabó R, Szabó GyM, Sárneczky K, Kiss LL: Large Size and Slow Rotation of the Trans-Neptunian Object (225088) 2007 OR₁₀ Discovered from Herschel and K2 Observations. *The Astronomical Journal*, 151:117 (2016) OA: arXiv:1603.03090
11. Paparó M, Benkó JM, Hareter M, Guzik JA: Unexpected Series of Regular Frequency Spacing of δ Scuti Stars in the Non-Asymptotic Regime. II. Sample-Echelle Diagrams and Rotation. *The Astrophysical Journal Supplement Series* 224: 41 (2016) OA: arXiv:1603.09161
12. Roettenbacher RM, Monnier JD, Korhonen H, Aarnio AN, Baron F, ..., Kővári Zs, et al.: No Sun-like dynamo on the active star ζ Andromedae from starspot asymmetry. *Nature*, 533: 217-220 (2016)
13. Pignatari M, Herwig F, Hirschi R, Bennett M, Rockefeller G, et al.: NuGrid Stellar Data Set. I. Stellar Yields from H to Bi for Stars with Metallicities $Z = 0.02$ and $Z = 0.01$. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 225: 24 (2016) OA: arXiv:1307.6961
14. Sárneczky K, Szabó GyM, ..., Pál A, Szakáts R, ..., Vida K, Vinkó J, Kiss LL: Activity of 50 Long-period Comets Beyond 5.2 au. *The Astronomical Journal*, 152: 220, (2016) OA: arXiv:1607.05811
15. Vida K, Kriskovics L, Oláh K, ..., Kővári Zs et al.: Investigating magnetic activity in very stable stellar magnetic fields. Long-term photometric and spectroscopic study of the fully convective M4 dwarf V374 Pegasi. *Astronomy & Astrophysics*, 590: A11 (2016) OA: arXiv:1603.00867

**AZ MTA CSILLAGÁSZATI ÉS FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB
MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	202	Ebből kutató ² :	131
PhD, kandidátus:	78	MTA doktora:	10
		Rendes tag és levelező tag:	5
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			4
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			52
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			438
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			401
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			23
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			20
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			256
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			156
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	2
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 11	idegen nyelven:	10
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	718,735	Összes független hivatkozás száma (2015):	3541
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			4900
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 3	MTA doktora:	1
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			186
		poszterek száma:	149
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	42	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	49
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			13
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			29
Témavezetések száma: TDK munka:	27	Diplomamunka (BSc):	62
Diplomamunka (MSc):	34	PhD:	61
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		1209 492	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	16	Teljes saját bevétel:	1808 726 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			34
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	116 369 E Ft
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	209 328 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			39
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	1332 486 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			6
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	18 770 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		131 773	E Ft

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1209 492	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	1808 726	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	116 369	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	209 328	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	214	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	1297 287	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	34 985	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	18 770	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	118 530	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	8448	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	4795	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: CSFK Földrajztudományi Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	37	Ebből kutató ² :	28
PhD, kandidátus:	16	MTA doktora: 1	Rendes tag és levelező tag: 2
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			11

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			99
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			92
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			17
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			9
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			24
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			11
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 10	idegen nyelven:	8

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	25,929	Összes független hivatkozás száma (2015):	843
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			876

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			43
		poszterek száma:	27
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 7		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	17
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			10

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			9
Témavezetések száma: TDK munka: 3		Diplomamunka (BSc):	32
Diplomamunka (MSc): 13		PhD:	26

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: CSFK Földtani és Geokémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	31	Ebből kutató ² :	22
PhD, kandidátus:	11	MTA doktora: 1	Rendes tag és levelező tag: 1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			10

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			52
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			51
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			3
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			37
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			31
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	91,578	Összes független hivatkozás száma (2015):	526
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			684

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			24
		posztterek száma:	42
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 5		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka: 8		Diplomamunka (BSc):	8
Diplomamunka (MSc): 7		PhD:	9

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: CSFK Geodéziai és Geofizikai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	50	Ebből kutató ² :	35
PhD, kandidátus:	24	MTA doktora:	3
		Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			10

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			46
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			37
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			3
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			16
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			13
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	2
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	32,434	Összes független hivatkozás száma (2015):	473
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			691

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			43
		posztterek száma:	44
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	12	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	13
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			2

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			0
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	12
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	9

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: CSFK Konkoly Thege Miklós Csillagászati Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	72	Ebből kutató ² :	45
PhD, kandidátus:	27	MTA doktora:	5
		Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			22

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	247		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	227		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	0		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	6		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	184		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	105		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	583,911	Összes független hivatkozás száma (2015):	1736
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			2699

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	76		
posztterek száma:	36		
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	18	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	15		
Témavezetések száma: TDK munka:	12	Diplomamunka (BSc):	10
Diplomamunka (MSc):	9	PhD:	17

MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.; 1525 Budapest, Pf. 49.
telefon: (1) 395 9159; fax: (1) 395 9293
e-mail: foigazgato@energia.mta.hu; honlap: www.energia.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2016-ban

2016-ban az MTA EK MFA (Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet) új igazgatója Pécz Béla lett, az EKBI (Energia- és Környezetbiztonsági Intézet) igazgatójának megbízását őt, az AEKI (Atomenergia-kutató Intézet) igazgatójának megbízását egy évvel hosszabbították meg. Az MFA integrálódásának elősegítésére 2015-ben bevezetett belső együttműködési pályázati rendszer jól indult, amelyet a továbbiakban is szeretnének fenntartani. A függetlenül működtetett 3 intézeti tudományos tanács (TT) is gördülékenyen működött, döntései és javaslatai a KUTTA (Kutatóközponti Tudományos Tanács) ülésein résztvevő elnökökön keresztül kerül az igazgatók elé, ahol a döntések és javaslatok figyelembevételével dönt a főigazgató a kinevezésekről, a belső együttműködési pályázatok elindításáról és egyéb a központot érintő döntésekről. A belső együttműködési pályázatokban jelentős szerepet kaptak az energiatudományhoz kapcsolódó kutatási témák, melyek mellett igyekszik a vezetőség megőrizni a sikeres hagyományos – a korábbi IKI-től örökölt – témákat is.

Jelentős tudományszervezési sikernek tekinti a vezetőség az EU Joint Research Center-rel létrejött öt éves megállapodást is, amely elmélyíti a tudományos kapcsolatot a központ és az Európai Bizottság kutatóközpontja között. Együttműködési megállapodást kötött a kutatóközpont a Pannon Egyetemmel is. Ebben alapvető érdekük fiatal kutatók kinevelése a stratégiában foglalt energiatudomány területére.

A Nemzetközi Atomenergia Ügynökséggel az EK a nukleáris törvényszéki analitika és védettségi kutatások területén kötött együttműködési megállapodást, amely tovább erősítheti az EK regionális szerepét és oktatási tevékenységét.

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

A 2016. évben elért kutatási eredmények a három intézet eredményei, így ezek leírása a három intézet beszámolójában található.

MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ATOMENERGIA-KUTATÓ INTÉZET

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

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

e-mail: horvath.akos@energia.mta.hu; honlap: www.energia.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az Atomenergia-kutató Intézet fő feladatait a kutatóközpont stratégiai kutatási tervében határozták meg, ennek ismertetése a kutatóközpont korábbi beszámolójában található. A koncepció ma is aktuális, hármas célt szolgál: a jelen igényeinek megfelelő nukleáris biztonsággal kapcsolatos kutatások, a Magyarországon létesítendő új atomerőmű blokkok előkészítésével összefüggő kutatási és fejlesztési tevékenység, a jövő energiatermelésének megalapozása: negyedik generációs atomreaktorok és magfúzió által.

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

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Reaktorfizikai és multi-physics kutatások

Az új paksi blokkok zónatervezési és üzemzavari elemzéseinek céljából 2016-ban jelentős előrehaladás történt a saját fejlesztésű KARATE-1200 reaktorfizikai kódrendszer felkészítése, fejlesztése során. A tervezett aktív zóna üzemanyag-kazettáinak speciális, VVER-440-től jelentősen eltérő geometriáját figyelembe véve módosították a KARATE kódrendszer legalsó szintjén található rendkívül gyors MULTICELL neutrontranszport számítások metodikáját a kazettába benyúló erős abszorbens rudak jelenléte esetén. Az új módszert MCNP Monte Carlo számításokkal verifikálták. A fenti modellel végzett számítások eredményeként előálló paraméterezett kevés csoport állandók („hatáskeresztmetszetek”) kapcsolódását is megoldották a nodális és pálcánkénti számítások irányába. E magasabb szinteken további fejlesztéseket végeztek az új blokkok geometriájának megfelelően. A nodális és pálcánkénti számításokat verifikálták és publikálták az AER együttműködésen belül definiált VVER-1000-es MIDICORE benchmarkon keresztül. Létrehozták a teljes zóna egy olyan VVER-1200-as termohidraulikai modelljét is, – valamint annak speciális offline csatolását a KARATE-1200 kódrendszer megfelelő moduljaival – amellyel a kilépő szubcsatorna hőmérséklete meghatározható. Az ugyancsak saját fejlesztésű KIKO3D neutrodinamikai kódot is továbbfejlesztették és tesztelték a tervezett blokkoknak megfelelően.

A jelenlegi és a közeljövőben létrehozandó reaktorok (pl. új paksi blokkok) más energia-termelési módokkal versenyképes és egyben biztonságos üzemeltetésének feltétele a normál üzemi és üzemzavari limitek és biztonsági sávok megalapozott, de nem túlzottan konzervatív kijelölése. A sávokhoz konfidencia szintek, valószínűségek tartoznak. Az OECD NEA UAM benchmarkkal párhuzamosan folytatódott azoknak a módszereknek a kidolgozása, melyek révén ezek az adatok (biztonsági sávok konfidencia jellemzőkkel) megalapozott módon kiszámíthatók úgy a normál üzemi, mint az üzemzavarok esetén. A magfizikai és a technológiai primer adatok bizonytalanságaiból származó számítási hiba következetes vizsgálatára a továbbfejlesztett statisztikus KARATE kóddal köteg és pálcaszintű

számításokat végeztek VVER-440 reaktor esetén a kiegészítés figyelembevételével. A fentiek túlmenően a sokszorozási tényező bizonytalanságát a teljes zónára kifejlesztett pálcaszintű MCNP 3D Monte Carlo modellel is vizsgálták a statisztikus KARATE kód felhasználásával, valamint a magfizikai és technológiai bizonytalanságok propagálásával oly módon, hogy az összetétel számítás bizonytalanságát a kritikussági számításokkal konzisztensen vették figyelembe. A teljesítmény-eloszlásokkal és a reaktivitással kapcsolatos biztonsági paraméterekre kapott eredmények hozzájárulnak a jelenlegi paksi kampányok biztonságának értékeléséhez illetve esetleges új fűtőelemek bevezetéséhez. A metodikai bizonytalanságokat is érintő témakörben a diszkontinuitási faktorok (ADF) előállítását, nodális kódban történő alkalmazását vizsgálták a KIKO3DMG és SERPENT Monte Carlo kódokkal. Ezen kívül egy rúdkioldódásos tranziens forrócsatorna szintű bizonytalanságainak meghatározását is elvégezték multiphysics módszerekkel az OECD NEA WGFS RIA II benchmarkra vonatkozóan.

A gázhűtésű gyorspektrumú erőmű kisebb teljesítményű demonstrátor változatának tervezése a visegrádi országok együttműködésében folyik. (A jelenlegi tervek szerint az ALLEGRO demonstrátor Szlovákiában fog megépülni.) 2016-ban további előrehaladás történt azoknak az eszközöknek a fejlesztése és verifikálása során, melyekre az ALLEGRO demonstrátor háromdimenziós zónatervezése, valamint a védelmi működés helyfüggő üzemzavarainak visszacsatolt elemzése során lesz szükség. Tekintettel az axiális irányú kifolyás és az így létrejövő anizotrópia jelentős hatására, kifejlesztették és tesztelték az eredetileg diffúziós 3D nodális KIKO3DMG kódnak egy újabb változatát, ami immáron a P3 Legendre komponensekig képes a fluxus és a szórás folyamatok modellezésére. Ezen kívül megoldottak egy egyszerűsített, kiegészítés-függő nemzetközi benchmark-problémát az ECCO programmal, amivel a fenti KIKO3DMG program csoportállandóit fogják számolni. Már az így kapott megoldások is rámutattak a kifolyás megfelelő figyelembevételének fontosságára.

2016-ban a SERPENT Monte Carlo kóddal kiszámították az ALLEGRO demonstrációs célú GFR zóna és egy 3600 MW_{th} teljesítményű SFR zóna legfontosabb hőmérsékletfüggő reaktivitás-tényezőit. Meghatározták továbbá az egyes reaktivitás-tényezők fontosságát különböző tranziens folyamatok során az ATHLET termohidraulikai kóddal. Javaslatot tettek arra vonatkozóan, hogy a generálandó csoportállandókat a hőmérsékletek függvényében milyen tartományban kell paraméterezni.

Az evolúciós Szuper VVER reaktor esetében - amelynél a neutronspektrum üzem közbeni változtatásával érhető el magasabb kiegészítés és konverziós-tényező - a kazettán belüli egyenlőtlenségi tényező csökkentésére radiális és axiális dúsításpofilizációt javasoltak a SCALE programrendszerrel elvégzett számítások alapján. Az egykörös szuperkritikus nyomású, negyedik generációs, MOX üzemanyaggal tervezett VVER-SCP számítási modelljének több elemét létrehozták, javaslatot tettek a részletesen kidolgozott európai HPLWR reaktor áramlási útjainak alkalmazására.

Termohidraulikai kutatások

A termohidraulikai kutatások egyik célpontja a kritikus hőfluxus jelenségének megismerése és kísérleti vizsgálata volt. Az ACRIIL berendezésen elvégzett mérések alapján megmutatták a világban jellemzően elterjedt korrelációk alkalmazhatóságát a jelenség leírására. Szintén fontos kutatások zajlottak a PMK berendezésen végrehajtott nagy töréses mérésekhez kapcsolódóan. A gyors megnyílású nagyméretű primerköri törések esetén egy gyors nyomáshullám indulhat el, mely veszélyeztetheti a reaktortartály belső szerkezeteinek épségét. A számos parametrikus mérés rendszerkódos szimulációja alapján belátható, hogy ezeket a milliszekundumos nagyságrendbe eső tranziens folyamatokat az ATHLET kód

nagyon jól tudja becsülni. Az atomerőművek üzeme szempontjából nagyon fontos jelenség a PTS, azaz a nyomás alatti vízütés lehetséges kialakulása. A tranziensek folyamán a vészhűtő rendszerek hideg vizet táplálnak a hidegágakba, mely eljut a gyűrűkamrába és hűti a tartály falát. Ha a hűtés túlságosan effektív, a tartályfalban lévő repedések megindulásához vezethet. A hűtő hatás modellezéséhez jól kell ismerni a hidegágban és a gyűrűkamrában lévő meleg víz és a vészhűtő rendszer hideg vizének keveredési folyamatát. A keveredés modellezésére a németországi Rossendorfban készültek mérések, ezeket modellezték FLUENT kód használatával. Ezzel validálták a későbbi erőművi számításaik metodológiáját.

Fűtőelem és reaktoranyag kutatások

Fűtőelemes kísérleteket végeztek a CODEX berendezésen a reaktor normál üzemi és leállított állapotából induló hűtőközeg-vesztéses üzemzavarok modellezésére. A mérések adatai alapján fel lehetett térképezni azt a tartományt, ahol várható a burkolat felhasadása és ahol a cirkónium vízgőzös oxidációja az ötvözet elridegedéséhez vezet. Új kísérleti módszert dolgoztak ki a tabletták és a burkolat közötti mechanikai kölcsönhatás vizsgálatra. A burkolat felhasadását egy különleges mérési elrendezésben videofelvétellel rögzítették és meghatározták azt a jellemző időtartamot, amely alatt a felfűvődött cső felhasadása végbemegy. Hidrogénnel töltöttek fel cirkónium ötvözetből készült gyűrűket és mechanikai vizsgálattal megállapították, hogy milyen hidrogéntartalomnál lép fel a képlékeny-rideg átmenet.

A fűtőelemek modellezése területén több modellfejlesztési feladatot is elvégeztek. Az üzemzavari folyamatok szimulációjára használt, az USA egyik kutatóintézetében készített FRAPTRAN program legújabb verzióját kiegészítették az orosz fűtőelemre vonatkozó, saját fejlesztésű anyagfüggvényekkel, valamint a program validációs adatbázisát kiegészítették egy, a svédországi Studsvik kutatóintézetben végzett, hűtőközeg-vesztéses üzemzavart modellező kísérlet szimulációjával. A normál üzemi és üzemzavari folyamatok szimulációjára használt, az EU egyik kutatóintézetében készített TRANSURANUS programot kiegészítették az orosz fűtőelem-burkolat üzemzavari oxidációját leíró, saját fejlesztésű modellel, valamint a program felhasználásával értékelték a jelenlegi és az újabb orosz fűtőelemek normál üzemi viselkedése közötti különbségeket. A normál üzemi folyamatok szimulációjára használt, saját fejlesztésű FUROM program legújabb verziójához elkészítették a validációs jelentést.

A Szerkezetintegritási Kutatócsoport 2016. évi tevékenységének egyik részét az atomerőművi primerkörök, és azok főberendezései szerkezetintegritási számításai megalapozását képező általános módszertan fejlesztése tette ki. A munka során megadták a szerkezetintegritás egy általános koncepcionális modelljét, majd az általános modell alapján feldolgozták az üzemelő atomerőművi reaktortartályok eddigi szerkezetintegritási elemzéseinek eddigi fejlődési irányait. Folytatták a törésmechanikai mérések újfajta – az ipari gyakorlatban és a kutatások során alapvetőnek tekintett szabványos kiértékelési módszerén túlmenő – kiértékelési eljárásának fejlesztését. A munka a törésmechanikai mérések során terhelt próbatestek alakjának optikai eszközökkel történő követését megvalósító rendszer installálásával kezdődött, amelyet illeszteni kellett a mérőberendezésre. Jelenleg az optikai rendszer tesztelése folyik, és fejlesztés alatt áll az alakváltozást követő kiértékelő modul. Ezek sikeres üzembevétele után a numerikus modellek lényegesen több információ alapján lesznek értékelhetők, mint azt az eddigi módszerek lehetővé tették. A csoport folytatta a tervezett MVM Paks II erőműbe installálni kívánt újfajta reaktortartályok szerkezetintegritási elemzése során használni kívánt számításai módszertan fejlesztését. A felsorolt tevékenységek mellett a csoport együttműködésben elvégezte a nukleáris környezetbe esetleg beépítésre

javasolt betonok részletes elemterképének meghatározását. Ennek a kutatásnak végső, távlati célja alacsony felaktiválódási hajlamú betonok kidolgozásának megalapozása.

A Paksi Atomerőmű üzemidő hosszabbítási program keretében a 80-as években eltört radioaktív reaktor acél mintákból újonnan továbbfejlesztett hegesztéses technológiával rekonstruáltak szakító és törésmechanikai próbatesteket. Ezeken újonnan kifejlesztett szilárdsági és törésmechanikai jellemzőket mértek, és ezzel hozzájárulnak a blokkok biztonságos élettartamának a meghatározásához. Az AGE-60 EU FP7 K+F projektben 6 külföldi intézettel együtt továbbfejlesztették a reaktortartály anyagok öregedését leíró trend görbéket. A Budapesti Kutatóreaktorban cirkónium fűtőelem burkolatokat öregítettek a sugárkárosodás vizsgálatához.

Az EU fúziós reaktor anyagkutató programja keretében elkészítették a kifejlesztés alatt álló, kevésbé aktiválódó, hőálló EUROFER nevű acél anyagtulajdonság kézikönyvét, és az új fúziós reaktor anyagok kutatásához szükséges adatbázist. A Budapesti Kutatóreaktorban előkészítették diagnosztikai rendszerekben használt anyagok sugárkárosodásának vizsgálatát.

Reaktor monitorozási és szimulációs rendszerek fejlesztése

2016-ben is folytatták a rendszeres reaktor diagnosztikai méréseket a Paksi Atomerőmű összes blokkján, és elvégezték a kapcsolódó kiértékeléseket. A havonta végzett mérések során keletkezett zajdiagnosztikai mérési adatokat a blokkok állapotának szisztematikus figyelésére használták, az elemzések az aktív zónán átáramló hűtőközeg forgalmának monitorozására és a zónán belüli szerkezetek rezgéseinek detektálására irányultak. Az elemzések egyik blokkon sem tártak fel technológiai rendellenességet vagy egyéb műszaki problémát.

A 2016-ban a Paksi Atomerőmű három reaktorblokkja mellett telepítették sikerrel az intézet által 2015-ben fejlesztett, új, 15 hónapos kampányokat kiszolgáló VERONA zónamonitorozó rendszert.

A Paksi Atomerőmű teljes léptékű szimulátorán üzembe helyezték a 2015 év végén kifejlesztett új szabályozó és biztonságvédelmi rendszer (SZBVR), illetve reaktor teljesítményszabályozó (RTSZ) modelljét. A valós fizikai SZBVR és RTSZ rendszert fejlesztő SKODA JS munkatársaival együttműködve elvégezték az új rendszer szimulációs tesztelését, majd 2016 decemberében támogatták a valós rendszer megvalósítását az erőmű 2. blokkján.

Átalakították a reaktor indítási méréseit végző reaktivitás monitorozó rendszert és VERONA zónamonitorozó rendszert úgy, hogy az összekapcsolható legyen az új SZBVR és RTSZ rendszerrel.

Az erőmű 2. és 3. blokkja mellett kísérleti méréseket végeztek, előkészítve egy új típusú neutronfluxus-detektor bevezetését, amelynek segítségével az indítási mérések és az átrakás közbeni neutron fluxus ellenőrzés kivitelezése a közeljövőben egyszerűbb formában lesz megoldható. Az új detektor típusra alapozva elkészítették egy új átrakási neutron fluxus ellenőrző és reaktivitás monitorozó rendszer tervét.

Részt vettek a Paksi Atomerőmű blokkszámítógépének felújítási munkálataiban. Ezen belül egy új rendszert fejlesztettek ki a reaktor operátorok munkáját támogató kritikus biztonsági funkciók monitorozásához, illetve a műszaki üzemeltetési szabályzat elektronikus verziójának alkalmazásához. 2016 nyarán támogatták a rendszer bevezetését és tesztelését a teljes léptékű szimulátor mellett, majd az év végén részt vettek az új rendszer üzembe helyezésén a 2. reaktorblokk mellett.

Megvizsgálták, hogy a Paksi Atomerőmű sugárvédelmi ellenőrző rendszer kibocsátás- és környezetellenőrző rendszerének védettséget milyen módon lehetne megerősíteni

földrengések és teljes feszültségkiesés ellen. Műszaki leírást készítettek, részletesen bemutatva a legfontosabb fejlesztési feladatokat, elvégezve az új mérések dozimetriai megalapozását, és kitérve arra is, hogy milyen módon lenne célszerű a radioaktív anyagok terjedésszámítását átalakítani.

A Paksi Atomerőmű felkérésére megvizsgálták, hogy milyen okai lehetnek primer- és szekunderkörüi reaktorteljesítmények között megfigyelt különbségeknek. Figyelembe véve a primer- és szekunderkörüi hőforrásokat, illetve veszteségeket, számításaikkal rávilágítottak az eltérések lehetséges okaira. Számításaik alapján az erőműben kezdeményezték az ún. üzemmód táblázatok módosítását.

Sugárvédelmi kutatások

Az Európai Űrügynökség (ESA) általános technológiafejlesztési program RADCUBE projektje keretében megkezdődött a Föld körüli kozmikus sugárzási és mágneses tér űridőjárási célú mérésére szolgáló RadMag műszer fejlesztése. A RADCUBE projekt célja a RadMag műszer demonstrációs repülése egy három egységes (10 cm x 10 cm x 30 cm) CubeSat kategóriájú műhold fedélzetén, melynek felbocsátására várhatóan 2019 első felében kerülhet sor.

Az EK-ban (korábban AEKI) kifejlesztett Pille-MKSz termolumineszcens dózismérő (TLD) rendszer 2003 óta a Nemzetközi Űrállomás (ISS) orosz modulján a dozimetriai szolgálati rendszer része. Segítségével rendszeresen végeznek méréseket a dóziseloszlás feltérképezésére, mérik az űrhajósok személyi dózist az űrséták alatt és rendkívüli naptevékenység idején, illetve részt vesznek fedélzeti kísérletekben. A 2016-ban végzett több ezer mérés eredményét – a korábbi évekhez hasonlóan – feldolgozták és nemzetközi szakmai fórumokon ismertették. Elkészült a jelenleg üzemelő, de szavatossági idején túl járó rendszer leváltására szolgáló második repülő példány.

Elkészült az ESEO-TRITEL háromtengelyű szilícium detektoros teleszkóp repülő példánya, mellyel az átadási teszteket sikeresen el is végezték. Az Európai Űrügynökség ESEO (European Student Earth Orbiter) programja keretében 2017-től egy Föld körül keringő műhold fedélzetén végeznek majd űrdozimetriai célú méréseket a TRITEL-lel.

Az ESA szervezésében és a Német Repülési és Űrkutatási Intézet (DLR) irányításával folyó DOSIS-3D projekt keretében folytatódott a dózistérképezés az ISS európai Columbus moduljában, amelyben az MTA EK termolumineszcens (TL) detektorokat és szilárdtest nyomdetektorokat tartalmazó saját detektor összeállításokkal vett részt.

A laboratórium munkatársai 2016-ban módszert dolgoztak ki a Paksi Atomerőműre jellemző sugárzási terekben alkalmazható béta és neutron sugárzásból származó személyi dózisok mérésére. A munka során áttekintették a hatályos jogszabályokat és a vonatkozó hazai, illetve nemzetközi szakirodalmat, majd ezek alapján módszert dolgoztak ki a termolumineszcens és szilárdtest dózismérőkön alapuló dózismérő rendszer kalibrálására és használatára.

Elkészült a Paksi Atomerőmű környezetére vonatkozó meteorológiai adatbázisokban a 2015. évre rendelkezésre álló adatok elemzése. A munka során összehasonlították a meteorológiai torony, a SODAR és az ALADIN időjárás-előrejelző kód adatait.

Folytatódtak a radioaktív anyagok légköri terjedésének területén végzett kutatások. Kidolgoztak egy olyan terjedésszámító modellt, ami képes a korábban használt módszereknél pontosabb becslést adni az épület közelében kialakuló aktivitáskoncentrációkról és az azok által okozott dózisokról. 2016-ban folytatódott a radioaktív anyagok felszíni vizekben való terjedésével foglalkozó kutatás, elkészült az új terjedésszámító modell algoritmus.

Számításokat és elemzéseket végeztek a működő és tervezett hazai nukleáris létesítmények biztonságos üzemeltetéséhez, elsősorban azok környezeti hatásainak becsléséhez kapcsolódóan, amelyekhez az EK-ban fejlesztett és kereskedelmi forgalomban kapható szoftvereket alkalmazták.

Sugárbiztonsági kutató-fejlesztő tevékenység

Gamma spektrometriai vizsgálatok keretében

- A Paksi Atomerőműbe beszállított friss fűtőelem kazetták dúsításának verifikálása folytatódott. A mért dúsítások értékét összehasonlították a Monte Carlo modellezéssel meghatározott értékekkel és megállapították, hogy mindegyik kazetta megfelelt a deklarált értékeknek.
- Kiegészítő atomerőműi fűtőelemek eredetének meghatározására érdekében kidolgozták és tesztelték a hasadási termékek gamma-spektroszkópiai meghatározásának kísérleti technikáját.
- Módszert dolgoztak ki csővezetékben/tartályokban in-situ gamma-spektroszkópiával mérhető többvonalas gamma-sugárzó izotópok oldott/falra lerakódott állapotának meghatározására.
- A nukleáris anyagok jellemzésére irányuló analitikai képességek fejlesztése céljából a CEA által szervezett nemzetközi körmérésben vettek részt. Számos különféle eredetű urán- és tórium-tartalmú mintát elemeztek, melynek során többek közt urán minták korát, dúsítását, mikroelem összetételét határozták meg.

Neutronkoincidenciás vizsgálatok során a NAÜ magyar támogatói programja keretében továbbfejlesztették az elmúlt években létrehozott PTR-32 neutron koincidenciás adatgyűjtő rendszert a felhasználók visszajelzései és a NAÜ kívánásai szerint. 2016-ban a rendszer szoftver csomagját bővítették az adatkezelésre és mérésvezérlésre vonatkozó funkciókkal. Ezen felül a Los Alamos-i kollégákkal kidolgoztak és közzétettek egy ajánlást a neutron koincidenciás mérések paramétereinek egységes értelmezéséről.

Dozimetriai tevékenységük során megvizsgálták a CaSO_4 és Li-tetraborát (LTB) anyagok optikai és dozimetriai tulajdonságainak változásait a technológiai dózisos (10-100 kGy) tartományában. Megállapították, hogy kettős szennyezésű $\text{CaSO}_4:\text{Dy,Cu}$, illetve $\text{CaSO}_4:\text{Tm,Cu}$ anyagok megfelelő kiértékelési körülmények (neutrális fényszűrők alkalmazása) esetén alkalmasak technológiai dózisos meghatározására. A különböző struktúrájú LTB anyagok közül az amorf (üveges) szerkezetű rézzel aktivált minták ugyancsak értékelhető dóziszválaszt mutattak a 10-50 kGy tartományban.

Nagyérzékenységű tömegspektrometriás (ICP-MS) roncsolásos módszerek alkalmazásával folytatták a nukleáris törvényszéki analitikai könyvtár létrehozásához szükséges adatbázis összeállítását, a program finomítását és tesztelését az adatok betöltésével. Emellett új típusú nukleáris anyagokat elemeztek (mint pl. uranil-nitrát, uranil-acetát, különféle U- és Th-tartalmú laboratóriumi vegyszerek) és megvizsgálták PuBe források lehetséges eredetjelölő paramétereit. Új módszert fejlesztettek ki a ritkaföldfémek elválasztására, valamint új típusú eredetjelölő paramétereket is bevezettek LIBS és XPS/AES vizsgálatokkal. Emellett kemometriai módszerekkel megpróbálták az egyes mintákat csoportosítani, egymástól eredetük szerint elkülöníteni, egyelőre a LIBS spektrumokra alkalmazva ezeket az eljárásokat.

Gyakorlat szervezése a hiányzó, a talált, valamint a lefoglalt nukleáris és más radioaktív anyagokkal kapcsolatos bejelentésekről és intézkedésekről munka célja a 490/2015 (XII.30.) rendelet szerinti válaszingtézkedések gyakorlása; a résztvevők közötti együttműködés kialakítása, tesztelése; az érintett szervezetek felkészültségének felmérése, értékelése; az

esetleges hiányosságok, jogszabályi előírások végrehajtásától eltérő gyakorlat, javításra módosításra szoruló területek azonosítása; valamint, ehhez kapcsolódóan, javító-jobbító intézkedések meghatározása a szervezetek felkészültségének és az együttműködés javítására. Ennek céljából szakmai egyeztetéseket kezdeményeztek a radiológiai veszélyhelyzet kezelésekre felelős hatóságokkal és minden érintett szervezettel. Segítségükkel és egy megalakuló munkacsoporttal megterveztek egy virtuális gyakorlatot, annak forgatókönyvét és kapcsolódó szakmai kérdéseit. Kiválasztották a gyakorlat lehetséges helyszínét, majd egy előgyakorlat keretében megtárgyalták a gyakorlat menetét, a lehetséges hibákat, problémákat.

Nukleáris törvényszéki területen az SBL-en 2015-ben nukleáris/radioaktív anyagok felkutatására kifejlesztett távirányítású robot és a működtető program fejlesztése folytatódott.

A mobil laboratóriumot az MTA Energiatudományi Kutatóközpont működteti, amely egy különböző kézi sugárzás mérő műszerekkel, valamint nagy térfogatú, érzékeny detektorrendszerrel felszerelt kisbusz. A mobil labor segítségével lehetséges rejtett radioaktív és nukleáris anyagok felderítése, az ismeretlen eredetű, lefoglalt radioaktív források és nukleáris anyagok vizsgálata és azonosítása, valamint nukleáris biztonságot érintő események és radiológiai bűnügyi helyszínek esetén szakmai segítségnyújtás a hivatalos szervek számára. Az ismeretlen eredetű elkobzott vagy talált nukleáris és radioaktív anyagok azonosítását és gyors jellemzését egy külön erre a célra kiképzett csoport (MEST-Mobile Expert Support Team) végzi. Az idei évben a mobil labort az angol Symetrica céggel való együttműködés eredményeként 3 nagy térfogatú plaztik-szcintillációs detektorral (1 db 20 literes és 2 db 7 literes egység) és egy nagy felületű ^3He -mentes neutron detektorral szerelték fel tesztelési céllal. A mobil laboratóriummal a KFKI telephelyen és az ország különböző pontjain mérték a gamma sugárzás ingadozását, a beépített GPS rendszerrel térképeket készítettek és vizsgálták a detektorok érzékenységét és azonosító képességét.

Az MTA EK SBL tesztlaboratóriumában került sor az angol Symetrica cég által készített detektorrendszer (Szcintillációs gamma és neutron detektorok) prototípusának az EUROSTARS program keretein belüli tesztelésére. Ehhez a tesztlaboratóriumban elkészült egy vezérlő szoftver, amely a mozgatható, sugárforrást tartó kocsis vezérlését és az adatok gyűjtését végzi. Emellett, főként a kézi műszerek tesztelésére két (1 db neutron források és 1 db gamma források hidraulikus emelésére alkalmas) statikus besugárzó egység is készült. A Symetrica detektor egységeket széleskörű tesztelésnek vetették alá annak érdekében, hogy azok detektálási hatékonyságát és azonosítási képességeit vizsgálják. A teszteléseket elsősorban nukleáris anyagokkal (pl. szegényített urán, nagy dúsítású urán, természetes urán, fegyver minőségű plutónium) és különböző álcázó gamma sugárzó forrásokkal (pl. NORM, orvosi és ipari források) végezték. Az elvégzett tesztek alapján a tesztlabor alkalmas kézi és fix telepítésű moduláris detektorok teljes körű statikus és dinamikus tesztelésére.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének főbb eredményei

A Budapesti Kutatóreaktor hazánk egyetlen nemzetközi felhasználói rendszerben működtetett nagyberendezése, amely alap-, és alkalmazott kutatások számára neutronforrásként szolgál. A kutatóreaktor körül 15 nagyberendezés működik. A berendezéseken folyó kutatómunkát a Budapest Neutron Centrum (BNC) koordinálja.

A felhasználói program keretében hazai és külföldi kutatók pályázhatnak a BKR nagyberendezéseire. A beérkezett pályázatokat nemzetközi bíráló bizottság értékeli. A berendezések nagymértékű kihasználtsága miatt a BNC kiváló és jónak minősített pályázatok számára tud mérési időt biztosítani. A felhasználói programmal, a mérési pályázatokkal kapcsolatos információk megtalálhatók a www.bnc.hu honlapon. BNC tagja a CERIC-ERIC konzorciumnak, így berendezéseiken CERIC-es kutatók is kaphatnak mérési időt. A

felhasználói program nemzetközi ismertségét mutatja, hogy több mint 20 országból érkeztek kutatók és végeztek méréseket a BNC berendezésein.

Évente, most már hagyományosan megrendezik a „user meeting”-t, amely egy kiváló fórum a BNC kutatói és a vendég kutatók számára, hogy beszámoljanak a legújabb kutatási eredményeikről és a berendezéseken történt fejlesztésekről.

2016-ban tízedik alkalommal rendezték meg a Közép-európai Neutronszerzéses Iskolát (Central European Training School on Neutron Scattering). Az iskolára rendkívül nagy az igény, miután az elméleti oktatás mellett a hallgatók mérést végeznek a kutatóreaktor nagyberendezésein, ezért korlátozott számú (30) hallgatót tudtak fogadni.

A SINE2020 (World Class Science and Innovation with Neutrons in Europe 2020) EU által támogatott projekt egyik jelentős munkacsomagja a neutronos módszerek bevezetése az iparban. Ennek keretében számos ipari kiállításon jelen voltak, ezek közül az egyik legjelentősebb kiállítás az Atomotive Kiállítás, Budapesten, a Hungexpo területén került megrendezésre. A kiállításon a BNC mint kiállító vett részt, standukon bemutatták, a neutronos anyagszerkezeti vizsgálatok ipari felhasználási lehetőségei közül azokat, amelyek az autó- és járműipari számára jelentősek lehetnek. A kiállítást követően az Autopro magazinban jelent meg egy cikk a BNC-ről ill. az autóiiparban használható neutronos módszerekről.

A kutatóreaktor évente átlagosan 120 napot, (12-szer 10 napos ciklus) üzemel.

b) Tudomány és társadalom

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

A Budapesti Kutatóreaktor 2016-ban is számos vendéget fogadott, elsősorban diákcsoportokat.

A sugárbiztonság, a nukleáris törvényszéki analitika területén zajló kutatások és lehetőségek bemutatásáról előadásokat tartottak a Fiala Kutatók Napján, az ELTE TDK hetének keretében, valamint a BME-n és a Pannon Egyetemen egy-egy féléves tantárgy keretében meghívott előadóként.

Az SBL az új mozgólaboratóriumot és annak képességeit bemutatta az osztrák biztonságtechnikai kiállításon Eisenstadt-ban.

Élelmiszer biztonság témában előadásokat és gyakorlatot tartottak szaúd-arábiai hallgatók számára.

Részt vettek az OAH által szervezett, nukleáris biztosítéki ellenőrök részére tartott tanfolyamon előadásokkal.

Az űr-dozimetria eredményeiről és a kapcsolódó műszerfejlesztésről időközönként internetes hírportálokon, napilapokban, magazinokban, valamint rádió és televízió műsorokban számolnak be. Az Ozone Network televíziós csatorna űrkutatási témájú ismeretterjesztő műsorának (Ozone Univerzum) szerkesztésében vesznek részt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Az intézet legfontosabb hazai partnerei hosszú évek óta az MVM Paksi Atomerőmű ZRt és az Országos Atomenergia Hivatal.

A Fenntartható Atomenergia Technológiai Platform (FAETP) 2016-ban folytatta tevékenységét.

2016 nyarán az űrdozimetriai kutatócsoport egyik munkatársa egy hónapot töltött Göttingenben, a Max-Planck-Institute für Sonnensystemforschung (MPS) intézetben, ahol a DIM kísérlet egyik társkutatójaként a Philae mérési eredményeinek értelmezésében és publikálásában vett részt.

A laboratórium kutatói egy nemzetközi konzorcium tagjaként részt vesznek az Európai Unió által finanszírozott CATHYMARA (Child and Adult Thyroid Monitoring After Reactor Accident) projektben. A projekt fő célja egy radioaktív kibocsátással járó esemény által okozott belső sugárterhelés mérési módszereinek vizsgálata és kidolgozása különös tekintettel a jódiotópok által gyermekekben okozott pajzsmirigydózisra.

A NERIS (European Platform on preparedness for nuclear and radiological emergency response and recovery) keretein belül részt vesznek a nukleáris baleset-elhárítás területén folyó nemzetközi munkában.

Az MTA EK részt vesz az OAH nemzeti támogatási programjában, mely nukleáris analitikai módszerek fejlesztését célozza a NAÜ részére a PTR-32 neutron koincidenziás adatgyűjtő rendszer továbbfejlesztése. Emellett a támogatóprogramban szerepel a tömegspektrometriai csoport csatlakoztatása a NAÜ nemzetközi mérőhálózatához (NWAL), ami hatósági ellenőrzésekből származó dörzsminták aktinidatartalmának összelemzését jelentené a NAÜ számára (Qualification of the IAEA's Network of Analytical Laboratories (NWAL) for Analysis of Environmental Samples and Nuclear Materials, A 1834).

A NAÜ megbízásából tartottak egy egyhetes nukleáris törvényszéki témájú tanfolyamot, míg a JRC Karlsruhe intézetének felkérésére egy-egy egyhetes tanfolyamot tartottak ukrán kutatók részére nukleáris anyagok tömegspektrometriai és elektronmikroszkópos vizsgálata témában.

A NAÜ megbízásából 1 ösztöndíjas töltött a Sugárbiztonsági Laboratóriumban 3 hónapot nukleáris törvényszéki analitikai témában.

Részt vesznek a NAÜ „Technical Cooperation” programjában, az európai régióban alkalmazott sugártechnológiai eljárások témában.

Dozimetriai fejlesztési témákban kétoldalú együttműködések vannak a Horvát Akadémia „Ruder Boskovic” intézetével, a Szerb Akadémia „Vinca Nukleáris Kutatóintézetével” és az Ukrán Akadémia „Felületkémiai Intézetének” munkatársaival.

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

A 2016-es év folyamán tovább erősítették kapcsolataikat és együttműködésüket az Amerikai Külügyminisztériummal, a GICNT (Global Initiative to Combat Nuclear Terrorism) nemzetközi szervezettel, valamint az ITWG (International Technical Working Group on Nuclear Forensic) nemzetközi szervezettel.

Az MTA EK SBL munkatársai az ESARDA (European Safeguards Research and Development Association) nemzetközi szervezet, és az ITWG vezetésében is képviseltetik magukat.

Részt vesznek az ASTM munkájában különféle technológiai doziméterek és módszerek ISO/ASTM szabványainak kidolgozása, ill. felülvizsgálata révén.

A nukleáris törvényszéki területen jelentős előrelépés történt a hazai kapcsolatok erősítésében is a Készenléti Rendőrség tűzszerész egységével, a Terror Elhárító Központtal, valamint a Bűnügyi Szakértői és Kutatóintézettel.

Egy EU H2020 projekt (C-BORD) kapcsán együttműködnek a CEA (Francia Atomenergia Hivatal) munkatársaival. Egyúttal megkezdődött egy újabb EU-s projekt (EUROSTARS) egy angol vállalattal együttműködésben.

A hazai kapcsolatok közül jelentősek még a hazai egyetemekkel történő együttműködések, mint BME, Pannon Egyetem, Szegedi Tudományegyetem.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az elnyert nemzetközi pályázatok nagy része az EU keretprogramjaiból származik. Ezek jelentősége abban áll, hogy a korszerű atomenergetikához kapcsolódó nemzetközi kutatásokhoz biztosít kapcsolatot, lehetőséget adva részben a hasadáson alapuló atomereaktorok korszerű változatainak vizsgálatára részben a fúzióval kapcsolatos kutatásokra. E két látszólag távoli területet az új, magas hőmérsékleten is használható szerkezeti anyagok kutatása kapcsolja össze.

Az Európai Űrügynökség általános technológiafejlesztési programja (GSTP) keretében elnyerték annak lehetőségét, hogy az űripar részére a kozmikus sugárzás és a mágneses tér üridőjárás célú mérésére szolgáló műszert fejlesszenek.

A 2016-ban kiírt CONCERT pályázaton egy nemzetközi konzorcium keretében vesz részt a Sugárvédelmi Laboratórium. A CONFIDENCE (Coping with uncertainties for improved modelling and decision making in nuclear emergencies) pályázat a nem hivatalos tájékoztatás szerint sikeresen szerepelt. A három éves munka célja a nukleáris veszélyhelyzetek korai, átmeneti és kései szakaszában való döntéshozatali stratégiák fejlesztése.

Az Országos Atomenergia Hivatal „Műszaki Megalapozó Tevékenység” pályázatai közül öt projektet nyertek el, a nukleáris biztonsági tevékenység erősítése céljából:

- A PTR neutronkoincidenziás adatgyűjtő és kiértékelő rendszer továbbfejlesztésének folytatása
- Nemzeti Törvényszéki Analitikai Könyvtár (LIBRARY) kiegészítése egyéb típusú nukleáris anyagok vizsgálatával és új paraméterekkel
- Gyakorlat szervezése a hiányzó, a talált, valamint a lefoglalt nukleáris és más radioaktív anyagokkal kapcsolatos bejelentésekről és intézkedésekről, (1. részfeladat)
- Kiegészített fűtőelemek előéletének meghatározása gamma-spektrometriával
- Oktató laboratóriumban használható virtuális neutron detektor prototípusának elkészítése

Elnyerték az ITRAP-10+ EU-s projektet. E projekt célja a nukleáris biztonság növelése érdekében a radioaktív és nukleáris anyagok alkalmazásával kapcsolatos biztonság erősítése, használatukkal kapcsolatos visszaélések megakadályozása, a terrorizmus veszélyének csökkentése. Ennek érdekében körelemzések keretében az alkalmazott sugárzásmérő detektorokat és mérési eljárásokat ellenőrzik, fejlesztik.

Az Országos Atomenergia Hivatal „Műszaki Megalapozó Tevékenység” pályázatai jelentős szerepet játszanak az intézet legtöbb laboratóriumának életében, lehetőséget adva a hatósági tevékenység tudományos alapjainak biztosítására.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Panka I, Hegyi Gy, Maráczy Cs, Keresztúri A: Uncertainties of the KIKO3D-ATHLET calculations using the Kalinin-3 benchmark (Phase II) data. *Kerntechnik*, 81: 4 (2016) <http://dx.doi.org/10.3139/124.110711>
2. Temesvári E, Keresztúri A, Pataki I, Tóta Á: Core Safety Calculations of the ALLEGRO Core, ICAPP - International Congress on Advances in Nuclear Power Plants - Nuclear Innovation: Inventing the Future of Existing and New Nuclear Power, April 17-21, 2016, San Francisco, USA, ICAPP2016-16382, CD-ROM, ISBN 978-0-89448-725-5 ANS 16382/ (CD-ROM) <http://www.scopus.com/record/display.url?origin=inward&eid=2-s2.0-84986256968>
3. Király M, Kulacsy K, Hózer Z, Perez-Feró E, Novotny T: High-temperature steam oxidation kinetics of the E110G cladding alloy. *Journal of Nuclear Materials*, 475: 27-36 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.03.007>
4. Perez-Feró E, Novotny T, Pintér-Csordás A, Kunstár M, Hózer Z, Horváth M, Matus L: Experimental results on the breakaway oxidation of the E110 cladding alloy under high-temperature isothermal conditions. *Progress in Nuclear Energy*, 93: 89-95 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.pnucene.2016.08.006>
5. Kiss S, Lipcsei S: Investigation of circulating temperature fluctuations of the primary coolant in order to develop an enhanced MTC estimation for VVER-440 reactors. Proceedings of the twenty-sixth Symposium of AER, Helsinki, Finland, 10-14 October, 2016, ISBN 978-963-7351-26-6, ISBN 978-963-7351-27-3, pp. 731-758 <http://dx.doi.org/10.1093/rpd/ncv400>
6. Pázmándi T, Andrási A., Fehér I., Kocsonya A, Pantya A, Szántó P, Zagyvai P: Calibration of a whole body counter for ²⁴¹Am with the LLNL chest phantom. *Radiation Protection Dosimetry*, 170:(1-4) 225-230 (2016) <http://dx.doi.org/10.1093/rpd/ncv400>
7. Strádi A, Pálfalvi JK, Szabó J, Pázmándi T, Ivanova OA, Shurshakov VA: Cosmic radiation measurements on the Foton-M4 satellite by passive detectors. *Acta Astronautica*, 131: 110–112 (2017) <http://dx.doi.org/10.1016/j.actaastro.2016.11.034>
8. Bagi J, Lakosi L, Nguyen CT: Neutron producing reactions in PuBe neutron sources. *Nucl. Instr. Meth. B*, 366: 69-76 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2015.10.004>
9. Metzinger A, Nagy A, Gáspár A, Márton Zs, Kovács-Széles É, Galbács G: The feasibility of liquid sample microanalysis using polydimethylsiloxane microfluidic chips with in-channel and in-port laser-induced breakdown spectroscopy detection. *Spectrochimica Acta Part B*, 126: 23–30 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.sab.2016.10.014>
10. ByYi SJ, Chung MS, Toth I: Pressure wave propagation phenomena in the pipe system of a nuclear power plant. *Annals of Nuclear Energy*, 87: 157-161 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2015.08.024>
11. Farkas I, Hutli E, Farkas T, Takacs A, Guba A, Toth I: Validation of Computational Fluid Dynamics Calculation Using Rossendorf Coolant Mixing Model Flow Measurements in Primary Loop of Coolant in a Pressurized Water Reactor Model. *Nuclear Engineering and Technology*, 48: 941-951 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.net.2016.02.017>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az elkezdett és a 2015-ben indított új energiatudományi kutatások folytatása, illetve felfuttatása hazai és nemzetközi együttműködésben;

A Budapesti Kutatórektornál működő kísérleti berendezések továbbfejlesztése és magas szintű hasznosítása nemzetközi és hazai kutatók bevonásával;

Az energiaátalakítás környezeti hatásainak és rendszereinek kutatása;

Energiaátalakító, környezetkímélő, gazdaságos és energiatakarékos kémiai módszerek kutatása.

II. A 2016-ban elért kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Nukleáris analitikai kutatások

A nukleáris analitikai módszerek kémiai és környezetvédelmi alkalmazásai

Az in-beam katalízis-kutatások keretében az FHI Berlin és az EZH Zürich munkatársai bevonásával végeztek in-beam katalízis PGAA kísérleteket. A HBr oxidációja a finomkémia egyik fontos reakciója, amellyel alkánokból értékes vegyületek állíthatók elő. Tanulmányozták a HBr oxidációjának mechanizmusát RuO₂, IrO₂, TiO₂ katalizátormintákon. Azt tapasztalták, hogy alacsony hőmérséklet és O₂:HBr arány esetében a bróm mennyisége jelentősen megnő a tömbfázisban, amely rontja a katalizátor stabilitását, míg HCl esetében a klórozódás a felszínre korlátozódott.

Kereskedelemben kapható Ti hordozós Ru és Ir monolit katalizátorok összetételét és elhasználódását vizsgálták dimetil-formamid nedves oxidációs körülmények között. Megállapították, hogy még 55 óra után sem csökkent le szignifikánsan a Ru és Ir tartalom, tehát a minták kellően stabilak akár egy jövőbeni félüzemi alkalmazáshoz is. Az alkalmazott PGAA mérés technika lehetővé teszi a minták feloldás-nélküli analizisét és akár egy adott minta többszöri vizsgálatát.

A nukleáris analitikai (PGAA, NAA és PGAI), illetve neutronos és röntgenes képalkotó módszerek (NT, XT) kombinációjával sikeresen jellemezték heterogén szilárd minták, különös tekintettel elektronikai hulladékok elemösszetételét. Meghatározták a gazdaságilag hasznosítható, a RoHS (*Restriction of Hazardous Substances Directive*) és WEEE (*Waste Electrical and Electronic Equipment*) direktívákban, ill. az Európai Bizottság COM(2014) 297 számú, az EU számára kritikus fontosságú nyersanyagok jegyzékében felsorolt egyes elemek mennyiségét és térbeli eloszlását különböző számítástechnikai alkatrészekben. A kutatások elősegíthetik az ismeretlen összetételű elektronikai hulladék gazdaságos újrafeldolgozását.

A nukleáris analitikai módszerek archeometriai alkalmazásai

Az OTKA K 100385 keretében főként a Mihálydy és Ebenhöch gyűjteményekbe tartozó hornfels, nefrit, szerpentin, zöldpala, és egyéb metamorf anyagú csiszolt kőeszközök

nyersanyag eredet-vizsgálatát végezték, a PGAA mellett hasonlóan roncsolásmentes SEM-EDX módszerrel. A PGAA és SEM-EDX adatok jó egyezést mutattak. Terepi munka során összehasonlító geológiai mintákat gyűjtöttek a feltételezett nyersanyaglelőhelyekről. A vizsgálatok eredményeképpen sikerült egyrészt a nagy távolságú őskori kereskedelmi hálózatba tartozó zöldkő (jadeit, eklogit) eszközöket azonosítani, másrészt a terepbejárásokkal érintett nyersanyagforrásokhoz köthető eszközöket geológiai forrásokhoz rendelni (nefrit, metabázis, szerpentin, hornfels)

Módszertani összehasonlító vizsgálatot végeztek a Magyar Nemzeti Múzeum Litotéka gyűjteményéből származó, az európai és mediterrán lelőhelyeket reprezentáló obszidián mintasorozaton. Meghatározták a PGAA, XRF és NAA módszerekkel mérhető elemeket, vizsgálták az adatok összehasonlíthatóságát és alkalmazhatóságát eredet-meghatározásra. Eredményeik szerint a PGAA adatok a (különösen a B, Cl, Ti koncentrációk alapján) jobban elkülöníthetők az egyes obszidián típusok és altípusok, mint az XRF-fel mérhető adatok (főként Rb, Sr, Zr) alapján, ennek ellenére az XRF gyors kvalitatív mérésre használható.

Mössbauer spektroszkópiával, PGAA-val és elektronmikroszkóppal vizsgálták egy különleges obszidián változat, az ún. kárpáti mahagoni obszidián geokémiai jellegzetességeit. Az eredményeket 5 publikációban foglalták össze. Nemzetközi együttműködésben X-XIV. századi bizánci üvegeket és XVII. századi lisszaboni mázas kerámiákat vizsgáltak, az eredményekből 3 referált publikáció készült.

PGAA, in-beam NAA, NR, μ XRF, pXRF, és ToF-ND módszerekkel több múzeumi ezüst tárgy, köztük két igen értékes római tál összetételét határozták meg a Seuso-projekthez kapcsolódóan. A vizsgálatok célja a tárgyak tömbi összetételének meghatározása, esetleges jellegzetes „ujjlenyomat-szerű” összetétel kimutatása. Az IPERION CH H2020 projekt FIXLAB munkacsomagjában 7 mérési projektet hajtottak végre. Egy (MTA BTK) Lendület projekthez kapcsolódóan bronzkori használati tárgyak és fegyverek elemanalízisét végezték. A jövőben tovább folytatják a bronztárgyak vizsgálatát, az adatokból a bronzművesség technológiai változásaira fognak következtetni.

Nukleáris és magadatok mérése és feldolgozása

Re-186 izotóp pontosabb nívósémáját és sokkal megbízhatóbb neutronbefogási hatáskeresztmetszet értékeit határozták meg a DICEBOX program segítségével, a Berkeley National Laboratory és az USA Légierő Kutatóintézet kutatóival együttműködésben. 102 új gamma-átmenetet és 50 új nívót azonosítottak, továbbá a korábban ismertnél háromszor kisebb szórással adták meg a neutron kötési energiáját (6179,59(5) keV).

A Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf munkatársaival együttműködve mérték a Cd-114(γ, γ') (Rossendorf) és a Cd-113(n, γ) (Budapest) magreakciók gamma-spektrumait. Spektrumvisszabontás módszerével meghatározták a Cd-114 ún. gamma-erősségfüggvényét, információt nyertek a nívósűrűségről, amelyek magreakció modellek teszteléséhez fontosak. A visszabontott spektrumból meghatározták HPGe detektorral felbonthatatlan kontinuum járulékát és az egy neutronra jutó átlagos gamma-átmenetek számát, amely 4,2-nek adódott.

Metodikai kutatások

Összefoglaló publikációban mutatták be az elmúlt 15 év felhasználói programjának eredményeit a Kutatóreaktor PGAA-NIPS mérőhelyén. Geológiai, anyagtudományi, archaeometriai és magfizikai esettanulmányokkal illusztrálták a módszer széleskörű alkalmazhatóságát.

A 2013-2016 között végrehajtott korszerűsítési programnak köszönhetően a neutronaktivációs analitikai laboratórium technikai felszereltsége és mérési lehetőségei jelentősen kibővültek, amelyet egy átfogó publikációban mutattak be. A Kutatóreaktor csőposta besugárzóját és a

későneutron-számlálást kombinálva kb. 10 ng/g ^{235}U kimutatási határt értek el folyadék és szilárd mátrixokban.

Megmutatták, hogy a kiváló energiafelbontású ún. LEGe germánium detektorral komplikált prompt gamma-spektrummal jellemezhető, főleg fémes elemek és ezek ötvözetei eredményesebben analizálhatók, mint a koaxiális germánium detektoron alapuló mérés technikával.

Bevezették a háromdimenziós, illetve kétmodalitású (neutron és röntgen) képalkotást a RAD mérőhelyen. A technikát sikerrel alkalmazták összetett régészeti és technológiai minták szerkezetvizsgálatára. A NORMA mérőhelyen jelentősen csökkentették a neutronnyaláb divergenciáját, lehetővé téve jobb térbeli felbontás és homogénebb nyalábprofil használatát a képkészítéshez. A NAÜ által szervezett körmérésben teszt objektumokat validáltak, amelyek a 3D neutronos képalkotás kontraszt- és felbontás standardjává válhatnak.

Mössbauer spektroszkópia alkalmazásai

^{57}Fe transzmissziós spektroszkópiával vizsgálták királis, kis-spinű ($S=1$) ötös koordinációjú $[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{asN}_4\text{Py})]^{2+}$ komplexben a $\text{Fe}(\text{IV})$ állapot stabilizálódását. Az átmeneti komplexet sikerült előállítani és spektrumát megfagyasztott oldatban felvenni, mellyel megerősítették a komplex szerkezetére vonatkozó más módszerekkel nyert információkat. A módszer egy másik alkalmazásával azonosították β -vasoxihidroxid foszforsavas kezelésénél keletkező vas-foszfát fázisok szerkezetét (monoklin, ortorombos, tridimit vagy hexagonális). A különböző fázisok ismerete a vas-foszfát alkalmazásai szempontjából fontos.

A Bodai Aleurolit formáció agyagos kőzetének ásványaiban meghatározták a $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ionok arányát. Ezek az értékek jó összhangban vannak az ásványok ciklikus voltammetriával végzett redox vizsgálatának eredményeivel.

A konverziós-elektron Mössbauer-spektroszkópia (CEMS) módszerét is alkalmazták. Az ^{57}Fe CEMS módszerével kimutatták, hogy 247 MeV energiájú Kr-ionokkal besugárzott α -vas vékonyrétegekben az eredetileg kristályos ferromágneses vasnak kb. csak fele marad kristályos, másik része amorfizálódik, harmadik része szuperparamágneses lesz. Fedő antimon réteggel borított, átlátszó ón-dioxid rétegeket vizsgáltak ^{119}Sn CEMS módszerrel. Megállapították, hogy az antimon atomok beépülése az ón-dioxid rétegbe növeli az elektronsűrűséget.

Környezetfizikai kutatások

A sztochasztikus tüdőmodell fejlesztése

A Sztochasztikus Tüdőmodell eredeti verziója a belélegzett nem radioaktív részecskék légzőrendszeri kiülepedés eloszlásának meghatározására készült. Az elmúlt évben kidolgozásra került e tüdőmodell RADACT nevű változata, amely alkalmas inhalált alfa-bomló izotópok légúti aktivitás- és dózisterhelés-eloszlásának számítására. A légúti epitélium, valamint a nyák vastagságának ismeretében a belélegzett polónium 218-as és 214-es izotópok bomlásából származó aktivitás- és dóziseloszlás a bronchiális régióban légúti-generációs szám szinten meghatározásra került. Lehetővé vált a szövet dózis és az epiéliumban lévő sejtmag dózisok számítása is. A modellben külön input fájlokban állítható be a légúti epitélium és a nyákréteg légúti generációnkénti vastagsága, valamint a belélegzett izotópösszetétel. A sejtmagdózis modell mind a bazális, mind a kiválasztó sejtek légúti generációnkénti és mélységeloszlás szerinti dóziseloszlásának meghatározására alkalmas. Az elvégzett számítások alapján megállapításra került, hogy a belélegzett radon leányelemekből származó alfa-terhelés rendkívül inhomogén a légzőrendszer bronchiális régiójában, így indokolt a tüdő légúti generációsintű dozimetriai vizsgálata.

Numerikus modell radioaktív részecskék bronchiális tisztulásának számítására

A bronchiális légutak epitéliumát érő alfa-sugárzás az elsődleges kiülepedésen túl, származhat a mélyebb bronchiális régiókban kiülepedett, de felfelé tisztuló izotópok bomlásából is. A nyáktisztulásból származó dóziszjárulék szimulálásához létrehoztak egy a kiülepedett radon leányelemek tisztulását szimuláló radioaktív tisztulási modellt. Összehasonlításra került az elsődleges depozícióból és a bronchiális mukociliáris tisztulásból adódó dóziszjárulékok mértéke. Az eredmények alapján kijelenthető, hogy a tisztulásból származó dóziszjárulék a nagy bronchiális légutakban meg is haladhatja a primer depozícióból származó terhelést. Így kizárólag a primer depozíció számítása a terhelés alulbecsléséhez vezet.

A radonleányelemekből származó sugárterhelés térbeli eloszlása egyenetlenségének következményei és a szöveti válasz matematikai modellezése

A sugárvédelem számára egy fontos kérdés, hogy milyen szöveti válasz figyelhető meg a légutak sugárterhelésnek leginkább kitett régióiban radon expozíció esetén. Ennek kapcsán elemzésre került, hogy a sugárterhelés miatt elveszített sejtek pótlásának milyen következménye van a sejtmag dóziszokra és a sejtmagokat eltaláló alfa-részecskék számára vonatkozóan. Ehhez olyan hámszövetmodellekre volt szükség, amelyek a kísérleti adatokhoz illeszkednek a sejttípusok gyakoriságára, a sejtmagok mélységeloszlására és térfogatára vonatkozóan mind normál állapotban, mind abban az esetben, amikor a bazális, illetve kehelysejtek száma a sugárterhelés miatt megnő. Ezek ugyanis részben a szövet megvastagodásával, részben pedig az azt borító nyákréteg megvastagodásával is járnak, amelyek jelentősen csökkentik egy adott radonkoncentrációhoz tartozó mikroszkopikus terheléseket, mint például a sejtdóziszok mértékét. Ezek meghatározásához saját fejlesztésű mikrodozimetriai kód került alkalmazásra. Ezzel bebizonyosodott, hogy a krónikus besugárzások során időben változik nemcsak a biológiai válasz, hanem a fizikai dózis értéke is; azaz az adaptáció nemcsak a biológiai válasz szintjén valósulhat meg, hanem már azt megelőzően is.

Aeroszol gyógyszerek légúti kiülepedésének numerikus modellezése

Megvizsgálták az asztma terápiájában leggyakrabban alkalmazott por alapú aeroszol gyógyszerek légúti kiülepedése légzési paramétereiktől és részecskemérettől való függését. Megállapítást nyert, hogy a gyógyszerbevitel során alkalmazott légzési mód inhalációs eszköz- és gyógyszer-specifikusan hat a légúti depozícióra, és ezáltal a terápia hatékonyságára. A legfontosabb légzési paraméternek az eszközmegszívás ereje és a gyógyszerbevitel utáni légzési szünet hossza bizonyult. Míg az előbbi az eszköz áramlási ellenállásától is függ, addig az utóbbi paraméter csak a páciens légzésfunkciós képességeivel van kapcsolatban. A légzési szünet a kis részecskés gyógyszerek (egy-két mikrométer átmérőjű) légzőrendszeri kiülepedés eloszlására van nagyobb hatással. Az eredmények azt demonstrálják, hogy a megfelelően validált számítógépes modellek képesek a gyógyszerbevitel optimalizálására és egyénre szabására.

A kis- és közepes dózisu ionizáló sugárzás hatásának kísérleti vizsgálata éjjeli lepkéken

A rovarok általában jóval kevésbé érzékenyek az ionizáló sugárzásra, mint az ember, mégis több olyan terület ismert, ahol mesterséges sugárszennyezés következtében emelkedett a sugárzási szint, és ezeken a területeken, ezen időszak után, néhány lepkefaj esetében szignifikánsan megnőtt a mutációk gyakorisága. Ezért sugárvédelmi, környezetvédelmi és természetvédelmi szempontból fontos a lepkék kis és közepes dózisu sugárterhelésének vizsgálata. A kapott eredményeik megerősítik, hogy a vizsgált lepkék egy része a kis és közepes dózisu ionizáló sugárzásra érzékeny. Több mint 400 gyapjaslepkén végzett kísérletek

eredményei alapján megállapítást nyert, hogy a besugárzott lepkéknek mind a bebábozódási ideje, mind a bábok kikelésének ideje szignifikánsan erősebben szór, mint a be nem sugárzott lepkéké. Ez azt jelenti, hogy a besugárzott petékből lett hernyók egy része jóval később bábozódik, mint a többiek, és hasonlóan a besugárzott petékből származó bábok egy része számottevően később lesz lepkévé, mint a többiek.

Nukleáris mérés technika fejlesztése

Az MTA EK tagja lett az EURATOM 7. keretprogramjának részeként szervezett OPERRA (Open Project for the European Radiation Research Area) nemzetközi konzorciumnak. Az Európai Unió által finanszírozott CATHYARA (Child and Adult Thyroid Monitoring After Reactor Accident) kutatási projekt fő célja egy nagyobb radioaktív kibocsátással járó baleset által okozott belső sugárterhelés mérési módszereinek kidolgozása, különös tekintettel a jódizotópok által gyermekekben okozott pajzsmirigydózis pontos meghatározására. Ennek keretében mérőrendszerek közös kalibrálására alkalmas fantomok készültek, az ezekkel végzett körmérés eredményeinek értékelése folyamatban van.

Az Európai Neutronkutató Központtal (ESS) való együttműködés keretében a bór-karbid alapú neutrondetektorok fejlesztéséhez felépítettek egy fizikai modellt. Monte Carlo szimulációval átfogó képet adtak e detektorok elemeinek neutron sugárzás hatására történő felaktiválódásáról, valamint felépítettek egy rugalmas és jól adaptálható detektormodellt a detektoron belüli neutron-szórás detektorválasz-jelre gyakorolt hatásának meghatározására. A modellt alkalmazva az ILL és az ESS által közösen fejlesztett Multi-Grid detektor eddig megépített prototípusaira, sikeresen reprodukálták kvalitatíve az SNS-beli CNCS, valamint az ILL-beli IN6 berendezéseknél mért szórt neutron háttér viselkedését.

Energiatudományi kutatások

A kiégett üzemanyag, a nagyaktivitású és hosszú élettartamú radioaktív hulladékok végleges elhelyezése

A nagyaktivitású hulladékok biztonságos végleges mélygeológiai tárolóban történő elhelyezéséhez megvizsgálták az esetlegesen kioldódó U(VI) és Cs(I) kationok viselkedését a Bodai Aleurolit Formáció geokémiai környezetében. Egy újonnan fejlesztett technika segítségével laboratóriumi körülmények között nyomnyi koncentrációban jelenlévő Cs(I) szorpciós tulajdonságát meghatározták a mikroskálán. A hulladékban százalékos koncentrációban jelenlévő U(VI) szorpciós tulajdonságainak vizsgálatánál mikro-XRF/XRD mérésekkel bizonyították, hogy az ankerit az agyag mellett szerepet játszik az U(VI) megkötésében.

A nagyaktivitású hulladékok kondicionálására kifejlesztettek az eddig ismert összetételekhez képest, egy egyszerűbb, gazdaságosabb körülmények között előállítható boroszilikát mátrix-üveget. Meghatározták azt a mátrix/hulladék arányt ahol még stabil szerkezetünk van. Hulladékként UO_3 -ot használtak. Az előállított mintasorozatot neutrondiffrakciós módszerrel vizsgálták, valamint a Reverse Monte Carlo szimulációs programot alkalmazva meghatározták az összetételük atomi méretű struktúráját. Az eredmények azt mutatják, hogy a mátrix-üveg 40s% UO_3 -at tud stabilan megkötni az üvegmátrixban.

Energiatérkép

A csoport munkatársai részt vettek az „Energia térkép (E-térkép)” projektben, ennek célja egy olyan országos „energiatérkép” létrehozása, amely alapot nyújt a 2014-2020-as programozási időszak forrásfelhasználás-tervezési, és végrehajtási munkáihoz. Önálló módszertan kidolgozása után felmérték különböző megújuló energiaforrások (nap-, szél-, vízenergia, biomassza, geotermia) kistérségi potenciálját az Energiatérkép projekthez, illetve

összehasonlították ezeket az értékeket Magyarország Megújuló Energia Nemzeti Cselekvési Tervének irányzámaival. Az összehasonlítás eredményeként megállapítható, hogy az NCST-ben vázolt tervekhez képest jelentős hangsúlyeltolódásra van szükség az egyes megújuló energiaforrások hasznosításának aránya között, ha Magyarország a tervben kitűzött célszámokat határidőig teljesíteni kívánja.

Napenergia-hasznosítás optimalizálása

A kutatás célja a magyarországi viszonyok között lehetséges maximális napenergia-hasznosítás útjának meghatározása, fotovillamos és kollektoros hasznosítás révén. Mivel az ország épületállományának mindössze 1-2%-a cserélődik évente, a régi épületek energiahatékonyságának növelése kiemelt fontosságot élvez. A kutatási módszertant két fő adatbázisra alapozták, ezek az EPBD direktívára alapozott Nemzeti Épületenergetikai Stratégiához használt épülettípológiák, illetve a járási szintű napenergia-potenciál értékek. (A két adatbázis felépítésében a csoport részt vett.) A fotovillamos, illetve kollektoros hasznosítás közötti döntés támogatására a KSH-tól rendelkezésre álló adatokat is felhasználták, míg a folyamat fő bemenetét a maximálisan hasznosítható primer energia mennyisége, a háztartások melegvíz- és villamosenergia-igénye, illetve a havi becsült termelés nagysága adta. A kutatás eredményei rámutattak arra, hogy az erősen urbanizált települések épületállománya kevésbé alkalmas magas primer energia kiváltás elérésére, ugyanis a társasházak és lakótelepi épületek tetőfelülete kis mennyiségű lokális energia-termelést tesz lehetővé. Igazolást nyert továbbá, hogy a jelenlegi regulációs környezetben Magyarország gyakorlatilag összes járásában kedvezőbb eredmények érhetők el, ha a napenergiát villamosenergia-termelésre hasznosítják.

Energia és környezetkímélő sugárkémiai kutatások

Új, energiakímélő eljárások alkalmazása a szennyvízkezelésben, vízben oldott szerves szennyezők lebontása nagyenergiájú sugárzással

Egy szulfonamid típusú antibiotikum, a szulfametoxazol (SMX) biodegradálhatóságának, valamint ökotoxicitásának nagyenergiájú, ionizáló sugárzás hatására bekövetkező változását követték nyomon, híg vizes oldatban. A biodegradálhatóságot az 5 napos biológiai oxigénigény (BOI5) mérésével jellemezték, 0,1 mmol dm⁻³ koncentrációjú SMX oldatban. A besugárzás hatására a biodegradálhatóság már 0,4 kGy elnyelt dózis hatására javult a besugározatlan mintához képest. A dózis növelésével a BOI5 tovább növekedett, jelezve a biológiailag nem lebontható SMX átalakulását biodegradálható vegyületté. 2,5 kGy elnyelt dózis hatására a BOI5/KOI (kémiai oxigénigény) érték 0-ról 0,16-ra nőtt, miközben a teljes szerves széntartalom csak 15%-ot csökkent. Ez azt jelzi, hogy a mineralizáció nem feltétele a biológiai lebonthatóságnak. A toxicitás kissé növekedett besugárzás közben, amit nagy valószínűséggel főleg a keletkező H₂O₂ okozott. Az eredmények alapján azt a következtetést vonták le, hogy kis dózis alkalmazása ajánlott, mivel a biodegradálhatóság ilyen körülmények között megfelelő és a dózis növelésének hátrányos következményei is vannak.

Penicillin típusú antibiotikumok (amoxicillin, ampicillin, cloxacillin) esetében azt tanulmányozták, hogy az antibakteriális aktivitásukért felelős β -laktám gyűrű felbomlik-e a sugárzásos kezelés hatására, azaz megszűnik-e az antibakteriális aktivitás. A kémiai vizsgálatok alapján a β -laktám farmakofór felbontása OH-gyökkel versenyben van az aromás gyűrűvel való reakcióval. A hidroxilgyök több helyen is megtámadja a penicillin molekulát, miközben OH szubsztituált termékek keletkeznek. Követték az akut, illetve krónikus toxicitás változását *Vibrio fischeri* lumineszcens baktériumok segítségével, valamint az antimikrobiális aktivitás változását Gram-pozitív és Gram-negatív baktériumok bevonásával. A vizsgálat kis dózisoknál mind az akut toxicitás, mind az antibakteriális aktivitás növekedését mutatta.

2 kGy körüli dózisonál a toxicitás erősen lecsökkent és az antimikrobiális aktivitás is csökkenő tendenciát mutatott. Az itt kapott eredmények – hasonlóan a szulfonamid típusú antibiotikumok esetében tapasztaltakkal – azt jelzik, hogy a sugárzásos lebontás folyamata igen gondos optimalizálást igényel.

Polimerek módosítása sugárzásos ojtással

CMC (karboximetil-cellulóz) és keményítő különböző arányú keverékéből állítottak elő jó vízfelvevő képességgel rendelkező polimer géleket. A keverékek vizes oldatát nagyenergiájú sugárzással besugározták, így biodegradálható, környezetbarát szuperabszorbenseket kaptak. A keményítő már kis arányban (5%) jelentős növekedést eredményezett a gélesedési arányban a tiszta CMC gélekhez képest, illetve a vízfelvevő képességet is nagymértékben javította (kb. 50 g víz/ggél értékkel). A keményítő mennyiségének változtatása emellett lehetőséget biztosított a szuperabszorbensek rezponzív viselkedésének befolyásolására.

Energiatakarékos, környezetkímélő és gazdaságosságot elősegítő felületkémiai és katalitikus kutatások

A metán szén-dioxidos (üvegházhatású gázok) reformálása szintézisgázzá

A száraz reformálás ($\text{CH}_4 + \text{CO}_2 \rightleftharpoons 2 \text{CO} + 2 \text{H}_2$) során keletkező szénlerakódásoknak ellenálló, hordozós nikkell katalizátorok fejlesztése és vizsgálata 2016-ban is folytatódott. A szénlerakódásoknak ellenálló katalizátorokat a hordozó felületén diszpergált nikkell nanorészecskék szelektív módosításával kívánták előállítani. A módosítás egy második fém hozzáadásával (indium) vagy alkálifém-adalékolással (nátrium) történt. A szilícium-dioxid hordozóra vitt Ni-In katalizátorokat konvencionális módszerekkel állították elő. A két fém kölcsönhatására több vizsgálati módszer (hőmérséklet programozott redukció, szénmonoxid termodeszorpció, röntgen-fotoelektron spektroszkópia) eredménye utal. Az átáramlásos katalitikus tesztek, biogáz modellező, nagy metán tartalmú gázelegyben hajtották végre. Ezek azt mutatták, hogy az egyfémű Ni katalizátorokkal ellentétben, az In tartalmú katalizátorokon nem képződik szénlerakódás. Ez azzal magyarázható, hogy az In atomok a Ni nanorészecskék felületén vannak feldúsulva, és blokkolják a szénképződésben aktív helyeket, továbbá lehetséges, hogy a szén-dioxid oxidáló hatására indium-szuboxid (In_xO) keletkezhet a felületen, ami szintén meggátolja a dezaktiváló szénfeleségek (nanocsövek, grafitos szénburok) keletkezését.

A ZrO_2 -hordozós Ni katalizátorokhoz promotorként adott 0,6 tömeg% Na_2O optimális eloszlása és a megfelelő Ni részecskeméret nagy katalitikus aktivitáshoz, de csökkent metán disszociációs sebességhez és reaktív, könnyen eltávolítható szénlerakódáshoz vezetett a zárt cirkulációs rendszerben izotópjelzéssel ($^{13}\text{CO}_2$) végzett tesztek alapján. Ezt azzal magyarázták, hogy a reakció során 600 °C-on a Na_2O adalék Na_2CO_3 formában van jelen a ZrO_2 mátrix felületén a Ni/Ni(OH)₂ részecskék mentén, annak dinamikus bomlása és újraképződése folytán – a reagáló CO_2 miatt – egy oxigén rezervoárt képezve a reakcióban keletkező szén eltávolítja a fémrészecske aktív helyeitől, így a katalizátor aktív marad hosszú távon is. Ha a Na_2O promotort Ni felvitele előtt adták ZrO_2 hordozóhoz, eltérő katalitikus viselkedést és szénképződési hajlamot tapasztaltak, megerősítve az eredeti szintézismódszer jelentőségét, amellyel lokalizált Na_2O -promoveálás érhető el. Ennek alapján előállítottak Ni-Pt- $\text{Na}_2\text{O}/\text{ZrO}_2$ rendszereket is, és megkezdték vizsgálatukat.

Aranytartalmú kétfémű katalizátorok alkoholok szelektív oxidációjában történt tanulmányozása keretében megállapították, hogy Au/M=1/1 tömbi atomarányú alumínium oxid hordozós rendszerekben a második fém (M: Cu, Ag, Ru, Ir) hozzáadása Cu esetén

növelte az Au/Al₂O₃ aktivitását a benzil-alkohol (BzOH) oxigénnel – bázis hozzáadás nélkül – végzett szelektív oxidációjában, a többi esetben viszont különböző mértékben csökkentette.

A megegyező Au-tartalomra vonatkoztatott aktivitássorrend:

AuCu/Al₂O₃>Au/Al₂O₃>AuRu/Al₂O₃>AuIr/Al₂O₃>>AuAg/Al₂O₃ = 0. Mindegyik katalizátor erősen dezaktiválódott a reakció során. A második fémek hasonlóan előállított egyfémű katalizátorként elhanyagolható aktivitást mutattak, vagy inaktívak voltak az alkalmazott reakció körülmények között (0,1M BzOH toluolban, 80⁰C, M/S=1/2000). K₂CO₃ reakcióelegyhez adásával a katalizátor mérgeződése kiküszöbölhető volt, az egyfémű Au és a kétfémű katalizátorok aktivitása jelentősen nőtt, kivéve az AuAg/Al₂O₃ mintát, ami továbbra is inaktív maradt. Az AuRu és AuIr esetén kb. 10 perces indukciós periódus volt tapasztalható, ezt követően az AuRu/Al₂O₃ Au tartalomra vonatkoztatott aktivitása meghaladta Au/Al₂O₃-ét. AuCu/Al₂O₃ esetén a K₂CO₃ jelenléte csökkentette a bázismentes reakcióelegyben tapasztalt szinergikus hatást. Az AuAg kétfémű rendszerben az Ag koncentráció csökkentése megnövelte a katalitikus aktivitást, az Au/Ag=4/1 atomarányú AuAg/Al₂O₃ aktivitása elérte az azonos aranytartalmú Au/Al₂O₃ aktivitását a bázis hozzáadásával végzett BzOH oxidációban. Együtműködés keretében milánói kollégák glicerinnel szelektív oxidációjában jelentős szinergikus aktivitásnövekedést tapasztaltak ezen a katalizátoron. Szerkezetvizsgálatokat végeztek a kétfémű hatás háttérében álló struktúrák felderítésére. TEM mérések szerint az Au tartalmú részecskék jellemző méretei az egyfémű Au és kétfémű AuCu, AuAg mintákban 2-3 nm, az AuRu és AuIr katalizátorokban 4-5 ill. 5-6 nm voltak. Kétfémű részecskék jelenlétét közvetetten mutatták az arany eltolódott SPR sávjai a látható-UV spektrumokban, a második fém megváltozott hőmérséklet programozott redukciós (TPR) tulajdonságai és az oxidatív előkezelést követően aranyon adszorbeált CO rezgési sávjának az Au elektronhiányosabb állapotát mutató eltolódása, illetve közvetlenül igazolták az egyes részecskéken végzett nagyfeloldású EDS mérések. Az egyes részecskék összetétele jól közelítette a tömbi M/Au atomarányt, kivéve az AuCu mintákat, amelyekben az 15/85 volt az 1/1 tömbi aránnyal szemben. A katalizátorok felületi összetételét CO adszorpcióval vizsgálták különböző előkezelések után, ami nagy eltéréseket mutatott a CO-t adszorbeáló Au koncentrációjában és jól korrelált a BzOH oxidációs katalitikus aktivitással. Az eredményekből azt a következtetést vonták le, hogy a kétfémű hatásban a második fém minősége mellett meghatározó jelentőségű a részecskék szerkezete.

A víz elektrolízisével nyerhető hidrogén a megújuló villamos energia kémiai tárolásának egyik legvonzóbb alternatívája. Az elektrolízis anódos félcella-reakciója, a dioxigén termelő reakció: 2H₂O(f) → O₂(g) + 4H⁺(aq) + 4e⁻ (E⁰ = 1,23 V) katalitikus gyorsítása továbbra is a kutatások homlokterében áll. A nagyobb léptékű vízbontás megvalósításához szükséges, hogy az Ir és Ru helyett gyakoribb és olcsóbb átmeneti fémeket is tanulmányozzanak, alkalmazzanak. Éppen ezért céljuk továbbra is az első sorbeli átmenetifémek komplexeinek tanulmányozása, működési mechanizmusuk megértése, felületi rögzítésük kidolgozása, ezáltal e fémek (elsősorban a réz) sikeresebb alkalmazása. Kutatásaik távlati célja a látható fényt elnyelő fényérzékenyítők kombinálása katalitikus rendszereikkel, amely megfelelő szerkezeti kapcsolóelemet (pl. oldallánc funkció, vagy H-híd donor hely) tartalmaz. Az oxigéntermelő reakcióban dokumentált katalitikus hatással bíró réz(II)komplexeiket rögzítettek indium-ón-oxid (ITO) félvezető felületen polielektrolitokkal. Eredményeiket a *Chemical Science* folyóiratban közzétették. Optikai hullámvezető fénymódus spektroszkópia (OWLS) segítségével vizsgálták a réteg a rétegen (layer-by-layer, LbL) módszerrel létrehozott Cu-peptid/polielektrolit/foszfát vegyes rétegek kialakulásának kinetikáját. Az atomerő mikroszkópiai kép alapján nanopórusos rétegek megnövelték az ITO elektród oxigéntermelő képességét, miközben a rögzített réztartalom jelentős hányada komplex formában a felületen maradt. Utóbbit röntgenfotoelektron spektroszkópiai (XPS) vizsgálatok erősítették meg. A növekmény hasonló arányt mutatott a komplexekkel homogén oldatban mérthez, s kiderült,

hogy a rézhez koordinált hisztidin jelenléte a felületen való rögzítés után is kimutatható, hatása ugyanúgy kedvező, mint homogén oldatban. Krono-amperometriával kombinált OWLS (EC-OWLS) segítségével *operando* követték a felületi koncentráció időbeli változását katalízis során. A kezdeti felületi koncentráció és a katalízis túlfeszültségének megváltozása arra utal, hogy a rögzített komplexek szerkezete megváltozik működés közben, feltehetőleg új donor csoport lép be a koordinációs övezetbe.

Nagyszámú réz(II)komplex összehasonlításáról elemző cikket közöltek, melynek témája a túlnyomó részben peptidkomplexek $\text{Cu}^{3+/2+}$ redoxi tulajdonságai, bruttó stabilitási állandója és szerkezete közötti összefüggések kiértékelése. A potenciális katalitikus alkalmazásokat tekintve, pl. oxigéntermelő, vagy épp szerves oxigénezési reakciókban, ez alapvető fontosságú az aktív formáig tartó lépések tisztázásához.

2016-tól kezdődően a vizsgálatokat kiterjesztették a hidrogéntermelő (katódos) reakció lehetséges katalizátoraira is. A korábbi években a MoS_2 kéntelenítési reakcióban való alkalmazása terén szerzett tapasztalatokra alapoztak, amikor grafit lapra (HOPG) növesztett 2D- MoS_2 réteg elektrokémiai tulajdonságait (elsősorban ciklikus voltametria és krono-amperometria segítségével) és felületi hibahelyek kialakulásának és ezek regenerálásának lehetőségeit vizsgálták. A vízbontás vizsgálatára 0,5 mol H_2SO_4 elektrolit oldatot elektrolizáltak. Munkájuk során 3-5 nm méretű Pt nanokristályokat sikerült a MoS_2 felületére vinni *in situ* elektrodepozícióval. Ezek a felületi nano Pt szemcsék nagyságrenddel megnövelték a H_2 képződés mértékét. Az elektrolízis során a MoS_2 tartalom jelentősen erodálódott. A MoS_2 rétegeken kialakuló két hiányhelyeket sikeresen újra szulfidálták, ám a teljesen eloxidálódott MoS_2 (jelen esetben már MoO_2) reszulfidálásakor nem kapták vissza az eredeti vékonyréteg szerkezetet.

Megjelentettek egy közleményt az SH projekt (SH7/2/14, Svájci-Magyar kooperációs projekt) keretében végzett kutatások eredményeiről. A közleményben a dimetil-formamid, illetve a paracetamol tartalmú modell szennyvizek katalitikus nedves oxidációját tárgyalták, ami szerint a monolit titán hálóra felvitt ruténiumoxid katalizátorok jó aktivitásúaknak és ígéretes stabilitásúaknak bizonyultak mindkét szubsztrátum lebontásában.

Rozsdamentes acél (AISI 321) elektrokémiai viselkedésének ionizáló sugárzás hatására bekövetkező változását vizsgálták. Elektron kilépési munkát mértek proton és Ar^+ ion besugárzást követően, atmoszférikus körülmények között, Kelvin próba segítségével. Úgy találták, hogy az Ar^+ ionok hatásra csökken, a protonok hatásra növekszik a kilépési munka; az előbbi tehát csökkenti, az utóbbi növeli az acél korróziós stabilitását. Az eltérést a kétféle sugárzás eltérő behatolási mélységével hozták összefüggésbe, és ennek az elképzelésnek az alapján értelmezték a Lang-Kohn elmélet segítségével az eredményeiket. Számításaik szerint mindkét sugárzás mintegy 7% duzzadást okoz a mintának a sugárzást elnyelő tartományában.

b) Tudomány és társadalom

A Budapesti Neutron Centrum kiemelt szekcióban mutatkozott be az Őszi Radiokémiai Napokon, illetve a HUNGEXPO Budapesti Vásárközpont területén az Automotive Hungary 2016 autóiipari beszállítói kiállításon <http://www.bnc.hu/?q=node/138>.

Középiskolai és a BME Energetikai Szakkollégium diákjainak reaktor látogatását bonyolították le.

Az MTVA Minden Tudás c. műsorában bemutatták a PGAA labort és szerepét a bronzkori tárgyak archeometriai kutatásában, amely a Nemzeti Audiovizuális Archívumban megtekinthető <http://nava.hu/id/3082432/>.

Nyilvános pódium-vitát szerveztek Szeged város polgárainak – a Fizikus Vándorgyűlés keretében – „Energiánk és környezetünk” címmel az SZTE Fizikai Intézetének Budó Ágoston

termében. Az előadásokat az MTA KÖTEB Energetika és Környezet albizottságának tagjai adták elő.

Aeroszol gyógyszerek légúti kiülepedése és hatása témakörben bemutató-népszerűsítő előadásokat tartottak több orvosi konferencián.

A megújuló energia csoport tagjai a SZIE Ybl Miklós Építéstudományi Kar Tervező Építészmérnök MSc hallgatók bevonásával felméréseket készítettek a KFKI Campus több épületére, majd energetikai és építészeti felújítási javaslatokat állítottak össze. A hallgatók által készített munkák makettjei az MTA EK épületeiben kiállításra kerültek.

Egyik munkatársuk a fő szervezője a nagy sikerű "A fizika mindenkié" című országos, a tudományt és ezen belül a fizikát népszerűsítő programsorozatnak, melyet az ELFT koordinált és az MTA EK is támogatta. A program részleteiről az alábbi linkeken lehet további információt szerezni:

<http://www.innoportal.hu/a-tudomanyt-nepszerusiti-a-fizika-mindenkie-sorozat>

https://www.youtube.com/watch?v=OZWf_5d1oUg

<http://nol.hu/tud-tech/a-fizika-mindenkie-1527735>

Ismeretterjesztő előadásokat tartottak a Semmelweis Egyetemen, a Hegyvidéki kulturális szalonban és a Simonyi 100 emlékülésen.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A *Nukleáris analitikai és radiográfiai laboratórium* az OAH-val és a SZIKKTI-vel együttműködésben kutatásokat kezdett az energetikai reaktorok tartálya közelében alkalmazható betonokra vonatkozó összetétel és aktiválódás kritériumok meghatározására.

Külföldi és hazai napelem és üvegfeldolgozó ipari felhasználók részére méréseket végeztek.

A SINE 2020 EU projekttel összefüggésben az Autopro.hu on-line magazinban (<http://autopro.hu/szolgaltatok/Neutronvizsgalat-uttoro-technologia-a-jarmugyartas-szolgالاتaban/20763/>) ismeretterjesztő publikációt jelentettek meg a neutronos módszerek autóipari alkalmazhatóságáról, a Wigner FK munkatársaival közösen.

Együttműködést kezdtek a Hadtörténeti Múzeum munkatársaival, mely keretében késő bronzkori pajzsokat, dárdahegyeket, kardokat és sisakokat vizsgáltak, lehetővé téve több korábban külön kezelt fragmens azonosítását, egyesítését és az eszköz részbeni rekonstruálását.

Kapcsolatot alakítottak ki a Dalian Institute of Chemical Physics (DICP) kutatóival Mössbauer spektroszkópia témakörében.

A *Környezetfizikai Laboratórium* részt vesz a CONCERT integrált EU projektben, melynek fő célja az európai sugárvédelmi kutatások összehangolása. Ennek érdekében harmonizálja négy európai kutatási platform, illetve az egyes tagországok sugárvédelemmel kapcsolatos kutatási stratégiáit és prioritásait. Ezek alapján kutatási pályázatokat ír ki, illetve támogat.

Az Európai Unió kis dózissal foglalkozó platformjának (MELODI) tiztagú stratégiai kutatási bizottságát 2016-ban újraválasztották és az új bizottságba ismét bekerült a Környezetfizikai Laboratórium egyik munkatársa.

A COST projektben történő részvételnek köszönhetően intenzív szakmai kapcsolat alakult ki és áll fenn a Brnói Műszaki Egyetemen és a Pármai Egyetemen.

Az OECD nukleáris Energetikai Ügynöksége számára igényoldali felmérést készítettek az új paksi blokkok fűtési hasznosítására és megtérülési számításokat végeztek nettó jelenérték alapon.

A *Sugárhatáskémiai Laboratórium* nemzetközi kapcsolatai is kiterjedtek, amelyek elsősorban a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség közvetítésével jöttek létre. Együttműködő partnereik (mintegy 20 országban) közt van a kínai Tsinghua University, Beijing, a török Turkish Atomic Energy Authority, Ankara, valamint a koreai EBTech, Daejeon.

A *Felületkémiai és Katalízis Laboratórium* munkatársai kapcsolatban állnak a BME kutatóival savasság mérés témakörben. Új kapcsolatot hoztak létre Dalian Institute of Chemical Physics (DICP) kutatóival nano részecskés katalitikus vizsgálatainak a témájában.

ESTEEM2 projekt felhasználói programjában támogatást nyertek katalizátor nano-részecskéi elemeloszlásának vizsgálatára nagy felbontású elektronmikroszkópiával a TU Graz egyetemen.

A CERIC-ERIC projekt felhasználói programjában támogatást nyertek a prágai Károly Egyetem Felület Fizika csoportjának NAP-XPS berendezésénél katalizátorkarakterizálási mérésekre.

Oktatási tevékenység:

A BNC keretében, előadások és laborgyakorlatok tartásával, részt vettek a 2016-os Közép Európai Neutron Iskola (CETS) lebonyolításában.

A NAL munkatársai kurzust tartottak az ELTE TTK-n, geológus és archeometria szakos MSc és PhD hallgatóknak, nukleáris elemanalitikai módszerek és alkalmazásai a földtudományi és archeometriai kutatásokban II címmel. A tárgyhoz az interneten is hozzáférhető segédanyagokat, előadásokat, jegyzeteket továbbfejlesztették (<http://energia.mta.hu/hu/ELTE-NEMA>). Egy ELTE Kémia MSc hallgató diplomamunkát és egy BME-s diák TDK dolgozatot készített a laboratóriumban. Három fiatal kutató PhD munkáján dolgozik. BME és ELTE MSc hallgatóknak tartottak laborgyakorlatot az év folyamán (összesen kb. 100 fő). A Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) által delegált malajziai vendégkutatót fogadtak három hónapra, illetve 2 marokkói kollégát 1-1 hétre. Az EUROFUSION RadEFF képzési program keretében két posztdoktor kutatót fogadtak, 1 ill. 3 hét időtartamra.

A sugárhatáskémia területén dolgozó kutatók oktatási tevékenységet végeztek a BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Karán, az ELTE-n, és az Óbudai Egyetemen sugárkémia, anyagtudomány, környezetvédelem, és víztisztítás témakörökben.

Az FKKL több kutatója vett részt a BME oktatási tevékenységében laborgyakorlatok vezetésével. 4 PhD hallgató dolgozik a témáján a laboratóriumban a munkatársak témavezetésével.

Egy BME-s diák 2 hónapos szakmai gyakorlatát a laboratóriumban végezte.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai nyertes pályázatok

– Együttműködnek az Országos Atomenergia Hivatallal, illetve a Nemzetközi Atomenergia Ügynökséggel, melynek eredményeképpen kutatási szerződéseket nyertek el a későneutron számláláson alapuló uránmeghatározás, illetve a gamma erősségfüggvények témájában.

– A 2016 decemberében megítélt NVKP_16-1-2016-0014 számú „Az atomerőművekben használt cirkónium ötvözetek anyagszerkezeti változásainak hatása a fűtőelemek épségére és a környezeti terhelésre" című VEKOP pályázathoz az intézet roncsolásmentes anyagvizsgálati technikákkal járul hozzá a 2017-19 időszakban.

– Posztdoktori kiválósági programban pályázatot nyertek nanokompozitok előállítása és alkalmazása fotoszintézis témában.

Nemzetközi nyertes pályázatok

- Részt vesznek a 2016-ban indult H2020 E-RIHS (European Research Infrastructure for Heritage Science) Preparatory Phase projektben, melynek célja egy kulturális örökség témájú ERIC megszervezése. A projekt hazai vezetője az MTA Atomki.
- Immár teljes jogú partner infrastruktúráként vesznek részt a CERIC-ERIC konzorcium munkájában.
- A 2016-os évben csatlakoztak a SimInhale nevű Európai Unió COST projekthez, melynek jelenleg 24 tagországa van. A projekt fő célja, hogy létrehozzon és fenntartsa egy európai szintű multidiszciplináris kutatói hálózatot, amely összefogja és előremozdítja az aeroszol gyógyszerekhez kötődő kutatás-fejlesztési tevékenységeket.
- Kétoldalú nemzetközi egyezményen alapuló MTA-CNR (olasz) közös kutatási projekttel nyertek mobilitási támogatást a 2016-2018 időszakra a benzil-alkohol és glicerin szelektív katalitikus oxidációjának vizsgálatára.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szentmiklósi L, Kasztovszky Zs, Belgya T, Révay Zs, Kis Z, Maróti B, Gméling K, Szilágyi V: Fifteen years of success: user access programs at the Budapest prompt-gamma activation analysis laboratory. *J. Radioanal Nucl. Ch.*, 309: 71 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1007/s10967-016-4774-9>
2. Kuzmann E, Csapó E, Stichleutner S, Garg VK, de Oliveira AC, da Silva SW, Sing LH, Pati SS, Guimaraes EM, Lengyel A, Dékány I, Lázár K: Fine structure of gold nanoparticles stabilized by buthlydithiol: Species identified by Mössbauer spectroscopy. *Colloid Surface A*, 504: 260 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.colsurfa.2016.05.088>
3. Szabó L, Tóth T, Engelhardt T, Racz G, Mohacsi-Farkas Cs, Takács E, Wojnárovits L: Change in hydrophilicity of penicillins during advanced oxidation by radiolytically generated •OH compromises the elimination of selective pressure on bacterial strains. *Science of the Total Environment*, 551-552: 393-403 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.02.002>
4. Wojnárovits L, Takács E: Radiation induced degradation of organic pollutants in waters and wastewaters. *Top. Curr. Chem.*, 374:(4) artn. 50: 1-35 (2016) (DOI: 10.1007/s41061-016-0050-2) <http://dx.doi.org/10.1007/s41061-016-0050-2>
5. Farkas E, Sranko D, Kerner Zs, Setner B, Szewczuk Z, Malinka W, Horvath R, Szyrwiel L, Pap JS: Self-assembled, nanostructured coatings for water oxidation by alternating deposition of Cu-branched peptide electrocatalysts and polyelectrolytes. *Chemical Science*, 7: 5249-5259 (2016) <http://dx.doi.org/10.1039/C6SC00595K>
6. Szabados E, Srankó DF, Somodi F, Maróti B, Kemény S, Tungler A: Wet oxidation of dimethylformamide via designed experiments approach studied with Ru and Ir containing Ti mesh monolith catalysts. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 34: 405-414 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.jiec.2015.12.019>
7. Kéri A, Osán J, Fábián M, Dähn R, Török Sz: Combined X-ray microanalytical study of the Nd uptake capability of argillaceous rocks. *X-ray Spectrometry*, 45: (1) 54-62 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1002/xrs.2656>
8. Hartmann B, Farkas Cs: Energy efficient data centre infrastructure Development of a power loss model. *Energy and Buildings*, 127: 692-699 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.enbuild.2016.06.037>

MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.
telefon: (1) 392 2225; fax: (1) 392 2226; e-mail: pecz.bela@energia.mta.hu
honlap: www.mfa.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA Energiatudományi Kutatóközpont Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet (MTA EK MFA) fő feladata 2016-ban sem változott: kutatások végzése nanoméretű funkcionális anyagokon, feltárva azok fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságait, valamint az ismeretek hasznosítása integrált nano/mikroeszközökben, szenzorokban és roncsolásmentes vizsgálati módszerek fejlesztésében. Fontos feladata a KKV-k és az egyetemi oktatás segítése, a kutatási infrastruktúra felhasználása a felsőoktatás (TDK, BSc, MSc, PhD képzés) támogatására Open Access Laboratory jelleggel.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Mikrotechnológiai Laboratórium

Az osztály fő feladata *multidiszciplináris szenzorkutatás, új érzékelési elveken alapuló funkcionális nano- és mikroérzékelők megvalósítása, validálása és a kapcsolódó technológiák kidolgozása*. A kutatómunka technológiai tisztaterekben, szerelő-, mérő és minősítő laborokban folyik.

EU FP7-es projekt keretében nano- és mikrotechnológiai eljárások kombinálásával vertikális piezoelektromos ZnO nano/mikrokristályokból, nanoszálakból álló tapintásérzékelő mátrixot valósítottak meg, amivel ujjlenyomat rögzítése három dimenzióban valósítható meg a mainál lényegesen nagyobb felbontás mellett.

A nemzetközi ENIAC INCITE projekt keretében a konzorciumi partnerekkel közösen a minimális sebészeti beavatkozást (Minimal Invasive Surgery) lehetővé tévő sebészeti robot fejlesztésében vettek részt. Szilícium alapú 3D erőmérő mikroszenzorokat építettek be a szívsebészeti robot laparoszkópjaiba, ezzel tapintás jellegű információkat lehet a robotot vezérlő sebésznek továbbítani. A Mikrotechnológiai Osztályon kifejlesztett és az orvos-biológiai feladatra módosított piezorezisztív elven működő erőmérő szenzor alkalmazása nagymértékben megnöveli a beavatkozás biztonságát.

NAP B projekt keretében szilícium alapú elektród rendszerekbe mikrooptikai, az infravörös tartományban működő hullámvezető elemeket integráltak, így a klasszikus elektrofiziológiai elvezető és ingerlő funkciók mellett az eszköz terápiás lehetőségként infravörös idegi stimulációra is alkalmas.

Polimer alapú Lab-on-a-chip mikrofluidikai rendszerekben a csatornák belső felületek nedvesítési tulajdonságainak vizsgálatát végezték. Eljárást dolgoztak ki a nedvesítési tulajdonságok és ezáltal a hidrodinamikai jellemzők tudatos alakítására. Az egy csepp vérből valamilyen biomarker kimutatására alkalmas mikrofluidikai rendszer megtervezésére és előállítására az ipari partnerek bevonásával nyílik lehetőség.

Mikrofluidikai orvos-biológiai rendszerekbe szükséges a folyadékban lévő mikro- és nanorészecskék irányított szétválasztása. Hidrodinamikai, vagy mágneses elven működő szeparációs mikrofluidikai rendszereket fejlesztettek ki, valósították meg és hatékonyságukat különféle körülmények között validálták.

Akadémiai támogatással sikeresen szereztek be és telepítettek egy PICOSUN R-200 típusú plazma segített atomi rétegleválasztó berendezést. Az új rendszerben oxidok, fémek, nitridek és szulfidok termikus vagy plazmás leválasztása is lehetséges, ezáltal szélesebb körű anyagtudományi, eszközfejlesztési hazai és nemzetközi kutatási projekteket kezdeményezhetnek.

Vékonyréteg-fizika Laboratórium

Az osztály az anyagtudomány és a vékonyréteg-fizika több egymáshoz szervesen kapcsolódó területén végzett kutatást. Tradicionális kutatási területük a *polikristályos rétegek szerkezetének* kialakulása, a *félvezető rétegek* - azok kontaktusai és a heteroátmenetek. Fontos terület az *ion-szilárdtest* kölcsönhatás, ion mixing rétegekben határfelületeken, a korszerű *kerámiák* és *biokompatibilis* implantátumok fejlesztése. A laboratórium új témája a portechnológiai eljárással előállított *kerámia adalékolt nanoszerkezetű ODS acél*. A különböző szilárdtest-fizikai és anyagtudományi kérdések megválaszolásához főleg transzmissziós elektronmikroszkópiát használnak. Főként elektron diffrakción alapuló *metodikai fejlesztések* segítik a fenti témákat.

A JST-V4 kutatási projekt célja olyan GaN alapú MOS kapcsolótranszisztorok technológiai fejlesztése, amelyek alapállapotban ki vannak kapcsolva, ezzel csökkenthetők a konverziós veszteségek. Kimutatták, hogy alacsony hőmérsékleten (100°C) előállított alumínium oxid ALD rétegek is kristályos szerkezetet mutatnak a GaN/AlGaIn/GaN rétegrendszer felületén, akárcsak a magas hőfokon (600°C) előállított MOCVD rétegek.

A FLAG_ERA projekt keretében ZnO-ot mint 2D anyagot ALD-vel (Atomic Layer Deposition) állítottak elő. A ZnO kristályok már 30 növesztési ciklus után összefüggő (nem szigetes) rétegnövekedést mutatnak. A kristályok és a hordozó között mindig látható egy vékony, 2-5 nm-es amorf Si-oxid réteg.

MTA Posztdoktori projekt és CNR MTA csere projekt keretében Ga₂O₃ széles tiltott sávú (~4,7 eV) félvezető oxid szerkezeti tulajdonságait vizsgálták. Ennek során sikerrel azonosítottak és modelleztek egy κ- Ga₂O₃ fázist, amelyet ebben a formában elsőként állítottak elő a 600°C-on elválasztott rétegben. A 2 órán át 1000°C-on hőkezelt minta teljesen átalakult β-Ga₂O₃-dá, polikristályos, de erősen texturált.

M-ERANET keretében fejlesztettek grafénnal adalékolt kerámia (Si₃N₄, SiC) nanokompozit anyagokat. A kutatás fő célja funkcionális kerámia-grafén nanokompozitok előállítása vizes közegű tribológiai alkalmazásokra. 1-10% adalékolt Si₃N₄ kompozitot állítottak elő, melyet gyors plazmaszintereléssel (SPS), meleg préssel (HP) és meleg izosztikus préssel (HIP) végeztek el.

Kimutatták, hogy a szinterelési módszer befolyásolja a végtermék tulajdonságait. A kiinduló Si₃N₄/3t% többsíkú grafén (MLG) HIP szinterelése nagy sűrűségű (HP) kompozit előállítására alkalmas, a HIP nagy keménységű és az SPS nagy szilárdságú kompozitot eredményez.

Az EU FP7 „HypOrth” projekt keretében különböző bioaktív bevonatokat/rétegeket fejlesztettek kereskedelmi titán implantátumok felületére, hogy elősegítsék a csontosodást és megfékezzék a különböző gyulladások kialakulását. A kiinduló alapanyag tojáshej, melyet

portechológiai eljárással dolgoztak fel. Attritoros őrlés után a nedves szuszpenziót electrospraying segítségével réteg formájában vitték fel az implantátum felületére.

NN OTKA keretében Fe, Ni, Co, Cu, Cr tartalmú ötvözeteket vizsgáltak, amelyben a komponensek aránya lényegében azonos volt. Kimutatták, hogy Nb-ot adagolva a rendszerbe hatodik komponensként, az ötvözet két-komponensű rendszerként viselkedik. A Nb tartalom növekedésével a kristálynövekedés korlátozottá vált, a köbös kristályos szemcsék mérete csökkent és végül amorf szerkezet alakult ki.

Fotonika Laboratórium

A Fotonika Laboratórium feladatai: felületek és *vékonyrétegek kialakítása és roncsolásmentes vizsgálata* nagy felületen, fotonikus és összetett szerkezetekben, folyamatkövető módon; *optikai és mágneses anyagvizsgálati eljárások* fejlesztése az érzékenység növelése és a vizsgálható anyag- és szerkezet típusok kiszélesítése céljából; *önszerveződő felületi nanostruktúrák kialakítása* és spektroszkópiai vizsgálata; valamint *folyadék-szilárd határfelületek folyamatkövető optikai vizsgálata* elsősorban fehérjék és összetett biomolekulák kitapadásának megértése és optimalizálása céljából szenzorikai alkalmazásokhoz.

A 2016-os év néhány fontosabb eredménye:

A mágneses hiszterézis hurkok szisztematikus mérésén alapuló, az utóbbi időben kifejlesztett *Mágneses Adaptív Teszt* (Magnetic Adaptive Testing, MAT) eljárás használatával meghatározták ferromágneses lemezek falvastagságának lokális csökkenését. Megmutatták, hogy a kismértékű vékonyodás megfelelő jel/zaj viszonytal kimutatható a minta hátoldaláról, vagy abban az esetben is, ha azt egy másik lemez fedi.

A Toursi Egyetem (Franciaország) GREMAN nevű kutatócsoportjával szilícium *nanocső szőnyeget* és *mezopórusos szilíciumot* vizsgáltak ellipszometriával és referencia módszerekkel. Megmutatták, hogy megfelelő izotróp, anizotróp és mélységprofilozó effektív közeg módszerekkel a vastagság és tömörség mellett a rétegek szerkezeti inhomogenitásának a jellege is tanulmányozható.

A Reaktor Anyagok Laboratóriummal közös kutatásban meghatározták reaktorok fűtőbetéjeiben használt *cirkónium csövek felületének* és felületi oxidjainak optikai tulajdonságait. Eljárást fejlesztettek ki a kis-átmérőjű csövek fókuszált optikai mérésére és felületi minősítésére.

Megvalósították *arany nanorészecskék* kis-molekulású polietilén glikol (PEG) kolloid kölcsönhatásával triggerelt *klaszterbe szervezését*. A rendeződés a nagy ionerősség és a magas hőmérséklet érzékeny összjátékának köszönhető; a jelenséget a felületre kötött PEG molekulák láncainak összeesésével magyarázták.

A részecskék részleges maszkolásával (spincoating technikával felvitt polimer réteggel) *arany/szilika Janus részecskéket* sikerült létrehozni és egyrészecske spektroszkópiával vizsgálni. Az előállított részecskéken megvizsgálták, hogy a borítottság mértékének változtatása megjelenik-e az egyrészecske spektrumokban. Ehhez korrelatív SEM felvételeket készítettek. A 33 és 50%-os borítottság között 5-7 nm különbséget mutattak ki a szórási maximumok pozíciójában.

Két EU projekt keretében („SEA4KET”, ENIAC-2012-2 “E450DL”) 30, 45-60 és 60-90 cm széles területen valósítottak meg *képalkotó optikai méréseket lyukkamerás ellipszometriai elrendezésben*. A berendezés működését oxidált, NiSi réteggel borított és plazma immerzióval implantált szilícium szeleteken demonstrálták egy tisztatérben működő robottal.

Nanobioszenzorika Lendület Kutatócsoport

A Nanobioszenzorika Lendület Kutatócsoport 2012-ben jött létre az MTA „Lendület” pályázat keretében. A csoport profiljába tartozik a jelölésmentes optikai bioszenzorok fejlesztése és alkalmazási területeinek bővítése, a biológiai, biofizikai folyamatok matematikai modellezése, funkcionális bevonatok kutatása és fejlesztése, valamint adhéziós és szignalizációs kísérletek végzése.

A Byosens és a Corning cégekkel együttműködésben kézi műszert fejlesztettek. Az új berendezés kialakítása lehetővé teszi a már használatos kísérleti eszközökbe (pl. inkubátorokba vagy folyadékadagoló rendszerekbe) történő integrációt, és ennek révén a jelölésmentes detektálás alkalmazási köre jelentősen bővíthető.

Az ellipszometriai kutatócsoporttal együttműködve egy újfajta mérési elrendezést fejlesztettek ki, melynek segítségével párhuzamos *in situ* méréseket lehet végezni két különböző felületen, azonos körülmények között. Az új mérési összeállításban egy folyadékcellát egy félhengeres optikai lencsével együtt alkalmaztak Kretschmann-féle elrendezésben, amellyel több beesési szögű, több hullámhosszú, belső visszaverődésű, plazmon gerjesztéses spektroszkópiai ellipszometriai vizsgálatokat végeztek.

Elsőként mutatták meg, hogy a vad típusú és RGD-motívumot kifejező flagellin variánsok segítségével olyan bevonatokat tudtak létrehozni, melyekkel befolyásolható a sejtadhézió. Az adatok azt mutatták, hogy stabil, orientált monoréteget alkotnak a fehérjék.

Bemutatták, hogy a flagellin fehérje polielektrolit rétegekbe ágyazható, és megfelelő pozitívan töltött polielektrolit felhasználásával indukálható a filamentumok képződése.

Bevezettek egy új módszert a felületi bevonatokban lévő fehérjék pontos számolására. Az általuk bevezetett módszer rendkívül egyszerű, és csak standard fluoreszcens mikroszkópot igényel.

Primer humán monociták, *in vitro* differenciáltatott makrofágok és dendritikus sejtek adhézióját a nagy áteresztőképességű Epic BenchTop jelölésmentes optikai bioszenzorral vizsgálták. A sejtkitapadási folyamat időbeli lefolyását monitorozva kiderült, hogy ezen immunsejtek (de leginkább a monociták és dendritikus sejtek) adhéziója nem triviális kinetikát követ. A kinetikai monitorozás fontosságára a nem monoton bioszenzor-görbék világítottak rá: az immunsejtek komplexebb adhéziós viselkedést mutattak, mint a korábban vizsgált sejt típusok.

Kifejlesztettek egy új eljárást, mely képes automatikusan izolálni egyedi sejteket szuszpenzióból, anélkül, hogy a sejteket a felülethez rögzítenék. Egy egyszerű 3D nyomtatót használtak ahhoz, hogy miniatűr „multi-wellplate”-et építsenek a Petri csészékbe. Ez az egyszerű technika minimális minta-előkészítést igényel, és gyakorlatilag bármilyen szöveti sejt típus esetén alkalmazható.

Nanoszerkezetek Laboratórium

Az osztály kutatásainak fókuszában a *kétdimenziós (2D) anyagok* állnak. Kutatásaik kiterjednek ezek előállításától az *atomi felbontású karakterizáláson és megmunkáláson* keresztül, a kialakított 2D nanoszerkezetek tulajdonságainak vizsgálatáig. A *grafén* kutatás mellett egyre nagyobb hangsúlyt fektettek a *2D átmenetifém dikalkogenid kristályok* előállítására, valamint szerkezetük és tulajdonságaik vizsgálatára. Az osztályon továbbra is fontos szerepet kap a biológiai eredetű és *bioinspirált fotonikus nanoarchitektúrák* kutatása.

A Lendület pályázat keretében, atomi felbontású STM mérések segítségével először sikerült atomi szinten nyomon követni a 2D MoS₂ kristályok levegőn történő oxidációját. Kimutatták, hogy több hónapos időskálán az oxidáció egyedi atomi szubsztitúcióként zajlik, amely során a S atomokat O atomok helyettesítik.

Az ERC Starting Grant projekt keretében, kidolgozták egy olyan nanoelektronikai eszköz működési elvét, amely a cikk-cakk grafén nanoszalagok élein kialakuló mágneses rendet kihasználva, egy egyszerű tranzisztor konfigurációban, egyszerre képes a töltés és a spin manipulációjára.

A Koreai-Magyar Közös Nanolabor keretében, arany felületén elhelyezett grafén rétegben kialakuló különleges szuperrácsot figyeltek meg STM mérések segítségével. Ennek értelmezéséhez molekuladinamikai szimulációkat végeztek, amelyek a kristályszerkezet jelentős torzulásával magyarázni tudták az észlelt grafén szuperrács szerkezetét.

A Graphene Flagship keretében 3D nyomtatással előállított többrétegű grafén / polimer kompozitok mikrohullám elnyelési tulajdonságait vizsgálták és optimalizálták.

EU FP7 Marie Curie projekt keretében felfüggesztett grafén membránokon végzett kombinált STM és AFM mérések segítségével meg tudták határozni, az STM mérés során a tű és a grafén között fellépő erőhatásokat, amely az STM mérések pontosabb értelmezését teszi lehetővé a jövőben.

OTKA pályázat keretében kimutatták, hogy a lepkék szárnyain előforduló fotonikus nanoarchitektúrák hosszantartó oldószeres előkezelése alkalmas a lepkeszárny alapú optikai gőzdetektorok érzékenységének hangolására.

A Komplex Rendszerek Laboratórium

A laboratórium legnagyobb visszhangot kiváltó eredményei az *evolúciós játékelméleti modellek* vizsgálatához kötődnek, ahol sikeresen alkalmazzák a *nem-egyensúlyi statisztikus fizika módszereit*. Emellett tanulmányozzák a hálózatokon megfigyelhető *dinamikai jelenségeket* és a népzenei, ill. genetikai adatokból származtatott rokonság mértékét különböző népcsoportoknál.

Az evolúciós játékelméleten belül vizsgálták azokat a jelenségeket, amelyek erősítik az együttműködést az önző egyének/egyedek között. Az együttműködés evolúciós kialakulásában igazolták azon szereplők fontosságát, akik egyszerre több befolyásos szereplővel tartanak kapcsolatot. A numerikus vizsgálatok rámutattak a szomszédokkal szembeni tolerancia szint inhomogenitásának előnyeire is. A közlegelő játékban a közösség haszna növekedett akkor, amikor a merev kapcsolatrendszer helyett megengedték a csoportosulások változását.

Az evolúciós játékelméleti modellekkel leírható jelenségek mélységi elemzése arra épül, hogy a mátrixokkal leírható kölcsönhatások négy alaptípus (elemi játék) lineáris kombinációjaként állítható elő. A különböző kombinációk szisztematikus vizsgálata megmutatta, hogy ha a koordinációs játékot semleges stratégiákkal egészítjük ki, akkor a zaj növelése során a mágneses (Ising) rendszerekre jellemző folytonos állapotváltozás csak addig marad érvényben, amíg a semleges stratégiák száma egy küszöbérték alatt marad. A fizikai rendszerek viselkedésétől jelentősen eltérő irányfüggő inváziós folyamatot találtak, ami perkolációs jelenségeken keresztül befolyásolja az evolúció végállapotát.

Az emberi agy idegsejtjei között kísérletileg feltárt kapcsolatrendszer statisztikai elemzése világitott rá arra, hogy a hálózatokon megjelenő dinamikai jelenségek hűebb leírásánál a

korábban használt egyszerű hálózati modelljeinket tovább kell finomítani. A térbeliséghez köthető hatások vizsgálata megkezdődött.

A népzenei dallamok terében meglévő csoportosulások numerikus azonosítását javították egy olyan öntanuló algoritmussal, amelyben már ezek száma is változhat. Ugyanezt a módszert használták a genetikai adatbázis elemzésénél is. A különböző népcsoportok közötti rokonsági fok számszerűsítésénél a két adatbázis hasonló eredményeket jósolt, és ezt a régészeti eredmények is támogatják.

b) Tudomány és társadalom

Az utánpótlás biztosítása érdekében egyetemi oktatásban való személyes részvétel mellett

- 25 Kárpát-medencei magyar középiskolás diákkal az MFA 2016-ben is megrendezte immár kilencedik alkalommal az MFA Nyári Iskolát, ahol a diákok érdeklődésének a felkeltése a cél. Számukra az intézet biztosított bentlakásos egyhetes lehetőséget a tudományos kutatásba történő bekapcsolódásra. (<http://alag3.mfa.kfki.hu/mfa/nyariiskola/>)
- Nyílt nap jellegű rendezvényekkel (MFA Nyílt Nap, Kutatók Éjszakája, Lányok Napja) az érdeklődő adófizetőknek biztosítanak lehetőséget az intézet kutatómunkájába való betekintésre.
- Oktatási és ismeretterjesztési célra az intézet fenntartja a www.nanotechnology.hu a www.nanobiosensors.com, www.mems.hu, www.biomems.hu, www.neuromems.hu www.ellipsometry.hu, www.nanotechnology.hu www.thinfilms.hu honlapokat, ahol az intézet működő berendezéseinek együttes technikai, technológiai jellemzői, valamint a kutatási eredmények szerepelnek közérthető megfogalmazásban.
- Folyatódta a középiskolákban az evolúciós játékelméletet és a nanotechnológiát bemutató ismeretterjesztő előadások.
- Az intézet 2016-ban is részt vett a ma „Sokszínű fizika” néven - elsősorban az MTA Wigner FK által működtetett - az MFA által korábban létrehozott ismeretterjesztő Nanobusz fenntartásában.
- Az MFA előző évi szakmai és társadalmi munkáiról immár 13 éve az angol nyelvű Yearbook <http://www.mfa.kfki.hu/hu/yearbook> kiadványban számolnak be, ami széleskörű publicitást biztosít az intézet tevékenységének.
- Továbbfejlesztették a Web-Schödinger nevű, Interneten át használható HCSD szimulációs programcsomagot, melynek oktatási célokra való felhasználása ingyenes.
- Az intézet üzemelteti az MTA Kolloidkémiai Munkabizottságának a honlapját <http://www.energia.mta.hu/~kolloidmb>

Megadott magyar szabadalom:

Mikrostély tartó transzmissziós elektronmikroszkópos minták fókuszált ionsugaras megmunkálására NSZO: H01J37/20 G21K5/08, Lajstromszám: 230423 (2016)

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Egyetemi és kutatóintézeti kapcsolatok:

Az MFA-ban öt emeritus és egy kinevezett egyetemi tanár, két docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktat az ELTE, BME, ÓE, PPKE, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTE, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, doktori és habilitációs tanácsának, többen a doktori iskolák alapító, ill. tőrzstagjai. Az intézetben működik a Pannon Egyetem MIK-vel közös Nanobioszenzorika

Laboratóriuma, a BME VBMK-val közös Nanokémiai Laboratóriuma, a BME TTK-val közös Elektronsugaras Litográfiai labor és a PPKE Információs Technológiai Karral közös MEMS-tervező laboratórium. Preparatív és analitikai laborjaikban rendszeres gyakorlatokat tartanak a graduális és posztgraduális képzés számára külső támogatás nélkül.

A korábbi igazgatót az MTA 2016-os közgyűlése az Akadémia Műszaki Osztályának rendes tagjává választotta. Az intézethez köthető (kollégáik által témavezetett), ill. az intézetben végzett kutatásaik alapján a PhD hallgatók közül 2016-ban 9-en szereztek PhD fokozatot, közülük négyen már az iparba visszatérve fejezték be az eljárást. MTA doktora fokozatszerzés 2016-ban nem volt.

2016-ban 48 PhD ösztöndíjas hallgató, illetve MTA fiatal kutatói álláshelyen foglalkoztatott fiatal folytatta részben vagy egészben a PhD kutatásait az MFA-ban. További 16 MSc és 20 BSc dolgozat, valamint 10 TDK munka témavezetését is vállalták. Diákjaik 2016-ban is sikeresen szerepeltek TDK versenyeken, hatan szerepeltek kiválóan az egyetemük által szervezett TDK versenyeken. Kiemelkedő eredményt ért el egy diák, aki a BME NTI TDK versenyen 1. helyezést ért el és megkapta a BME Pro Progressio Alapítvány különdíját is. Másik diákjuk, megnyerte a 2016-os Nemzeti Tehetség Program Ösztöndíját a Mag Car-4.0 projekttel. A 23rd International Conference of Young Scientists rendezvényen (<http://www.icys2016.com/>) aranyérmet kaptak, a Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Információs Technológiai és Bionikai Kar, Műszaki szekció TDK versenyén 1. helyezést értek el. A Szent István Gimnázium diákja a 25. Ifjúsági Tudományos és Innovációs Tehetségkutató Versenyen 1. díjat kapott, ezzel kvalifikálta magát a nemzetközi versenyre. A European Union Contest for Young Scientists (EUCYS), Brüsszelben megrendezett versenyén különdíjat érdemelt ki.

Díjak, elismerések:

MTA Fizikai Fődíj, MTA Fizikai Díj, Veszprém Megyei Jogú Város Polinszky-díja, Akadémiai Prof. Emeritus cím, MTA Akadémia Ifjúsági Díj, Pócza Jenő díj (Magyar Mikroszkópos Társaság), MTA EK Ifjúsági díj, MTA EK MFA Intézeti díj, MTA EK MFA Posztdoktori díj, MTA EK MFA Fiatal kutatói díj, Óbudai Egyetem KVK Dékáni dicséret, Tavasz Szél konferencia, 2016. április 15-17., Budapest 1. díj, EPL “Highlights 2015” -A compilation of the best papers published within the last year”

Ipari kapcsolatok:

35 ipari kutatás-fejlesztési együttműködésük volt 2016-ban (8 nagyvállalat, 27 KKV):

- 77 Elektronika Kft.: Autonóm mintaszállításra alkalmas mikrofluidikai rendszereket terveznek és alakítanak ki betegágy melletti Lab-on-a-Chip alapú diagnosztikai rendszerek fejlesztése során
- ANTE Innovatív Kft.: szenzorfejlesztés, kerámiagyártás
- Anton Paar GmbH: IR LED-ek fejlesztése és kissorozatú gyártása
- Audi Magyarország: mintavizsgálat
- Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft.: tribológiai vizsgálatok
- Biotalentum Kft.: neuronok tenyésztésére és vizsgálatára alkalmas mikrofluidikai chip fejlesztése
- BHE Bonn Hungary Kft.: korszerű funkcionális anyagok hálózatba rendezhető autonóm szenzorokhoz, valamint korlátozott térbeli felbontású hőérzékelő (thermopile) szenzor másodlagos biztonsági érzékelő adaptációja
- Bosch Magyarország Kft.: elektronmikroszkópos vizsgálatok
- Byosens Kft.: Miniaturizált optikai sejt-szenzorok
- CellSorter Kft.: Mikrowell plate fejlesztése sejtmnipulátor automatához

- Creoptix AG: bioszenzor fejlesztés
- Cyclodex Kft.: bioszenzorokban használható vékonyrétegek kialakítása
- Demas Kft.: érzékelő és fényforrás előállítás
- EagleBurgmann Inc: Funkcionális grafén és kerámia/grafén nanokompozitok előállítása vizes közegű tribológiai alkalmazásokra
- Flextronix Kft.: LED továbbképzés, Óbudai Egyetem
- General Electric Hungary Kft.: LED tesztelés, tanácsterem, energia pozitív világítási rendszer fejlesztés, ipari kerámia
- Greensolar Equipment Manufacturing Kft.: Elektronmikroszkópos vizsgálatok
- Hungarolux Kft.: optikai rétegminősítés
- Kerox Kft.: mérési szolgáltatás
- LightTech Lámpatechnológiai Kft.: Elektronmikroszkópos vizsgálatok
- Microfluidlabs Kft.: motilitásmérő készülék és mikrofluidikai csatornarendszer tervezése és kivitelezése, Mikrofluidikai chip fejlesztése sejtvizsgáló automatához
- MicroVacuum Kft.
- Mirrotron Kft.: síkjelleg minősítése és deformáció mérése Si szeleteken és rétegszerkezeteken
- NanoMegas Ltd.: amorf anyagok elektron-diffrakciójának vizsgálata
- Philips Research Ltd. intelligens katéterek műtéti alkalmazásokhoz
- Rikola Ltd.: IR LED-ek fejlesztése és kissorozatú gyártása
- Robert Bosch GmbH: Motorvezérlő ipari chip kontaktusának mérése Bosch számára
- Semilab Zrt.: ellipszometriai mérőábrák és kalibráló minták készítése
- Senop Oy: LED gyártás
- Tateyama Kagaku Ltd.: katalitikus CO gázérezékelő fejlesztés
- Technoorg Linda Kft.: légszennyezettség mérő szenzor fejlesztése
- Tenzi Mérlegtechnika Kft.: ellipszométer hasznosítás
- Toptica Photonics AG: lézerdiodák antireflexiós réteggel (AR) történő bevonása
- Weszta-T Kft.: nyomástávadók minősítése
- Woollam Co.: ellipszométer hasznosítás

Tagságok hazai bizottságokban

- BME
 - TTK Fizikai Doktori Tanács alapító tagja és tagjai (3 fő)
 - VBK Doktori Tanács és Habilitációs Bizottság tagja
 - VIK Doktori Tanács és Habilitációs Bizottság tagja
- Doktoranduszok Országos Szövetsége, Biológiai és Kémiai Tudományok Osztálya tagja
- Eötvös Loránd Fizikai Társulat, tag (16 fő)
 - Atom-molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport vezetőségi tagja
 - ELFT Díj Bizottság tagja
 - Tanács tagja
 - Vákuumfizikai szakcsoport tagja, elnökségi tagja
 - ELFT Vándorgyűlés 2016 tagja
 - Felügyelőbizottság tagja
 - Vákuumfizikai technológiai és Alkalmazásai Szakcsoportban vezetőségi tagja
- ELTE
 - Doktori Iskola Bizottsága tagja
 - Fizikai Intézet, az Igazgató Tanács tagja
 - TTK Kari Habilitációs Bizottság tagja
 - Fizikai Intézet Habilitációs Bizottságának tagja
 - TDK zsűri (nano és anyagtudomány) tagja

- Hírközlési és Informatikai Tudományos Egyesület tagja
- Koreai- Magyar Társaság tagja
- Kutató Diák mentora
- Magyar Anyagtudományi Egyesület titkára, elnökségi tagja, és tagjai (7 fő)
- Magyar Biofizikai Társaság elnökségi tagjai (2 fő)
- Magyar Elektronmikroszkópos Társaság Kuratórium titkára
- Magyar Innovációs Szövetség választmányának tagja
- Magyar Kémikusok Egyesülete tagja
- Magyar Mérnökakadémia tagja (3 fő)
- Magyar Mikroszkópos Társaság, elnöke, elnökségi tagja, tagjai (12 fő)
- Magyar Nemzeti Bank – MNB Értéktéremtők Klubjának tagja
- Magyar Ökotoxikológiai Társaság tagja
- Magyarhoni Földtani Társaság Agyagásványtani szakosztály vezetőségi tagja
- MMA Népművészeti Kollégium kollégiumi tag
- Magyar Művészeti Akadémia rendes tagja
- Magyar Tudományos Akadémia
 - MTA Köztestületi tagok
 - MTA Műszaki Tudományok Osztálya rendes tagja
 - MTA Fizikai Tudományok Osztálya levelező tagja
 - MTA Közoktatási Elnöki Bizottság tagja
 - MTA Akusztikai Komplex Bizottság bizottsági tagja
 - MTA Anyagtudományi és Technológiai Bizottság tagja, Nanoanyagok és Nanotechnológiák Albizottság tagjai (3fő)
 - MTA Biológia Tudományok Osztály Biofizika Bizottság tagja (3 fő)
 - MTA Külhoni köztestület tagja
 - MTA Felületkémi és Nanoszerkezeti Munkabizottság titkára, tagjai (5 fő)
 - MTA Fizikai Osztály Doktori Bizottság póttagja
 - MTA Fizikai Osztály doktorképviselő tagja
 - MTA Fizikai-kémiai Bizottság Kolloidkémiai Munkabizottság tagja (3 fő)
 - MTA Geokémiai és Ásvány-kőzettani Bizottság Nanoásványtani Albizottságának titkára
 - MTA Közgyűlési doktorképviselő tagja
 - MTA Műszaki Tudományok Osztálya Elektronikus Eszközök és Technológiák Tudományos Bizottság elnöke és tagjai
 - MTA Statisztikus fizikai bizottság tagjai (2 fő)
 - MTA Szilárdtest-fizikai Bizottság tagjai (6 fő)
 - MTA Veszprémi Területi Bizottság tagja
 - MTA VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság elnöke és tagjai (4 fő)
 - MTA-IUVSTA Magyar Nemzeti Bizottság tagja, Nanoszerkezetek divízió magyar vezetője
- Nők a Tudományban Egyesület elnökségi tagja és tagja
- OTKA
 - OTKA IVM zsűri tagja
 - OTKA képviselője a Materials-ERA-NET Steering Board-ban
- Óbudai Egyetem Tudományos Műhely tagja
- Pannon Egyetem MIK Molekuláris- és Nanotechnológiai Doktori Iskola alapító és tőrzstagjai
- Pécsi Egyetem, TTK, Fizika, Informatika doktori iskolájának alapító tagja
- Szegedi Tudományegyetem Doktori Bizottság tagja
- Szilikátipari Tudományos Egyesület tagjai (2 fő)

- SZTE, Finomkerámia szakosztály tagja
- Vákuum Társaság tagja

Részvétel hazai konferenciák szervezésében:

- 2016. április 26-28. Műszaki Kémiai Napok 2016, Veszprém,
- 2016. április 28. Lányok Napja
- 2016. június 13. British International School, Budapest diákoknak nyílt nap rendezvény az MFA-ban
- 2016. augusztus 24-27. ELFT Vándorgyűlés 2016
- 2016. szeptember 30. Kutatók éjszakája (ELTE közreműködés)

Részvétel nemzetközi konferenciák szervezésében:

- 7th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry (June 2016, Berlin, Germany, <http://www.icse-7.de/homepage/committees/>) programbizottság tagja
- 20th International Vacuum Congress (IVC-20) , August 21-26, Busan, Korea ICN+T Steering Committee tag
- EMN Epitaxy Conference, Budapest, Hungary <http://emnmeeting.org/epitaxy/> 4-8 September 2016, elnök
- CompleNet 2016 konferencia Dijon, France, March 23-25, 2016, TPC
- CompleNet 2017 konferencia March 21-24, 2017, TCP
- DTIP 2016 - Design, Integration, Test and Packaging of MEMS and MOEMS Symposium Technical Committee member
- EMR-S 2016 Spring Meeting: Graphene and related materials, szimpózium szervező, Lille, 2016. május 2-6.
- EUROSENSORS 2016, Budapest, 2016. 09. 04-07, general chair, programme chair, publication chair, local organizing chair, workshop chairs
- Faemcar Workshop, 2016. október 11. Budapest szervező
- ICCGE-18 Nagoya Japan, 2016 International Advisory Committee Member
- IEEE SENSORS 2016 programbizottsági tag
- INCITE workshop 2016. 09. 05, főszervező
- IUVSTA School on "NANO – OPTICS", Braga, Portugal, 11-15 April 2016, International Scientific Committee
- JVC Portoroz, 2016. 06. 06-10, International Organizing Committee
- PiezoMat workshop 2016. 09. 07 főszervező
- SSL China 2016, Peking award committee member
- EGT-BiSS 16 Amsterdam, 2016. 09. 20, programbizottsági tag
- International Conference on Sensors Engineering and Electronics Instrumental Advances (SEIA' 2016), programbizottsági tag
- SIWAN7 Szeged International Workshop on Advances In Nanoscience 2016, elnök
- IEEE Symposium on Design and Diagnostics of Electronic Circuits and Systems 2016, programszervező
- THERMINIC 2016, programbizottsági tag
- ECOSS 2017, bizottsági tag
- ECERS (Európai Kerámia Társaság Konferenciája), 2017. Július 9-13
- Junior EUROMAT 2018

Intézményi együttműködések:

- Hazai felsőoktatási intézetek: BME, ELTE, Pannon Egyetem, Miskolci Egyetem, Pécsi Tudományegyetem, Szegedi Tudományegyetem, Dunaújvárosi Főiskola, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Semmelweis Egyetem

- Hazai kutatóintézetek: MTA ATOMKI, MTA KOKI, MTA Wigner FKI, MTA BTK Zenetudományi Intézet, Bay Zoltán Kutatóintézet, Szentágotthai Kutatóközpont, Budapesti Orvosszakértő Intézet
- Harvard University, USA
- University of Maribor, Maribor, Szlovénia
- Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brazília
- University of Cadiz, Spanyolország
- University of Ghent, Belgium
- Yale-NUS College, Singapore
- International Institute for Applied Systems Analysis, Laxenburg, Auszria
- Hong Kong Baptist University, Hong Kong, Kína
- Universidade Federal de Viçosa, Brazília
- HZDR, Dresden, Németország
- CEA-LETI, Franciaország
- CIEMAT, Spanyolország
- ESRF - European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, Franciaország
- FAPEMIG, Brazília
- Fraunhofer Institut, Németország
- FRK - Foundation of Cardiac Surgery Development, Zabrze, Lengyelország
- GREMAN – University of Tours, Franciaország
- IMEM-CNR, Parma, Olaszország
- Indian Institute of Technology, Chennai, India
- Linköping University, Svédország
- LMU – Ludwig Maximilians Universität München, Németország
- Max Planck Institut, Garching, Németország
- National Institute for Materials Science (NIMS) – MANA, Japán
- Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Németország
- Suzhou Institute of Nano-Tech and Nano-Bionics, China
- Szlovák Tudományos Akadémia Elektrotechnikai Intézet
- Toyama National College of Technology, Japán
- Technical University of Delft, Hollandia
- University of Leeds, UK
- Virginia Commonwealth University, USA

Nemzetközi folyóiratok szerkesztőbizottsági tagságai:

- IEEE Sensors Journal associate editora
- Conference on Electromagnetic Field Computations, editorial board member
- Copernicus Journal of Solid State Sensors (Open access) associate editora
- Europhysics Letters (EPL), szerkesztője
- Frontiers in Physics folyóirat szerkesztőbizottsági tagság
- Games MDPI vendég-szerkesztője
- International Journal of New Horizons in Physics, szerkesztője
- Materials Engineering folyóirat Szerkesztőbizottság tagja
- Nanopages, szerkesztőbizottsági tagja
- Open Engineering szerkesztőbizottsági tagja
- Radiation and Discovery folyóirat szerkesztőbizottság tagja
- Resolution and Discovery managing szerkesztője (Akadémiai Kiadó)
- Scientific Reports, szerkesztője

Nemzetközi tagságok:

- Cseh-Szlovák Mikroszkópos Társaság tagja
- E-MRS Executive Committee tagja
- ENIAC Scientific Council magyar tagja
- European Microscopy Society tagja (7 fő)
- European Ceramic Society tagja
- European Microbeam Analysis Society, Honorary Member
- European Physical Society tagja
- EUROSENSORS Fellow Award Committee elnöke
- EUROSENSORS International Steering Committee szavazó tagja
- Federation of European Material Societies tagja
- MRS tagja
- IEEE tagja
- Szlovák Tudományos Akadémia köztestületi tag
- IEEE Sensory Systems Technical Committee tagja
- International Solid State Lighting Alliance advisory board member
- IUVSTA Electronic Materials tagja
- World Materials Research Institutes Forum tagja

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban tovább folytatódott 18 OTKA, 7 Bolyai ösztöndíj, 5 EU FP7 és számos az NKFIH-nél szerződött projekt. Ezen felül 2016-ban az alábbi projektek indultak el:

európai kutatási pályázatok

- Novel 2D quantum device concepts enabled by sub-nanometre precision nanofabrication H2020 ERC 680263 — NanoFab2D
- Graphene Flagship Core 1 H2020 696656

hazai kutatási pályázatok (NGM és NKFIH támogatásában)

- Korszerű funkcionális anyagok hálózatba szervezhető autonóm érzékelőkhöz (NVKP_16-1-2016-0018)
- Generációváltást jelentő elektronmikroszkóp beszerzése, a magyar anyagtudomány open laboratóriuma (VEKOP-2.3.3-15-2016-00002)
- 9 NKFIH OTKA pályázat, ebből 1 postdoc, 3 nemzetközi és 5 kutatási:
 - Újszerű implantátum anyagok alkalmazása az agykéreg aktivitásának nagyfelbontású, multiparaméteres leképezésére (OTKA K 120143)
 - Grafén-fém hibrid nanoszerkezetek előállítás és jellemzése (OTKA K 119532)
 - Megkülönböztethetőség következményei az evolúciós játékelméletben (OTKA K 120785)
 - Kerámia kompozitok kopásállóságának és súrlódási tulajdonságainak hatékony javítása, grafén és más 2D adalékanyagok segítségével (OTKA PD 121368)
 - FLAG-ERA III-nitrid és II-oxid 2D rétegek formájában (Grifone, OTKA NN 118914)
 - Jelölésmentes optikai bioszenzorok élő sejtek kutatására (OTKA 117755)
 - Biológiai és bioinspirált fotonikus nanoarchitektúrákon alapuló gőz/gázérezkelők előállítása és tulajdonságainak vizsgálata (OTKA 115724)
 - M-ERA.NET-WaterSafe: Sustainable autonomous system for nitrites/nitrates and heavy metals monitoring of natural water sources (WaterSafe, OTKA NN 117847)
 - JST V4 Nagy biztonságú GaN MOS kapcsolótranszisztor (OTKA NN 118201)

- MTA által támogatott pályázatok:
 - INFRA 2016/ősz 2. kategória FLUID-FM beszerzése
 - EUHUNKPT 2016/1 és 2016/2
 - MTA bilaterális együttműködések (2 olasz, japán, cseh, szlovák, bolgár)

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Anaya J, Rossi S, Alomari M, Kohn E, Tóth L, Pécz B, Hobart KD, Anderson TJ, Feygelson TI, Pate BB, Kuball M: Control of the in-plane thermal conductivity of ultra-thin nanocrystalline diamond films through the grain and grain boundary properties. *Acta Materialia*, 103: 141-152 (2016) <http://real.mtak.hu/31181/>
2. Stolarczyk JK, Deák A, Brougham Dermot F: Nanoparticle clusters: assembly and control over internal order, current capabilities and future potential. *Advanced Materials*, 28:(27) 5400-5424 (2016) <http://real.mtak.hu/35411/>
3. Nador J, Kalas B, Saftics A, Agocs E, Kozma P, Korosi L, Szekacs I, Fried M, Horvath R, Petrik P: Plasmon-enhanced two-channel in situ Kretschmann ellipsometry of protein adsorption, cellular adhesion and polyelectrolyte deposition on titania nanostructures. *Optics Express*, 24:(5) 4812-4823 (2016) <http://real.mtak.hu/35391/>
4. Kentaro W, Takahiro N, Seungjun Oh, Yutaka W, Takashi S, Volk J, Yoshiaki N: Arbitrary cross-section SEM-cathodoluminescence imaging of growth sectors and local carrier concentrations within micro-sampled semiconductor nanorods. *Nature Communications*, 7: Paper 10609. 9 p. (2016) <http://real.mtak.hu/35440/>
5. Kiss ÁK, Rauch EF, Lábár JL: Highlighting material structure with transmission electron diffraction correlation coefficient maps. *Ultramicroscopy*, 163: 31-37 (2016) <http://real.mtak.hu/32914/>
6. Oláh N, Fogarassy Z, Sulyok A, Szívós J, Csanádi T, Balázs K: Ceramic TiC/a:C protective nanocomposite coatings: Structure and composition versus mechanical properties and tribology. *Ceramics International*, 42:(10) 12215-12220 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/35180>
7. Pothorszky Sz, Zámbo D, Deák T, Deák A: Assembling patchy nanorods with spheres: Limitations imposed by colloidal interactions. *Nanoscale*, 8:(6) 3523-3529 (2016) <http://real.mtak.hu/35451/>
8. Szabó G, Borsos I: Evolutionary potential games on lattices. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters*, 624: 1-60 (2016) <http://real.mtak.hu/34411/>
9. Szolnoki A, Perc M: Biodiversity in models of cyclic dominance is preserved by heterogeneity in site-specific invasion rates. *Scientific Reports*, 6: Paper 38608. 9 (2016) <http://real.mtak.hu/43184/>
10. Vancso P, Magda GZ, Peto J, Noh JY, Kim YS, Hwang C, Biro LP, Tapasztó L: The intrinsic defect structure of exfoliated MoS₂ single layers revealed by Scanning Tunneling Microscopy. *Scientific Reports*, 6: Paper 29726. (2016) <http://real.mtak.hu/41700/>

11. Battistig G, Gurbán S, Sáfrán G, Sulyok A, Németh A, Panjan P, Zolnai Z, Menyhárd M: Wafer-scale SiC rich nano-coating layer by Ar⁺ and Xe⁺ ion mixing. Surface and Coatings Technology, 302: 320-326 (2016) <http://real.mtak.hu/41923/>
12. Kovacs B, Patko D, Szekacs I, Orgovan N, Kurunczi S, Sulyok A, Khanh NQ, Toth B, Vonderviszt F, Horvath R: Flagellin based biomimetic coatings: From cell-repellent surfaces to highly adhesive coatings. Acta Biomaterialia, 42: 66-76 (2016) <http://real.mtak.hu/44304/>
13. Pálincás A, Süle P, Szendrő M, Molnár G, Hwang C, Biró LP, Osváth Z: Moiré superlattices in strained graphene-gold hybrid nanostructures. Carbon, 107: 792-799 (2016) <http://real.mtak.hu/36943/>

**AZ MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Energiatudományi Kutatóközpont

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	352	Ebből kutató ² :	165
PhD, kandidátus:	97	MTA doktora:	20
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			5
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			64
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			248
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			238
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			10
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			11
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			170
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			163
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 3	idegen nyelven:	9
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	496,746	Összes független hivatkozás száma (2015):	6329
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			7327
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 11	MTA doktora:	1
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			165
		poszterek száma:	111
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	41	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	19
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			4
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			55
Témavezetések száma: TDK munka:	13	Diplomamunka (BSc):	29
Diplomamunka (MSc):	22	PhD:	73
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		1647 506	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	22	Teljes saját bevétel:	3291 916 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			33
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	156 819 E Ft
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			17
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	933 485 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			29
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	879 392 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	150 625 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		1171 595	E Ft

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Energiatudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1647 506	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	3291 916	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	156 819	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	933 485	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	479 426	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	399 966	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	150 625	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	998 907	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	49 925	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	116 068	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	6695	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: EK Atomenergia-kutató Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	87	Ebből kutató ² :	31
PhD, kandidátus:	21	MTA doktora: 4	Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			11

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			51
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			44
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			6
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			25
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			24
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	42,768	Összes független hivatkozás száma (2015):	790
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			976

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			35
		poszterek száma:	7
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 6		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka: 1		Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc): 3		PhD:	4

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: EK Energia- és Környezetbiztonsági Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	68	Ebből kutató ² :	51
PhD, kandidátus:	28	MTA doktora: 4	Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			25

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			74
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			73
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			6
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			7
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			51
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			49
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 2	idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	139,354	Összes független hivatkozás száma (2015):	1532
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			1896

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			42
		poszterek száma:	30
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 12		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			4

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			18
Témavezetések száma: TDK munka: 2		Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc): 3		PhD:	21

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: EK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	121	Ebből kutató ² :	83
PhD, kandidátus:	48	MTA doktora:	12
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			28

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	129		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	127		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	1		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	3		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	97		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	93		
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	6

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	325,869	Összes független hivatkozás száma (2015):	4260
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			4747

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	88		
	posztterek száma:	74	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	23	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			33
Témavezetések száma: TDK munka:	10	Diplomamunka (BSc):	20
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	48

MTA RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET

1053 Budapest, Reáltanoda u. 13-15.; 1364 Budapest, Pf. 127
telefon: (1) 483 8302; fax: (1) 483 8333
e-mail: palfy.peter.pal@renyi.mta.hu; honlap: www.renyi.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet alapvető feladata, hogy az elméleti matematika területén világszínvonalú kutatásokat folytasson. Az intézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központja. Munkatársai kiváló munkáját 2016-ban is számos hazai és nemzetközi elismerés illette. A Magyar Tudományos Akadémia az intézet egyik kutatóját rendes taggá, egy másikat levelező taggá választotta. Egy kutató Széchenyi-díjat kapott, egy másik az MTA Matematikai Tudományok Osztályának Erdős Pál-díjában részesült. Egy fiatal munkatárs elnyerte az Akadémiai Ifjúsági Díjat, egy másik a Bolyai János Matematikai Társulat Grünwald Géza emlékérmét. Az intézet egy kutató professor emeritusa az amerikai Rutgers Egyetem életműdíját kapta. 2016 folyamán 5 ERC által támogatott kutatócsoport működött az intézetben. Az Akadémia Lendület programjában is kiemelkedően eredményes az intézet, 2016-ban a hatodik Lendület-kutatócsoportot indíthatták, ezúttal a véletlen spektrumok témakörében.

Az intézet kutatói 171 tudományos közleményt publikáltak a beszámolási év során. Legkiemelkedőbb eredményeik a legjelentősebb nemzetközi matematikai folyóiratokban (Annals of Mathematics, Journal of the American Mathematical Society, Duke Mathematical Journal, Journal of the European Mathematical Society, Annals of Probability stb.) láttak napvilágot.

Az intézet tudományos feladatai elsősorban az alapkutatásra koncentrálnak, de néhány alkalmazott matematikai témára is jelentős erőket fordítanak. Ezek a témák elsősorban a kriptográfia, a nagy hálózatok kutatása (ezen belül újabban indított témájuk a mesterséges intelligencia kutatásában alapvető szerepet játszó „deep learning”), valamint a bioinformatika, de a matematikai statisztikát is számos társtudományban (például az orvostudományban) használták.

A munka 9 tudományos osztály, 5 Lendület-kutatócsoport, valamint a nemrégiben létrehozott szakmódszertani kutatócsoport keretei között folyik. Az intézet kutatási tematikáit folyamatosan a matematika fejlődése által felvetett legújabb kérdésekhez igazítják.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Alacsony dimenziós topológia Lendület-kutatócsoport

Lefschetz-fibrálások minimális szinguláris fibrumszámát vizsgálták abban az esetben, ha a bázistér a tórusz. Meglepő módon ennek a kérdésnek szoros kapcsolata van hamis komplex projektív síkok topologikus konstrukciójával. Folytatták Seifert fibrált sokaságok kontakt struktúráinak betölthetőségére vonatkozó vizsgálataikat is. A Heegaard–Floer-homológia alapjairól szóló könyv első 10 fejezete elnyerte végleges formáját; ebben a munkában több korábbi eredményt újragondoltak, új bizonyítást adtak az alaptételekre, illetve más megvilágításba helyeztek korábbi eredményeket. A 2013-as bonni, Freedman tételéről szóló féléves szemináriumról készítendő jegyzet megírásában is részt vettek.

Formulát találtak $(p,1)$ típusú ciklikus hányados szingularitások Hilbert-sémái Euler-karakterisztikáinak generátorfüggvényeire. Ez az eredmény új levezetést adott a diagonálisan színezett Young-diagramok többváltozós generátorfüggvényére vonatkozó formulára. A konkordizmus csoportot, illetve a 3-dimenziós homológia gömbök csoportját vizsgálták, különös tekintettel a köztük lévő homomorfizmusok természetére. Továbbá 3-sokaságoknak spin 4-sokaságokba való beágyazhatóságát kutatták. Láncok konkordizmus invariánsait találták meg rács-homológia segítségével. Vizsgáltak továbbá Lagrange-féle kobordizmusokat Legendre-féle részsokaságok között.

Beágyazott kontakt homológia és 4-sokaságok Gromov-invariánsainak homotopikus finomítását fejlesztették ki. Ezek segítségével Taubes invariánsainak csavart változatát definiálták, és kapcsolták egy bizonyos 3-sokaság csavart Alexander polinomjához. Beágyazott kontakt homológia egy kombinatorikus átfogalmazását adták meg tórikus sokaságokra; ezen eredmények javítottak korábbi beágyazhatósági tételeket szimplektikus 4-sokaságok között. Az R^{2n+1} -en lévő egzotikus kontakt struktúrákat tanulmányozták és vizsgálták azt, hogy a Bourgeois-féle kontakt struktúrák közül melyek betölthetőek.

Az 1-kodimenziós prím Morin-leképezések kobordizmuscsoportjainak és a komplex projektív tér stabil homotópiacsoportjai közti kapcsolat bizonyítását továbbfejlesztették és egyszerűsítették. Az eredményeket általánosították magasabb kodimenziós prím Morin-leképezésekre.

Szinguláris leképezések klasszifikáló tereinek ún. kulcsfibrálással való konstrukciójában az indukáló leképezéseket kifejezték az eddiginél explicitebb módon.

Csoportok és gráfok Lendület-kutatócsoport

Belátták, hogy létezik olyan partíciója R^3 -nek összefüggő „szép” darabokra, hogy a darabok szomszédsági gráfja a 3-reguláris végtelen fa, és a partíció egybevágóság-invariáns, és ezen túl a partíció osztályokat nem lehet megkülönböztetni bármely invariáns módon meghatározott tulajdonság révén. A (látszólag jól támogatott) sejtés az volt, hogy ilyen konstrukció nem létezik. Vizsgálták, hogy tranzitív és unimoduláris véletlen gráfok mikor ágyazhatóak be invariáns módon euklideszi terekbe. Bizonyították, hogy unimoduláris véletlen hipervéges gráfok beágyazhatóak ilyen módon R^3 -be.

Végtelen reguláris fán egy IID folyamat faktoráról ismert, hogy két távoli csúcs kevéssé korrelált. Ezt az eredményt kiterjesztették a következő módon: belátták, hogy minden IID faktornak triviális az úgynevezett „1-ended tail” szigma-algebrája, és hogy véges állapotú folyamat esetén a fa egy konvex része csupán kevés információt árul el egy távoli csúcsról.

Meghatározták a véletlen d -reguláris páros gráf adjacencia mátrixának co-rang határeloszlását modulo p . Ez egybeesik a sűrű véletlen páros gráfhoz tartozó határeloszlással, ha p nem osztja d -t. A nem páros modell esetének vizsgálata folyamatban van.

Általánosították Kun csoportelméleti konstrukcióit hipervéges komplexusokra: a cél Freedman és Hastings stratégiájának alkalmazása a kvantum PCP sejtés megtámadására.

Belátták, hogy adott félig-egyszerű Lie-csoport-hoz tartozó Ramanujan lokálisan szimmetrikus terek tetszőleges sorozata, ahol a térfogat végtelenhez tart, szükségképpen Benjamini-Schramm konvergál a Lie-csoport szimmetrikus teréhez. Serre sejtése szerint az összes aritmetikus lokálisan szimmetrikus tér ilyen. Belátták, hogy egy lokális-globálisan konvergens gráfsorozat limeszének a cost-ja megegyezik a sorozat kombinatorikus cost-jával. Ez több ismert tétel új, egyszerűbb bizonyítását adja, illetve az új eredményt, hogy egy amenábilis

csoporthoz véges indexű részcsoporthoz tetszőleges Farber-sorozatára elfajul a rang növekedése: ez eddig csak láncokra volt ismert.

Bevezetésre került egy olyan konvergenciafogalom, amely közös általánosítása a korlátos fokú gráfok és a sűrű gráfok szokásos konvergenciájának. Sikert ért el ennek az új gráflimeszelméletnek a kereteit kialakítani és számos érdekes példát mutatni konvergens gráfsorozatokra és becslhető gráfparaméterekre. Reménybeli limeszobjektumok is bevezetésre kerültek. Sikert ért el limeszobjektumot konstruálni a véges projektív síkok, illetve a hiperkockák sorozatához, sőt valójában minden, lényegében nagy körű konvergens gráfsorozathoz is, bár gyengébb értelemben.

Belátták Pyber egy 1993-ból származó sejtését, amely egy konstans szorzótól eltekintve meghatározza, mekkora egy véges primitív permutáció-csoport minimális bázis száma.

Nagy hálózatok Lendület-kutatócsoport

A csoport 2016-ban is folytatta a gráfok, mint kombinatorikai struktúrák limeszelméletének vizsgálatát. Ezt a kutatási irányt, melynek segítségével a folytonos objektumokat kezelő analízis és a valószínűségszámítás eszközeivel véges gráfokra vonatkozó eredmények érhetőek el, részben a valóságban megjelenő nagyméretű hálózatok megértése motiválja. Ezen a területen azt vizsgálták, hogy a sűrű gráfok korábban kidolgozott limeszelméletét hogyan lehet a ritka (szubkvadrátikus élszámú) esetben általánosítani. Bebizonyították, hogy a konvergens sorozatok határértéke reprezentálható egy Borel-mértékkel a Cantor-halmaz négyzetén. Ennek a jelentőségét az adja, hogy a gyakorlati alkalmazásokban előforduló gráfok (szociális hálók, neuronok kapcsolódási hálójai stb.) többnyire ritkák. A ritka gráfokkal kapcsolatban olyan módszereket is találtak, amelyek például leírják a gráfok fraktálszerű viselkedését. Egy másik fontos eredményük a véletlen mátrixok elméletéhez is kapcsolódó véletlen reguláris gráfról szól, amelyek sajátvektorairól bebizonyították, hogy elemeinek eloszlása nagyjából Gauss-eloszlású kell, hogy legyen. A sűrű véletlen gráfok közül pedig olyanokat vizsgáltak és hasonlítottak össze egymással, melyek (a valós élethez hasonlóan) folyamatosan növekszenek, és a nagyobb fokú csúcsok nagyobb valószínűséggel kapnak új éleket.

A magasabb rendű Fourier-analízissel kapcsolatos munka is folytatódott, egyrészt a készülő jegyzet gyarapításával, másrészt új tételek bizonyításával. Ennek az elméletnek kulcsszerepe van a prímek közötti számtani sorozatok tanulmányozásában is. Ugyanakkor ennek az elméletnek egy speciális esetét, a kvadrátikus esetnek az alkalmazásait is vizsgálták: pénzügyi és természeti idősorok előrejelzésére használható szoftvereket fejlesztettek.

A napjainkban széles körben alkalmazott és kutatott, mesterséges intelligencián alapuló algoritmusok és a mély tanulási (deep learning) módszerek vizsgálata is jelentős szerephez jutott a csoport munkájában. Ezek a módszerek egyre gyakrabban épülnek be a hétköznapi, ipari vagy információtechnológiai alkalmazásokba, például képfelismerő, adattömörítő vagy adatfeldolgozó szoftverekbe. A csoport célja, hogy a limeszfogalmak felhasználásával erősebb, tisztább matematikai alapokra helyezze a napjainkban oly sikeressé váló mély tanulási módszereket, és ilyen módon kapcsolatot teremtsen az intézetre hagyományosan jellemző elméleti alaputatás és a nagy ipari kutatóközpontokra (Google, Facebook stb.) jellemző alkalmazott kutatási tevékenység között. 2016 során a kutatás fókuszában a generatív neuronháló modellek (elsősorban statisztikai feladatokra, valószínűségi eloszlások közelítésére), illetve a reziduális hálózatok voltak, melyet többek között természetes képek osztályozására használtak. Számítógépes kísérletekkel vizsgálták neurális hálózatok különböző topológiáit, ezek működését. Vizsgálták a hálózatok mélységének és szélességének

a tanulásra gyakorolt hatását, illetve véletlen mélységű neurális hálózatokat és autoencoder alapú modelleket is fejlesztettek.

Pénzügyi matematika Lendület-kutatócsoport

Fő kutatási irányvonaluk a sztochasztikus irányításelmélet és annak alkalmazásai befektetési problémákra.

Pénzügyi piacokon a kereskedett értékpapír mennyisége nagyban befolyásolja annak árát, ezt a jelenséget illikviditásnak nevezik. A matematikai modellezés csak mostanában zárkózott fel és adott megfelelő matematikai leírást erre a jelenségre. Sikerült optimális befektetések létezésére bizonyítást adniuk olyan piaci szereplők esetére, akik mind kockázatkereső, mind kockázatkerülő viselkedést is mutatnak, ahogyan ez a befektetőkön ténylegesen megfigyelhető. Ezen eredmények hozzájárulnak az ilyen piaci jelenségek jobb megértéséhez.

A részvényárak elemzése azt mutatja, hogy a régebbi árak erősen befolyásolják a mostaniakat. Az ilyen „memória” hatását vizsgálták és közelítő formulát találtak, ami kifejezi, hogyan hat a memória „hosszúsága” az optimális portfóliók eredményére.

Úgynevezett adaptív algoritmusokkal kezdtek foglalkozni, amelyek az adott sztochasztikus rendszer dinamikáját követik anélkül, hogy ezt a dinamikát pontosan meghatároznák. Sikerült új eredményeket elérniük az ilyen adaptív sémák konvergenciájáról abban az esetben, amikor az alkalmazott függvények nem folytonosak. Ez gyakran van így az alkalmazásokban, de elméletük még alig kidolgozott. Ezen kutatásokat a londoni Alan Turing Intézet egy „kis kutatócsoportjának” keretében végezték, két kollégával az edinburgh-i egyetemről.

Optimális befektetésekről szóló eredményeket terjesztettek ki arra az esetre, amikor az adott piaci szereplő bennfentes információval is rendelkezik. Képleteket találtak az optimális befektetés eredményére.

Véletlen spektrumok Lendület-kutatócsoport

Mint ismert, a természetben van néhány valószínűségi eloszlás, ami sokszor előjön, amikor több véletlen esemény közös hatását vizsgáljuk. A legismertebb ezek közül a normáeloszlás. Egy másik nagyon fontos ilyen a Tracy–Widom-eloszlás, ami egy véletlen mátrixoknál, véletlen permutációknál, illetve bizonyos lerakódási folyamatoknál jelenik meg, és a modern valószínűségszámítás egyik központi témája. Felfedezték, hogy ez az eloszlás megjelenik bizonyos véletlen Schrödinger-operátorok esetében is, ezzel bekapcsolva egy teljes kutatási területet a Tracy–Widom-eloszlás hatáskörébe.

Másrészt fontos eredményeket értek el az úgynevezett kicserélődési folyamatok tanulmányozásában. Belátták, hogyha n sorbarendezett részecskét párok cserélgetésével viszonylag gyorsan véletlenszerűen fordított sorrendbe állítunk, akkor ez nagy n -re a véletlenség ellenére egy bizonyos előírt rend szerint történik. Többek között – meglepő módon – a részecskék szinuszgörbék mentén mozognak.

Szaktudományi kutatócsoport

A csoport tagjai 2016-ban sikeresen pályáztak az MTA négyéves Tantárgy-pedagógia Kutatási Programjára. Ennek a pályázatnak a munkáját szeptemberben kezdték meg.

A speciális matematika tagozatokon tanító tanárok számára szerveztek szakmai programokat, koordinálták ezen osztályok tantervének korszerűsítését, aktualizálását.

2016-ban 21 hétvégi matematikátábort szerveztek tehetséges diákok számára. Nagyjából 250 diák vett részt a táboraikban. A nyár folyamán két nagy matematikátábort szerveztek: a MaMuT-ot (Matematikai Multságok Tábora) és a MaMuT2-t. Kiemelkedő hazai és nemzetközi versenyeredményekkel rendelkező, 10-18 éves diákok vettek részt a táborokban, hogy fejlesszék matematikai tudásukat.

Több alkalommal tartottak matematikát és a matematika felfedeztető módon történő tanítását népszerűsítő programokat középiskolákban. Sok tehetséges diákkal egyénileg, illetve 2-3 fős csoportokban is foglalkoztak. Hátrányos helyzetű hatodik osztályos diákok számára tartottak 11 egymásra épülő szakkört, alkalmanként 4 iskolai órának megfelelő terjedelemben.

A felfedeztető matematikatanítás alapjait tanították az ELTE-n és a Budapest Semesters in Mathematics Education programban is.

Algebra osztály

Szoros kapcsolatot teremt az additív kombinatorika és az invariánselmélet között az a tény, hogy egy véges Abel-csoport Noether-száma (a csoport felbonthatatlan polinominvariánsainak maximális lehetséges foka) megegyezik a Davenport-konstanssal (felbonthatatlan zérusösszegű sorozat maximális hossza). Az invariánselméletben az utóbbi 15 évben előtérbe került a szeparáló rendszerek (generátorrendszerek általánosítása) vizsgálata. Az előbb említett alapvető tény mintájára sikerült jellemezniük egy véges Abel-csoport szeparáló rendszereinek fokára vonatkozó felső korlátot tisztán a csoport feletti zérusösszegű sorozatok elméletének nyelvén. Ezt a karakterizációt alkalmazták annak igazolására, hogy szinte minden véges Abel-csoport esetén a szeparáló rendszerekre vonatkozó univerzális fokszámkorlát kisebb, mint a polinominvariánsok algebráinak generátorrendszereire vonatkozó fokszámkorlát.

Meghatározták az összes 32-nél kisebb elemszámú véges csoport Noether-számát, valamint számítógép segítségével ezen csoportoknak a kis és nagy Davenport-konstansát. Az eredmények megerősítik Geroldingernek és Gryniewicznek azt a sejtését, mely szerint a Noether-szám nagyobb, mint a kis Davenport-konstans, ugyanakkor az első példát szolgáltatják olyan csoportra, amelynek a Noether-száma nagyobb, mint a nagy Davenport-konstans. A p -csoportok Noether-számára adtak egy általános érvényű felső becslést.

Nagata adta az első példát olyan csoportreprezentációra, amelyhez tartozó polinominvariánsok algebrája nem végesen generált. Ezen nevezetes algebra Steinberg-féle változatának kiszámították a Hilbert-sorát, és kiderült, hogy bár az algebra nem végesen generált, ez a Hilbert-sor szép racionális törtfüggvény. Ez az eredmény egy akadémiai bolgár-magyar mobilitási projekt keretében született.

Félcsoportok Morita-ekvivalenciájának a vizsgálata során gyűrűelméleti analógiára bevezették az ún. szilárd félcsoportok fogalmát. A szilárd félcsoportok a faktorizálható félcsoportoknak egy meglehetősen nagy részosztályát alkotják. Jelentős eredményeket értek el a szilárd félcsoportok Morita-ekvivalenciája terén. Bebizonyították, hogy két szilárd félcsoport szilárd aktjainak a kategóriái között bármely ekvivalencia funktor tenzor szorzat funktor, továbbá két szilárd félcsoport fölött a szilárd jobb aktok kategóriái akkor és csak akkor ekvivalensek, ha a két félcsoport között Morita-összefüggés áll fenn bijektív leképezésekkel. Ez a tétel eddig csak lokálisan egységelemes félcsoportokra volt ismeretes, a szilárd félcsoportok osztálya pedig ezeknél lényegesebben bővebb.

Folytatták Peirce-gyűrűk strukturális vizsgálatát, megadva egy Wedderburn principális felbontás-szerű eredményt minden n -dimenziós Peirce-gyűrűre. Az ún. erős n -Peirce-gyűrűk automorfizmus csoportját leírták komponensei automorfizmus csoportjainak a segítségével.

Megmutatták, hogy a korábban kommutatív félgűrűkre bevezetett Krull-dimenzió fogalom egybeesik a szokásos dimenzió fogalommal tropikus varietások esetén. Bebizonyították azt, hogy egy tropikus varietást definiáló ún. „bend” relációk hányados félgűrűjének a Krull-dimenziója mindig pontosan eggyel nagyobb az eredeti varietás dimenziójánál.

Tanulmányozták matroid politópok és általánosított polimatroidok tórikus ideálját, és ezek generátoraira speciális esetekben fokszám korlátot adtak meg.

Algebrai geometria és differenciáلتopológia osztály

Fontos sejtést állítottak fel és bizonyítottak a racionális egycsúcsú projektív síkgörbékről. Kiszámították bizonyos műtét háromsokaságok univerzális Abel-fedéseinek Seiberg–Witten-invariánsait (ezen a téren ez az első ilyen típusú eredmény).

Bebizonyították A. Durfee 1978-ban megfogalmazott híres sejtését (a Milnor-fibrum szignatúrájának a negativitását) 2-dimenziós hiperfelület szingularitásokra. Továbbá teljes metszetek szignatúrájára is szoros egyenlőtlenségeket láttak be, kombinatorikus egyenlőtlenségeket javítva.

Kiszámították az egyszerű felületszingularitások Hilbert-sémáinak számoló függvényeit.

Meghatározták bizonyos nemizolált 2-dimenziós hiperfelület szingularitás Milnor-fibrumjának peremét, mint gráf-sokaságot.

Fontos eredményeket értek el tetszőleges algebrai csoportok étale homotópia-csoportjainak vizsgálatában. Ennek segítségével explicit formulát adtak homogén terek második homotópia-csoportjaira.

Belátták, hogy Ghys sejtése (egy kompakt sokaság diffeomorfizmus csoportjának minden véges részcsoportjában van korlátos indexű Abel-részcsoport) eredeti formájában nem igaz, viszont mindig van korlátos indexű feloldható részcsoport. Továbbá sokkal általánosabb és egyben sokkal erősebb tételt bizonyítottak: homeomorfizmusok egy véges részcsoportjának mindig van korlátos indexű nilpotens részcsoportja.

Algebrai logika osztály

Folytatták a korábban elsőrendű logikában formalizált három tulajdonság (elv vagy principium), a relativitás elve, a tér és idő homogenitása és a tér izotrópiája között fennálló kapcsolatok vizsgálatát. Ezek Einstein speciális relativitási elvének három természetes, de lényegesen különböző megfogalmazásai a matematikai logika precíz, egyértelmű jelentéssel bíró nyelvén. Többek között bebizonyították, hogy a tér izotrópiájából következik a tér homogenitása. Továbbá az idő homogenitásából következik a tér homogenitása. Ha föltesszük, hogy van szinkronból kiálló órapár, akkor a tér homogenitásából következik az idő homogenitása. Bizonyos feltételek mellett a tér izotrópiájából és az idő homogenitásából következik a relativitás elve, ha pedig föltesszük azt is, hogy van szinkronból kiálló órapár, akkor már a tér izotrópiájából következik a relativitás elve.

Megmutatták, hogy ha a speciális relativitáselméletben kitüntetjük egymáshoz képest álló megfigyelők egy halmazát, akkor az így kapott elmélet definíciósan ekvivalens a klasszikus (newtoni) kinematikával. Ez a matematikai logika módszereinek alkalmazása fizikára, egy

nagyobb vállalkozásnak része, melyben a fizikát elsőrendű logikai elméletek hálózataként/kategóriájaként vizsgálják. Itt az elméletek közötti átjáráson van a hangsúly.

Kidolgoztak egy olyan időutazást megengedő fogalmi keretet, amiben általánosan lehet vizsgálni, hogy adott dinamika esetén milyen kezdőfeltételekhez tartoznak ellentmondásmentes megoldások.

Erősen teljes bizonyítási rendszert adtak a séma-logikára, azaz az elsőrendű logika formulasémáinak logikájára. Ez megold két, több mint 30 éve Tarski csoportjában publikált problémát.

Megmutatták, hogy Tarski eredeti tíz axiómájából, amivel a reláció algebraikat definiálta 1941-ben, kettőt ki lehet hagyni, annak árán, hogy másik két axiómát kissé módosítunk. Bizonyították, hogy mind az eredeti, mind a módosított axiómarendszer független axiómákból áll. Az irodalomban szinte mindenki Tarski eredeti tíz axiómáját használta 1941 óta. Az új rendszert könnyebb ellenőrizni bizonyításokban, és intuitívabb axiómákból áll mint az eredeti.

Bizonyították, hogy parciálisan rendezett halmazokon értelmezett függvények teljes additívusági tulajdonsága megőrződik ultraszorzatokra. Ebből következik, hogy a függvények teljes additívuságát ki lehet fejezni elsőrendű logikai formulával, noha a teljes additívuság definíciója azt sugallja, hogy ez a tulajdonság lényegesen másodrendű.

Analízis osztály

A Delsarte-módszer Fourier analitikus alkalmazásával megjavították a kvadratikus, illetve köbös maradékokat elkerülő halmazok méretének felső becslését a ciklikus csoportokban. Megfogalmazták a Delsarte-módszer egy lehetséges alakját nem-kommutatív csoportok felett, és alkalmazták ezt a torzítatlan bázisok problémájára.

Vizsgálták a baricentrikus interpoláció konvergencia-divergencia kérdéseit. Ez egy Lagrange-interpolációhoz hasonló diszkrét lineáris interpolációs operátor, amely nem polinom, hanem racionális függvény.

Folytatták a hermitikus formák felbontásainak vizsgálatát és ezzel kapcsolatban megmutatták, hogy számtalan, az analízis különböző területeiről ismert felbontási tételre közös bizonyítás adható. Megmutatták, hogy a Lebesgue-típusú felbontás komoly szerepet játszik bizonyos reprezentálható pozitív funkcionálokra vonatkozó extrémális (vagy rendezéseméleti) kérdésekben.

Megvizsgálták azt a híres sejtést, amely szerint egy tetszőleges konvex testen az algebrai polinomokra vett egyenletes norma aszimptotikusan optimális módon helyettesíthető egy diszkrét részhalmazon tekintett normával. Ezt a sejtést sikerült igazolni a kétdimenziós térben.

Folytatták a Bernstein-Erdős optimális interpolációs pontokra vonatkozó sejtés vizsgálatát bizonyos Haar-rendszerekre.

Diszkrét matematika osztály

Belátták, hogy a nem adaptív keresés hatékonysága alig csökken, ha a megengedett kérdések halmazát kis mértékben szűkítjük. Ha n elemet akarunk szeparálni egymástól triviálisan $\log n$ halmazra van szükség. Egyik szép eredményük szerint ennél csak eggyel több halmaz akkor is elég, ha a szeparáló halmazokat egy előre megadott halmazrendszerből kell választani, ami a lehetséges halmazok több mint felét tartalmazza.

Az Erdős–Ko–Rado-tétel „kétrészes” általánosítása 20 éve megoldott. Most sikerült ezt messzemenően általánosítani, amikor is a tekintett halmazok valamilyen, a két részben adott számú elemet tartalmaznak. Pontos eredményt értek egy meglehetősen széles hipergráf osztály pontos Turán-számának meghatározásában. Ez segítséget adhat az Erdős–Sós–Kalai-sejtés bizonyításához. Bebizonyították a klasszikus Erdős–Gallai-tétel stabilitási változatát, ami az első ilyen típusú eredmény a páros gráfok extrémális elméletében. A kizárt poszetekkel definiált extrémális problémák egy természetes általánosítását vezették be: a halmazrendszerek mérete helyett azt vizsgálták, hogy egy adott másik poszetből hány példányt tartalmaz.

Igazolták R. Faudree sejtését útpárosítható gráfok maximális fokszámának minimumáról, és további nyitott kérdéseket válaszoltak meg részben vagy teljes egészében általánosabb terminálpárosítási problémakörben. Bebizonyították Erdős 25 éves sejtését éldiszjunkt háromszögek számáról teljes négyest nem tartalmazó gráfokban. A Pósa–Seymour-sejtés egy új bizonyítását adták nagy pontszámú gráfok esetére két fontos új lemma segítségével, amelyek már további alkalmazásokkal is rendelkeznek. A bizonyításból származó pontszámhatár sokkal jobb a korábnál. Meghatározták 6-kör nélküli gráfok legnagyobb páros és négy hosszúságú kör nélküli részgráfjainak a lehetséges méretét.

Bebizonyították a Bollobás–Eldridge pakolási sejtés lista változatát kevés élű gráfokra. A metsző Ryser-sejtéssel kapcsolatban bizonyítottak eredményeket, például a t -metsző esetre, illetve éles eredményt adtak arra kérdésre, hogy egy k -élszínezett teljes gráf csúcsainak mekkora hányada fedhető le $k - 1$ db különböző színű monokromatikus komponenssel. A Grundy dominálási szám értékére pontos, illetve jól közelítő eredmények születtek grid- és tórusz típusú gráfok esetében (utak, illetve körök Descartes-, lexikografikus-, direkt-, illetve erős szorzatai). Gráfok élhalmazának klikkfedéseit vizsgálva a lokális klikkfedési számra (a maximális csúcsfedettség minimuma adott gráf esetén) bizonyítottak olyan összefüggéseket, amelyek egy Nordhaus–Gaddum-típusú sejtéshez kapcsolódnak. Körök maximális számára vonatkozó becsléseket adtak olyan gráfosztályokban, ahol csak véges sok körhossz engedélyezett.

Az MMS sejtéssel kapcsolatban a vertex sign balance paraméter mintájára bevezették az edge sign balance paramétert, és vizsgálták ennek tulajdonságait gráfok és (főleg 3 uniform) hipergráfok esetében. Bebizonyították az utakra vonatkozó Erdős–Gallai-sejtés különböző hipergráf változatait. Teljes többrészes hipergráfok fedését vizsgálták monokromatikus komponensekkel. A főtételükben meghatározták a legkisebb m -et, hogy bármely teljes r -uniform $(r-1)$ -részes hipergráf lefedhető m db monokromatikus komponenssel, ha élei k színnel vannak színezve úgy, hogy minden csúcson van mindenféle színű él. Leírták azokat a kellően nagy csúcsszámú hiperfákat, melyeknek élszáma minimális, és egyúttal általánosították a hiperfák élszámára vonatkozó alsó becslést olyan hiperfák esetén, melyeknek élgráfja nem összefüggő.

Megjavították a négyzetrács optimálisnak sejtett pebbling számára vonatkozó konstrukciót.

Sikerült bizonyítani egy elemi csoportelméleti eredményt, amely a kvázipolinomiális gráfizomorfizmus algoritmusának bizonyítását klasszifikációmentessé teszi.

A poly-Bernoulli és a velük rokon számokat kombinatorikus módszerekkel vizsgálták. Új kombinatorikus értelmezéseket adtak, és ezek alapján korábbi analitikus eredményeket indokoltak meg transzparens formában.

Fontos előrelépést értek el négyzet homotetikusainak színezésével kapcsolatban, egy új módszerrel is gyarapítva a terület eszköztárát. Ezt az eredményt a rangos SoCG konferencián prezentálták Bostonban.

Egy korábbi véletlen gráf modell általánosításával sikerült reprezentálni azt az agykutatók által feltételezett jelenséget, hogy két fajta neuron befolyásolja az agyműködést, vannak élénkítő (excitatory) és gátló (inhibitory) neuronok.

A Regularitási Lemma alkalmazásaként Ramsey-típusú klasszikus problémákat vizsgáltak. Kiemelkedik az út több színű Ramsey-számára vonatkozó eredmény, amely hosszú idő óta az első javítás ezen a területen.

Véges metrikus terek kombinatorikájának kutatása terén megmutatták a Fano-sík metrizálhatatlanságát.

Megmutatták, hogy nem-konvex politópok esetén is lehet a csúcs fogalmat definiálni és sok tulajdonságát igazolni.

Tvergerg híres tételét sikerült kiterjeszteni negatív együtthatók esetére is.

Geometria osztály

Kvadratikus idejű algoritmust adtak sűrű gráfok rektilineáris kereszteződési számának akármilyen kis százaléknyi hibával való becslésére. Ehhez olyan geometriai és kombinatorikus partíciós tételeket fejlesztettek ki, melyek a Szemerédi regularitási lemma messzemenő általánosításainak tekinthetők.

Igazolták azt a régi sejtést, hogy minden pozitív epszilontra, ha n elég nagy, akkor az egységnyezet felbontható pontosan n kisebb négyzetre, melyek oldalhosszai maximum epszilón százaléknnyira térnek el egymástól.

Felső becslést adtak térbeli szakaszok és más geometriai objektumok diszjunktsági gráfjainak kromatikus számára a klikkszám függvényében.

A következő problémát tanulmányozták: határozzuk meg a legkisebb $w(n)$ számot, amelyre teljesül, hogy az egységgömb lefedhető az egyenlítőre szimmetrikus w szélességű sáv n kongruens példányával. Lényegesen megjavították a $w(n)$ -re korábbról ismert legjobb alsó korlátot.

Vizsgálták a véletlen pontok által meghatározott konvex politópok határalakzatát. Tovább kutatták a Steinitz-problémát, erősítették a vektorrendszerek kis összegű rendezéseire vonatkozó korlátokat. A kvantitatív Helly-típusú tételekre vonatkozó korlátokat erősítették.

Toeplitz 1911-es sejtése szerint minden zárt Jordan-görbe tartalmazza egy négyzet négy csúcsát. Toeplitz problémájának egy lehetséges variánsa az, amikor azt mondjuk, hogy egy adott sokszög (négyzet) ténylegesen a görbének beírt sokszöge, ha P csúcsai a görbén vannak, míg magának a sokszögnek a belseje a görbe által körülhatárolt tartományhoz tartozik. Többek között karakterizálták azokat a háromszögeket, amelyekhez hasonló háromszögek ténylegesen beírhatók bármely Jordan-görbébe.

Hajós-lemmaként arra a szép elemi feladatra szokás hivatkozni, ahol minden $r > 1$ esetén minimalizáljuk azon sokszögek területét, amelyek tartalmazzak egy rögzített egységkört, és az r sugarú koncentrikus kör beírt sokszögei. A duális kérdés, ahol maximalizálni szeretnénk a területét azoknak a sokszögnek, amelyeket a nagyobbik kör tartalmaz, és amelyek érintő sokszögei az egységkörnek, önmagában is érdekes. Kiderült, hogy miközben a Hajós-lemma egy körelhelyezési probléma megoldásának a kulcsa, addig a duális probléma egy körfedési problémát old meg.

Megoldották az L_p Minkowski-probléma síkbeli esetét, ha p 0 és 1 között van. Továbbá sikerült fontos részeredményeket elérniük tetszőleges dimenzióban, ha p negatív.

Karakterizálták egy fix konvex sokszög köré írt maximális területű konvex sokszöge(ke)t és egy hatékony algoritmust adtak ennek megtalálására. A kérdésnek számos alkalmazása van, például a statisztikában.

Halmazelmélet és topológia osztály

Hosszú ideje jelennek meg sporadikus eredmények a geometriai mértékelméletben alapvető Hausdorff-mértékek számosság-invariánsairól. Kutatóiknak sikerült lényegében teljes képet kapni az invariánsok közötti egyenlőtlenségekről, és megválaszolni D.H. Fremlin, J. Zapletal, illetve Laczkovich M.-P. Humke egy-egy kapcsolódó kérdését.

Megszámlálható struktúrák automorfizmus-csoportjai sokszor nagyon érdekesek mind halmazelméleti, mind pedig csoportelméleti szempontból. Két konjugált automorfizmus tekinthető izomorfnak, így természetesen adódó kérdés, hogy vajon létezik-e tipikus automorfizmus, más szóval létezik-e nagy konjugált-osztály különböző kicsiség fogalmakat tekintve. Csoportjuk ezt a kérdést vizsgálta meg a Christensen-féle Haar-null fogalmat használva, amely egy általánosítása a Haar-mérték szerinti nullmértékűségnek nem lokálisan kompakt csoportokban. Számos automorfizmus-, és homeomorfizmus-csoport esetén teljes leírást sikerült adni a nemnulla osztályokról.

Folytatták annak a kérdésnek a vizsgálatát, milyen halmazelméleti feltevések mellett, milyen topologikus terek létezhetnek úgy, hogy a leszűrési számuk különbözik a sűrűségüktől. Ebben szorosan együttműködtek az intézetben az MTA vendégkutatói programja keretében dolgozó Jan van Mill professzorral. Megmutatták, hogy a korábbi példákról minden további nélkül feltehető, hogy akár (lokálisan) összefüggőek vagy topologikus csoportok. Azonban összefüggő Tyihonov-példák létezése további feltételeket kíván meg. Még további feltételek esetén azonban még topologikus vektortér példák is megadhatóak.

Belátták, hogy ha az X (végtelen) homogén kompaktum előáll megszámlálható sok sűrű, vagy véges sok akármilyen megszámlálhatóan szűk altér uniójaként, akkor X kontinuum számosságú.

Bebizonyították, hogy a monoton normális terek osztályában a gyengén lineárisan Lindelöf-tulajdonság implikálja a – sokkal erősebb – Lindelöf-tulajdonságot. (Egy tér akkor gyengén lineárisan Lindelöf, ha nyílt halmazok bármely nem-megszámlálható reguláris számosságú rendszerének van teljes felhalmozódási pontja.)

Megmutatták, hogy minden majdnem diszkréten Lindelöf- és első megszámlálható reguláris tér legfeljebb kontinuum számosságú. (Egy tér akkor majdnem diszkréten Lindelöf, ha bármely diszkrét altere lefedhető egy Lindelöf-alterével.)

A függetlenségi logikákat algebrai logikai eszközökkel vizsgálva sikerült – az eddigi irodalomban találhatóktól eltérő – cilindrikus jellegű jelentésalgebrákat megadni, majd axiomatizálni az általuk generált varietás lokálisan véges dimenziós elemeit.

Egy Väanänen által bevezetett játékot vizsgáltak, amely általánosított Baire-terek esetében megadja a perfektségek fogalmának egy analógonját. Belátták, hogy egy gyengén kompakt számosság létezéséből következik egyrészt ennek a játéknak az eldöntöttsége az általánosított Baire-terek tetszőleges részhalmazai esetében, másrészt az általánosított Baire-tereken definiálható bizonyos gráfok független csúcshalmazainak méretével kapcsolatos dichotómia is. Ezelőtt az volt ismert mindkét állítás esetén, hogy konzisztenciájuk egy mérhető számosság létezéséből következik. A Cantor–Bendixson-rang fogalmát általánosító, az általánosított Baire-tereken játszott játékot is vizsgáltak és megmutatták, hogy a fenti dichotómia egy ezekkel kapcsolatos variánsa már igaz a ZFC axiómarendszerben is.

Számelmélet osztály

A számelmélet két nagy visszhangot kiváltó eredménye egyrészt Maynard és Tao tétele, miszerint bármely m darabszámra van egy olyan adott véges korlát alatti m számból álló konfiguráció, hogy ezen konfiguráció eltoltjaiban végtelen sokszor találunk m db prímet, másrészt a Green–Tao-tétel, hogy a prímek közt található akármilyen (véges) hosszúságú számtani sorozat. Ezen két eredmény közös általánosítását sikerült az osztály tagjainak elérniük 2016-ban. Egy másik eredményük arra vonatkozik, hogy majdnem minden számtani sorozatra a benne előforduló prímek közt is van végtelen sok olyan m -es blokk, amely a számtani sorozat differenciájánál csak egy (csupán m -től függő) korlátos faktorialábbal nagyobb, és a prímekből álló első ilyen blokk már a differencia köbe fellép.

Az automorf formák gazdag szimmetriával rendelkező harmonikus hullámok, amelyek segítenek az egész számok megértésében. Fontos feladat az automorf formák értékelésének tanulmányozása. Erős és természetes becsléseket adtak arra vonatkozóan, hogy „milyen magasra csaphat” egy harmonikus hullám, ha a szimmetriákat egy tetszőleges algebrai számtest feletti 2×2 -es mátrixok szolgáltatják. Vizsgálták még a hiperbolikus körproblémában fellépő hibtagot. Foglalkoztak magasabb rangú csoportok feletti automorf csúcsformák szuprémum-normájának becslésével. Számtest feletti $GL(2)$ Hecke–Maaß-csúcsformák szuprémum-normáját becsülték meg a szint és a sajátérték aspektusban. Eredményeik minden számtestre erősebbek a generikus (pusztán analitikus megfontolásokból adódó) korlátnál és annál jobbak, minél nagyobb teljesen valós részteste van az adott testnek (speciálisan teljesen valós testekre sikerült reprodukálniuk a racionális testre ismert becsléseket).

Az általánosított Montréal-funktorokkal kapcsolatos eredményeket véglegesítették. Sikeresen általánosították A.C. Cojocaru és Tóth Á. eredményeit a véges karakterisztikájú függvénytestek feletti elliptikus görbékről alacsony karakterisztikájú esetekre, illetve megcáfoltak egy azzal kapcsolatos sejtést.

A klasszikus Gauss-féle körprobléma az euklideszi síkon adott koordináta-rendszer origója körüli R sugarú körbe eső rácspontok számának a becslésére vonatkozik. Ahogy R a végtelenhez tart, ez a szám jól közelíthető a kör területével, és a probléma az eltérés minél jobb becslése. A hiperbolikus körprobléma ennek a kérdésnek a megfelelője a hiperbolikus síkon: ha adott a hiperbolikus sík egybevágóságainak egy G diszkrét részcsoportha és a sík egy z pontja, szeretnénk megbecsülni a z körüli R sugarú körbe eső, z -vel G szerint ekvivalens pontok számát. A főtag itt is a kör területe. Jól ismert, hogy adott z és G esetén a hibtag a főtag $2/3$ -adik hatványával megbecsülhető, de az a sejtés, hogy a $2/3$ itt bármely $1/2$ -nél nagyobb számra megjavítható. Azonban a $2/3$ -os eredményt senkinek sem sikerült még megjavítani. Nemrég Risager és Petridis bizonyos átlagos értelemben (ha z -re átlagoljuk a hibtagot) $7/12$ -re tudta javítani a $2/3$ -os kitevőt, de csak számelméleti jellegű G esetére. Az osztály tagjainak 2016-ban sikerült általánosítaniuk tetszőleges G esetére is, ebben az átlagos értelemben megjavítani a $2/3$ -os kitevőt $5/8$ -ra. Ez tehát általánosabb eredmény, de numerikusan nem annyira erős, mint Risager és Petridis eredménye az általuk tekintett speciális esetben.

Egy új additív kombinatorikai eredményt kidolgozva gyors algoritmust mutattak nilpotens gyűrűk fölötti polinomok értékészletének meghatározására.

Valószínűségszámítás és statisztika osztály

Új függetlenségvizsgálati módszert dolgoztak ki annak ellenőrzésére, hogy többdimenziós valószínűségi vektorváltozók koordinátái teljesen függetlenek-e. E módszer jóságát

folyamatosan tesztelik az MTA felhő segítségével. Az eddigi eredmények azt mutatják, hogy sikerült a korábbi módszereknél jobb eljárást találni. Elkezdték általános vektorpárok függetlenségvizsgálati módszereinek az elemzését is.

Egyes kutatások a valószínűségszámítás, analízis és matematikai statisztika következő problémaköréhez kapcsolódtak: dilatált és hézagos sorok, véletlen trigonometrikus sorok, diszkrepanciaelmélet, autoregresszív folyamatok. E kutatásokban fontos szerepet játszottak mind a valószínűségszámítás, mind a számelmélet és analízis modern módszerei.

Tanulmányozták a független bolyongások közötti távolságot a lépésszám függvényében. Azt vizsgálták, hogy ha több független bolyongást tekintünk a d -dimenziós téren, amelyek nem találkoznak egy pontban, akkor mekkora a köztük lévő maximális távolság az idő függvényében. Tekintették e probléma természetes megfelelőit más gráfokon, például ún. fésűn történő bolyongás esetében is. Ezenkívül eredményeket kaptak az ún. pók struktúrán történő bolyongás lokális és tartózkodási idejének az aszimptotikus tulajdonságairól.

Információelméleti alapkutatást folytattak egyrészt a többfelhasználós és/vagy aszinkron hírközlő rendszerek exponenciális hibabecsléseiről, másrészt általánosított információmennyiségekre vonatkozó szélsőérték problémákról. Az utóbbi problémával kapcsolatos eredményeket alkalmazták a pénzügyi matematikában.

Folytatták hazai és nemzetközi együttműködéseiket. Eredményeket értek el nagy véletlen gráfokon definiált i.i.d. folyamatok faktorainak vizsgálatában. Megmutatták, hogy a gráfok távoli részein ezek a faktorok mindig közel függetlenek. Belga kutatókkal a gépi tanulás policy iteration algoritmusát vizsgálták, és annak komplexitására új becsléseket adtak. Egy workshop lehetőségeit felhasználva kooperációt kezdeményeztek nem-reverzibilis (aszimmetrikus) Markov-láncok keverési tulajdonságainak (cutoff jelenségének) finomabb megértése érdekében. Bekapcsolódtak egy véletlenített optimalizálási algoritmus analízisével foglalkozó együttműködésbe is.

Megpróbálták a korábbiaknál jobb becslést adni a Gibbs-sampler logaritmikus Sobolev-konstansára a Dobrushin unicitási feltételét kielégítő eloszlások esetén (véges szorzattéren). Azt sejtik, hogy ha a Dobrushin-féle interdependencia-mátrix L_2 normája $1 - \delta$, akkor a logaritmikus Sobolev-konstansnak $1/\delta$ nagyságrendűnek kell lennie, szemben a meglévő $1/\delta^2$ -tel. Egyelőre nem sikerült a meglévő eredményt megjavítani. De sikerült megmutatni, hogy a Gibbs-sampler fejlődésekor a t -edik és $t + 1$ -edik időpontban keletkező eloszlásoknak van egy olyan coupling-ja, amely a folyamat fejlődése alapján a legtermészetesebb, és ez bizonyos mérték-koncentrációs egyenlőtlenségek bizonyításában éppen olyan jó eredményt ad, mint a szokásos módszer, amely nem tűnik természetesnek. Ez a vizsgálat talán elvezet a logaritmikus Sobolev-konstans megjavításához.

Foglalkoztak bizonyos kényszerfeltételeket teljesítő gráfok vizsgálatával és fokszámpakolásokkal. Megmutatták, hogy annak eldöntése, hogy létezik-e gráf előírt fokszámmal és második szomszédokkal NP-teljes probléma. Megmutatták, hogy ez a probléma már páros gráfokra is NP-teljes. Másrészt megmutatták, hogy annak eldöntése, hogy létezik-e gráf előírt fokszámmal és megadott bipartíció két osztálya közötti élszámmal P-beli probléma. Bebizonyították azt is, hogy a swap operációk nem irreducibilisek az ezen kényszerfeltételeknek megfelelő gráfok terén, de a swapok és dupla swapok már azok. Azt is igazolták, hogy egy gráfdekompozíció segítségével exponenciálisan több fokszámsorozatra lehet bizonyítani a realizációjukon a swap Markov-lánc gyors konvergenciáját, mint ahány fokszámsorozatra ez eddig ismert volt.

Megmutatták, hogy ha két fa fokszámsorozatnak nincs közös levele, akkor mindig létezik élfüggetlen hernyó realizációjuk is. Megmutatták azt is, hogy ilyen fokszámsorozatpárok

élfüggetlen fa realizációira léteznek FPRAS és FPAUS algoritmusok. Továbbá bebizonyították, hogy NP-teljes annak az eldöntése, hogy egy fa fokszámsorozatnak és egy tetszőleges fokszámsorozatnak van-e élfüggetlen realizációja.

Vizsgáltak bizonyos statisztikus fizikával kapcsolatos jelenségeket, például azt, hogy nem-Markovi terjedési folyamatokat kritikus véletlen gráfokon nagyon fel lehet gyorsítani akár egyetlen él hozzáadásával. Idetartozik spin rendszerek (perkoláció, Ising-modell) eseményeinek ritka rekonstrukciójának a vizsgálata is. Vizsgáltak egy másik, szintén statisztikus fizikával kapcsolatos, de a komplex függvénytan elméletére is támaszkodó kérdést, amely részben a Conformal Loop Ensemble modellek, részben a Diffusion Limited Aggregation által motivált probléma. E problémát vizsgálva konstruáltak egy SLE darabokból építkező „teljesen konforminvariáns” növekedési folyamatot.

Foglalkoztak a matematikai statisztika gyakorlati alkalmazásával is. Új módszert dolgoztak ki a GIANT COSMIC RING szignifikanciájának meghatározására, és jó közelítést adtak a különböző allergén pollenek európai elterjedésére a negatív binomiális eloszlás tulajdonságait felhasználva.

Alkalmazások

Az MTA Rényi Intézetben végzett munka továbbra is elsősorban az elméleti (felfedező) tudományokra összpontosult. Az alkalmazott kutatások terén a korábbi években már kialakult munkacsoportok dolgoztak tovább a kriptográfia, bioinformatika és egyéb, az élettudományokban alkalmazott matematikai módszerek, illetve a neurális hálóknak témakörökben.

A Rényi Intézet Kriptográfiai kutatócsoportja 2016-ban jelentős szerepet vállalt az április 6. és 8. között Budapesten tartott COST (European Cooperation in Science and Technology) nemzetközi szervezet által részben szponzorált *CryptoAction Symposium* szervezésében, ahol több mint 200 résztvevő összesen 40 előadást hallhatott. Ugyancsak a kutatócsoport egyik tagját hívták meg a kolumbiai Universidad Nacional egyetemen szervezett *Encounters of Mathematicians* konferencián egy titokmegosztásról szóló előadás-sorozat megtartására. Csoportjuk vendégül látott egy prágai kutatót, akivel a kvantum titokmegosztás témakörben dolgoztak együtt.

Az intézet munkatársai számos kisebb bioinformatikai projektben vettek részt. Folytatták korábbi kutatásaikat a University of South Carolina és a University of Notre Dame munkatársaival. Ezen kutatásokból egy genomátrendeződésről szóló kézirat és három hálózatkutatásról szóló kézirat született, amelyek jelenleg még elbírálás alatt vannak. Három új kutatási témát kezdtek el, ebből diszkrét tomográfiából egy beadott kézirat van, öregedéskutatásból és hálózatok dinamikájából a kutatások még csak most kezdődtek el. A hálózati dinamika kutatása nemzetközi kollaborációban történik a ljubljani, pécsi és a szegedi egyetem munkatársaival. Az intézet és az MTA TTK alkotta konzorcium (a svájci Swiss Institute of Bioinformatics-szal kiegészítve) 2016-ban előkészített és benyújtott egy EU Spreading Excellence and Widening Participation WIDESPREAD-04-2017: Teaming Phase 1 projektet Teaming for Bioinformatics Focus in Hungary (BioinfHU) címmel.

Az intézet munkatársai 2016-ban részt vettek a „Pattern avoidance and genome sorting” című Dagstuhl szeminárium szervezésében és lebonyolításában. A szemináriumnak nagy sikere és nemzetközi visszhangja volt.

A Nagy hálózatok Lendület-kutatócsoport és a Limits of Structures ERC kutatócsoport munkatársainak alkalmazott kutatásai (a neurális hálózatok területén) 2016-ban arra irányultak, hogy az intézeten belül meghonosítsák az elmúlt néhány évben óriási jelentőségre

szert tett „Deep Learning” gépi tanulási paradigmát, továbbá feltárják annak meglepő, organikus kapcsolatát a Regularitási Lemma köré szerveződő elméleti matematikai eredményekkel.

A megcélzott kutatási profil kapcsolatot kíván teremteni az intézetre hagyományosan jellemző elméleti alap kutatás és a nagy ipari kutatóközpontokra (Google, Facebook stb.) jellemző alkalmazott kutatási tevékenység között. A kutatás fókuszában 2016-ban a generatív neuronháló modellek, illetve az úgynevezett reziduális hálózatok voltak.

A generatív neuronháló modellek feladata, hogy ismeretlen valószínűségi változókat fedezzen fel megadott példák alapján. Ez egy igen általános feladat, melyet jól szemléltet az alábbi példa: egy jól működő generatív neurális háló képes lehet hamisítványok létrehozására egy adott művész munkáinak megfigyelése alapján. A kutatócsoport eddig megalkotott modelljei természetesen erre még nem képesek, de már versenyképesek egyszerűbb, hasonló feladatok esetén, mint pl. a kézírás utánzása, vagy élethű emberi arcok megrajzolása.

A reziduális hálózatok egy rendkívül sikeres új paradigma „Deep Learning” modellek megalkotására, amely a gépi tanulási feladat megoldását egy olyan folyamatként értelmezi, amely egy kezdetben pontatlan megoldást finomít fokozatosan. A modellnek ígéretes kapcsolatai vannak az elméleti matematika legkülönbözőbb ágaival.

A tiszta matematikai alap kutatással ellentétben a deep learning kutatás hardver- és szoftver-erőforrásokban rendkívül intenzív munka. Ennek megfelelően jelentős erőfeszítést fordítottak arra, hogy a megfelelő hardver- és szoftver-infrastruktúra kiépüljön, és a kutatócsoport a szükséges technikai know-how-t megszerezze.

Az előzetes eredmények között az alábbiak említendők:

Empirikus Wasserstein-távolság optimalizálásán alapuló generatív neuronháló modell kidolgozása.

State-of-the-art teljesítményű rekurrens képfelismerő neuronháló, sztochasztikus mélységű reziduális hálózat relaxed weight-sharing alapú tanításával.

State-of-the-art eredmény a mesterséges intelligencia-kutatás standard CIFAR-100 benchmark feladatán, széles sztochasztikus mélységű reziduális hálózatokkal.

Neuronháló-alapú szemantikus tömörítési eljárás kidolgozása. 2-dimenziós Gauss RBF alapú autoencoder modell kidolgozása.

A kutatók szakmai előmenetele

Az intézet munkatársai közül 2016-ban egy kutató lett akadémikus és hat fiatal kutató szerzte meg a PhD fokozatot, hárman habilitáltak. Az év végén 10 akadémikus, 34 akadémiai doktor és 55 PhD fokozattal rendelkező, illetve kandidátus dolgozott az intézetben; 25-en még nem szereztek tudományos fokozatot. Emellett 13 kutató professor emeritus/emerita vesz részt az intézet tudományos munkájában (közülük 7 akadémikus, 6 akadémiai doktor). Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD tanulmányaikat folytató vagy éppen azt befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2016 folyamán további 5 fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémia által biztosított új, illetve megüresedett fiatal kutatói álláshelyeken. Ezekkel együtt 2016-ban összesen 20 fiatal kutató dolgozott az intézetben. Az intézet szerződéses kapcsolatban áll a Közép-Európai Egyetemmel (CEU), amelynek keretében 26 doktorandusz munkáját irányította intézeti kutató.

b) Tudomány és társadalom

Az intézet alapkutatói témáinak többsége sajnos nem alkalmas a társadalommal folytatott párbeszéd közvetlen tárgyának. Ugyanakkor a kutatók eredményei a médiában is megjelenítették az intézetben folytatott kutatásoknak a jelentőségét.

Az intézet munkatársai fontos szerepet vállalnak a matematika népszerűsítésében, ismeretterjesztő előadásokat tartanak középiskolások és egyetemisták számára. Rendszeresen sor kerül a Magyar Tudomány Ünnepe keretében az intézeti bemutató rendezvényre, ahol elsősorban középiskolások és tanáraik tájékozódhatnak a matematikusi pálya kihívásairól és szépségeiről, bár a 2016-os rendezvényen inkább az idősebb korosztály mutatott érdeklődést. Az intézet munkatársai részt vesznek a matematikai tehetségek gondozásában, 2016 során is számos matematikai tábor, versenyt és más rendezvényt szerveztek a tárgy iránt érdeklődő diákoknak. Az intézet szakmai háttérrel biztosít a középiskolák speciális matematikai tagozatai tanárainak is.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

Az intézet kutatói több budapesti és vidéki felsőoktatási intézmény (ELTE, BME, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Szegedi Tudományegyetem, Pannon Egyetem stb.) munkájában vesznek részt. Különösen jelentős a szerepük a doktorképzésben és a mesterszakos képzésben. Az intézet kutatói közül tizenhárman törzstagok különböző doktori iskolákban, 56 doktorandusz munkáját irányítják témavezetőként. Kiemelt jelentőségű az intézet számára a Közép-európai Egyetem (CEU) Matematikai Tanszékével folytatott együttműködés. A CEU matematikai doktori és mesterképzési programjának oktatói és témavezetői zömében az intézet kutatói közül kerülnek ki. A tanszék vezetője, és a doktori program irányítója is az intézet munkatársa. A Budapest Semesters in Mathematics angol nyelvű egyetemi részképzési program oktatóinak java része is az intézet kutatója. Ez a program az amerikai egyetemekre viszi el a magyar matematika hírért, és mintául szolgál más nemzetközi oktatási programoknak is. Az intézet számára nagy jelentőségű a tudományos utánpótlással való közvetlen kapcsolat, ennek jegyében 2016-ban az intézet 62 munkatársa, a teljes kutatói létszám 57%-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben, 4 TDK-dolgozat, 9 alapszakos és 22 mesterszakos diplomamunka témavezetését látták el az intézet kutatói.

Az akadémiai megújítási program részeként ismét lehetőség nyílt arra, hogy egyetemi kollégák egy vagy két szemesztert oktatási feladataiktól mentesülve az intézetben tölthessenek vendégkutatóként. E program keretében 2016 folyamán az ELTE-ről három, a Szegedi Tudományegyetemről és a Pannon Egyetemről pedig egy-egy oktató vett részt az MTA Rényi Intézetben folyó kutatómunkában.

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

Az MTA Rényi Intézet kutatói a matematikai közélet feladataiból hagyományosan számarányukon felül veszik ki részüket. Ezek között említhető az MTA Matematikai Tudományok Osztályában és akadémiai bizottságokban, az NKFIH testületeiben, a Bolyai János Matematikai Társulatban végzett munka. Az MTA III. Osztály elnöke, az MTA Matematikai Bizottság elnöke és titkára, a Matematikai Doktori Bizottság eddigi titkára, a Bioinformatikai Osztályközi Állandó bizottság egyik alelnöke, valamint titkára, a Bolyai

János Matematikai Társulat elnöke, tudományos szakosztályának elnöke és titkára, alkalmazott matematikai szakosztályának alelnöke mind az MTA Rényi Intézet kutatói.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet kutatói igen széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. A társszerzős munkák zömében a szerzők között az intézeti kutató(k) mellett külföldi matematikusok találhatók. Közös projektek és közösen szervezett konferenciák is jellemzőek.

Az intézet munkatársai közül 2016-ban huszonnyolcan vettek részt nemzetközi konferencia szervezésében, néhányan közülük több alkalommal is. Az intézet épületében folyó emeletráépítési munkák következtében a konferenciákat más helyszínre kellett telepíteni.

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

Az intézet kutatói összesen tizenegy nemzetközi tudományos bizottságban vettek részt. 164 alkalommal szerepel intézeti kutató neve nemzetközi folyóirat szerkesztő bizottságának névsorában. A munkatársak 2016-ban összesen 280 előadást tartottak nemzetközi rendezvényeken, ezek közül sokat meghívott, illetve plenáris előadóként.

Az intézetből 2016-ban nyolc kutató volt távol fél évnél hosszabb ideig a következő külföldi intézményekben: University of Chicago (USA), City University of New York (USA), National Science Foundation (USA), Auburn University (USA), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svájc), Lancaster University (Anglia), Technische Universität Graz (Ausztria).

Az intézeti kutatók által elnyert ERC támogatások és a Lendület projektek keretéből, illetve más forrásokból összesen 12 külföldi kutató dolgozott az intézetben 1–7 hónapot (az összesített időtartam 35 hónap), többek között Franciaországból, Svájcban, Izraelből, az USA-ból, Iránból, Tajvanról, Kínából, Belgiumból, Svédországból és Oroszországból. Az intézetben rövidebb időt töltő külföldi látogatók száma 2016-ban – a konferenciák résztvevőit nem számítva – 84 fő volt.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

Az intézet a korábbi évekhez hasonlóan jól szerepelt a hazai NKFIH kutatási témapályázatokon. 2016-ban újabb négy kutatási és egy SNN_16 (szlovén-magyar együttműködés) pályázat nyert el támogatást. Ezekon felül benyújtásra került egy újabb ERC_HU_16 pályázat (melyet azon kutatók részére írtak ki, akik az EU ERC pályázataikra „A” minősítést kaptak, de forrás hiányában az Európai Unió mégsem tudta támogatni őket), mely a korábban, 2015-ben nyertesként elbírált pályázattal együtt hivatalosan 2016-ban nyert és indult el. További két NKFIH_PD egyéni posztdoktori pályázatot is az intézetben dolgozó fiatal kollégák nyertek. A nagyszámú nyertes pályázat – köztük több, magas finanszírozású –, illetve a korábban, 2015-ben nyertes projektek 2016-os év eleji indulása eredményeként összességében az NKFIH kutatási projektek támogatása intézeti szinten 2016-ban a korábbi évek szintjéhez képest majdnem háromszorosára növekedett. Ez kisebb mértékben az összességében (országos szinten) is nagyobb kutatási témapályázati támogatásoknak köszönhető, jelentős részben azonban egyszeri, a további években nem feltétlenül

megismételhető pályázati formáknak (a 2016-ban indult két ERC_HU, illetve három nemzetközi – osztrák-magyar és szlovén-magyar – projekt adja a növekedés nagyobb részét).

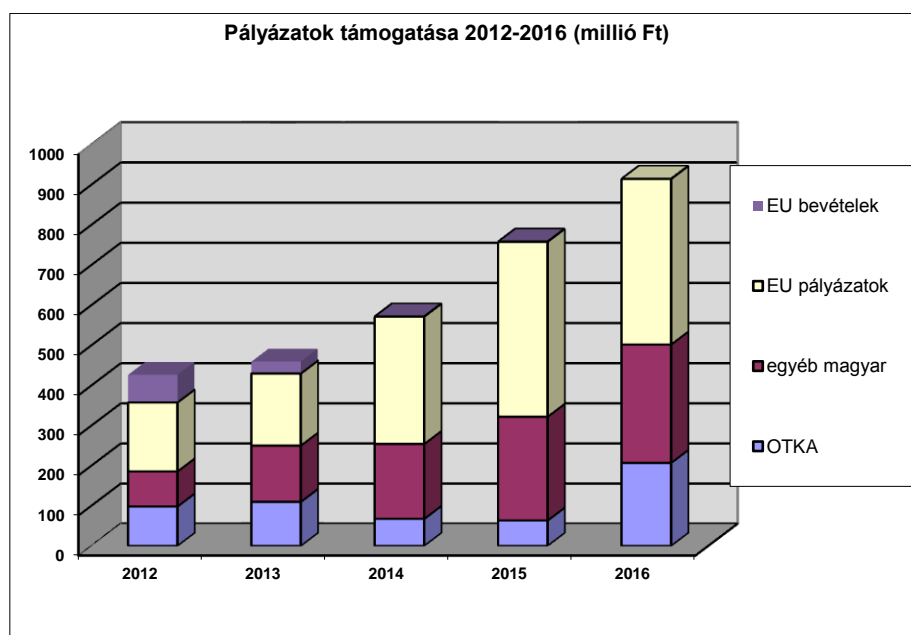
Az MTA pályázati formában elnyerhető projektjei közül egy az intézethez pályázó fiatal külföldi kolléga MTA Prémium posztdoktori kutatói pályázatát, az intézet szakmódszertani csoportja MTA szakmódszertani pályázatát, és egy külföldről hazatérő kutató Lendület pályázatát nyert, melyek összességében eredményezték, hogy az előző évi rekordszinthez hasonló magas arányt tett ki az intézet bevételei között az MTA és egyéb (nem NKFIH kutatási) pályázati támogatások aránya.

Nemzetközi pályázatok

Az MTA Rényi Intézet a matematikai felfedező kutatási projektjeivel nemzetközi szinten a European Research Council (ERC) kiírásaira és a mobilitási (Marie Curie) kiírásaira tud továbbra is eredményesen pályázni. A 2015 folyamán beadott ERC projektek közül egy Advanced és egy Consolidator kapott „A” értékelést, így ezek sikerrel pályáztak a NKFIH ERC_HU támogatására. Az Advanced pályázat újra benyújtásra került, „A” minősítést kapott, de a végső döntés még nem született meg. Egy H2020 MSCA mobilitási projekt nyert és indul el 2017 elején, illetve egy további hasonló projekt van várólistán. A fentiekén kívül több, konzorcionális projekt került beadásra, illetve áll előkészítés alatt.

Összességében az intézet 2016. évi pályázatokból származó bevétele újra meghaladta a korábbi évek hasonló bevételeit. Korábban a növekedés elsősorban az európai uniós pályázati bevételeknek volt köszönhető, míg 2016-ban ezek a bevételek és az MTA és egyéb források az előző évihez hasonlóan alakultak, a növekedést elsősorban az NKFIH kutatási témapályázatok eredményezték.

A következő diagram mutatja a pályázati bevételek alakulását az elmúlt 5 év folyamán (a bevételek számítása kisebb korrekcióval, átcsoportosítással történt az egyes évek közötti, főleg a speciális EU-s elszámolási szabályok okozta eltérések kiküszöbölésére).



V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Abért M, Glasner Y, Virág B: The measurable Kesten theorem. Ann. Probab., 44:(3) 1601-1646 (2016) <http://real.mtak.hu/44165/>
2. Bárányi I, Matoušek J, Pór A: Curves in \mathbb{R}^d intersecting every hyperplane at most $d + 1$ times. J. Eur. Math. Soc., 18:(11) 2469-2482 (2016) <http://real.mtak.hu/44195/>
3. Blomer V, Harcos G, Milićević D: Bounds for eigenforms on arithmetic hyperbolic 3-manifolds. Duke Math. J., 165:(4) 625-659 (2016) <http://real.mtak.hu/44369/>
4. Böröczky KJ, Henk M: Cone-volume measure of general centered convex bodies. Adv. Math., 286: 703-721 (2016) <http://real.mtak.hu/44378/>
5. Breuer T, Csiszár I: Measuring distribution model risk. Math. Finance, 26:(2) 395-411 (2016) <http://real.mtak.hu/44216/>
6. Carassus L, Rásonyi M: Maximization of nonconcave utility functions in discrete-time financial market models. Math. Oper. Res., 41:(1) 146-173 (2016) <http://real.mtak.hu/44160/>
7. Füredi Z, Kostochka A, Verstraëte J: Stability in the Erdős-Gallai theorems on cycles and paths. J. Comb. Theory B, 121: 197-228 (2016) <http://real.mtak.hu/44181/>
8. Harari D, Szamuely T: Local-global questions for tori over p -adic function fields. J. Algebraic Geom., 25:(3) 571-605 (2016) <http://real.mtak.hu/44233/>
9. Bodnár J, Némethi A: Lattice cohomology and rational cuspidal curves. Math. Res. Lett., 23:(2) 339-375 (2016) <http://real.mtak.hu/44213/>
10. Juhász I, Soukup L, Szentmiklóssy Z: Pinning down versus density. Isr. J. Math., 215:(2) 583-605 (2016) <http://real.mtak.hu/44236/>
11. Keleti T, Matolcsi M, de Oliveira Filho FM, Ruzsa IZ: Better bounds for planar sets avoiding unit distances. Discrete Comput. Geom., 55:(3) 642-661 (2016) <http://real.mtak.hu/44372/>
12. Kun G, Szegedy M: A new line of attack on the dichotomy conjecture. Eur. J. Combin., 52: 338-367 (2016) <http://real.mtak.hu/44212/>
13. Major P: Sharp tail distribution estimates for the supremum of a class of sums of i.i.d. random variables. Stoch. Proc. Appl., 126:(1) 100-117 (2016) <http://real.mtak.hu/32402/>
14. Maróti A: A lower bound for the number of conjugacy classes of a finite group. Adv. Math., 290: 1062-1078 (2016) <http://real.mtak.hu/44150/>
15. Némethi A, Sigurdsson B: The geometric genus of hypersurface singularities. J. Eur. Math. Soc., 18:(4) 828-851 (2016) <http://real.mtak.hu/44386/>
16. Pyber L, Szabó E: Growth in finite simple groups of Lie type. J. Am. Math. Soc., 29: 95-146 (2016) <http://real.mtak.hu/44517/>
17. Szemerédi E: Structural approach to subset sum problems. Found. Comput. Math., 16:(6) 1737-1749 (2016) <http://real.mtak.hu/44175/>

**AZ MTA RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET FŐBB MUTATÓI
ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	133	Ebből kutató ² :	109
PhD, kandidátus:	43	MTA doktora:	30
		Rendes tag és levelező tag:	7
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			8
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			40
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			168
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			166
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			12
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			136
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			129
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	109,624	Összes független hivatkozás száma (2015):	5698
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			6224
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 6	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			280
		poszterek száma:	9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	11	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	164
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			62
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	22	PhD:	56
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		771 369	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	16	Teljes saját bevétel:	714 403 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			30
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	207 407 E Ft
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			8
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	412 332 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		94 664	E Ft

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	771 369	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	714 403	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	207 407	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	412 332	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	12 563	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	82 101	E Ft

MTA SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

1111 Budapest, Kende u. 13-17; 1518 Budapest, Pf. 63.
telefon: (1) 279-6159; e-mail: monostori.laszlo@sztaki.mta.hu
honlap: <http://www.sztaki.hu/>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az intézet 2016-ban megfogalmazott küldetése szerint „erős – és jellemzően célzott – alapkutatási tevékenységre támaszkodva, széleskörű hazai és nemzetközi együttműködések keretében hoz létre új eredményeket, és támogatja azok alkalmazását a gazdaság és a társadalom fenntartható fejlődésének érdekében, ugyanakkor működési területén segít megőrizni és lehetőség szerint magasabb szintre emelni a hazai tudományos-műszaki kultúrát”.

Jelenlegi tevékenységük fő iránya a *kiber-fizikai rendszerek (Cyber-Physical Systems, CPS)* kutatása, mely összefogja és a nemzetközi kutatás egyik kiemelt áramlatába emeli munkájukat. E szellemben alakítják ki és üzemeltetik laboratóriumaikat (i4D intelligens tér, irányítástechnikai, SmartFactory, felhő-számítás, kooperatív kiber-fizika kutatási laboratóriumok), az elméleti kutatás és a mérnöki megközelítés új kölcsönhatásait létrehozva. A kiber-fizikai rendszerek olyan számítási struktúrák, melyek intenzív kapcsolatban állnak a környező fizikai világgal, annak folyamataival, egyúttal támogatják és hasznosítják az internet adatelérési és adatfeldolgozási szolgáltatásait. A kiber-fizikai megközelítések „okos” városokhoz, gyártási, közlekedési, logisztikai, energetikai rendszerekhez vezethetnek és hozzájárulhatnak egy újabb életminőség megteremtéséhez. A kiber-fizikai gyártórendszerek (*Cyber-Physical Production Systems, CPPS*) egyre inkább elfogadott nézet szerint megalapozhatják a 4. Ipari Forradalmat, melyet gyakran Industry 4.0-ként is említeneek. A kiber-fizikai rendszerekkel szembeni támasztott elvárások már most hatalmasak, és az újonnan megjelenő technológiákkal gyors ütemben bővülnek: robusztusság, önszerveződés, adaptív helyzetfelismerés, transzparencia, előreláthatóság, hatékonyság, interoperabilitás, globális nyomon követhetőség; csak a legfontosabbakat említve. A kooperatív irányítás, a multi-ágens rendszerek, a komplex adaptív rendszerek, az emergens (kibontakozó) rendszerek, a szenzorhálózatok, az adatbányászat stb. területén elért kiemelkedő eredmények további jelentős előrelépések iránti várakozást generálnak, folyamatossá téve így a kutatás iránti igényt.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A következőkben az intézet négy alapkutatási főirányának (számítástudomány, rendszer- és irányításmélelet, mérnöki és üzleti intelligencia, gépi érzékelés és interakció) bemutatása mellett öt alfejezet foglalja össze, hogy alapkutatási eredményeik miképpen támogatják az EU Horizon 2020-ban kiemelt jelentőségűnek tartott szakterületeket, amelyek egyben illeszkednek hazánk S3 szakosodási tervezetéhez, a Széchenyi 2020 célkitűzéseire és az Irinyi Tervhez. Így külön alfejezet taglalja a járműipar és közlekedés, a termelésinformatika és logisztika, az energia és fenntartható fejlődés, a biztonság és felügyelet, valamint a hálózatok, az elosztott számítások és a jövő internete témakörökben elért alkalmazásorientált eredményeiket.

ALAPKUTATÁSI FŐIRÁNYOK

Számítástudomány

Számítástudományi kutatásaik során több, egymással összefüggő terület szinergiáját aknázzák ki: ilyenek az algoritmusok elmélete, kiemelten a párhuzamosítás, az új hardver-architektúrák kihasználása céljából; az adatbányászat és információ-visszakeresés; a gépi tanulás, adatbázisok elmélete, illetve a nagyméretű (extremális) gráfok. Adattudománnyal kapcsolatos alap- és alkalmazott kutatásaik meghatározója a matematikusi és mérnöki munka együttélése: a kutatás alapvetően kísérleti jellegű, ugyanakkor az adatok óriási mérete miatt az eljárások mély algoritmuselméleti és valószínűség számítási ismereteken, matematikailag bizonyítható alapokon kell, hogy álljanak.

2016-ban elért főbb eredmények:

A *paraméteres algoritmusok* területén kutatásaik egyik fő iránya az úgynevezett négyzetgyök-jelenség síkgráfokon, vagyis az a jelenség, hogy síkgráfok esetén a legtöbb kombinatorikus problémára az optimális algoritmus a paraméter négyzetgyökében exponenciális. Korábbi eredményeket jelentős mértékben általánosítva és kiterjesztve megmutatták, hogy ez a jelenség fennáll számos olyan algoritmikus probléma esetén, amely minták keresését modellezi síkgráfokon. Hasonló eredményt sikerült elérni a síkbeli ponthalmazok háromszöghálóinak leszámolására is.

Az irányított gráfokkal modellezett *hálózat-tervezési problémák* két klasszikus feladata az egy adott pontból a többi terminál elérhetőségét biztosító minimális súlyú hálózat, illetve az összes terminál között minden irányban elérhetőséget biztosító hálózat tervezése. A két hasonlóan tűnő feladat nagyon különbözőképpen viselkedik paraméteres bonyolultság szempontjából. Számos további hálózat-tervezési feladatot lehet definiálni az elérhetőségi igények előírásával. Teljesen feltérképezték azokat az igénymintákat, amelyek esetén a probléma megoldható uniform polinomiális futási időben, megmutatva, hogy az összes többi esetben egy nehéz algoritmikus problémát kapunk.

Algebrai algoritmusok: randomizált polinom idejű algoritmust adtak háromnál több változós kvadratikus formák nemtriviális nullhelyeinek számítására páratlan karakterisztikájú véges test feletti függvénytest, mint alaptest felett. Az új módszer az inputforma kétfelé választásán nyugszik, ami után olyan értéket kell hatékonyan találni, amelyet mindkét kapott forma felvesz. Az eredmény véges testek feletti irreducibilis és bizonyos kongruencia feltételeknek eleget tevő polinomok számára vonatkozó erős becslésen is alapul.

Determinisztikus polinom idejű módszert javasoltak nem kommutatív mátrix rangszámítására, abban az esetben, amikor a mátrix elemei többváltozós lineáris polinomok. A nem kommutatív rang értelmezésekor a mátrixot a változók által generált szabad ferdetest feletti mátrixként kell tekinteni.

A fenti kutatásokat jórészt *ERC Starting Grant* és *MTA Lendület* támogatással végezték. Alapkutatási eredményeikre támaszkodó kutatás-fejlesztési tevékenységük legjelentősebb ipari partnerei az Ericsson Magyarország, az AEGON Magyarország, az OTP Bank, és a Bosch.

Rendszer- és irányításelmélet

A kutatás fő tématerületei a rendszermodellezés és -identifikáció, az adaptív és robusztus irányítási, jelfeldolgozási és szűrési módszerek, az elosztott és hálózatba kapcsolt rendszerek irányítása, valamint a folyamatrendszerek. A lineáris és nemlineáris rendszerek, mind

folytonos, mind diszkrét idejű megközelítésben, valamint a determinisztikus és sztochasztikus szemléletmód egyaránt figyelmet kapnak.

A nemlineáris rendszerek irányításelméleti problémáikhoz kapcsolódva LPV (Linear Parameter Varying) és qLPV (quasi Linear Parameter Varying) modelleket alkalmazó robusztus tervezés során felmerülő kérdésekben értek el új eredményeket. A konvencionális konvex LMI/LTI (Linear Matrix Inequality / Linear Time Invariant) tervezési eljárások LPV és qLPV feladatok megoldására általában igen konzervatív módon alkalmazhatók. Ez motiválja a lineáris rendszerek robusztus irányításának szeparációs elven és dinamikus IQC (Integral Quadratic Constraints) technikán alapuló megközelítését. Új eredmények születtek a dinamikus IQC-k által felvetett és a zárt körben stabilitásőrző faktorizációk jellemzésére, kimutatva az ún. Potapov-Ginsburg transzformáció szerepét. A Klein-féle megközelítés geometriai szemléletét előnyösen alkalmazták a robusztus kontroll világában: rávilágítottak a visszacsatolásos stabilitást garantáló halmaz és az azon értelmezhető stabilitást megőrző művelet tulajdonságainak csoportelméleti hátterére, valamint egyes, a robusztus stabilitási feladatok kezelése során alkalmazott megközelítések Jordan-algebrai kapcsolataira. Példát mutattak a kidolgozott geometriai eljárás Youla-parametrizációtól eltérő nem-triviális alkalmazására.

A hibadetektálás és a nulltér alapú strukturális rekonfiguráció módszereit alkalmazó hibatűrő irányítórendszerek szintézisére és analízisére új megoldásokat vezettek be. Kidolgozták az annihilátor rendszerek tervezésének módszereit LPV és qLPV esetekre. A bevezetett nulltér alapú technikákkal módszert adtak stabilitás és performanciaőrző hibatűrő rekonfiguráló algoritmusok tervezésére. Az itt elért eredményeket földi és légi járművek irányítási feladatainak megoldásában alkalmazták.

A flexibilis repülőgépszárnyak és az ilyen jellegű mérnöki objektumokat leíró igen nagydimenziós matematikai modellek szisztematikus redukciós eljárásai terén további jelentős kutatási erőfeszítések történtek. A nagyon nagydimenziós LPV és qLPV rendszerek modális dekompozíción alapuló és az állapotok konzisztenciáját megőrző modellredukciós eljárásaiban sikerült új eredményeket elérni.

A jelfeldolgozás és rendszeridentifikáció területén, a racionális ortogonális bázisokon alapuló identifikációs és a rendszerek pólusainak meghatározására kidolgozott módszerekre alapozva meghatároztak egy, a pólusok hiperbolikus távolságát figyelembe vevő H2 modellredukciós eljárást.

A rendszer- és irányításelméleti eredmények primer felhasználója az energia-, jármű- és közlekedéssipar (lásd a Járműipar és közlekedés, illetve az Energia és fenntartható fejlődés pontokat).

Mérnöki és üzleti intelligencia

A kiber-fizikai gyártó- és logisztikai rendszerek tervezésének, irányításának, illetve működésük változó viszonyokhoz való adaptálásának problémái több tudományterület – jellemzően a számítástudomány, az operációkutatás, a gyártástudomány és a tudásalapú módszerek – együttes művelését igénylik. A 2016-ban elért alapkutatói eredményeik közül elsősorban a következők emelendők ki:

Grid számítógépes környezetben vizsgálták különböző *ütemezési stratégiák* javítási lehetőségét a munkák összevonása által.

Approximációs sémákat adtak nem megújuló erőforrásokkal kiegészített *párhuzamos gépes ütemezési problémákra*, és feltételt adtak approximációs sémák létezésére. Az új eredményekkel együtt a maximális befejezési idő célfüggvény approximálhatósága egy- és többgépes esetben is teljes mértékben tisztázódott.

Az *erőforrás-korlátos legrövidebb út problémára* dolgoztak ki új lineáris programozás alapú egzakt megoldási módszereket. A számítási eredmények egyik érdekes tapasztalata, hogy a széleskörűen használt benchmark feladatok nagy része egyszerű előfeldolgozással optimálisan oldható meg.

Lineáris korlátozásokat és célfüggvényt, de egészértékű változókat is tartalmazó matematikai programok megoldásához használatos *vágásosztályokat* elemezték. Egon Balassal közösen megmutatták, hogy a Balas és Margo által nemrég definiált általánosított metszétvágások egybeesnek a jól ismert felemelés-és-vetítés vágásokkal, valamint számos elégséges feltételt adtak arra nézve, hogy az új vágásosztály különböző legyen az egyszerű metszétvágásoktól. Ennek az a jelentősége, hogy az új vágásosztály minőségileg különbözik számos, az egészértékű matematikai programok megoldására szolgáló programcsomagokban implementált vágásosztálytól.

Meghatározó kutatóközpontokkal többéves nemzetközi együttműködésben készült átfogó dolgozatban foglalták össze a *kiber-fizikai gyártórendszerek* sajátosságait, kihívásait és jövőbeli alkalmazási lehetőségeit, rámutatva, hogy a gyártás- és informatikai tudományok egymásra kölcsönösen ható és összefonódó fejlődésében minőségileg új szakasz kezdődött.

A korábbi SPS (*Sign-Perturbed Sums*) nem-aszimptotikus, eloszlás független identifikációs algoritmusuk továbbfejlesztéseként robusztus becslési módszert javasoltak, amely dinamikus rendszerek paraméteres becsléseihez nem-szimmetrikus zajeloszlások esetén is garantált konfidencia tartományokat tud konstruálni. A javasolt módszert kiterjesztették LAD (*Least Absolute Deviation*) alapú megközelítésekre is.

Kombinatorikus optimalizálási és geometriai következtetési módszerek felhasználásával hierarchikus megközelítést vezettek be *szereleési folyamattervezési* feladatok megoldására. A cél a szereleési feladatok lehető leghatékonyabb sorrendezése és erőforrásokhoz rendelése úgy, hogy a terv minden fontos technológiai, geometriai, stabilitási, stb. követelményt kielégítsen.

Módszert dolgoztak ki redundáns, sok szabadságfokú ipari robotok trajektória tervezési feladatának megoldására. Az eljárás a munkadarab vagy a gyártócella koordinátarendszerében megadott műveleteket a robot csuklóterében végzett mozgásokká transzformálja, miközben hatékonyan használja ki a robot kinematikai láncának redundanciáját egy adott célfüggvény (pl. ciklusidő) optimalizálására.

Új, Stackelberg-játékon és kétszintű programozáson alapuló módszert javasoltak intelligens energiahálózatokban végzett tarifaoptimalizálásra. A játékelméleti megközelítésben az energiahálózat üzemeltetője a fogyasztók különféle csoportjai modelljének felhasználásával úgy állíthatja be a tarifát, hogy a fogyasztók keresletválaszoként kiadódó hálózati szintű fogyasztás a lehető legjobban közelítse az üzemeltető által megcélzott értéket.

A kutatások részben az OTKA, részben az EU által támogatott projektek keretében folynak, amelyekben néhány esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak. Elméleti eredményeik alkalmazott, iparban is hasznosuló kutatásokat alapoztak meg (lásd a Termelésinformatika és logisztika, illetve az Energia és fenntartható fejlődés pontokat).

Gépi érzékelés és interakció

Projektív geometria: Kutatásaik újdonsága, hogy a képeken nemcsak a vetített pontok helyét, hanem a térbeli testek mintázatának torzulásait is figyelembe veszik. A torzulást a képek között affin transzformációkkal írják le, amelyet a torzulások elsőrendű közelítésével lehet megkapni. A kidolgozott módszerek továbbfejlesztik a szakmában még szinte egyeduralkodónak számító pontalapú rekonstrukciós módszereket. Megmutatták, hogy az alkalmazott kamera paraméterei, a pontok kétdimenziós és háromdimenziós pozíciói, illetve a lefényképezett térbeli alakzatok felületi normálisai hogyan függenek össze.

Levezették a képek között a síkok torzulását leíró ún. homográfia és az affin transzformáció közötti algebrai kapcsolatot. Bebizonyították, hogy egy mintapár közötti affin transzformációból és a minta két képen szereplő pozícióiból egyértelműen meghatározható a síkhomográfia, ha a képek között a fundamentális mátrix ismert. Ismeretlen fundamentális mátrix esetére pedig bebizonyították, hogy legkevesebb két mintapár szükséges a homográfia becsléséhez.

Megmutatták, hogy két kép között az érvényes affin transzformációkra két algebrai megkötést lehet felírni az epipoláris geometria segítségével. Bebizonyították, hogy egy adott affin transzformációhoz az optimálisan becsülhető legközelebbi érvényes transzformáció egy hatváltozós lineáris egyenletrendszer megoldásával rendelhető hozzá.

Kimutatták, hogy az affin transzformációk segítségével a lefényképezett tárgyak felületéhez tartozó térbeli normálvektorokat optimálisan ki lehet számítani. Igazolták, hogy az affin transzformációkat is felhasználva pontosabb becslést lehet adni, mintha kizárólag a pozíciókból számítják a projekciós mátrixokat.

A szakirodalomban leggyakrabban használt módszerekkel történő összehasonlításra kidolgoztak egy strukturált fényes szkennelésen alapuló rekonstrukciós módszert, amely képes nagy pontosságú, ún. *ground truth* adatok előállítására.

Multimodális távérzékelési adatok feldolgozása: Elméleti modellt dolgoztak ki, mely hatékonyan képes kezelni a multimodális adatokat (2D műholdképeket és 3D légi LIDAR pontfelhőket), illetve multitemporális adathalmaz esetén követni tudja az idő során bekövetkezett változásokat.

Mélytanulási eljárások képelemzésre és alakfelismerésre: Mély konvolúciós hálózatokkal új eredményeket értek el a szürke képek automatikus kiszínezésében, valamint a képi adatbázisok hatékony alkalmazásában.

A modern *mesterséges szemlencsék* több fókuszú leképezést valósítanak meg, ami lehetővé teszi a távoli és közeli objektumok éleslátását szemüveg alkalmazása nélkül. Multifokális videók készítésével, szimulációk segítségével megvizsgálták, hogyan reagál az emberi látórendszer arra, hogy ha egy látványnak egyszerre egy éles és életlen változata is a retinára vetül egy ilyen optika használatakor. A szimuláció alapján meghatározták a figyelmi (saliency) térképeket, és összehasonlították a kétfókuszú és az egyfókuszú esetben a figyelmi aktivitás gócpontjait. Az eredmények azt mutatták, hogy a különbség normál esetben nem jelentős, azaz az így megváltozott leképezés nem zavarja számottevően az automatikus figyelmi funkciókat.

A *holografikus képalkotás* fontos része a fókuszkeresés, a tárgy rekonstrukciós síkjának pontos megállapítása. Kidolgoztak a numerikus optika területén egy eljárást, amely az input objektumok képének frekvenciatérben történő manipulálásával – a numerikus apertúra utólagos változtatásával – képes az objektumok egyes képi tulajdonságait kiemelni, ezzel

javítva a hagyományos kontraszt vagy intenzitás maximumon alapuló fókuszkereső módszerek teljesítményét, amelyek a holográfia területén e nélkül gyenge teljesítményt nyújtanak.

KUTATÁS-FEJLESZTÉSI TEVÉKENYSÉGEK

Járműipar és közlekedés

A járműipart és közlekedést érintő technológiai fejlesztéseket jellemzően a közúti és légi közlekedés eszközei és rendszerei strukturálják. Jelentős szerepet kap a kooperatív rendszerek elmélete, a járműirányító rendszerek tervezésének integrált módszerei, a korszerű hálózati kommunikációs eljárások, a járműfedélzeti szabályozó rendszerek hibatűrő kialakításai, valamint a vezetéstámogató rendszerek.

Földi gépjárművek és közlekedés

A *SEPPAC* projektben az intelligens közúti közlekedéshez és infrastruktúra-fejlesztéshez kapcsolódó kutatás-fejlesztési tevékenység haszongépjárművek sebességprofiljának energiaoptimalt tervezésére irányult. Itt az üzemanyag minimalizálásának igénye is megjelenik a menetidő minimalizálására vonatkozó szokásos elvárás mellett. A megoldás nagyszámú korlátozó tényezőt képes figyelembe venni, úgy, mint a domborzati viszonyokat, a forgalmi előírásokat, az időjárás és a folyamatosan változó forgalmi körülményeket. A kidolgozott algoritmusok hatékonyságát mind számítógépes szimulációs, mind valós környezetben igazolták.

Hybrid vezérlés: A hibrid és elektromos közúti járművek irányítórendszereinek összehangolt működtetésére elosztott és hierarchikus járműarchitektúrákat dolgoztak ki. Megoldások születtek a szenzorfüziora és kommunikációs hálózatokra épülő integrált és kooperatív robusztus járműirányításokra, amelyekkel a biztonságos, hatékony és gazdaságos üzem biztosítható.

Egy, a gépjárművezetőt támogató *kamera alapú, közlekedési jelzéseket és úttípust/környezetet érzékelő rendszer* kifejlesztése a Robert Bosch Tudásközpontban folyó munkákhoz kapcsolódott. Haszongépjárművek hatékony és gazdaságos működtetésére részlegesen automatizált járműplatform került kidolgozásra az üzemeltető és a gyártó igényeinek figyelembevételével a Knorr Bremse Fékrendszerek Kft.-vel folytatott kooperáció során.

Mozgó tárgyak sebességének mérésére terveztek egymásbaágyazott, szimultán működésre képes, különböző érzékenységű *fotoszenzor mátrixokat tartalmazó érzékelő tömböt*. A szimulációk, illetve az előzetes mérések szerint a gyártás alatt levő szilícium chip képes lesz egyszerre éles képet is készíteni és a mozgó objektumok sebességét is mérni egyetlen expozíció segítségével. Az alacsony árfekvésű eszköz az intelligens város alkalmazásban kaphat jelentős szerepet.

Helyszínerzékelés térinformatikai adatbázis háttérrel: Új algoritmikus eszköztárat fejlesztettek ki az autós környezetérzékelés és a térinformatikai (GIS) rendszerekben található pontos 3D pontfelhőtérképek együttes kiaknázásának támogatására, amivel a korszerű érzékelőkkel felszerelt autók valós időben juthatnak releváns információhoz a GIS rendszerek alapján történő gyors navigáláshoz, valamint lehetővé válik a járművek szenzoradatainak felhasználása a GIS rendszerek bővítéséhez és frissítéséhez.

Légi közlekedés

A *VISION projekt* a légi közlekedés biztonságának javítását célozza új technológiákat használva a légi járművek navigációs és irányítási rendszerének támogatására. A célok között szerepel a repülőgépes navigáció kiegészítése gépi látás alapú rendszerekkel és fejlett előrejelzési módszerek alkalmazásával. A projekt keretében automatikus leszállást segítő rendszerek adatfeldolgozási, képfeldolgozási és szenzorfüziós módszereinek kutatása zajlott. Ennek során olyan új képfeldolgozási és szenzorfüziós módszereket dolgoztak ki, amelyek használatával lehetőség nyílik az adott geometriával rendelkező leszállóhely detektálására, valamint a gép és a pálya küszöbének távolságbecslésére és folyamatos felügyeletére. A kutatáshoz kapcsolódóan a pilóta nélküli légi járművek automatikus leszállító algoritmusait adaptálták a különböző (ILS, GPS) szenzorok kiesését figyelembe vevő újrakonfigurálható irányításokhoz. A megoldást a speciális feladatra létrehozott szimulációs környezetben tesztelték.

Fedélzeti látórendszer segítségével vizuális alapú navigációs eszközt készítettek, amely képes a robotrepülőgép pontatlan inerciális szenzor adatait pontosítani (pl. a horizont vonalának valós idejű detektálásával), illetve a leszállópályához közelítve meg tudja állapítani a gép pozícióját és térbeli helyzetét a többi szenzor esetleges meghibásodása mellett is, ezáltal növelve a repülésbiztonságot.

Az ipari partnerek (Airbus, Bosch, Knorr-Bremse) bevonásával végzett európai és nemzeti kutatási projektekben az elméleti eredmények gyakorlati alkalmazhatóságát szem előtt tartva értek el ipari felhasználásra előkészített eredményeket a korszerű járműfedélzeti irányítórendszerek hibátűrő kialakításának tervezése, a járműflották koordinált irányítása, az intelligens vezető nélküli járműirányítási megoldások, szenzorfüziós módszerek alkalmazása és az elektronikus fék és kormány alkalmazásának integrált irányítási módszerei terén.

Termelésinformatika és logisztika

A termelésinformatikai és logisztikai K+F+I tevékenység termelő, szolgáltató és logisztikai rendszerek tervezésére és modellezésére, valamint azok működésének irányítására, optimalizálására, monitorozására és valós viszonyokhoz való adaptálására irányul, üzemi, vállalati és hálózati szinten egyaránt. A legfontosabb, 2016-ban elért eredmények a következők:

Moduláris, újrakonfigurálható szerelőrendszerek életciklus menedzsmentjéhez új módszertant fejlesztettek, amely segítségével minimalizálni lehet a rendszer teljes életciklus költségét, figyelembe véve a várható üzemeltetési költségeket már a rendszer tervezési fázisában.

Olyan *robosztus termelés- és kapacitástervezési módszertant* dolgoztak ki, amely a rugalmas, kézi szerelősorok esetén biztosítja a tervek végrehajthatóságát sztochasztikus műveleti idők, és változó termékhiba-arányok esetén is, minimalizálva a gyártási költségeket.

Az Audi Motor Hungaria Kft. részére fejlesztett egyedi *termelés-tervező rendszer* validálását és finomhangolását végezték az összes gyártósoron, és támogatták a rendszer üzemi bevezetést megelőző pilot tesztet.

A Hitachi Manufacturing Technology Research Center-rel, illetve a Fraunhofer Társaság stuttgarti intézetével közösen olyan *Manufacturing Service Bus (MSB)* alapú elosztott rendszert fejlesztettek ki, amelyben földrajzilag különálló, intelligens vezérlések egyszerűen

és biztonságosan kapcsolhatók össze, logisztikai és gyártási adataik megosztása érdekében. Az elosztott rendszer valós idejű monitorozó, előrejelző és tervező modullal is rendelkezik.

Szervezeti heterogenitás esetén – különösen dinamikusan változó hálózatokban – az adatszintű együttműködést és a valós idejű adatfeldolgozást biztosítja az a közös adattípusnyelv, az adatfolyam hálózat helyességét garantáló típusinferencia algoritmus valamint a reaktív-adatfolyam keretrendszer, melyeket egy logisztikai hálózatra is adaptáltak.

Az egyre növekvő egyedi piaci igényekre reagálni képes termelési rendszerek folyamatainak és komplexitásának megfelelő, új információtechnológiai architektúrák fejlődési trendjét elemezték és meghatározták az *interoperabilitás* követelményeit.

Az AQ Anton cég számára kifejlesztett betanított mesterséges neurális hálózatmodellek beépítésre kerültek a megmunkáló gépek vezérléseibe, ahol üzemi körülmények közt valós időben működve azonosítják egyes megmunkálási műveletek kritikus állapotait.

Az Opel Szentgotthárd Kft. számára kialakításra került egy üzemcsarnok szintű adatgyűjtő, -tároló, valamint konfigurálható beszámolókat és kimutatásokat kezelő *üzleti intelligencia szoftverrendszer*. A megoldás a cégcsoporton belül nemzetközi viszonylatban is mintaként szolgál.

A termelésinformatikai és logisztikai témakörökkel kapcsolatos alkalmazott kutatás-fejlesztés és ipari bevezetés jó része az Intézetben 2010-óta működő *Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont* keretében folyt.

Energia és fenntartható fejlődés

A fenntartható fejlődés egyik alapvető feltétele az energiatermelő, -szállító, és -átalakító rendszerek adaptálása a változó igényekhez és lehetőségekhez. E rendszerek irányítása és felügyelete területén a megújulás egyik kulcsa az informatikai eszköztár megnövelt adatfeldolgozási, -tárolási és -továbbítási kapacitása, ami az automatizálás és a hatékonyság növelése terén is új lehetőségeket nyit, de egyben új problémákat is felvet. Kiemelten foglalkoztak az alábbi témákkal:

Energiatermelő rendszerek irányítása és felügyelete területén az intézet egyik legrégebbi műltra visszatekintő ipari tevékenysége az MVM Paksi Atomerőmű Zrt.-vel történő stratégiai együttműködésen alapul. Az erőmű üzemidő hosszabbítási projektjéhez kapcsolódóan ebben az évben is kiemelt feladat volt szakértői részvételük a meglévő irányítástechnikai rendszerek (pl. Atomerőmű Reaktorvédelmi Rendszerének, a Szabályozó és Biztonságvédelmi rendszernek) több évre nyúló felújításában és más ilyen jellegű projektek előkészítésében. Az intézet folytatta az erőmű kapacitás-fenntartási munkáira vonatkozó együttműködést, valamint közreműködött a felépítendő új blokkok előkészítésével kapcsolatos irányítástechnikai szakértői feladataiban.

A GE Hungary számára egy *okos város* projekt keretében kifejlesztettek egy felhőalapú analitikai modult, amely modern jelfeldolgozási és statisztikus tanulási módszereket alkalmazva elemezi Budapest XII. kerületében, a közvilágítási rendszerre telepített szenzorhálózat jeleit, és megbízhatósági információkkal ellátott előrejelzéseket és térképeket készít a mért mennyiségek alapján.

Központi vezérlő architektúrát javasoltak *intelligens közvilágítási rendszerekhez*, amely lehetővé teszi a világítási rendszer irányítását, a rendszer és környezetének monitorozását és az összegyűjtött adatok szolgáltatását, valamint a rendszer optimális energiamedzsmentjét.

A megépült prototípusból származó mérési adatokon vizsgálták a hasonló rendszerek kulcsfontosságú műszaki és gazdaságossági kérdéseit.

Befejezték az EC Joint Research Centre (JRC) megbízásából végzett speciális, hatékony *energiagazdálkodás* célját szolgáló matematikai megoldó rendszer fejlesztését. Az eredmény egy olyan optimalizálási motor, amely képes nagyméretű lineáris és másodrendű kúp programozási feladatok hatékony megoldására, továbbá elkészítettek egy interfészt az optimalizálási motor és az AIMMS modellező rendszer között.

Biztonság és felügyelet

Az Európai Kiberbiztonsági Kampány során több országon átívelő összehangolt *kibertámadás kezelésével* kapcsolatosan komplex elemző és koordinációs feladatok megoldását végezték el. A ma alkalmazott *hiperspektrális kamerák* képalkotó jellegüknel fogva csak néhány (4-25) hullámhosszon méri a spektrumot. Ennek áthidalására olyan numerikus módszert dolgoztak ki, amely – kihasználva, hogy a spektrum lokálisan sima és csak pozitív értékekből áll – a teljes spektrumot visszaállítja. Megfelelő optikai szűrők alkalmazásával a spektrumrekonstrukció hibája egy tartományon belül annyira alacsony lesz, hogy a számított folytonos spektrum használhatóvá válik orvosi, élelmiszeripari, illetve mezőgazdasági alkalmazásokban.

Fluoreszcens és digitális holografikus mikroszkópia kombinálásával kidolgoztak és szabadalmaztattak egy új mérési módszert, illetve eszközt ritka mikrobiológiai minták elemzésére. Az új eszköz kiterjeszti a hagyományosan 2D fluoreszcens mikroszkópiát a harmadik dimenzióba, ezáltal több százszorosára növelve a vizsgálati minta térfogatát. A mintában lévő algák fluoreszcens festékanyagot tartalmaznak, amit a fluoreszcens képérzékelő képes regisztráltan detektálni, és pozíciójukat átvinni a holografikus mikroszkóp képére.

Hálózatok, hálózati rendszerek és szolgáltatások, a jövő internete

A *kommunikációs hálózatok* körében fontos fogalom az SRLG (Shared Risk Link Group). Ez összeköttetések olyan halmaza, amelyek esetleges együttes meghibásodására felkészítik a hálózatot. Az alaphálózat tervezésekor az SRLG-k listájának a megtervezése igen fontos; az itt elkövetett pontatlanság nagymértékben csökkentheti a hálózat megbízhatóságát. Regionális hibáról akkor beszélünk, amikor egyszerre több, fizikai értelemben egymáshoz közeli hálózati elem hibásodik meg. Általános vélekedés szerint a lehetséges regionális hibák száma túlságosan magas ahhoz, hogy SRLG-ként felsoroljuk őket. Ezt a vélekedést cáfolták meg egy fontos esetben, amikor korlát adható a regionális hiba átmérőjére. Gyors algoritmust találtak a lehetséges SRLG-k felsorolására, amelyek számára kedvező felső korlátot adtak a hálózat alapvető paramétereinek a függvényében.

Occopus alapú munkafolyam szervezés: Felhőalapú rendszerek használhatóságának kiterjesztése érdekében intenzív kutatásokat folytattak olyan eszközök kidolgozására, amik lehetővé teszik az alkalmazók számára, hogy komplex infrastruktúrákat tudjanak dinamikusan és skálázhatóan létrehozni. Ennek keretében továbbfejlesztették az Occopus cloud orchestrator rendszert és 4 új verziót hoztak nyilvánosságra.

Az egyre népszerűbb *docker konténer alapú alkalmazások* támogatására kidolgozták a docker klaszter infrastruktúra létrehozásának módját az MTA Felhő-re és az általában elérhető legfontosabb kutatási és kereskedelmi felhőalapú rendszerek számára.

Precíziós mezőgazdaság: továbbfejlesztettek egy, a régióban egyedülálló és kivételesen nagyszabású kutatási infrastruktúrát a precíziós mezőgazdaság elterjedésének támogatására. 2016-ban a kialakított Big Data és felhő alapú infrastruktúra közel 1000 kihelyezett komplex szenzoroszlop, több mint 50 gazdálkodó, összesen 110 mezőgazdasági területének mintegy 8000 hektárjáról gyűjt adatokat a döntéstámogatás hatékony előkészítéséhez.

b) Tudomány és társadalom

Az *MTMT (Magyar Tudományos Művek Tára)* országos hatáskörű állami regiszter, amely speciális biztonsági és használati követelményeket támaszt. Készítik az országos tudományos publikáció-nyilvántartási rendszer új digitális archívumi szoftverrendszerét. A projekt keretében ebben az évben kifejlesztették a rendszer végső verzióját, és elkezdődött a rendszer következő évi bevezetésével végződő tesztelési és integrációs lépéssorozat.

Kidolgozták az *MTA Cloud koncepcióját*, és 2016. október 1-én átadták az akadémiai hálózat kutatóinak használatra. 2016 végéig az MTA Cloud szolgáltatást 8 akadémiai intézetből 18 projekt alkalmazta. Az európai Grid és Cloud infrastruktúrákért felelős EGI szervezettel együttműködési tárgyalások folynak, hogy hosszú távon az MTA Cloud legyen része az európai EGI Federated Cloud infrastruktúrának.

Az elmúlt 21 évhez hasonlóan folyamatosan üzemeltették az országban egyedülálló *KOPI plágiumkereső* internetes szolgáltatást és a *SZTAKISzótárt*, amely 2016-ban a kínai szótárral bővült és további nyelvbővítés is folyamatban van.

2016 májusában vezetésükkel megalakult a hazai kutatóintézetek, oktatási intézmények és magyarországi telephellyel rendelkező vállalkozások részvételével az *Ipar 4.0 Nemzeti Technológiai Platform (I4.0 NTP)*. Egyebek közt megszervezték az év során az I4.0 NTP két plenáris ülését, részt vettek az NTP mind a hét munkacsoportjában, az általuk vezetett Stratégia Munkacsoportban irányították a kormányzat számára készített „*Ipar 4.0 rövidtávú cselekvési terv*” kidolgozását, és részt vettek egy országos felmérés előkészítésében.

A HUNGEXPO-n évente megrendezett *Ipar Napjai* kiállításon „*Ipar 4.0: Új kihívások és lehetőségek*” címmel műhelytalálkozót szerveztek, ahol öt előadásban mutatták be kurrens kutatási-fejlesztési eredményeiket (2016. május 24.).

2016 áprilisában az intézet által vezetett RobustPlaNet európai FP7 projekt sikeresen mutatkozott be a *Hannoveri Vásáron*. A kiállításon, külön szervezett szekcióban, a kutatók és fejlesztők demonstrálták a gyártórendszerek újrakonfigurációjában, a gyártókapacitások, valamint a termelésstervezés optimalizálásban elért eredményeiket.

A „Európai Robotikai Hét” (*European Robotics Week, ERW*) több mint 800 regisztrált eseménnyel 2016-ban Európa kiemelkedő ismeretterjesztői programjai közé tartozott. A jövő nemzedékének tájékoztatása érdekében óvodásokat is fogadtak a rendezvény keretében.

Az intézet kommunikációs tevékenységét korszerű csatornák, transzparencia, társadalmi felelősségvállalás, illetve a kutatói és marketing szemlélet dinamikus összeegyeztetése jellemzi. 2016-ban mintegy 60 kiadott sajtóközleménnyel és csaknem 250 médiamegjelenéssel a korábbi éveket is sikerült felülmúlniuk a külső kommunikációban. Az online média mellett tovább erősítették televíziós és rádiós, valamint nyomtatott médiás kapcsolataikat. 2016-ban cikksorozat jelent meg az intézet falai között zajló munkáról többek között a *Forbes*, *Computerworld*, *GyártásTrend*, *Techstory*, *Techmonitor*, *Piac és Profit*, *Magyar Idők*, valamint az *IT Business* hasábjain. A partnerek hírfolyamai mellett számos eredményük jelent meg a legnagyobb szakmai portálokon, szakújságok hasábjain, és

szakértők több ízben nyilatkoztak a fontosabb kereskedelmi médiumokban – *Kossuth Rádió, RTL Klub, hirado.hu, index.hu, origo.hu, hvg.hu*, stb. – is. Az intézet naponta frissülő tartalommal volt jelen a közösségi médiában - *Facebook, LinkedIn*, Wikipédia -, de a videó megosztókon is - *YouTube, Videotorium* - magas a látogatottsága.

2016 végén elindult az intézet *új honlapja*, amely formájában, technológiájában, struktúrájában és tartalmában egyaránt illeszkedik az akadémiai nívóhoz, a 21. századi elvárásokhoz és célcsoportjaik tartalomfogyasztási igényeihez.

A *GUIDE@HAND* okostelefonos alkalmazáscsalád folyamatos fejlesztésének eredményeként már hatvan, az alkalmazásboltokból (App Store, Google Play) túlnyomórészt ingyen letölthető alkalmazás érhető el, többek között a kulturális örökség védelme, a turizmus, az oktatás, a sport, a kultúra és tudomány területén. Példaként a Széchenyi István Egyetemet, az Ipar 4.0 Nemzeti Technológiai Platformot, a Poptörténeti Tanösvényt, a Víz Világnapja és a Múzeumok Éjszakája eseményeit bemutató alkalmazások, az egészséget és az aktív életmódot támogató D+ Sport okostelefonos alkalmazás, valamint a „Ferencváros a forradalomban”, a „Pálos túra”, a Költészet Napjára készített „Ünnepi szonettkoszorú” vagy az első számítógépeket bemutató „Kalandos időutazás a múltban” című valós és virtuális séták említhetők meg.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok, részvétel a 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, Corvinus, Pannon Egyetem, PTE, ME, PPKE, CEU, Kecskeméti Egyetem. Átlagosan mintegy 20 PhD hallgató végzi kutatómunkáját az intézetben, vezető kutatók témavezetése mellett. A hazai doktori iskolákban munkatársaik 25 esetben szerepelnek külső és 5 ízben belső alapító tagként.

2016-ban együttműködési megállapodást írtak alá a BME-vel és az ELTE-vel közös, autonóm járműfejlesztési irányzatú MSc képzés(ek) kialakítására és végzésére.

Nemzetközi és kiemelkedő országos rendezvények szervezése

2016. május 26-28. között rendezték meg Budapesten, az ELTE-vel együttműködve, az *European Chapter on Combinatorial Optimization* 29. konferenciáját (ECCO 2016).

Az intézet társszervezésében 2016-ban is megrendezésre került a *VIII. Magyar Számítógépes Grafika és Geometria Konferencia*. Közreműködtek a 2016. október 24–26. között az ELTE Informatikai Karán tartott *Informatics Europe Konferencia* megszervezésében.

Szeptember 4-6. között az *IMEKO (International Measurement Confederation)* nemzetközi tudományos szervezet az intézetben tartotta 59. *Közyűlését*. Októberben az intézet adott otthon az *ERCIM (European Research Consortium on Informatics and Mathematics)* éves *Közyűlésének* és az *Euróai Manufuture High Level Group* értekezletének.

A nagy ismertségnek örvendő *RecSys Challenge* 2016. évi versenyét az intézet valósította meg a XING professzionális közösségi portállal. A Németországban nagyon elterjedt XING

segítségével többek között munkát lehet keresni, illetve álláshirdetéseket lehet feladni. Jelenleg a XING több mint 15 millió felhasználóval és 1 millió álláshirdetéssel rendelkezik. A XING célja a felhasználói számára legrelevánsabb állásajánlatok kiválasztása. A verseny során ezt a feladatot kellett a résztvevőknek a lehető legpontosabban megoldaniuk. A verseny záró rendezvénye az *ACM RecSys 2016 Konferencián*, Bostonban történt.

Az OTP Bankkal együttműködve megszervezték a legfontosabb európai gépi tanulási konferencia, az *ECML/PKDD Discovery Challenge 2016 Bankkártya Használatelemző Versenyét*. Cél volt két feladatban megjósolni a banki felhasználók viselkedését. A nemzetközi mezőnyben több mint 30 csapat mérettetett meg. Az eredményeket az ECML/PKDD 2016 konferencián Olaszországban mutatták be.

Részt vettek a *MOL Bubi Adatelemző Verseny* megszervezésében is.

Nemzetközi kapcsolatok

Az Intézet munkatársai aktívan közreműködnek témakörük legjelentősebb nemzetközi tudományos szervezeteinek (*IEEE, CIRP, IFAC, IMEKO, IAPR*) vezetésében, munkabizottságaiban és ezek egyes konferenciáinak, ill. műhelytalálkozóinak előkészítésében.

Folytatva sikeres szereplésüket az EU kutatási programjaiban – a VII. Keretprogramban 45 támogatást nyert projektben voltak résztvevők, 8 esetben konzorciumvezetői szerepet is elláttak – a Horizon 2020 program keretében eddig 12 elnyert projektről tudnak beszámolni, melyek közül háromban konzorciumvezetők.

Az intézet vezetésével készült „*Termelésinformatikai és Termelésirányítási Kiválósági Központ*” (*EPIC*) pályázat, amelyet az EU *Horizon 2020 Widening* program legnagyobb presztízsű, ún. *Teaming* kutatási kiválósági programjának keretében nyújtottak be, az európai rangsorban 2. helyezést ért el. Ezzel az Intézet, a német Fraunhofer Társaság, valamint a BME Közlekedés- és Járműmérnöki, valamint Gépészmérnöki Karai közti hosszú távú európai kooperáció intézményes alapjait teremtették meg. Egyrészt az EU által 2001-ben az intézetnek adományozott kiválósági központ cím, másrészt a 2010 óta sikeresen működő a Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont (FhG PMI) alapján így most az Intézetben létrejöhet a *kiber-fizikai rendszerek nemzetközileg elismert kiválósági központja*.

Az intézet jelentős gyakorlattal és projekttapasztalattal rendelkezik a kereskedelmi célú repülést és a gépjárműipart érintő kutatások és technológia fejlesztések területén. Az avionikai kutatások tekintetében a *Minnesotai Egyetem* repüléstechnikai tanszékével, az *USA Haditengerészetének Kutatási Hivatalával (ONR)*, a *Bordeaux-i Egyetem* rendszerelméleti laboratóriumával, valamint a német (DLR) és Európai Űrügynökséggel (ESA) ápolt kapcsolatok említendők.

Folytatódott a *Hitachi Ltd., Manufacturing Technology Research Center*-rel a többéves együttműködés, ami ebben az évben is közös publikációhoz, két nemzetközi szabadalom benyújtásához és egy Hitachi-Fraunhofer-SZTAKI közös kutatási projekt indításához vezetett.

Otthont adnak a *World Wide Web Consortium Magyar Irodájának*, amely részt vesz a munkacsoportok tevékenységében, ezáltal közvetlenül hozzájárul a web fejlesztéséhez, valamint korai információkkal rendelkezik a web fejlődésének várható irányáról. Segíti a W3C nemzetközi szabványainak magyar elterjesztését, a W3C technológiákkal kapcsolatban felvilágosítást nyújt, és összekapcsolja az érdeklődőket a nemzetközi szakemberekkel.

Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok

A termelésinformatikai és logisztikai témakörökkel kapcsolatos alkalmazott kutatás-fejlesztés és ipari bevezetés jó része a *Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont* keretében folyt. Számos kis- és középméretű vállalat mellett a következő jelentős nagyvállalatokkal tartottak fenn kutatási-fejlesztési kapcsolatot: Audi Motor Hungaria (termeléstervező rendszer fejlesztése), GE Hungary (okos város), Opel (vizuális felismerés), Volvo (ember-robot szimbiózis a szerelésben), Knorr-Bremse Fékrendszerek Kft. (gyártórendszer konfiguráció), Festo, BPW, AQ Anton, Aventics Hungary, Hoya (digitális gyártás).

Folytatódott a Hitachi Ltd., *Manufacturing Technology Research Center*-rel az immár tízéves közös kutatás. Stratégiai együttműködés keretében biztosítják a Siemens PLM szoftver *Tecnomatix* termékvonálának egyik kiemelkedő hazai kompetenciaközpontját.

Az intézet a felfedező kutatások eredményeivel járul hozzá a Győrben folyó, kiemelkedő színvonalú járműipari kutatásokhoz, jelenlétével egyidejűleg támogatva az alapvetően régiós műszaki és természettudományos K+F+I tevékenységeket. Az együttműködés bázisa az MTA által alapított és a győri Széchenyi István Egyetemen létrejött *Járműtechnológiai Kutatások Kiválósági Központja (J3K)*. Az új kutatóközpont működését az MTA, az Audi Hungaria, az egyetem és Győr városa együtt biztosítja.

Munkatársaik részt vettek a Zalaegerszegen megépítendő és az önvezető járművek prototípusainak kötelező ellenőrzését és azok műszaki teljesítménytesztjeinek lebonyolítását lehetővé tevő autóiipari tesztpálya specifikációs munkáiban. Szakértői közreműködtek az önvezető járművek közúton történő ellenőrző méréseinek lebonyolítását és az automatizált járművek forgalomba bocsátását szabályozó jogszabály megfogalmazásában.

Energetikai területen a meglévő blokkok hosszú távú biztonságos üzemeltetésének irányítástechnikai feladataiban az MVM Paksi Atomerőmű Zrt.-vel, míg a későbbi kapacitás-fenntartási feladatok irányítástechnikai vonatkozásaiban a MVM Paks II. Atomerőmű Fejlesztő Zrt.-vel és az MVM ERBE ENERGETIKA Mérnökiroda Zrt.-vel működnek együtt.

Az intézet győri telephelye után 2016-ban Kecskeméten is telephelyet hozott létre.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

EPIC Center of Excellence in Production Informatics and Control
(EU H2020 Teaming, 5 158 750 €, 2017-2024)

A projekt célja az „Ipar 4.0 kutatási és innovációs kiválósági központ” létrehozása, az NKFIH koordinációja mellett, több Fraunhofer Intézettel és a BME két karával közösen.

SYSTEMATICGRAPH Systematic Mapping of the Complexity Landscape of Algorithmic Graph Problem
(ERC, 1 532 000 €, 2017-2022)

A pályázat gráfokon és hálózatokon felmerülő számítási problémák hatékony megoldhatóságát vizsgálja, hozzájárulva ezzel az alkalmazási területek sikeréhez.

COLA Cloud Orchestration at the Level of Application
(EU H2020, 455 000 €, 2017-2019)

A projekt fő célja, hogy olyan felhőalapú referencia keretrendszert hozzon létre, amely alkalmazás minták és sablonok segítségével lehetővé teszi a legkülönbözőbb vállalati alkalmazások gyors és hatékony adaptálását a legfontosabb felhő rendszerek számára.

Linking Danube Transnational, multimodal traveller information and journey planning for environmentally-friendly mobility in the Danube Region
(*INTERREG EUROPE, 344 512 €, 2017-2019*)

Nemzetek közötti, többcélú utazási információ és utazástervezés a környezetbarát mobilitásért a Duna-régióban.

INTRO4.0 Ipar 4.0 módszertan és technológia ipari bevezetésének előkészítése a KKV-k részére
(*EU EUREKA, 32 908 €, 2016-2018*)

A projekt az IPAR4.0 technológiák bevezetésének elősegítésére keres megoldásokat, kiemelve a KKV-k célközönségét.

OWETIS Observation of Local Wetland Areas from Satellite Imaging
(*European Space Agency, 119 999 €, 2017-2018*)

Hiperspektrális műholdfelvételek alapján keresik a biodiverzitás ritka és elhagyott helyeit/foltjait, műholdképek elemzésével és helyszíni ellenőrző mérésekkel.

Ipar 4.0 Ipar 4.0 kutatási és innovációs kiválósági központ
(*GINOP-2.3.2, 1 835 792 E Ft, 2016-2020*)

A projekt olyan csúcstechnológia területet céloz meg, ahol integrálódik a magas szintű alap kutatás szükségessége az égető gyakorlati igények kielégítésével.

Biomimicry 3D Kizárólag magas iontartalmú folyadékban oldódni képes, 3D nyomtatásra alkalmas, DNS kódrendszerrel ellátott polimer és az erre alapozott üzletileg hasznosítható UAV-UUV drón hibrid prototípus fejlesztése
(*GINOP-2.2.1, 44 754 E Ft, 2017-2019*)

A projektben az intézet az elméleti robotpilóta architektúra és az ahhoz tartozó segédrendszerek, továbbá szenzorfüziós és navigációs rendszerek kidolgozását végzi.

OTKA Szó szerkezet felismerés mélytanulással
(*OTKA, 44 000 E Ft, 2016-2020*)

A mélytanulós módszerek számos területén érték el áttöréseket az elmúlt években, ugyanakkor a szavak belső szerkezetének elemzése (morfológiai elemzés) egy olyan probléma marad, amit a kézzel írt szabályalapú rendszerek még mindig uralnak.

OTKA Tájékozódás dinamikus környezetben részleges látványokból
(*OTKA, 35 516 E Ft, 2016-2019*)

A projekt egyik célja a szimultán lokalizálás és térképezés mint térképezési matematikai eljárás kiegészítése objektumokkal és eseményekkel. A kutatás további célja az extrém nézetváltással készült képek regisztrációja, vizsgálata mozgásstatistikák alapján.

OTKA Instant környezet megfigyelés mobil járművekről újgenerációs térinformatikai adatbázis háttérrel
(*OTKA, 47 952 E Ft, 2016-2020*)

A pályázat fő célja az instant autós érzékelés és a térinformatikai rendszerekben található információk együttes kiaknázásának támogatása.

MTA Rangsorolás páros összehasonlításokkal: elmélet és alkalmazások
Prémium (MTA Prémium, 27 525 E Ft, 2016-2019)

A projekt azt vizsgálja, hogy milyen kapcsolatban állnak egymással, a rangsorral szemben támasztott követelmények és az irodalomban javasolt módszerek.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kecskeméti G, Kertész A, Németh Zs (szerk.): Developing interoperable and federated cloud architecture. Hershey: IGI Global, 2016. 398 p. (ISBN:9781522501534)
2. Tettamanti T, Varga I, Csikós A: Közúti mérések: Eszközök és módszerek a közúti járműforgalom megfigyelésére. Budapest: Typotex, 2016. 292 p. (ISBN:978-963-279-916-2)
3. Vámos T, Bars R, Bokor J, Szabó Z, Gáspár P: Sysbook: Rendszerekről mindenkinek, egyetemi hallgatóknak és a rendszertudományok művelőinek. Sokfelületű e-könyv. Budapest: MTA SZTAKI, 2016. <http://sysbook.sztaki.hu/>
4. Zarándy Á: Cellular processor arrays for topographic calculations: Architecture, programming, efficiency, and implementability. Saarbrücken: Lambert Academic Publ. (LAP), 2016. 172 p. (ISBN:978-3-330-01502-9) <http://eprints.sztaki.hu/8999/>
5. Ács B, Szederkényi G, Tuza Zs, Tuza AA: Computing all possible graph structures describing linearly conjugate realizations of kinetic systems. Computer Physics Communications, 204: 11-20 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8938/>
6. Balas E, Kis T: On the relationship between standard intersection cuts, lift-and-project cuts, and generalized intersection cuts. Mathematical Programming, 160: 85-114 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8898/>
7. Bozóki S, Csató L, Temesi J: An application of incomplete pairwise comparison matrices for ranking top tennis players. European Journal of Operational Research, 248: 211-218 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8996/>
8. Cao YX, Marx D: Chordal Editing is Fixed-Parameter Tractable. Algorithmica, 75: 118-137 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/9048/>
9. Egri P: Information elicitation for aggregate demand prediction with costly forecasting. Autonomous Agents And Multi-Agent Systems, 30: 681-696 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8877/>
10. Erdős G, Kovács A, Váncza J: Optimized joint motion planning for redundant industrial robots. Cirp Annals-Manufacturing Technology, 65: 451-454 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8893/>
11. Farkas Z, Kacsuk P, Hajnal A: Enabling workflow-oriented science gateways to access multi-cloud systems. Journal of Grid Computing, 14: 619-640. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8987/>
12. Gáspár P, Németh B: Integrated control design for driver assistance systems based on LPV methods. International Journal of Control, 89: 2420-2433. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8940/>

13. Gőzse I: Optical Indoor Positioning System Based on TFT Technology. Sensors, 16: Paper 19. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8821/>
14. Hegedűs I, Berta Á, Kocsis L, Benczúr AA, Jelasity M: Robust Decentralized Low-Rank Matrix Decomposition. Acm Transactions on Intelligent Systems and Technology, 7: 1-24 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/9074/>
15. Horváth M, Kis T: Solving resource constrained shortest path problems with LP-based methods. Computers & Operations Research, 73: 150-164. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8915/>
16. Karnok D, Kemény Zs, Ilie-Zudor E, Monostori L: Data type definition and handling for supporting interoperability across organizational borders. Journal of Intelligent Manufacturing, 27: 167-185. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8890/>
17. Karoczkai K, Kertész A, Kacsuk P: A meta-brokering framework for science gateways. Journal of Grid Computing, 14:(4) 687-703.(2016) <http://eprints.sztaki.hu/8984/>
18. Kerepesi Cs, Szalkai B, Varga B, Grolmusz V: How to direct the edges of the connectomes: Dynamics of the consensus connectomes and the development of the connections in the human brain. Plos One, 11 (6): 1-8. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8866/>
19. Kovács A, Bátai R, Csáji BCs, Dudás P, Háy B, Pedone G, Révész T, Váncza J: Intelligent control for energy-positive street lighting. Energy, 114: 40-51 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8875/>
20. Lipták Gy, Szederkényi G, Hangos KM: Kinetic feedback design for polynomial systems. Journal of Process Control, 41: 56-66. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8732/>
21. Luspay T, Kulcsár B, Péni T: Set-theoretic analysis of the isolated ramp metering problem. International Journal of Robust and Nonlinear Control, 26:(6) 1246-1266 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8823/>
22. Monostori L, Kádár B, Bauernhansl T, Kondoh S, Kumara S, Reinhart G, Sauer O, Schuh G, Sihn W, Ueda K: Cyber-physical systems in manufacturing. Cirp Annals-Manufacturing Technology, 65: 621-641 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8869/>
23. Péni T, Seiler P: Computation of lower bounds for the induced L2 norm of LPV systems. International Journal of Robust and Nonlinear Control, 26: 646-661. (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8943/>
24. Tapolcai J, Rónyai L, Hosszu É, Gyimóthi L, Ho P-H, Subramaniam S: Signaling Free Localization of Node Failures in All-Optical Networks. IEEE Transactions on Communications, 64: 2527-2538 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/9006/>
25. Zarándy Á, Németh M, Nagy Z, Kiss A, Sántha L, Zsedrovits T: A real-time multi-camera vision system for UAV collision warning and navigation. Journal of Real-Time Image Processing, 12: 709-724 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8035/>
26. Zsedrovits T, Bauer P, Hiba A, Németh M, Jani Matyasné Pencz B, Zarandy A, Vanek B, Bokor J: Performance Analysis of Camera Rotation Estimation Algorithms in Multi-Sensor Fusion for Unmanned Aircraft Attitude Estimation. Journal of Intelligent & Robotic Systems, 84: 759-777 (2016) <http://eprints.sztaki.hu/8945/>

**AZ MTA SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET
FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	228	Ebből kutató ² :	121
PhD, kandidátus:	71	MTA doktora:	10
		Rendes tag és levelező tag:	6
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			53
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			247
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			245
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			6
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			6
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			78
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			58
Könyv, atlasz	magyarul: 2	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:	7
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	92,146	Összes független hivatkozás száma (2015):	3124
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			3669
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	4
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			113
		posztterek száma:	16
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	59	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	30
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			2
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			51
Témavezetések száma: TDK munka:	18	Diplomamunka (BSc):	59
Diplomamunka (MSc):	21	PhD:	45
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		1153 534	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	16	Teljes saját bevétel:	3465 155 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			10
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	77 489 E Ft
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			6
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	446 752 E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			21
		A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	416 140 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	24 972 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		2499 802	E Ft

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	1153 534	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	3465 155	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	77 489	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	446 752	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	416 140	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	24 972	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	387 656	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	2081 629	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	30 517	E Ft

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.; 1519 Budapest, Pf. 286.

telefon: (1) 382 6900; e-mail: pokol.gyorgy@ttk.mta.hu

honlap: www.ttk.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2016-ban

2016 első hónapjaiban a kutatóközpont teljes szakmai és gazdálkodási átvilágításon esett át. A szakmai átvilágítás – melyet az MTA elnöke által felkért bizottság végzett el – a teljes szervezetre és gyakorlatilag az összes munkatársra (nem csak a kutatókra) kiterjedt. A működési-gazdálkodási átvilágítás – melyet az MTA elnöke független tanácsadó cégtől rendelt meg – tisztázta a fedezethiány összegét, meghatározta kialakulásának fő okait, és javaslatot tett a konszolidáció lehetőségeire.

A szakmai átvilágító bizottság az értékelésen kívül ajánlásokat is megfogalmazott bizonyos kutatócsoportok átalakítására, egyes esetekben megszüntetésére is. Az átszervezési intézkedések ezen alapultak, figyelemmel az év közben elfogadott konszolidációs megállapodás követelményeire is, melyek között a megtakarításokon belül a személyi költségek csökkentésének az MTA elnöke által elrendelt mértéke is szerepelt. Így ezek az intézkedések szükségképpen a létszám csökkentésével jártak.

Az év során elfogadott új SZMSZ-ben tisztázták és hatékonyabbá tették a (kémiai) Műszercentrum (MC) helyzetét. Három, korábban az SZKI keretében működő kutatócsoportot (MS Metabolomika, NMR, Röntgen Krisztallográfia) integráltak a Műszercentrumba, így a Műszercentrum megfelelő laboratóriumai képesek a magas színvonalú szakmai szolgáltatás mellett a kooperációs kutatásokra (a TTK-belül és kívül), valamint az önálló témáik kutatására is.

A költségvetés tervezésében új megközelítést alkalmaztak: a kutatóház és a központi szervezeti egységek költségeit az év elején rögzítették, ami az intézetek és kutatócsoportok munkájának tervezhetőségét lényegesen javította.

A 2016-ban megalapozott együttműködések közül az ELTE által vezetett FIEK konzorcium megalakulását tartják legfontosabbnak. Az elnyert pályázati projekt tumor biomarkerek kutatására és fejlesztésére irányul.

Anyag- és Környezetkémiai Intézet (AKI)

2016-ban minden részletre kiterjedő, alapos szakmai átvilágításon esett át az intézet, amelynek eredményeként a kutatócsoportok különböző minősítési kategóriákba kerültek. Kiváló kutatócsoportot besorolást kapott a Lendület Biomolekuláris Önrendeződés Kutatócsoport, átalakítandó lett a Funkcionális Határfelületek Kutatócsoport. Az átvilágító testület javaslata alapján a Spektroszkópia és a Preparatív Nanokémia csoportokat megszüntették, míg a többi kutatócsoport – a Plazmakémia, a Funkcionális Nanorészecskék, a Polimer Fizika, a Polimer Kémia, a Környezetkémia, a Megújuló Energia és a Biológiai Nanokémia – a jó kategóriába került. A 2016-ban alakult új kutatócsoport (Metatézis) természetesen még nem kaphatott minősítést.

Az MTA TTK felépítése lehetővé teszi, hogy a megoldandó kutatási problémákat komplexen, multidiszciplináris módon tudják megközelíteni. Az intézet és az MTA TTK többi intézete között számos sikeres együttműködés alakult ki, amelyben érvényesül a komplementer tudásbázis. Bár a TTK-ban dominálnak az orvosbiológia kutatások, sikerült benyújtani és pozitív szakpolitikai bírálatot kapni egy, az „Anyagtudományi kiválósági műhely:

környezetbarát eljárások fejlesztése megújuló energia- és nyersanyagforrások hatékony felhasználására és energiatartalmuk szabályozott felszabadítására” című pályázatra, amelynek megvalósításában támogató minisztériumi döntés esetén 3 intézet fog részt venni.

Enzimológiai Intézet (EI)

Az intézetben számos tudományterületet átfogó, interdiszciplináris kutatások folynak, melyek során mind a biológia, mind fizika és a kémia tudománya által kínált lehetőségek alkalmazásra kerülnek. A kutatóhelyen részben szerkezeti biológiai alap kutatások folynak, melyek lehetővé teszik a fizioiógias és patofizioiógias folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezeti biológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába, a proteomika és a bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálják a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplement-rendszer aktiválódási mechanizmusait molekulaszerekezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatok, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet (KPI)

A kutatócsoportok közötti együttműködések közös OTKA és EU pályázat beadásban, közösen elnyert MTA Infrastruktúra pályázatban és közösen elnyert NAP Infrastruktúra pályázatokban manifesztálódtak. Több publikáció is megjelent az elmúlt időszakban a csoportok közötti munka eredményeként. A közösen működtetett EEG laborok, állatházak, viselkedéses laborok, neuroanatómiai labor és víruslabor, valamint a közösen fenntartott asszisztencia, technikai gárda is mutatja a csoportok intézeten belüli magas együttműködési potenciálját. Az intézet kutatóházon belüli együttműködő partnerei a következők: Agyi Képző Központ (AKK), Enzimológiai Intézet, Anyag és Környezetkémiai Intézet, Szerves Kémiai Intézet.

2016 során folytatódott az a Lendület pályázat által támogatott vizsgálatsorozat, melynek célja a párhuzamosan beszélők hangjának szétválasztásának tanulmányozása volt. Ezen belül a prozódia szerepét vizsgáló kísérleteket az AKK munkatársaival közösen tervezték meg. A kutatóközponton belüli módszertani lehetőségeket kihasználva a KPI és az SZKI kutatói együttműködnek, hogy kidolgozzák az oxytocin szint perifériás változásainak vérből, illetve vizeletből való kromatográfiás mérési módszerét. Azok a kísérletes vizsgálatok, melyek a kutyák in vivo idegi aktivitásának feltérképezésére irányulnak fMRI segítségével, az AKK-val együttműködésben zajlanak.

Szerves Kémiai Intézet (SZKI)

Az intézet általános kutatási profilja, a szerves kémia, amely centrális kutatási terület, így lehetőséget nyújt széleskörű tudományos kooperációkra. A szintetikus kémiai laboratóriumok új modell vegyületeket állítanak elő anyagtudományi és biológiai vizsgálatok és mérések céljára, valamint az együttműködő intézet által javasolt szintéziseket végzik el, a műszeres szerkezetkutató egységek speciális szerkezet-meghatározási lehetőséget kínálnak az együttműködő partnerek számára. Az Elméleti Kémiai Csoport kvantumkémiaiával és egyéb elméleti számításokkal szervesen egészíti ki a kísérleti kutatásokat. Az elsődlegesen szerkezeti kémia irányultságú csoportok a központi igazgatás alá tartozó és nagy műszereket üzemeltető Műszer Centrummal kerültek összevonásra 2016 második félévében. Ezzel

megoldódott a központilag fenntartott nagy műszerek és a rajtuk kutatást végző csoportok széttagozódásának problémája.

A tárgyévben az Enzimológiai Intézettel membránfehérjékkel és fehérje-fehérje kölcsönhatással foglalkozó témákon működtek együtt, szerkezeti biológiai kérdéseket tanulmányoztak, fluoreszcensen jelzett vegyületeket fejlesztettek ki organikus taurokolsav transzporterek vizsgálatához, továbbá humán és patkány haptocita modellekkel gyógyszerhatóanyagok toxicitásának vizsgálatában vettek részt. Az Anyag- és Környezetkémiai Intézettel közösen biológiai rendszerekben használható jelző molekulák új fluoroforjainak fotokémiai és fotofizikai tulajdonságait tanulmányozták, cirkónium-szilikát-polialmasav konjugátumok toxicitását határozták meg, kukurbituril származékok és gyógyszerhatóanyagok között kialakuló komplexek szerkezetét vizsgálták, prosztataspecifikus membrán antigén alapú tumordiagnosztikai eljárás fejlesztésében vettek részt.

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

Agyi Képző Központ (AKK)

Az AKK-t alkotó két kutatócsoportban - Neurokognitív Fejlődés Kutatócsoport (NFK) és Agyi Szerkezet és Dinamika Kutatócsoport (ASZDK) - folyó kutatások kiterjedtek a számítógépes viselkedési tesztek és tréningprogramok, EEG és fMRI módszerek fejlesztésére és alkalmazására az emberi kognitív képességek háttérét képező egészséges és kóros idegrendszeri folyamatok és agyi hálózatok jellemzésére. Legfontosabb új eredmények:

Adaptív szenzoros információfeldolgozás agyi folyamatai

Az adaptív tárgylátásban kulcsfontosságú visszacsatoló mechanizmusok agyi háttérét vizsgálták az ismétléselnyomás-jelenség (RS) – azaz ugyanazon inger ismételt bemutatásakor tapasztalható fMRI válaszcsökkenés – segítségével. Kimutatták, hogy az arcíngerek esetén a fusiform arc területen (FFA) megfigyelhető RS háttérét egy kiterjedt agyi hálózathoz tartozó visszacsatoló moduláció képezi, és az ezen hálózaton belüli intrinzik funkcionális konnektivitás erőssége szorosan összefügg az RS mértékével. Továbbá, az agyi archálózaton belül mért RS nagysága jól előre jelezte az arcészlelésben megmutatkozó egyéni különbségeket (eredményeik a rangos Brain Imaging and Behavior folyóiratban jelentek meg).

A szóhangsúly agyi reprezentációjának RS segítségével történő vizsgálatával kimutatták, hogy az anyanyelvi hangsúly feldolgozásában fontos szerepet játszanak a superior temporális tekervény (STG) hátsó területének prediktív kódolási mechanizmusai. Ezen eredmények támogatják a beszéd prozódiai aspektusának prediktív kódolási elméletét.

Az olvasás és az olvasási zavarok agyi háttere

Az olvasás elsajátításának, valamint a természetes körülmények között történő összefüggő szövegolvasás idegrendszeri folyamatainak vizsgálatában érték el kiemelkedő eredményeket. Nagymintás olvasásfejlődési kutatásukban azt vizsgálták, hogy miként változik az ún. betűfelcserélési hatás olvasni tanuló gyerekeknél (2-4. osztályban). Kimutatták, hogy a betűfelcserélési hatás valójában az ortográfiai rendszer adaptivitásának eredménye, nem pedig a látási/olvasási mechanizmusok inherens következménye. Eredményeiket a nagy presztízsű Developmental Science folyóirat fogadta el közlésre (megjelenés éve: 2017.). A természetes olvasás idegrendszeri háttérét képező agyi folyamatok vizsgálatával sikerült azonosítani azokat a vizuális információfeldolgozási komponenseket, melyek szoros összefüggést

mutatnak az olvasásban való jártassággal és így lehetőséget nyújtanak az olvasási készség pontos jellemzésére és gyakorlás következtében történő változásának követésére (eredményeik a rangos Scientific Reports folyóiratban jelentek meg). Ezen túlmenően a módszertani apparátust kiegészítették a szemmozgás eseményekhez-kötött agyi oszcillációk spektrális analízisével, és elkezdték a szövegorientáció természetes, olvasás közbeni EEG markereinek vizsgálatát. A kidolgozott kísérleti és adatfeldolgozási eljárások az olvasás kutatásának egy lényegében új és nagyon ígéretes megközelítését teszik lehetővé.

A figyelmi funkciók szerepe a munkamemóriában

A munkamemória zavaró ingerekkel szembeni ellenálló képességének romlása a kognitív öregedés egyik legígéretesebb előrejelzője. Azonban meglepően keveset tudunk a zavaró ingerek kiszűrésének neurális folyamatairól és azok változásáról öregedés során. Az AKK kutatói feladathoz kötött és nyugalmi fMRI, valamint EEG módszerrel vizsgálták a munkamemória tárolása során jelentkező zavaró, irreleváns információ kiszűrésének neurális folyamatait egészséges fiatal felnőttekben. EEG vizsgálataik kimutatták, hogy a zavaró ingerek kiszűrése egy aktív folyamat, mely az inger feldolgozásáért felelős agyterületeken belüli fokozott információfeldolgozást igényel és ennek egy fontos markere lehet a zavaró ingerek által kiváltott alfa-béta deszinkronizációs válasz. Továbbá, fMRI kutatásaik az első kísérletes bizonyítékát szolgáltatták annak, hogy vizuális munkamemória feladatban a törzsdúcok kiemelt szerepet játszanak az irreleváns tárgyak figyelmi szűrésében. Eredményeik arra engednek következtetni, hogy a törzsdúcok – a jól ismert motoros kapuzó szerepükhöz hasonlóan – fontos funkciót látnak el a vizuális input szűrésében és a vizuális tárgyak munkamemóriában történő rövid idejű eltárolásának szabályozásában.

Amblyopia

Korábbi kutatások kimutatták, hogy az amblyop szemből érkező információ feldolgozása kevésbé hatékonyan és lassabban történik a látókéregben a jó, domináns szemhez képest. Azonban, eddig az amblyop szemet mindig úgy vizsgálták, hogy a jó szem közben le volt takarva és ebből kifolyólag semmit sem tudunk arról, hogy mennyire sérül, kerül elnyomásra az amblyop szemből érkező információ valós, kétszemes látás esetén. Az AKK kutatói kidolgoztak egy új kísérletes paradigmát, mely lehetőséget nyújtott ennek a kérdésnek az EEG vizsgálatára. Kutatásaikból kiderült, hogy kétszemes látás esetén az amblyop információfeldolgozás eddig ismert, a látókérgi válaszok korai komponensein jelentkező válaszcökkenésen kívül egy későbbi károsodási komponens is azonosítható, mely nem mutatható ki abban az esetben, amikor az amblyop szemet magában, a jó szem letakarásával vizsgálják. Az amblyop szemből érkező ingerekre kapott neurális válaszcökkenésének késői komponense szoros összefüggést mutat az amblyop betegek binokuláris/sztereoskopikus látáskárosodásával. Kutatásaik eredményeként sikerült azonosítani az amblyopia egy új, klinikailag releváns neurális markerét.

Jelentősebb közlemények:

1. Weiss B, Knakker B, Vidnyánszky Z: Visual processing during natural reading. Scientific Reports, 6: Paper 26902 (2016) <http://www.nature.com/articles/srep26902>
2. Hermann P, Grotheer M, Kovács Gy, Vidnyánszky Z: The relationship between repetition suppression and face perception. Brain Imaging and Behavior, 1–11 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/46275>
3. Honbolygó F, Török Á, Bánréti Z, Hunyadi L, Csépe V: ERP correlates of prosody and syntax interaction in case of embedded sentences. Journal of Neurolinguistics, 37: 22-33 (2016) <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0911604415000366>

Műszercentrum

A Műszercentrum 2016-ban is sikeresen működtette a birtokában lévő nagyműszereket: 6 db tömegspektrométert, 2 db NMR és 1 db egykristály röntgendiffraktométert.

A Műszerközpont együttműködött az MTA TTK több kutatócsoportjával. Szerkezet-felderítést végeztek oldatfázisú NMR vizsgálatok alkalmazásával a Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, az Organokatalízis Kutatócsoport és a Kémiai Biológia Kutatócsoport részére. A Polimer Fizikai Kutatócsoporttal kurkumin modell gyökdonor vegyületekkel való kölcsönhatását vizsgálták. A polimerek gyökös degradációjának megakadályozására irányuló alap kutatások a későbbiekben ipari hasznosságúvá válhatnak.

Az MTA-ELTE Lendület Katalízis és Szerves Szintézis Kutatócsoporttal együttműködve tanulmányozták aromás aldehidek és anilidek Pd katalizált kapcsolási reakcióit, NMR vizsgálatokat végeztek a reakció feltételezett kulcs-intermedierjének igazolására.

További Pd katalizált CH-aktiválási reakciók vizsgálatában egykristály röntgendiffrakciós módszert alkalmaztak, eredményeiket publikálták.

Új módszert dolgoztak ki N-glikozilációs mintázatok HPLC-MS alapú meghatározására. Az eredmények a hazai gyógyszeripar (pl. Richter Rt) számára is jól felhasználhatók, növelik a versenyképességet.

Glikoproteinek analitikájában alkalmazták a tömegspektrometriás technikákat.

MS és LC-MS támogatást biztosítottak a TTK intézményeiben (SZKI, AKI, KPI, EI) felmerülő problémák (szerkezet-felderítés, célmolekulák mennyiségi meghatározása) megoldásában.

Jelentősebb közlemények:

1. Bazso FL, Ozohanics O, Schlosser G, Ludanyi K, Vekey K, Drahos L: Quantitative Comparison of Tandem Mass Spectra Obtained on Various Instruments. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 27 (8): 1357 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/39802>
2. Csimbók E, Takács D, Balog JA, Egyed O, May-Nagy NV, Keserű GM: The first synthesis of isoxazolo[3,4-c]pyridine-7-ones. *Tetrahedron Letters*, 57(39): 4401 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/46592>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.; 1519 Budapest, Pf. 286.

telefon: (1) 382 6500; e-mail: tompos.andras@ttk.mta.hu

honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az intézet feladata 2016-ban funkcionális és szerkezeti anyagok, valamint kémiai eljárások kutatása volt i) a fenntartható környezet és ii) a fenntartható egészség területein. Az első területen tevékenységük kiterjed a környezettudományra, nevezetesen az emberi tevékenységből származó káros környezeti hatások értelmezésére és csökkentésére, továbbá a megújuló energiaforrások átalakítására. A második területen az orvos-biológiai szempontból fontos lágy-anyagokra épülő rendszerekre, gyógyszerhordozókra, bioszenzorokra és az azokban lejátszódó folyamatok kutatására fókuszálnak.

A változatos szakértelmi bázis szinergiái kedveznek az intézetben folyó interdiszciplináris kutatásoknak. Kutatási témáikat az alapkutatási kérdések megválaszolásán keresztül mindig valamilyen társadalmi–gazdasági–környezeti igény motiválja. Tudományos-szakmai arculatukat így valós problémák alakítják. Tevékenységük fontos eleme az alap- és alkalmazott kutatások egymásra épülése.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Kiemelkedő kutatási eredményeik tárgyalásakor az elsősorban anyagtudományi témáktól haladnak az energetikai célú és környezeti kémiai témákon keresztül a biológiai rendszereken és gyógyászati célból végzett kutatásokig. Az intézetben működő „Lendület” kutatócsoport eredményét a biológiai rendszerekkel kapcsolatos kutatások között szerepeltetik.

Különleges nanoszerkezetű amfifil kotérhálók

Tovább folytatták újfajta nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálókkal (kovalensen kötött hidrofíl és hidrofób szegmensekből felépülő térhálókkal) kapcsolatos kutatásaikat, amelynek keretében széles összetétel tartományban vizsgálták a poli(metil-metakrilát)-*l*-poliizobutilén kotérhálók termikus és duzzadási tulajdonságait. Sikerült igazolniuk, hogy a kotérhálóban a főlánchoz tartozó üvegesedési hőmérséklet nem függ a keresztkötőtől, csak –meglepő módon a Fox-Flory egyenlet szerinti összefüggést mutatva – a keresztkötési pontok közti átlagos molekulatömegtől. Másik fő irányvonalként a poli(N-vinil-imidazol) tartalmú amfifil polimer kotérhálókat alakították át Pd-fém hordozóvá, és vizsgálták ezek katalitikus aktivitását. Az eddigi eredmények alapján megállapítható, hogy sikeres a komplexképzés a fém és a polimer között, és további optimalizálás mellett katalitikusan aktív részecskék hozhatóak létre. Vizsgálták továbbá réztartalmú poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát)-*l*-poliizobutilén amfifil polimer kotérháló nanokompozitok elektromos vezetési tulajdonságait, valamint sikeresen állítottak elő az irodalomban eddig le nem írt poli(N-vinil-pirrolidon)-*l*-poliizobutilén amfifil polimer kotérháló sorozatot.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Biopolimerekből előállított társított rendszerekben tanulmányozták a határfelületi kölcsönhatásokat. Politejsav (PLA) és termoplasztikus keményítő (TPS) keverékeinek

vizsgálata bizonyította, hogy a két komponens között a kölcsönhatás gyenge. Termodinamikai modell segítségével igazolták, hogy a PLA kismértékben oldódik a TPS fázisban, főként a termoplasztikus keményítőben lévő glicerin hatására, de a keményítő nem képes oldódni a PLA-ban. A gyenge kölcsönhatás következményeként a fázisok közötti feszültségátvitel nem lehetséges, ami kis deformálhatóságot és kis szilárdságot eredményez. Polipropilén (PP) és lignin keverékeit készítették el széles összetétel tartományban homopolimer PP és két lignosulfonát alapanyagból. A komponensek elegyíthetőségét és a kölcsönhatásokat dinamikus mechanikai analízis (DMTA) segítségével, míg a mechanikai tulajdonságokat szakítóvizsgálatok segítségével jellemezték. A lokális deformációs folyamatokat akusztikus emissziós és a szakítási felületek pásztázó elektronmikroszkópos felvételei alapján azonosították. Az eredmények azt mutatták, hogy a keverékek szerkezetét a lignin szemcsék feldolgozás során lejátszódó lágyulása befolyásolja. Elsősorban a lignin molekulák közötti nagyszámú erős specifikus kölcsönhatás miatt gyenge kölcsönhatás alakul ki a két fázis között, de maleinsav-anhidriddel ojtott PP kapcsolóanyag segítségével a határfelületi kölcsönhatás javítható. Habár a kapcsolás növeli a szilárdságot, a keverékek deformálhatósága – különösen nagy lignin tartalmak mellett – kicsi marad, ami gátat szabhat a keverékek alkalmazhatóságának.

Műszaki polimerek felületeinek hideg plazmával történő módosítása

Többféle műszaki gyakorlatban használatos polimer – PA6, HDPE, PP, PEEK, PTFE, POM – plazmás felületkezelését vizsgálták a felületi tulajdonságok, így felületi energia, adhézió és tribológia előnyös változtatása céljából. Megállapították, hogy atmoszférikus dielektromos akadály kisülés (dielectric barrier discharge) plazmakezeléssel a vizsgált műszaki polimerek felülete mind kémiai aktivitásában, mind topológia tekintetében jelentősen módosult. A felületek felületi energiája lényegesen növekedett (hidrofilebbé vált), azonban ennek hatása időben csökkent. A felület érdessége a kiindulási állapottól függően csökkent vagy növekedett. A plazmakezelés hatására a polimerek adhéziója a polimer típusától függően kisebb-nagyobb mértékben növekedett.

Szén nanofázisok felületmódosítása

Részletes XPS vizsgálatokkal meghatározták a különféle szén nano-fázisokba (grafén, grafén-oxid) N₂ plazmából beépülő nitrogén kötésviszonyait és azok arányának változását. Meghatározták különböző összetételű grafén-oxidok redukciójának és a felületi C-O kötések változásának mértékét.

Acetaldehid előállítás etilén szelektív katalitikus oxidációjával

Kimutatták, hogy Pd/V₂O₅/TiO₂ heterogén katalizátoron, atmoszférikus nyomáson, viszonylag alacsony hőmérsékleten (~100 °C-on) víz és oxigén jelenlétében az etilén nagy szelektivitással és hozammal acetaldehiddé oxidálható. Az acetaldehidnek a közeljövőben jelentős szerepe lehet a gumigyártás alapanyagául szolgáló 1, 3-butadién szintézisében.

A vegyipar napjainkban főleg benzin termikus pirolízisével állítja elő a műanyaggyártás számára az etilént. Az 1,3-butadién az etilényártás mellékterméke. A vegyipar etilényártó ágazata most van átalakulóban. Mivel az olcsó palagázban a metán mellett jelentős mennyiségű etán van, a műanyagipar etilén igényét egyre inkább az etán oxidatív dehidrogénezésével elégítik ki. Ez felvetette a kérdést, hogyan fogja a gumigyártás az 1,3-butadién szükségletét ellátni. Egy lehetséges megoldás, ha a butadiényártást továbbra is az etilényártáshoz kapcsolják. A butadién előállítás régóta ismert eljárása az etanolból kiinduló, heterogén katalitikus Lebegyev-eljárás. Etilénből hidratálással lehet etanolt előállítani.

Számos tanulmány megállapítja, hogy a Lebegyev-eljárásnál enyhébb körülmények között és annál nagyobb hozammal etanol/acetaldhid elegyből állítható elő 1,3-butadién. A jövő 1,3-butadién gyártási technológiájának nagy valószínűséggel etanolra és acetaldhidre lesz szüksége. Kutatási eredményeik alapján technológiát lehet kifejleszteni, mellyel etilénből nagy hatékonysággal lehet acetaldhidet előállítani.

Metanol fotokatalitikus reformálása

Gallium-cink-oxinitrid és gallium-oxid alapú fotokatalizátorok a fotokatalitikus reakció során szerkezeti változáson mennek keresztül, a működő katalizátorokban oxihidroxidok alakulnak ki. Szol-gél módszerrel előállított TiO_2 fotokatalizátorok aktivitása jelentősen nő $\text{SnO}_x\text{-PtO}_x$ kokatalizátorok jelenlétében. A kokatalizátor formázása kedvezőbb kalcinálással, mint magas hőmérsékletű hidrogénes kezeléssel. A reakciókörnyezetben in situ kialakuló fémes platina tartalmú katalitikus aktív helyek előnyösek a fotokatalitikus hidrogéntermelés szempontjából. Az Sn aktivitást növelő szerepe pozitív és negatív hatások eredőjeként jelentkezik.

$\text{Ti}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_2\text{-C}$ ($M = \text{W}, \text{Mo}$; $x = 0,2-0,4$) kompozit hordozós Pt elektrokatalizátorok fejlesztése

Meghatározták azokat a szintézisfeltételeket, amelyek szükségesek a W és a Mo adalékok rutilszerkezetű TiO_2 rácsba építéséhez a $\text{Ti}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_2\text{-C}$ ($M = \text{W}, \text{Mo}$; $x = 0,2-0,4$) kompozitok kialakítása során. A kompozit hordozós Pt katalizátorok elektrokémiai minősítése kapcsán kimutatták a nagyfokú W- és Mo-beépülés jelentőségét a CO tűrőképesség és a stabilitás fokozásában. Összefüggést találtak a W- és Mo-beépülés mértéke, a hidrogén spillover jelenség, a stabilitás és a CO tűrőképesség között, ugyanakkor sem a katalitikus aktivitást, sem a stabilitást, sem a CO tűrőképességet nem befolyásolta az oxofil adalék anyagi minősége. A kompozit hordozós elektrokatalizátorok Pt/C vagy Pt-Ru/C referencia katalizátorokhoz viszonyított jobb teljesítőképességét 100 ppm CO-t tartalmazó hidrogénnel táplált tüzelőanyagcella-tesztberendezésben is igazolták.

Szén hordozós Sn-Pt kétfémes katalizátorok fejlesztése kizárólagos Pt-Sn kapcsolatok biztosításával

Az irányított felületi reakció módszerével Pt/Sn=3 összetétel-arányú Sn-Pt/C ötvözet elektrokatalizátorokat készítettek. A mintakészítési módszer garantálja, hogy az ón kizárólag a Pt részecskék felületére válik le, garantálva a Sn-Pt ötvözet fázis létrejöttét. In situ fotoelektron-spektroszkópiai és röntgendiffrakciós mérésekkel igazolták a $\text{PtSn} \leftrightarrow \text{Sn}^{4+} + \text{Pt}$ reverzibilis átalakulást oxigén, illetve hidrogén jelenlétének hatására. A katalizátorok elektrokémiai teljesítőképességét CO oxidációs, illetve oxigén redukciós reakciókban vizsgálták; a CO oxidációban az Sn-Pt/C katalizátorok jobbnak bizonyultak az ipari referenciaként használt Ru-Pt/C katalizátoroknál. A felületi összetétel optimális megválasztásával a kiindulási Pt/C katalizátorhoz képest az oxigén redukciós aktivitás is jelentősen javítható.

Etanol átalakulása Ni/CeO₂ modellkatalizátor felületen

Szubmonorétegnyi mennyiségű nikkellel módosított $\text{CeO}_2(111)$ felületen vizsgálták etanol viselkedését fotoelektron-spektroszkópiai módszerekkel. A korábbi tapasztalatok szerint a nikkelmentes CeO_2 felületen az etoxi adszorbeátumok bizonyos mértékű oxidációjára kerül sor, így a hőmérséklet emelésével deszorbeálódó molekulák között a rekombinálódó etanol mellett az acetaldhid megjelenése is várható. Nikkel jelenlétében, vákuumban az etoxi csoportok két átalakulási útvonalát sikerült azonosítani: többségük az etoxi csoportok dehidrogéneződése, a C-O kötés felszakadása és a keletkező termékek kondenzációja után

grafitos képződményekké alakul, kisebb részük viszont már szobahőmérsékleten acetáttá oxidálódik, ami a hőmérséklet emelésével karbonáttá alakul. A vízgőz jelenléte gátló hatású az acetát/karbonátos reakcióra; ilyenkor csak a grafitos képződmények figyelhetők meg. A grafitos lerakódások vákuumban a CeO₂ rács oxigénje segítségével, vízgőzben a képződő felületi hidroxilcsoportok felhasználásával könnyen eltávolíthatók, 300 °C-on már gyakorlatilag szénmentes felület alakul ki. Érdeemes megjegyezni, hogy katalitikus mérésekben 300 °C körül indul gyors növekedésnek a hidrogéntermelés.

Elektrokémiai energiatárolás

Az elektrokémiai energiatárolási témájú *PLIANT FP7* európai uniós projekt keretében szuperkondenzátor előállításakor alkalmazható szén nanocső gyártósorra telepíthető minőségellenőrző berendezést fejlesztettek ki. A berendezés a futószalagon készülő elektród anyag igen gyors jellemzésére alkalmas, ezáltal a gyártási folyamat megszakítása nélkül, valós időben ad visszajelzést az esetleges minőségi változásokról. A gyors minősítést lehetővé tévő innovatív méréstechnikai megoldás sok felharmonikus tartalmú perturbáló jellel másodpercnyi időtartam alatt pásztázza végig a teljes hangfrekvenciás tartományt, és azonnal elvégzi a mért impedancia spektrumok kiértékelését is. A berendezés további módosításával, azaz a mérőcellával összeépített előerősítő fokozat és az önálló egységben kialakított AD és DA konverterek kialakításával a laboratóriumi kivitel továbbfejlesztették, és egy kisméretű, könnyen áttelepíthető, egyszerűen kezelhető, ipari környezetben is jól használható mérőberendezést fejlesztettek ki.

Molekuláris elektronika

Az „Elektrontranszport egy molekulán mint átmeneten. Elektromos és termoelektromos áram közvetlen mérése törőátmenet technikával” című MTA magyar-cseh együttműködés keretén belül a prágai együttműködő partnerrel molekuláris elektronikai jelenségeket vizsgáltak, ezen belül egyedi szerves molekulák elektromos vezetését mérték. Az ilyen jellegű mérések úttörőnek tekinthetők, az egyedi molekulán keresztül történő elektromos vezetés mechanizmusát segítik tisztázni, illetve új típusú, molekuláris szenzorok kialakítására adnak módot. A munka során mind a magyar, mind a cseh laboratóriumban felépítették a fém-molekula-fém elektromos átmenet termoelektromos viselkedésének jellemzésére alkalmas pásztázó alagútmikroszkóp konstrukción alapuló méréstechnikát. 4,4'-bipiridin molekulán végzett mérésekkel tesztelték, és irodalmi adatokkal összehasonlítva validálták az eljárást.

Polipenténamer alapú újrahasznosítható szintetikus autógumi alapanyag szintézise

Az alapanyag szintézise egyensúlyi gyűrűnyitó metatézis polimerizációval kőolajipari melléktermékből, a gőzpirolízis során képződő alacsony hozzáadott értékkel rendelkező C5 frakcióban található ciklopentén komponensekből lehetséges. A szintetikus polimer gumialapanyag hatékony szintézisét és katalitikus depolimerizálását valósították meg enyhe reakciókörülmények között. A ciklopentén közepes gyűrűfeszültségének köszönhetően a gyűrűnyitó metatézis polimerizációjakor szobahőmérsékleten egy olyan reakció elegy képződik, amelynek összetétele – a reakció viszonylag magas entrópiaváltozásának köszönhetően – a reakcióhőmérséklet enyhe módosításával jelentősen a polimerképződés vagy a depolimerizáció irányába tolható el. Így pl. 20 tf.% kezdeti monomer koncentrációnál 0 °C-on a monomer konverzió elérheti a 85%-ot, míg 40 °C-on csak kb. 40%. Ez az egyensúlyi polimerizáció a polipenténamer alapú szintetikus gumi szintézisét 0 °C-on magas hozammal teszi lehetővé, míg az elhasznált gumi 40-50 °C-on ugyanazon katalizátor rendszer alkalmazásával (a visszaalakult ciklopentén folyamatos kidesztillációja mellett)

depolimerizálható. A kutatási eredmények a 2016. évi Amerikai Kémiai Társaság (ACS) konferencián Philadelphiában kiemelt figyelmet kaptak, és „press released topic”-ként a konferencián tartott sajtótájékoztató keretében a széles közvélemény számára is bemutatásra kerültek.

Hazai biomassza anyagok termikus hasznosítását vizsgáló kutatások

Akácfa, repceszalma és búzaszalma alacsony hőmérsékletű pirolízisének (200-300 °C), az ún. torrefactionnek a hatását vizsgálták termogravimetria-tömegspektrometria módszerrel. A termikus vizsgálatokon kívül a kezeletlen és különböző hőmérsékleteken hőkezelt minták cellulóz, hemicellulóz és Klason lignin tartalmát is meghatározták, amelyek segítségével a hőkezelés hatására a fő alkotókban bekövetkező változásokról átfogó képet kaphatnak. Megállapították, hogy a lágyszárú növények magas alkáliion tartalma alacsony hőmérsékleten is jelentősen katalizálja mind a cellulóz, mind a lignin hőbomlását, azonban a hemicellulóz bomlását nem katalizálja. Megfigyelték, hogy a 225 °C-os hőkezelés hatására a minták hemicellulóz tartalma lényegében nem változik, azonban a savasságot okozó oldalcsoportjai már lehasadnak a hőkezelés hatására. A mérési eredményeket statisztikai módszerrel (Főkomponens elemzéssel) is feldolgozták. Ezzel szemléltetni tudták a különböző hőmérsékletű hőkezelések hatására a biomassza minták szerkezetében bekövetkező változások és a termogravimetriás paraméterek közötti összefüggéseket.

Környezetkémiai reakciókinetikai és fotokémiai kutatások

A növényi biomasszából előállítható tetrahidrofurán (THF), 2-metil-tetrahidrofurán (2MTHF) és 5-hidroximetil-furfural (5HMF) ígéretes bioüzemanyagok, és megújuló platform molekulák. Gyakorlati felhasználásuk során elkerülhetetlenül kikerülnek a környezetbe, így környezeti hatásuk vizsgálata alapvető fontosságú. A kutatócsoport munkatársai laboratóriumi alapkutatásokkal megállapították, hogy a THF és 2MTHF nagyon gyorsan reagál OH-gyökkel, ezért légköri élettartamuk rövid, az 5HMF pedig főleg fotokémiai reakciókban fogy el a környezetben.

Reakciódinamikai módszerfejlesztés

Az elemi kémiai reakciók dinamikájának elméleti modellezése területén klasszikus mechanikai módszert dolgoztak ki annak felmérésére, hogy milyen szisztematikus hibái vannak a sok atom részvételével járó reakciók dinamikai leírására használatos redukált-dimenziós módszereknek. A metán és H-atom reakciójának példáján megmutatták, hogy súlyos hibákra vezet, ha a dinamikai számításban egyes szabadsági fokok be vannak fagyasztva. A példareakció izotópkombinációjától és a modellezésre használt potenciálisenergia-felület jellegétől függően a szabadsági fokok befagyasztása miatt egyes esetekben a reaktivitás a valódinál lényegesen alacsonyabbnak, másoknál túlzottan nagyknak adódott.

Polimerek kémiai módosítása és környezetileg előnyös stabilizálása

Ez irányú kutatásaik két fő terület köré csoportosíthatók. Ez egyik irány a hiperelágazós poliglicidol alapú antioxidánsok létrehozása, amelyeket PVC termooxidatív stabilizálására kívántak alkalmazni. Az eredmények azt mutatják, hogy az előállított antioxidáns molekulák alkalmazásával hasonlóan magas stabilitás érhető el, mint a kereskedelmi forgalomban lévő kismolekulájú termékekkel, azonban az új makrostabilizátorok kioldódása jóval kisebb mértékű a PVC mátrixból. A másik irány keretében a poli(etilén-glikol)lal ojtott PVC kopolimerek szerkezetének feltérképezését végezték el, amelyből megállapítható, hogy az

összetételtől függően az ojtott kopolimerek üvegesedési hőmérséklete széles tartományban változik. Kísérletileg igazolták, hogy ezek felületén a fehérjeletapadás kismértékű, ami lehetőséget kínál bioanyagként történő alkalmazásra.

Jól definiált szerkezetű multifunkciós polimerek

Új iniciátorrendszert dolgoztak ki biokompatibilis hiperelágazós poliglicidol előállítására, melynek szelektív módosításával (bio)konjugációs reakciókban releváns csoportokat tartalmazó monofunkciós polimereket állítottak elő. Egyszerű eljárást dolgoztak ki amfifil karakterű mono-alkil csoportot tartalmazó hiperelágazós poliglicidol előállítására, továbbá igazolták a makromolekula felületaktív tulajdonságát, és elsőként alkalmazták poli(tejsav-glikolsav) alapú gyógyszerhordozó nanorészecske előállítására és stabilizálására. Tanulmányozták a poli(etilén-glikol)-poliakrilsav és poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát)-poliakrilsav interpolimer komplexek hőmérsékletérzékeny oldatait, és feltárták az átmeneti hőmérséklet függését az összetevők szerkezeti és az oldat koncentrációs paramétereitől. Szisztematikus kísérletekkel meghatározták a poli(N-izopropil-akrilamid) kritikus oldhatósági hőmérsékletének optimális, standardizálható körülményeit, mely kiterjeszhető más hőmérséklet érzékeny (intelligens) polimerek esetére is. Poli(N-izopropil-akrilamid) alapú hibrid kopolimereket és géleket állítottak elő, és vizsgálták ezek alapvető tulajdonságait, például hatóanyagleadásukat. Eredményeik azt mutatják, hogy ezek az újszerű hibrid gélek alkalmasak jól szabályozható hatóanyagleadásra. Kutatták poliizobutilén és poli(etil-oxazolin) láncvégi funkcionálásának lehetőségeit, és optimális körülményeket dolgoztak ki. Új reakciókörülmények kidolgozásával és környezetileg előnyös oldószerkeverékekkel sikeresen polimerizáltak apoláris akrilátokat egy újszerű élő polimerizációs eljárással, SET-LRP-vel.

Biokompatibilis polimerek felületmódosítása

Polimetil-metakrilát (PMMA) felületét módosították, ezáltal növelve biokompatibilitását. A mű szemlencseként is használatos PMMA felületén hoztak létre egy olyan réteget, amely terveik szerint a hosszú távú felhasználást nagymértékben javítja azáltal, hogy meggátolja a baktériumok, fehérjék megtapadását a felületen. Első lépésben a felületet aktiválták hidegplazmás eljárással, ezzel funkciós csoportokat, gyököket hoztak létre, amihez ezt követően polivinilpirrolidon és csersav makromolekulákat kapcsoltak. Mindkét vegyület biokompatibilis, a csersav pedig antibakteriális hatású is, így a felvitt réteg feltehetően megtartja baktériumölő tulajdonságát. Bár mindkét makromolekulát használják a gyógyászatban, élelmiszeriparban, de felületmódosításra elsőként alkalmazták. Eredményeik (FTIR, XPS, AFM) egyértelműen bizonyítják, hogy a felületet sikerült módosítani. Mivel a felületkezelés csak néhány nanométeres vastagságban történt, elmondható, hogy a kiindulási PMMA-t kedvező tömbi tulajdonságainak megtartása mellett új felületi tulajdonságokkal sikerült felruházni.

Önszerveződéssel képződő szabályozható szerkezetű nanorészecskék

Külső hatásra szerkezetváltozással reagáló nanorészecskék iránt széleskörű érdeklődés tapasztalható sokoldalú felhasználási lehetőségük miatt. A kutatócsoport tagjai francia kutatóintézettel együttműködve 1-metil-3-tetradecil-imidazolium kationok és vízben jól oldódó, nem toxikus makrociklusos vegyületcsalád, a 4-szulfonáto-kalixarének különböző gyűrűméretű tagjainak spontán önszerveződésével állítottak elő gömb alakú nanorészecskéket. Feltárták, hogy milyen körülmények között valósítható meg reverzibilis nanorészecske-szupramolekuláris micella átalakulás. Megállapították, hogy a hőmérséklet, a só koncentráció, a komponensek mennyiségének aránya és a makrociklus mérete miként

befolyásolja az asszociációs folyamatok termodinamikai paramétereit és a szerkezetváltozást. 4-Szulfonáto-kalixarének jelenlétében több mint 50-szeres kritikus micella koncentráció csökkenést sikerült elérniük, így jelentősen növelni tudták a felületaktív anyag hatékonyságát. Biokompatibilis makrociklus és protonált kitozán önszerveződésével gyógyászati szempontból fontos alkaloidok hordozására alkalmas nanorészecskéket szintetizáltak.

Indukált konformáció változás természetes és nem-természetes peptidekben – a Biomolekuláris Önrendeződés „Lendület” Kutatócsoport kiemelkedő kutatási eredménye

Az antimikrobiális és egyéb membránaktív peptidek biológiai aktivitása szorosan összefügg a peptid – sejtmembrán kölcsönhatással, illetve a peptidek eközben végbemenő térszerkezet változásával. Ennek megismerése céljából tanulmányozták a CM15 antimikrobiális peptid hatását lipid kettősrétegre. Cirkuáris dikroizmus (CD) spektroszkópia és UV abszorpciós spektroszkópia módszerekkel elsőként igazolták, hogy az említett peptiden jelentős konformációs változás mehet végbe kontrollált körülmények között is, negatívan töltött szintetikus biomolekulák jelenlétében. Indukált CD sávok mérésével és molekulamodellezési számításokkal tisztázták ezen komplexek szerkezeti tulajdonságait. A jelenség általános megértéséhez újonnan szintetizált foldamer (nem természetes alapú peptid) – lipid kölcsönhatásait is tanulmányozták vezikuláris rendszerekben. Infravörös spektroszkópiás (ATR-FTIR) és lineárisan polarizált fényspektroszkópiás (LD) mérések alapján kimutatták a peptid beépülését DOPC (dioleoil-foszfátidilkolin) vezikulákba. A modell membrán liposzómák csak részlegesen alkalmasak az igazi sejtmembrán mimikálására, ezért komplex modellek vizsgálatát is elindították. Ennek keretében elsőként mutatták ki a vörösvértestből izolált extracelluláris vezikulák orientálhatóságát polarizált fényspektroszkópia módszerével. Ezen potenciálisan gyógyászati és/vagy diagnosztikai szereppel bíró vezikulák izolálása és jellemzése még kevésbé standardizált. A csoportban egy új, gyors kivitelezésű módszert sikerült kidolgozni a részecskék jellemzésére, amelytől remélhető, hogy ezen lipid rendszerek komplex membránmodellként is alkalmazhatóak lesznek.

Természetes és mesterséges vezikula rendszerek előállítás, szeparálása, jellemzése, orvosi célra történő fejlesztése

A gyógyászatban már alkalmazott úgynevezett pegilált, azaz PEG-lánccal stabilizált vezikulák esetében a kozmotróp sók által kiváltott vezikula-aggregációt értelmezték a PEG lánc szerkezeti változásainak (a C-O-C kötések trans-gauche aránya) alapján. Úttörő módon elsőként kezdtek el extracelluláris vezikulák (EVk) IR spektroszkópiai vizsgálatával foglalkozni. Olyan spektrális markereket kerestek, amelyekkel egyszerűen, megbízhatóan lehet jellemezni az egyes EV szubpopulációkat (exoszóma, mikrovezikula, apoptotikus test), és amelyek az EVk szeparációjának gyors ellenőrzéséhez vezethetnek. Ilyen például az amid I és a C-H vegyértékrezgések aránya, amely jellemzően eltérő értékeket ad a különböző szubpopulációk esetében.

Oldatfázisú bio-makromolekulák, fehérjék méret- és alakmeghatározását biztosító röntgenszórási metodika fejlesztése

A kisszögű röntgenszórás módszerét fejlesztve oldott állapotú biológiai makromolekulák és fehérjék méret, valamint alak meghatározását végezték el. Az alak meghatározás módszerének fejlesztése érdekében foszfolipid keverékből álló bicella modellrendszer ellipticitás változásának követésére röntgenszórás és NMR technikákat alkalmaztak, és a továbbiakban a két módszer által nyerhető adatok összehasonlító vizsgálatát végezték el. Meghatározták a bicella modellrendszerbe ágyazott melittin és KALP23 fehérjék

alakmódosító hatását. Az eukarióta sejtekben megtalálható kalmodulin fehérje apo (Ca ionban szegény), ill. Ca ionnal kötött formáinak szerkezeti eltérését jellemezték. Igazolták a tripszin enzimnek az egyrétegű vezikulákban történő bezáródását. A ROCK 2 kináz rendszeren végzett kisszögű röntgenszórásos vizsgálatok eredményei alapján a pontosabb, a rendszer szinkrotron állomáson kivitelezett szerkezeti jellemzését készítették elő. A kisszögű röntgenszórásos vizsgálataikkal egyúttal hozzájárultak a szinkrotron mérési idő pályázat elnyeréséhez. Elvégezték a nagyméretű fenilalanin-liáz (PAL) enzim oldatfázisú, kislebontású alakmeghatározását.

Szabályozott hatóanyag-leadású biokompatibilis és biológiailag lebontható kompozit nanorészecskék

Három féle poli(tejsav-glikolsav) (PLGA) és két fajta polietilén-glikol-poli(tejsav-glikolsav) (PEG-PLGA) kopolimerrel, összetett emulziós módszer segítségével 80-90% kapszulázási hatékonysággal állítottak elő 160-170 nm átlag szemcseméretű, interferon-béta (szklerózis multiplex elleni) hatóanyagot tartalmazó nanorészecskéket. A PEG-PLGA polimerből készült nanorészecskék az elvárásoknak megfelelően jelentős mértékben képesek voltak elkerülni a sejtek által történő felvételt. Ezzel szemben a PLGA polimerrel előállított nanorészecskék nagy részét a vizsgált sejtek bekebelezték.

Szintén PLGA és PEG-PLGA kopolimerekkel sorafenib hatóanyagot (hepatocelluláris karcinóma kezelésére) mikrokapszuláztak emulziós módszerrel. A létrehozott 200 nm körüli átlagméretű nanorészecskék sejtfelvételi vizsgálatokban az interferon tartalmú részecskékhez hasonlóan viselkedtek. A részecskék karcinóma sejtekre gyakorolt citotoxicitását jelentősnek találták. A PEG-gel módosított kopolimerekből felépülő nanoszemcsék in vivo kísérletekben szignifikánsan hosszabb vérbeli tartózkodási idővel rendelkeztek.

Elektroanalitikai fejlesztések

Kardiovaszkuláris megbetegedések kezelésében fontos szerepet játszó fehérjebontó enzimek aktivitásának lokális jellemzésére elektroaktív biomolekula-konjugátum vékonyrétegekkel módosított mikro-elektrodokat alkalmaztak. Véralvadék modellben végbemenő enzimaktivációs folyamatokat követték elektrokémiai úton különböző, a vérben neutrofil sejtek által extracellulárisan kiválasztott komponens jelenlétében. A mérések igazolták a komponensek fibrin oldódási sebességet befolyásoló hatását. A kialakított mérési eljárást vérmintában történő alvadék oldódás vizsgálatára is tesztelték.

Szerves és vizes fázis közötti megoszlás és kromatográfiás adatok modellezése

Egy egyedülálló, szisztematikus algoritmust fejlesztettek ki a legmegfelelőbb lipofilicitási jellemzők (indexek) kiválasztására és csoportosításukra két nemparaméteres módszer: a rangszám-különbségek összege és az általánosított párkorrelációs módszer segítségével. ANOVA és hőtésképek segítettek a jellemzők csoportosításában. A kísérletes, rázóedényes módszer adta a legjobb eredményt, de közvetlenül utána a számítós módszerek következnek. Az oktadecil-szilika fázisokon a mobil fázis milyensége (metanol vagy acetonitril) nem játszik szerepet.

Több évtizedes próbálkozás után a Szentpétervári Egyetem kutatóival együttműködve sikerült hihető magyarázatot adni a Kováts indexek (a legjobban reprodukálható retenciós adat) anomális hőmérsékletfüggésére. Az elméleti magyarázat nemcsak az analizálandó anyag polaritásával operál, hanem a minta mennyiségével is. Kimutatták, hogy az oszlopra adagolt mintamennyiség dinamikusan megváltoztatja az oszlop elválasztási tulajdonságait, mégpedig úgy, hogy a háromféle hőmérsékletfüggés (csökkenő, növekvő, minimumos) magyarázhatóvá

válí. A korábbi elképzeléseket (elárasztás és adszorpciós hatások) cáfolni tudták. Ezzel több évtizedes vita végére tettek pontot.

b) Tudomány és társadalom

A társadalom széles rétegei számára tették közkincsé tudományos eredményeiket ismeretterjesztő folyóiratcikkekkel és rádióriporttal. Előadásokkal, demonstrációkkal csatlakoztak más intézvények rendezvényeihez, több saját kezdeményezésű programjukkal népszerűsítették a tudományt, segítették középiskolások tehetséggondozását és pályaválasztását, valamint a legkisebbekben igyekeztek felkelteni az érdeklődést a természettudományok iránti.

A Tudományos Ismeretterjesztő Társulat és az MTA Természettudományi Kutatóközpont közös ismeretterjesztő cikkpályázatán a Természet Világa kategóriában az intézet fiatal munkatársa második helyezést ért el „Pörkölt kávébab és hőkezelt biomassza” című munkájával.

Az OTKA magazinban közérthető módon írtak a „Molekulahordók”, valamint a „Hulladékok hőbontása pirolízissel” című kutatásokról.

Az intézet egyik kutatócsoport-vezetőjét a Hitrádió munkatársa által készített interjúban kérdezték a megújuló energiákról. A beszélgetésben érintették a különbséget az alternatív energia és a megújuló energia között, a hazánkban elterjedt alternatív, illetve megújuló energiaforrásokról, valamint az ezekhez kapcsolódó kutatási irányokról: a hidrogén tüzelőanyag-cellás és a direkt metanol tüzelőanyag-cellákon alapuló technológiákról.

A Kossuth Rádióban, interjúban számoltak be a „Lendület” támogatást nyert Biomolekuláris Önrendeződés csoport kutatási terveiről. Az NKFIH honlapján a csoport vezetőjének korábbi tevékenységéről és a Magyarországra való visszaköltözésének szakmai megfontolásairól írtak. Az MTA honlapján rövid közlemény mutatta be a csoport nem természetes peptidszármazékok szintézisére is alkalmas reakciókról szóló összefoglaló cikkét.

Más intézmények szervezésében, külső helyszíneken is részt vettek a tudomány népszerűsítésében

Az „Élet - Tudomány - Történelem” konferencián (2016. június 1. MTA Székház) „A toxikus fémek szerepe az emberi betegségekben. Történeti áttekintés az ókortól napjainkig” címmel tartottak előadást.

A Szellemi Tulajdon Nemzeti Hivatala székházában a Hamisítás Elleni Nemzeti Testület Műtárgyhamisítás elleni munkacsoportja rendezvényén (2016. április 7.) szerepeltek.

Az ELTE középiskolásoknak szóló Alkímia ma sorozat 2016. január 28-i előadás témája „Analitikusok a makromolekulák nyomában” volt, a március 10-i előadás pedig arról szólt, hogy "Hogyan mérünk tömeget, hőmérsékletet és nyomást manapság?".

Az MTA EK Energetikai szemináriumai keretén belül, 2016. április 18-án a „Polimer elektrolit membrán tüzelőanyag elemek katalitikus problémái” témáról beszéltek.

A Nemzetgazdasági Minisztériumban kerül sor a „metanolos tüzelőanyag-cellák” workshopra, amelyen a „Tüzelőanyag-cellás járművek a jelenlegi elterjedtsége, piaci helyzete és várható fejlődése” című előadás hangzott el.

A Csodák Palotája Múzeumok Éjszakája rendezvényén az intézet egyik tudományos tanácsadója „Polimer (műanyag) korszakban élünk: A fogkefétől a számítógépes csipekig és gyógyszerkibocsátó szívkoszorúér sztentekig” címmel tartott előadást.

„Miben mások a makromolekulák?” címmel ugyancsak a polimerekről adott elő az intézet egyik fiatal munkatársa az V. Eötvös Természettudományos Táborban.

A Csodák Palotája Tudományos Csopa Cafe programján, 2016. december 13-án az intézet egyik főmunkatársa „Fény és anyag - színképelemzés a természettudományok szolgálatában című” előadásában bemutatta, hogy miként járult hozzá a színképelemzés a modern kémia és fizika tudományának kialakulásához, és hogyan szolgálja a mai napig a tudomány és az ipari kutatás-fejlesztés szakembereit.

Saját szervezésű programok rendezése

Az MTA TTK épületében 2016. június 6-án került sor a „Az elektro-mobilitás és a hidrogén-mobilitás lehetőségei, feladatai Magyarországon és az EU-ban” című információs napon a „Kapcsolódás az EU hidrogén és tüzelőanyag-cellák közös vállalkozásához (FCH JU) és annak kutatási szervezetéhez (N.ERGHY)” című előadásra.

Megszervezték az „E-mobilitás másképpen II” konferenciát Budapesten, az EXPO területén 2016. október 19-én, amelyen a metanol tüzelőanyag-cellák fejlesztésének problémáiról beszéltek.

Marie Curie workshop keretében a Marie Curie ösztöndíjakra jelentkező fiatalok felkészülését segítő többnapos tanfolyamot szerveztek.

Az intézet a szervezője az „AKI Kíváncsi Kémikus” kutatótábor sorozatnak, amelynek nyolcadik táborát szervezték meg 2016. június végén. Az egy hetes programban 25 tehetséges középiskolás vehetett részt. A diákok tizenkét kémiai, illetve biológiai téma kutatásába kapcsolódhattak be, melyek közül hetet az intézet munkatársai irányítottak. Ezek a következők voltak: Hogyan épül fel a sejtmembrán? Egyszerű modellek előállítására és vizsgálata; Liposzómás gyógyszerhordozó rendszerek; Kétdimenziós kémia; Polimerek – Az óriásmolekulák csodálatos világa; A 9,9'-biantril különleges fluoreszcenciája; Katalízis fűvel-fával: vegyianyagok előállítása lignocellulózból; Mennyi energiát nyerhetünk ki egy elektrokémiai áramforrásból? A rendezvény megnyitóján az intézet egyik fiatal kutatója „Lehet „intelligens” egy polimer?” címmel tartott plenáris előadást. A kutatótáborban készített munkájukról a diákok dolgozatokat készítettek, melyeket a korábbi évekhez hasonlóan ISBN számmal rendelkező kötetbe szerkesztettek, és kiadtak.

A Magyar Tudomány Ünnepe, 2016. november 29-én „Oknyomozás tudományos módszerekkel” címmel nyílt napot rendezett az intézet, melyen a Szinyei Merse Pál Gimnázium 50 kémia és biológia fakultációra járó diákja vett részt. A diákok érdeklődésüknek megfelelően választhattak a tizenhat labor nyújtotta kínálatból, ahol érdekes kutatási projektekkel ismerkedhettek meg.

2016 decemberében a kutatóközpont munkatársai ismét elhozták óvodás és kisiskolás gyermekeiket, unokáikat a hagyományos „Kémikulás” rendezvényre, ahol egy tematikus program keretében az ElektroKémikulás várta a piciket, akivel játékos elektrokémiai kísérleteket hajthattak végre.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

Az intézet hazai kapcsolatrendszeréhez egyetemek, akadémiai kutatóintézetek és vállalatok tartoznak.

Intenzív kapcsolatokat tartanak fenn a hazai oktatási intézményekkel. A közös kutatások mellett az intézet munkatársai részt vesznek a graduális és posztgraduális képzésben, előadásokat tartanak, gyakorlatokat vezetnek a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetemen (BME), az Eötvös Loránd Tudományegyetemen (ELTE), a Pannon Egyetemen (PE) és az Óbudai Egyetemen. PhD, MSc, BSc és TDK témákat vezetnek a fenti egyetemeken kívül a Szent István Egyetem hallgatóinak is. A BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karával és a Pannon Egyetem (PE) Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével különösen szoros az együttműködés, hiszen velük közös laboratóriumot tartanak fenn.

ELTE Kémiai Intézet Határfelületi- és Nanoszerkezetek Laboratóriumával közösen elnyert MEDinPROT Szinergia pályázat keretében különféle szerkezetű polimerek biokompatibilitását jellemezték. További két MEDinPROT pályázatban működnek együtt MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoporttal: fehérjék oldatbeli szerkezetét határozták meg SAXS és NMR módszerekkel, illetve poli(N-izopropil-akrilamid) és globuláris, valamint rendezetlen fehérjék hőmérsékletfüggő kölcsönhatásait vizsgálták NMR spektroszkópiával. Ez utóbbi projektben részt vesz az MTA TTK Enzimológiai Intézet is.

Az MTA kutatóhálózatának intézeteivel is sokrétű kutatási kapcsolatban állnak. Az együttműködésekhez speciális szakismereteikkel és színvonalas kutatást lehetővé tevő műszerparkjukkal járulnak hozzá. Kutatási eredményeik gyakorlati megvalósításában kis- és nagyvállalatokkal kialakított kapcsolatrendszerük segít.

A kutatás-fejlesztési és oktatási tevékenységük mellett az intézet kutatói nagy számban vesznek részt az MTA bizottságainak, munkabizottságainak és más tudományos testületeknek, valamint folyóiratok szerkesztőbizottságainak munkájában.

Nemzetközi kapcsolatok

Mesterséges lökéshullámmal létrehozott és aszteroida becsapódás során képződött gyémántszerkezetek komplex vizsgálatát kezdték meg a University College London (Nagy-Britannia) és az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont kutatóinak együttműködésével.

Természetes (barlangi) és mesterséges (laboratóriumi körülmények között előállított) karbonátok szerkezetének és izotóp összetételének összehasonlítását végzik a Graz University of Technology (Austria) és az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont munkatársaival közösen. A kapcsolattartást az MTA és az Osztrák Akadémia egyezménye teszi lehetővé.

Akadémia-ipar mobilitási pályázatban (H2020 MSCA RISE – FORMILK) ír és szlovák részvétellel innovatív technológiát dolgoznak ki enzim aktivitás meghatározására tejben.

MÖB DAAD kutatócsere projekt keretében az Universität Ulm (Németország) munkatársaival közösen az elektrokémiai kettősréteg átrendeződési folyamatait vizsgálják ionfolyadékokban.

Együttműködésben a Heyrovsky Institute of the CAS (Prága, Cseh Köztársaság) kutatóival elektromos és termoelektromos áram közvetlen mérése alkalmas nagy érzékenységű, egyedi mérőberendezést fejlesztettek ki, amellyel egy molekulán mint átmeneten képesek elektrontranszportot mérni.

Az University of Novi Sad (Novi Sad, Szerbia) oktatóival közösen korróziós folyamatokat tanulmányoznak kvarckristály mikromérleg alkalmazásával.

A Szlovák Tudományos Akadémia Polimer Intézetével (Pozsony, Szlovákia) elnyert mobilitási pályázattal támogatott együttműködésben új típusú, kisebb környezeti kockázatot jelentő makromolekuláris stabilizátorokat dolgoznak ki.

Többfunkciós elágazó polimerekkel kapszulázott ftalocianin pigmenteket fejlesztenek ki in situ nyomtatáshoz. A kétoldalú nemzetközi egyezményen alapuló kutatási projekt együttműködő partnere a National Research Center, Kairo (Egyiptom).

Funkcionalizált egyenes szénláncú és ciklikus polimerek szintézise témában együttműködtek a Texas A&M University at Qatar (Doha, Qatar) és a California Institute of Technology (Pasadena, CA, USA) intézményekkel. Az együttműködést a Qatar Nemzeti Kutatási Alap támogatja.

COST együttműködésben a Cordoba Egyetemmel (Rabanales, Spanyolország) alacsony környezetterhelést eredményező technológiákat dolgoznak ki kémiai alapanyagok és energiahordozók gyártására.

Az intézet egyik fiatal kutatója a Karlsruhe Institute of Technology (Németország) vendégeként impulzus-lézer fotolízissel tanulmányozta OH gyök és gyűrűs éterek reakcióját. A kint tartózkodás költségeit a „Chemistry of smart energy carriers and technologies” COST akció fedezte.

MTA és a Bolgár Tudományos Akadémia közötti megállapodás keretében az Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry (Szófia, Bulgária) kutatóival új típusú nanopórusos szilikátokat alkalmaznak gyógyszer hatóanyag hordozó rendszerként és katalitikus célokra.

A Humboldt tapasztalt kutatói ösztöndíj támogatásával sorafenibet és gadolíniumot tartalmazó nanokompozitokat fejlesztenek ki hepatocelluláris karcinóma diagnosztizálására és kezelésére. A fogadó intézmény a Goethe Universitát (Frankfurt am Main, Németország).

Az East Paris Institute of Chemistry and Materials Science (Franciaország) a partner a molekulák önszerveződésével előállított szabályozható nanorendszerek kutatásában.

MTA-JSPS együttműködési projekt keretében a Saitama University (Japan) munkatársaival közösen feltárták, hogy egy reverzibilis redox reakcióra képes szerves kation és negatív töltéssel rendelkező makrociklusos vegyület között milyen asszociációs folyamatok játszódhatnak le.

TÉT együttműködésben az Uniklinik RWTH Aachen (Németország) kutatóival liposzómás radionukleozidot állítottak elő, és tesztelték biológiai működését.

Foldamerekben használható aminosavak szintézise témában a Chalmers University (Göteborg, Svédország) kutatóival dolgoznak együtt. A Tokyo Institute of Technology (Japan), és a Harvard University (Cambridge, MA, USA) professzoraival önszerveződő molekuláris motor-DNS komplexeket tanulmányoznak rekombinációs reakció folyamatában. Mintázatfelismerés, osztályozás, kromatográfiás és spektroszkópiai adatok modellezése élelmiszerek eredetvizsgálatára és a biológiai aktivitás jellemzésére témában működnek együtt a Belgrádi Egyetem (Szerbia) kutatójával. A közös munka kereteit MTA bilaterális egyezmény adja.

A következő tudományos jelentőséggel is bíró külföldi szerződéses munkákban vesznek részt:
A Borealis Polyolefine GmbH-val (Linz, Austria), a Kompetenzzentrum Holz GmbH-val (Linz, Austria) és a BME-vel együttműködésben hibrid polipropilén kompozitok kifejlesztésén dolgoznak. Elsősorban szerves szálak alkalmazásával a műanyag kompozitok tulajdonságainak (merevség, ütésállóság, tömeg, ár) megfelelő kombinációját kívánják elérni.

A SABIC Petrochemicals B.V. (Hollandia) megbízásából tanulmányozzák ligninnek polietilén stabilizátoraként való alkalmazhatóságát.

A Taiwan Liposome Company Ltd. megbízásából sztérikusan stabilizált liposzómák PEG-rétegvastagságát határozták meg SAXS módszerrel.

Három jelentős nemzetközi konferencia szervezésével járultak hozzá az intézet külkapcsolataihoz: World Congress on Living Polymerizations and Polymers, Budapest, 2016. május 29. – június 3.; 3rd Conference on Biobased Polymers and Composites, Szeged, 2016. augusztus 28. – szeptember 1.; 13th Pannonian Symposium on Catalysis, Siófok, 2016. szeptember 19-23.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A H2020 MSCA RISE – FORMILK 690898 pályázat keretében innovatív technológiát dolgoznak ki enzim aktivitás meghatározására tejben. Szlovák, hazai és ír akadémiai és gazdasági szereplők (Univerzita Komenskeho v Bratislave; University College Dublin; MTA TTK AKI; Powertec sro., Szlovákia; Sonas Ltd., Írország; Magyar Tejgazdasági Kutató Intézet) részvételével 2016 januárjában indult a projekt. A külföldi kiküldetések során ígéretes kutatási eredmények születtek biomolekulákkal stabilizált fém nanorészecskék szenzorikában történő alkalmazhatóságával, tej modell lipid-fehérje kevert vékonyrétegek stabilitásával és tejben alkalmazott táplálék kiegészítők stabilitásával kapcsolatban.

Az OTKA NN 117986 projekt keretében 2016 áprilisa óta alga foszfolipidből mint megújuló nyersanyagforrásból kiindulva állítanak elő olefin metatézissel biológiailag lebomló polimereket. Az alga olaj gyártása során alacsony hozzáadott értékű foszfolipidek képződnek, amelyek hasznosításával többszörösen telítetlen zsírsav észterekből poliészter és poliamid alapanyagok állíthatók elő. Együttműködő partner a Yale University, Center for Green Chemistry and Green Engineering, New Haven, CT, USA.

Az EGT/Norvég alap FM támogatásával a Terra Humana Kft. vezetésével 2016 májusa óta dolgoznak az „Új zöld ipari technológia alkalmazása és piaci bevezetése melléktermékekből előállított magas foszfor tartalmú csontszén szilárd fermentációjával” című pályázaton. A projekt keretében fizikai kémiai módszerekkel jellemezték az állati melléktermékeket (esősorban csontliszt), illetve pirolízisük szilárd és cseppfolyós termékeit. Kísérleteket végeztek a pirolízis olajban nagy koncentrációban megjelenő hosszúszenláncú savnitrilek hidrolizálására, a nitrogéntartalom kinyerésére. Vizsgálataik tudományos értékű eredményeket ígérnek.

A 2016. évi Lendület pályázat egyik nyertese az intézet munkatársa. A 2016 júniusában indult „Membrán aktív mesterséges szerveződések” című projektben a következő eredményeket érték el: Egy új, gyors kivitelezésű módszert dolgoztak ki extracelluláris vezikulák jellemzésére, melyből remélhető, hogy ezen lipid rendszerek a jövőben komplex membránmodellként is alkalmazhatóak lesznek membránaktív peptidok aktivitásának vizsgálatakor. Ezen felül egy rendezetlen szerkezetű antimikrobiális peptid konformációváltozását indukálták negatívan töltött szintetikus, biológiailag releváns molekulákkal, ezt CD és UV abszorpciós spektroszkópia módszerekkel, valamint molekulamodelllezési technikákkal igazolták.

A „Bionanotechnológiai kutatások betegségek hatékony kimutatása, újfajta hatóanyagok kifejlesztése és bioinspirált intelligens nanoanyagok előállítása érdekében” című GINOP-2.3.2-15-2016-00017 pályázatban (projekvezető a Pannon Egyetem) 2016 szeptemberében

kezdődött meg a munka. Poli(tejsav-glikolsav) és polietilén-glikol-poli(tejsav-glikolsav) kopolimerekkel fehérje típusú (szklerózis multiplex kezelésére), illetve szerves rákellenes gyógyszert tartalmazó biokompatibilis és biológiailag lebontható nanorészecskéket állítottak elő. A nanorészecskék fizikai, kémiai és in vitro hatóanyagleadási és citotoxicitási elemzését elvégezték, és megkezdték az in vivo vizsgálatokat. Tanulmányozták egy biológiailag aktív természetes alkaloid, a flavopereirin kukurbit[7]uril apoláris üregébe ékelődésének kinetikáját különböző hőmérsékleteken. Nagypontosságú, egyszerű módszert fejlesztettek ki kukurbit[7]uril komplexek disszociációs sebességi állandójának meghatározására.

A 2016 szeptemberében indult Magyar-indiai Tét projekt (Tét_15_IN-1-2016-0034) célja „Katalitikus zöldkémiai eljárás fejlesztése vegyi anyagok és üzemanyagok előállítására lignocellulózából”. Eddig elért eredmények: Üzemanyagként, illetve üzemanyag adalékként alkalmazható, hosszú szénláncú alkoholokat, ill. paraffinokat állítottak elő biomasszából nyerhető rövid szénláncú alkoholokból és ketonokból heterogén katalizátorok segítségével. A lignocellulóz sav, illetve enzim katalizátorok jelenlétében különféle platform vegyületekké, pl. etanollá és acetonná alakítható. Első lépésben az acetone etanos Guerbet alkilezésével hosszabb szénláncú (C₅ – C₁₉) ketonokat, illetve alkoholokat állítottak elő Ni-tartalmú Mg,Al-hidrotalcit katalizátoron, ezt követően a keletkezett alkoholokat, illetve ketonokat alkánokká redukálták NiMo/γ-Al₂O₃ katalizátoron. Vizsgálták továbbá az etanol Guerbet önkapcsolódását hosszabb szénláncú alkoholokká Pd tartalmú, lúggal módosított aktív szén katalizátoron.

Az „Új galenikus gyógyszerkészítmények kutatás-fejlesztése és a gyártásukat biztosító infrastruktúra kialakítása” című GINOP-2.2.1-15-2016-00023 pályázat vezető intézménye az Egis Gyógyszergyár Zrt., az intézeten kívül résztvevő még a Pannon Egyetem és a Szegedi Tudományegyetem. A munka 2016 októberében vette kezdetét, az azóta eltelt időben áttekintették a hatóanyagról rendelkezésre álló irodalmat, elkezdték vizsgálni antioxidáns tulajdonságait és elektrokémiai detektálhatóságát. Megállapították, hogy a hatóanyag nem rendelkezik Fe³⁺ redukáló képességgel, és ICP-MS eredményei nem mutatnak jelentősebb szennyeződést. A bőrgyógyászatban alkalmazott hatóanyag liposzómák foszfolipid kettősrétegével való kölcsönhatását jellemezték kisszögű röntgenszórással, fagyasztva töréssel kombinált transzmissziós elektronmikroszkópiával és infravörös spektroszkópiával. Olaj/víz emulziós módszerrel többféle kapszulázó polimerrel létrehoztak topikális alkalmazásra szánt nanokompozitokat. Nanoszemcsés hatóanyag előállítását vizsgálták precipitációs és porlasztva szárítási módszerekkel ultrahang és növekedésgátlást biztosító és kapszulázó polimerek jelenlétében.

Az „Épületek korszerű hőtárolása környezetbarát fázisváltó anyagok alkalmazásával építő- és szigetelőelemekben” című GINOP-2.2.1-15-2016-00010 pályázat kezdete, 2016 októberétől a megnövelték a fázisváltó hőtároló mikrokapszulák előállításának léptékét, és kidolgozták a léptéknöveléshez szükséges technológiai változtatásokat. A projektet vezető intézmény a Thermofoam Kft., az intézeten kívül résztvevő még a Pannon Egyetem.

A „Módszerek fejlesztése pontos és gyorsan számítható analitikus potenciálisenergia-felületek előállítására és alkalmazásuk elemi reakciók dinamikájának vizsgálatában” című PD_16 120776 pályázat keretében 2016 októberétől kifejlesztettek egy újszerű, teljesen automatizált módszert félmerek molekulák konvencionális erőterének paraméterezésére, amelyhez rezgési analízis eredményeket használnak fel.

A PD 121326 pályázat célja „Biomimetikus referencia nanorészecskék előállítása extracelluláris vezikulák jellemzéséhez”. A 2016 októberében indult projektben üregek,

mezopórusos szilika nanorészecskéket állítottak elő, és különböző módszerekkel (TEM, SAXS, DLS, FTIR, NTA, RPS) jellemezték azokat.

A "Polimer kompozit termékek előállítása rövid ciklusidejű, automatizált gyártástechnológia segítségével gépjárműipari alkalmazásokra, különös tekintettel a kompozit elemek komplexitására és újrafeldolgozhatóságára" című NVKP_16-1-2016-0046 nyertes pályázatban a 2016. december 1-én kezdődött el a munka. A pályázat vezetője az Evopro Systems Engineering Kft., az intézet mellett résztvevő még az eCon Engineering Mérnöki, Szolgáltató Kft. és a BME.

2017. januárban indulnak az NVKP_16-1-2016-007 „Anyagtudományi kutatás és fejlesztés az extracelluláris vezikula alapú orvosdiagnosztika megvalósításához” című, és a H2020 735977 jelű „A Tüzelőanyag Cellák és a Hidrogén technológiák fejlődése érdekében a jogi szabályok és adminisztratív folyamatok azonosítása, a jogi akadályok vizsgálata és megszüntetésüknek támogatása” című, 2017. februárban pedig a NVKP-16-1-2016-0045 „Innovatív fotooxidációs víztisztítási technológia kidolgozása szerves mikroszennyezők eltávolítására biológiai úton tisztított szennyvizekből” című pályázatok.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bozsódi B, Romhányi V, Pataki P, Kun D, Renner K, Pukánszky B: Modification of interactions in polypropylene/lignosulfonate blends. *Materials and Design*, 103: 32-39 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41642>
2. Czégény Zs, Bozi J, Sebestyén Z, Blaszó M, Jakab E, Barta-Rajnai E, et al. (4): Thermal behaviour of selected flavour ingredients and additives under simulated cigarette combustion and tobacco heating conditions. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 121: 190-204 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/39789>
3. Fazekas P, Czégény Zs, Mink J, Bódis E, Klébert Sz, Németh Cs, et al. (3, Keszler AM, Károly Z, Szépvolgyi J): Decomposition of Poly(vinyl chloride) in Inductively Coupled Radiofrequency Thermal Plasma. *Chemical Engineering Journal*, 302: 163-171 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/35346>
4. Feczkó T, Fodor-Kardos A, Sivakumaran M, Shubhra QTH: In vitro IFN- α release from IFN- α - and pegylated IFN- α -loaded poly(lactic-co-glycolic acid) and pegylated poly(lactic-co-glycolic acid) nanoparticles. *Nanomedicine*, 11: 2029-2034 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/44974>
5. Fekete É, Lengyel B, Cserfalvi T, Pajkossy T: Electrochemical dissolution of aluminium in electrocoagulation experiments. *Journal of Solid State Electrochemistry*, 20: 3107-3114 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41925>
6. Fodor Cs, Stumphauer T, Thomann R, Thomann Y, Iván B: Poly(N-vinylimidazole)-l-poly(propylene glycol) amphiphilic conetworks and gels: molecularly forced blends of incompatible polymers with single glass transition temperatures of unusual dependence on the composition. *Polymer Chemistry*, 7: 5375-5385 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45114>

7. Garcia-Diez R, Gollwitzer C, Krumrey M, Varga Z: Size determination of a liposomal drug by small-angle X-ray scattering using continuous contrast variation. *Langmuir*, 32: 772-778 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45524>
8. Harangozó JG, Wintgens V, Miskolczy Zs, Guigner J-M, Amiel C, Biczók L: Effect of macrocycle size on the self-assembly of methylimidazolium surfactant with sulfonatocalix[n]arenes. *Langmuir*, 32: 10651-10658 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/40460>
9. Hári J, Gyürki Á, Sárközi M, Földes E, Pukánszky B: Competitive interactions and controlled release of a natural antioxidant from halloysite nanotubes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 462: 123-129 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/37878>
10. Kali G, Iván B: Noncollapsing polyelectrolyte conetwork gels in physiologically relevant salt solutions. *European Polymer Journal*, 84: 668-674 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45115>
11. Nagy-Naszályi L, Polyák A, Mihály J, Szécsényi Á, Szigyártó ICs, Czégény Zs, et al. (11, Jakab E, Németh P, Bertóti I, Bóta A): Silica@zirconia@poly(malic acid) nanoparticle: promising nanocarriers for theranostic applications. *Journal of Materials Chemistry B*, 4: 4420-4429 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36448>
12. Onyestyák Gy, Novodárszki Gy, Farkas Wellisch Á, Pilbáth A: Upgraded biofuel from alcohol-aceton feedstocks over a two-stage flow-through catalytic system. *Catalysis Science & Technology*, 6: 4516-4524 (2016) <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2016/cy/c6cy00025h>
13. Rácz A, Bajusz D, Fodor M, Héberger K: Comparison of classification methods with "n-class" receiver operating characteristic curves: A case study of energy drinks. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 151: 34-43 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/46476>
14. Vass Á, Pászti Z, Bálint Sz, Németh P, Szűjjártó GP, Tompos A, et al. (1, Tálas E): Structural evolution in Pt/Ga-Zn-oxynitride catalysts for photocatalytic reforming of methanol. *Materials Research Bulletin*, 83: 65-76 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/39149>
15. Vikár A, Nagy T, Lendvay G: Testing the Palma–Clary Reduced Dimensionality Model Using Classical Mechanics on the $\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$ Reaction. *Journal of Physical Chemistry A*, 120: 5083-5093 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45139>
16. Zsila F, Beke-Somfai T: Dimeric binding of the plant alkaloid ellipticine to human serum proteins. *RSC Advances*, 6: 44096-44105 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/47576>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT ENZIMOLÓGIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.
telefon: (1) 382 6700; e-mail: buday.laszlo@ttk.mta.hu
honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az Enzimológiai Intézetben számos tudományterületet átfogó, interdiszciplináris kutatások folynak, melyek során mind a biológia, mind fizika és a kémia tudománya által kínált lehetőségeket alkalmazzák. A kutatóhelyen részben szerkezeti biológiai alapkutatások folynak, melyek egyrészt lehetővé teszik a fiziológiás és patofiziológiás folyamatok sejt és molekula szintű értelmezését, másrészt a szerkezetbiológia mellett folyamatosan bővül a kutatási tevékenység a komplex biológiai folyamatok megértését célzó rendszerbiológia irányába, a proteomika és a bioinformatika lehetőségeinek kihasználásával. Így többek között vizsgálja a sejtekben zajló jelátviteli utakat, a rendezetlen fehérjék működését, a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusait molekulaszervezeti alapon, a daganatos és neurodegeneratív betegségek kialakulásához vezető egyes folyamatok, a transzmembrán fehérjék szerepét, valamint a DNS hibajavításban szerepet játszó enzimeket.

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik négy egyetemen tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben mind posztgraduális oktatásban. Intézetük ezzel egy időben több mint 60 doktorandusz hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

Az intézet alapkutatási eredményeinek hasznosítására együttműködések jöttek és jönnek létre különböző kis- és nagyvállalatokkal. 2016-ban az intézet aktív módon közreműködött a Richter Gedeon NyRt-vel, valamint szoros kapcsolatot alakított ki számos kisvállalattal (Vichem Chemie Kutató Kft., Targetex Kft., Pharma-Trend-Biotechnológia Kft, Toxi-Coop Toxikológiai Kutatóközpont Zrt., KTT Kft., Alkahest Inc., USA, Zymo Research Corporation/Zymo Research Europe GmbH stb.). Fontos feladatuknak tekintik a magyar tudomány eredményeinek nemzetközi szinten történő képviselését, amit nemzetközi pályázatok résztvevőiként és nemzetközi szervezetekben viselt tisztségek útján valósítanak meg.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A Jelátviteli és Funkcionális Genomika Kutatócsoport egyik része (jelátvitel) alapvetően két ún. állványfehérje családot vizsgál, ezek a Caskin és a Tks fehérjecsaldok. Rekombinációs technikával előállítottak számos SH3 domént, illetve az ezek foszforilációjára képes tirozin kinázt. Az *in vitro* foszforilációt követően vizsgálták a partner prolin-gazdag peptidek kötődését. Kimutatták, hogy a tirozinon foszforilált SH3 domének nem vagy csak alig képesek prolin-gazdag peptideket kötni. Sikerült a foszforilált fehérjék szerkezetét röntgenkrisztallográfia, illetve NMR vizsgálatok segítségével atomi szinten is feltérképezni. A Tks4 fehérjét kódoló gén kiütésével egérmodellt hoztak létre. Kimutatták, hogy a jelentős defektusokat mutató egerekből izolált mesenchymalis őssejtek differenciációs programja sérül, így nem vagy csak rosszul képesek zsír- és csontszöveti irányba differenciálódni. A funkcionális genomika alcsoport kutatói korábbi munkájuk során kimutatták, hogy a WFIKKN1 fehérje jelentős affinitással kötődik a promiosztatin és latens miosztatin prodomén régiójához, ezért feltételezhető volt, hogy e kölcsönhatás révén a WFIKKN1 befolyásolja a

miosztatin proteolitikus aktiválódását. Kimutatták, hogy bár a WFIKKN1 fehérje nincs hatással a promiosztatin furin által történő hasítására, jelentősen növeli a latens miosztatin BMP1-gyel történő processzálódását. A vizsgálatok azt is kiderítették, hogy a BMP1 metalloproteáz a WFIKKN1 fehérjét is elhasítja, és elsősorban a keletkező KKN1 fragmens felelős a BMP1 aktivitást fokozó hatásért. Megállapították továbbá, hogy a genom szekvenciák számítógépes vizsgálata alapján azonosított fehérje-kódoló gének jelentős hányadának szerkezete téves, ezért a hibás adatok elemzése gyakran téves következtetésekre vezet a kutatókat. Kimutatták, hogy arra a meglepő konklúzióra is génpredikációs hibák vezették a kutatókat, hogy a morfológiailag extrém konzervatívizmust mutató (élő fossziliaként számoltartott) lándzsahalak fehérjéi extrém evolúciós változékonyságot mutatnának.

A rendezetlen fehérjék többfunkciós, többek között aggregatív jellegüknél fogva igen gyakran aktív résztvevői idegrendszeri betegségeknek, mely betegségek kialakulásában e fehérjék oldható, kisméretű asszociált formái játszanak meghatározó szerepet; a patológiás aggregátumuk felhalmozódása a betegség későbbi szakaszában jellemző kórképként jelenik meg. A Sejtarchitektúra Kutatócsoport által felfedezett mikrotubulus asszociált (MAP) fehérje, a TPPP/p25 nem rendelkezik 3D szerkezettel, a szintén szerkezet nélküli α -szinukleinnel patológiás komplexet alkot, ami aggregátumok majd zárványtestek képződéséhez vezet, ami jellemző kórképe a Parkinson-kórnak és a multiszipstémás atrófiának (MSA). Ezek a rendezetlen, többfunkciós „hallmark” fehérjék azonban nem tekinthetők ideális gyógyszer-célpontnak, miután mind fiziológiás, mind patológiás funkcióval rendelkeznek, amit a kölcsönható partnereik határoznak meg (*Neomorphic Moonlighting Proteins*). Egy új innovatív kutatási stratégiát valósítottak meg azáltal, hogy a patológiás TPPP/p25-szinuklein kontaktfelületét azonosították, és gyógyszer-célpontként molekuláris és sejtszinten validálták. Bizonyították elméleti és kísérletes módszerekkel, hogy a TPPP/p25 speciális plaszticitással rendelkezik (*Neomorphic Chameleon Protein*), melynek alapját génszintű változások képezik. Javaslatot dolgoztak ki arra vonatkozólag, hogy a többfunkciós, plasztikus, nagyrészt rendezetlen fehérjék esetén hogyan azonosítható nagy specificitású gyógyszer-célpont, illetve fejleszhető alacsony toxicitású gyógyszer-molekula. Agykutatási eredményeik megmutatták, hogy egyrészt a TPPP/p25 kifejeződésének hiánya tumor (glióma) kialakulásához vezet, másrészt over-expressziója antiproliferatív hatással bír, ami a fehérjének a mikrotubuláris hálózat acetilációját fokozó hatásának tudható be. A hatásért a citoplazmatikus hiszton dezacetilázok (HDAC6 és SIRT2) – melyek tumor ellenes molekulák fontos célpontjai – TPPP/p25 általi gátlása felelős. COST projekt keretében német és francia szintetikus vegyészek potenciális molekuláinak sejtszintű vizsgálatai révén sikerült új hatásmechanizmussal működő molekulákat azonosítaniuk (pl. az inhibitor a SIRT2 proteozómális degradációját indukálja). Megállapították, hogy az általuk azonosított és elnevezett apicortin fehérje 3 paralógja megtalálható a chromerida egysejtűekben.

A Fehérjeszerkezet Kutatócsoport a multidrog rezisztencia szerkezeti hátterét vizsgálja. Az aryl hydrocarbon receptoron (AHR) mint a multidrog rezisztencia hátterében álló széles ligand specificitással rendelkező receptorok modelljén kollaborációban végzett in silico vizsgálatok alapján valószínűsítették, hogy a ligand specificitásért nem csak a PAS-B domén tehető felelőssé. A ligand kötő zseb mellett az oda vezető csatorna is fontos szerepet játszik a testidegen molekulák felismerésében. Emellett új potenciális hatóanyagok keresésével, glutaminil cikláz gátlására fragmens alapú drogok tervezésével is foglalkozik a munkacsoport. Irodalomból ismert gátlószerekből kiindulva 2D hasonlósági szűrés alapján összeállított fragmenskönyvtár kísérletileg leghatékonyabbnak ítélt 15 elemét vizsgálták a Schrödinger Suite 2015 programcsomaggal. A fehérje szerkezetét is flexibilisen kezelő Induced Fit Docking modul segítségével bedokkolták a fragmenseket a glutaminil cikláz 3si0 PDB

szerkezetébe. A legjobb pontszámokat kapott fehérje-ligand komplex szerkezetek összehasonlítása azt mutatta, hogy egy fragmens a fehérje más részéhez kötődik, mint a többi. Ezt a fragmenst egy hozzá közel kötődő másik fragmenssel összekötötték és az így kapott molekulán újabb IFD számolást végeztek. A számolás kedvezőbb kötődést jósolt, mint irodalmi gátlószerek esetében, azonban ez a molekula nem elérhető kereskedelmi forgalomban, és nehezen szintetizálható lett volna. Így 2D hasonlósági keresést végeztek kereskedelmi ligand adatbázisokban, majd a találatokon IFD és végül MMGBSA kötési szabadentalpia számolásokat végeztek. A kis-molekulákat ezen eredményekből számított konszenzus Z-score alapján rangsorolták. A TagetExKft munkatársaival készült cikk előzetes, on-line változata 2016 végén jelent meg.

A Membrán Fehérje Lendület Kutatócsoportban az ERC pályázat záró szakaszában megfejtették az MDR-szelektív toxicitás egyik lehetséges hatásmechanizmusát. Számos újabb vegyületet szintetizáltak és jellemeztek, valamint szabadalmi beadványt nyújtottak be a multidrog rezisztens rákos sejtek ellen szelektíven ható és megemelkedett toxicitású 8-hidrokinolin származékok előállítására és alkalmazására, rákos megbetegedések kezelésére, különös tekintettel azok multidrog rezisztens variánsaira (P1600234 alapszámú magyar szabadalmi bejelentés). Lipidomikai módszerekkel jellemezték az NCI 60 sejtpanel vonalait, és kidolgoztak egy REIMS-alapú sejtvizsgálati módszert. Vizsgálták az ABCB1 (MDR1/P-glikoprotein) molekuláris működését, valamint az endothelin-A szerepét a nintedanib-bal szemben kialakuló rezisztenciában. Rescue kísérletekkel kimutatták, hogy a humán ABCB6 fehérje a *C. Elegans* és az *S. pombe* HMT1 fehérje ortológja. Vizsgálták a humán organikus anion transzporterek fluoreszcens molekulákkal való kölcsönhatását, melynek során szubsztrátokat azonosítottak.

A Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport kutatásainak fő témája a rosszindulatú daganatok genomjában található mutációk keletkezésének és következményeinek megértése volt. A genomikai kísérletek mellett a csoport munkája kiterjedt a sérült DNS replikációjának genetikai és biokémiai vizsgálatára. A kutatócsoport brit és amerikai klinikusok közreműködésével génkiütött sejtvonalakban modellezte a daganatokban mutációkat okozó (mutagenikus) folyamatokat. Ehhez szükség volt a sejtek teljes génállományának meghatározására, és az ebben létrejövő összes mutáció pontos azonosítására. A bioinformatikai adatok elemzésére létrejött egy szoros együttműködés az ELTE Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék kutatóival. Az eredmények szerint a BRCA génhibával rendelkező sejtekben rendkívül felgyorsul a mutációképződés folyamata. Bár a BRCA fehérjéknek a DNS-törések javításában ismert a szerepe, meglepő módon nemcsak a törések hibás javítására utaló deléciók dúsultak fel, hanem ennél jóval nagyobb arányban növekedett az egyszerű bázisváltozások száma. Az Oncogene folyóiratban közölt eredmények arra utalnak, hogy a bázisváltozások, melyhez hasonlókat daganatok genomjában is észleltek, fontos szerepet tölthetnek be a BRCA génhibák onkogenikus hatásában. A kifejlesztett kísérleti rendszer lehetővé tette a kemoterápiás kezelések hatásának modellezését is a tumorsejtek genomjában. A kemoterápiák egyik alapvető hatásmechanizmusa a DNS károsításával a daganatsejtek elpusztítása. A terápiát túlélő sejtekben azonban a kezelés génmutációkat okozhat. A kutatók megvizsgálták számos, gyakran használt citotoxikus hatóanyagok a kezelést túlélő sejtek genomjára gyakorolt hatását. A Genome Biology folyóiratban publikált eredmények szerint a hatóanyagok között van olyan, amelynek számottevő a mutagenikus hatása, és jellemző típusú génmutációkat idéz elő. Több klinikai esetben ugyanilyen mutációk okoztak rezisztenciát a kezelés után kiújuló BRCA mutáns daganatokban. Ezek alapján az eredmények egy új mechanizmust vázolnak fel a daganatok evolúciójában, mely szerint a mutagenikus kemoterápia elősegítheti a terápiára való

rezisztencia kialakulását. Az eredmények tükrében a Lendület pályázat jó minősítéssel zárult, a munka folytatásához szükséges forrás beépült az intézet költségvetésébe.

A Rendezetlen Fehérje Kutatócsoport több éve folyamatosan vizsgálja az ERD14 növényi chaperone fehérje szerkezet-funkció összefüggéseit. Mutánsok előállításával és részletes szerkezeti/funkcionális vizsgálatával sikerült még alaposabban feltérképezni, hogy mely régiók felelősek a fehérje sejtvédő hatásaért. Sejten belüli NMR mérésekkel sikerült azt is kimutatni, hogy a fehérje funkcionális állapotában is nagyrészt rendezetlen, és egy kevert szekvenciájú kontroll konstrukció segítségével ki lehetett zárni a sejtes környezetből eredő aspecifikus hatásokat is. A rendezetlen chaperonok további vizsgálata egy *Deinococcus radiodurans* Nudix fehérjével (DR0550) folytatódott, melynek N-terminális rendezetlen régiója ismeretlen funkcióval rendelkezik. Az enzim különböző mutáns formáinak előállításával és ezek alapos szerkezeti és funkcionális vizsgálatával kimutatható volt, hogy a rendezetlen régió nem elsősorban a fehérje stabilitását növeli, hanem RNS kötő szerepe van. Sikerült azonosítani az RNS kötésért felelős szekvencia-motívumot is. A vad típusú enzim és egy deléciós mutáns esetében is sikerült fehérje-kristályokat előállítani, melyek lehetővé teszik a fehérje szerkezetének pontos megismerését. A BME Bioorganikus Kutatócsoportjával 2014-ben kezdődött együttműködés folytatásaként His-tag-gel ellátott fehérjék mágneses nanorészecskékkel történő tisztításának további optimalizálása történt meg. Számos különböző bevonattal rendelkező nanorészecske tesztelése által sikerült két eltérő jellemzőkkel rendelkező nanorészecske-típust előállítani. Az első fajta alacsonyabb specifitással, gyengébben, de nagy mennyiségben képes a fehérjék kötésére, a második pedig nagy specifitással és erősen, de kisebb mennyiségű célfehérjét köt. A rendezetlen fehérjék kölcsönhatásait kötéserősség, specifitás, konzerváltság tekintetében folytatott bioinformatikai vizsgálatok eredményeként sikerült megállapítani, hogy az általánosan elfogadott “nagy specifitás-gyenge kölcsönhatás” tétel nem írja le a rendezetlen fehérjék teljes interakciós kapacitását. A kapott eredmények rámutatnak, hogy a rendezetlen fehérjék is képesek nagy kötéserősség kialakítására, ezért nem tekinthetők homogén halmaznak az interakcióikat tekintve.

Az Aktív Transzport Fehérjék Kutatócsoport felfedezte, hogy a kötőszövetek meszesedésének gátlásáért felelős fiziológiai metabolit, a pirofoszfát (PPi), szájon át bejuttatva emberben felszívódik, és a felszívódás mértéke eléri, illetve meghaladja a terápiás szintet. Ezzel egy több mint 50 éves dogmát döntöttek meg, amely szerint a szájon át bejuttatott PPi bioavailability-je zérus. Megállapították továbbá, hogy a PPi egérben nemcsak a vékonybélből, hanem a szájüregből és a gyomorból is felszívódik. Két olyan egérmodellen végeztek kísérleteket, amelyek egy-egy kötőszöveti/artériás meszesedési örökklődő betegség modelljei. Mindkét esetben megállapították, hogy az ivóvízzel bejutatott PPi nagymértékben gátolja a puhaszöveti meszesedést. Ezzel egy új, egyszerű és rendkívül olcsó terápia lehetőségét vetették fel. Eredményeik alapján a pseudoxanthoma elasticum (PXE) örökklődő betegség terápiáját célzó klinikai kipróbálást kezdték szervezni az USA-ban. Felfedezésük alapján Hollandiában szabadalmat nyújtottak be holland (15%) és magyar (85%) részvétellel. Ebben az évben is folytatták a franciaországi Angers-ban működő Orvosegyetem Bőrgyógyászati Klinikájával kialakult együttműködés keretében a francia PXE-páciensek mutációinak preklinikai, állatmodellben történő jellemzését. 4 olyan misszensz mutációt azonosítottak, amelyek az „*Allele-specific use of 4-PBA in PXE; 4-PBA as an orphan drug in calcification disorders*” című klinikai kipróbálásba bevonhatóak. Olyan ABCC6-specifikus antitest fejlesztésében értek el biztató eredményt, amely a fehérjét a sejten kívül található epitópok alapján ismeri fel. Ennek a kifejlesztés alatt álló kísérleti eszköznek a gyógyszerfejlesztésben, a kémiai chaperonok szűrésében van nagy jelentősége. A fenti eredményt az ELTE Immunológiai Tanszék és az ImmuniGenes magyar céggel közösen érték

el. Korábban soha nem sikerült az ABCC-típusú membránfehérjéket felismerő ilyen típusú antitestet előállítani. *In vivo* módszereket fejlesztettek ki a nagy izomsérüléseket kísérő meszesedés vizsgálatára, illetve az azt megelőzni képes terápiás stratégiák kidolgozására. Különlegesen fontos eredményük, hogy bemutatták, hogy egérmájban *in vivo*, rövid idő alatt a genom több tízezer pontján történhet DNS metilációs változás, ezzel bebizonyították a legstabilabbnak hitt, a transzkripció szabályozásában fontos szerepet betöltő, epigentikus módosítás dinamikusan változó. Tudomásuk szerint ez az első adatsor, amely néhány óra alatt ilyen jelentős mértékű DNS metilációs változásra derít fényt nem osztódó, differenciálódott sejtekben. Kísérleteik azt mutatták ki, hogy jelentős DNS metilációs csökkenés alakult ki az éheztetés hatására, míg az újraetetés következtében egy remetilációs hullám figyelhető meg már 4 óra alatt. A metilációs változások jelentős része intergenikus régiókban következik be, míg a promóterekben kifejezetten kevés DNS metilációs változást figyeltek meg. Vizsgálataikhoz az RRBS módszert alkalmazták, az eredményeik bioinformatikai analízisét is ők végezték. Meghatározták, hogy mely transzkripciós faktorok szabályozzák az ABCC6 gén hepatocita-specifikus kifejeződését. Kimutatták továbbá, hogy különböző szignál transzdukciós kaszkádok aktiválódása gátolja a gén kifejeződését a HNF4 α gátlásán keresztül. Kollaboráció keretében (egy Marie-Curie RTN résztvevőjeként) alkalmazzák az RRBS módszert a Tourette-szindróma patkány modelljében az epigenetikus változások tesztelésére. Részt vettek a Philadelphiában rendezett PXE-Research Meeting szervezésében. A tudományterület legfrissebb eredményeit bemutató review-cikk megírására kaptak ismét felkérést a bőrgyógyászati tudományterület legrangosabb folyóiratában.

A Genom Metabolizmus Kutatócsoport két jelentős publikációjában leírta a patogén és más mikrobák túlélési stratégiáit a genom integritás kulcsenzimeinek nélkül. A mikroorganizmusok teljes genomkészletét (mikrobióm) vizsgálva számos olyan fertőző és egyéb mikrobát azonosítottak, melyek nem kódolják a fontos dUTPáz és UNG enzimeket. Ezek túlélési stratégiai szempontból kiemelt jelentőségűek az új DNS javító útvonalak feltárásában. A csoport továbbá jellemezte az Arg finger motívumok szerkezeti proteomikáját. Teljes PDB-re kiterjedő szerkezeti biológiai rendszerszemlélettel leírták az Arg ujjak jelentőségét és szerepét a kis GTPázoktól a pirofoszfatazokig, ahol elsőként azonosították ezt a fontos elemet. A csoportvezető társszerzője volt az autofágia modern módszertanát leíró összefoglaló cikknek.

A Szerkezeti Biofizika Munkacsoport négy fő kutatási témában ért el jelentős eredményeket. Tanulmányozták komplement-rendszer és más proteolitikus kaszkádrendszerek, illetve immunsejtek közötti kölcsönhatásokat. Kimutatták, hogy a lektin út fő proteáza, a MASP-1 jelentősen gyorsítja a véralvadás folyamatát protrombin jelenlétében. Ebből azt a következtetést lehet levonni, hogy a MASP-1 képes aktiválni a protrombint. Ezek alapján feltételezhető, hogy bizonyos patofiziológiai körülmények között a MASP-1 gyorsítja vagy akár iniciálja is a véralvadás folyamatát. Kimutatták, hogy a MASP-1 növeli a neutrofil granulociták és az endotél sejtek közötti adhéziót azáltal, hogy stimulálja az E-szelektin adhéziós molekula termelődését. Ezzel egy új kapcsolatot fedeztek fel a komplementrendszer és a neutrofil granulociták között, amely hatékonyabbá teszi a patogén mikrobák elleni védekezést. Tanulmányozták fontos élettani és patológiai szerepet betöltő kináz enzimek és ligandumok közötti kölcsönhatásokat. A Rassf1A fehérje Aurora A kináz általi foszforilációjában az egyes domének és szerkezeti motívumok funkcióját azonosították. A ROCK1/2 kinázok LIMK1/2 kinázok irányában mutatott specificitásért (ROCK2-LIMK1 illetve ROCK1-LIMK2) felelős régióját tükröképi mutációk segítségével lokalizálták. Tovább kutatták a bakteriális flagellumok felépülésének mechanizmusát. A FliS fehérjéről korábban kimutatták, hogy hozzájárul a flagellin hatékony exportjához. Feltételezett fő feladata a flagellin monomer formában tartása a sejten belül, de emellett számos egyéb funkciója is ismert. Felmerült a kérdés, hogy ez a kis fehérje hogyan képes számos jelentősen eltérő

feladatot ellátni. Többféle biofizikai módszerrel megvizsgálva kimutatták, hogy a FliS egy molten globula-szerű fehérje és nagymértékű szerkezeti plaszticitással bír, ami diverz funkcióinak alapjául szolgálhat. A bioinformatikai kutatások területén is értek el új eredményeket. Két- és háromállapotú fehérje dimerek kapcsolt felgombolyodását és kötődését vizsgálták egy új megközelítéssel, mely a hálózatos kinetikai modellt az ún. WSME sokaság alapú modellel kombinálja. Több ismert kétállapotú dimer esetében kimutatták, hogy az asszociációt a láncok kismértékű lokális rendeződése előzi meg. Tovább javították a korábban kifejlesztett Gauss-keverék alapú eljárást, mely entrópiakülönbségek konformációs sokaságokból történő becslésére szolgál, az így kifejlesztett GMENTROPY szoftvert nyilvánosan elérhetővé tették. Részben ennek felhasználásával az uroporfirinogén-3 szintáz enzim példáján megmutatták, hogy a szegmenscsere evolúciós lépése hozzájárult a szubsztrátkötő funkció kialakulásához a domének közötti flexibilitás csökkentése révén.

A Membránfehérje Bioinformatika Lendület Kutatócsoport tovább folytatta a membránfehérjékkel kapcsolatos bioinformatikai és nagy áteresztő képességű kísérletes topológia meghatározó módszerek fejlesztését. E fejlesztések során 7 nemzetközi folyóiratba beküldött tudományos mű jelent meg, vagy fogadtak el, e mellett számos hazai és nemzetközi konferencián mutatta be a csoport a tudományos eredményeket. Sikert ért el egy olyan kísérlettel kombinált elméleti módszer kidolgozása, amellyel egyszerre több száz transzmembránfehérjéről lehet topológiai adatot meghatározni, és a kapott adatokkal jelentősen lehet ezen fehérjék alacsonyfelbontású szerkezetbecslését javítani. Emellett több adatbázist is kifejlesztett a csoport, amelyekben levő adatok szintén a topológia becsléshez, illetve a szerkezeti genomikai projektekhez nyújtanak értékes információkat. A Genomstabilitás Lendület Kutatócsoporttal együttműködve a csoport részt vett egy olyan bioinformatikai eszköz kifejlesztésében, amellyel sikerült a rákos betegségek ellen használt különböző gyógyszerek káros mutációkat okozó hatásait kimutatni. Ezek a munkák mind igen színvonalas, 5 fölötti impaktfaktorú nemzetközi folyóiratban jelentek meg.

A Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport kutatási területe kiterjed a membránfehérjék és a Ca^{2+} szignalizáció vizsgálatára polarizált hámsejtekben (májsejtekben), őssejtekben és azokból nyert leánysejtekben, valamint a membránfehérjék vörösvérsejtekben történő elemzésére. A csoport tagjai kimutatták, hogy az ABCG4 fehérje funkcionális dimert alkot az ABCG1 fehérjével, és az ABCG1-hez hasonlóan apoptózist indukál sejtekben; mutációs analízissel feltérképezték az ABCG1 potenciális szterol-kötő helyeit. Vizsgálták a májsejtek és a máj-specifikus szöveti makrofágok, a Kupffer sejtek kölcsönhatásait. Kidolgoztak egy nagyhatékonyságú eljárást az ABCG2 transzporter funkcionális detektálására, valamint egy olyan sejt-alapú módszert, amely segítségével kimutatták a különböző IgG alosztályok eltérő proinflammatorikus potenciálját. Egy könyvfejezet megírásával a csoport tagjai hozzájárultak az ABC fehérjékkel kapcsolatos jelenlegi kutatási trendek összefoglalásához; ismertették az ABCB11 epesó transzporterhez kapcsolódó legújabb eredményeket. A NAP pályázat keretében folytatták a neurális progenitorok (NPC-k), valamint az érettebb idegi sejtek jellemzését. Az NPC-ket modellként felhasználva, High Content Screening technológia alkalmazásával vizsgálták az idegi regeneráció kezdeti lépéseit humán rendszerben. Az SE Pszichiátriai és Pszichoterápiás, illetve a Városmajori Szív- és Érgyógyászati Klinikákkal együttműködésben a korábban meghonosított sejt visszaprogramozási eljárás segítségével két, pszichiátria betegséggel (skizofrénia és DiGeorge szindróma) érintett család tagjaiból indukált pluripotens őssejteket (iPSC) hoztak létre, melyek a betegség kialakulásának és a lehetséges terápiájának vizsgálatát teszik lehetővé. Az őssejtek általános jellemzése kapcsán vizsgálták az ABC transzporterek kifejeződését, elemezték a kalcium-szignálokat, és megmutatták a pluripotens őssejtek, mint modellek felhasználásának további lehetőségeit.

A Biomembrán Kutatócsoport tagjai a humán ABC transzporter fehérjék szerkezeti és funkcionális vizsgálata során részletesen elemezték a transzportereknek az emberi őssejt differenciálódásában, valamint a daganatok multidrog rezisztenciájában betöltött szerepét. Gyógyszerhatások mérésére alkalmas új esszéket állítottak be, elemezték a gyógyszerek és a membrán-lipidek kölcsönhatásait az ABC fehérjékkel. A *Mycobacterium* ABC transzporterek vizsgálatát indították el a rezisztens tuberkulózis gyógyszeres kezelésének fejlesztése érdekében. Aktívan részt vettek az emberi őssejt-differenciáció elemzésében. Tanulmányozták a prion fehérjecsalád fiziológiás folyamatokban, valamint a szivacsos agysorvadásban, illetve az Alzheimer-kórban betöltött szerepét. Új módszereket állítottak be a CRISP-R génedítáló rendszer alkalmazására emlős sejtekben. Részletesen elemezték a DNS transzpozonok működését, és specifikus módszerek kidolgozása után vizsgálták a piggyBac transzpozon szupercsaládba tartozó humán gének (PGBD gének) expressziós mintázatát. Speciális mikroRNS-eket terveztek és teszteltek, amelyek fontos szerepet játszanak a membránfehérjék szabályozásában.

A görcsgátló, nyugtató hatású klonazepam mellékhatásai a metabolizmusában résztvevő CYP3A és NAT2 enzimnél megfigyelhető jelentős egyéni különbségekre vezethetők vissza. Pszichiátriai betegek bevonásával végzett vizsgálatok során a Metabolikus Gyógyszerkölcsönhatások Kutatócsoport munkatársai igazolták, hogy a klonazepam plazmakoncentrációja összefüggésben van a betegek CYP3A4 expressziójával, azonban a CYP3A5 és NAT2 genotípus nincs hatással a 'steady-state' klonazepam koncentrációra. Ugyanakkor a normál CYP3A4 aktivitás lassú NAT2 acetiláló képességgel párosulva a 7-aminoklonazepam metabolit felhalmozódásához vezet, amely rontja a klonazepam hatékonyságát, és a gyógyszer visszavonásakor súlyos megvonási tünetek kialakulásához vezet. A betegek CYP3A4 expressziójának és a NAT2 genotípusának ismerete segíti a mellékhatások szempontjából nagy kockázatú betegek beazonosítását és a személyre szabott klonazepam terápia kialakítását. A primer hepatociták egyszerű *in vitro* modellt jelentenek a gyógyszerek és gyógyszer-jelölt hatóanyagok farmakokinetikai és metabolizmus vizsgálatához. A humán májsejt modell *in vivo* 'clearance' becslésre való használhatóságát igazolták 16 forgalomban lévő pszichofarmakon vizsgálatával. Az *in vitro* farmakokinetikai adatokból becsülhető humán biohasznosulási értékek megegyeztek a klinikai vizsgálatok során nyert biohasznosulási értékekkel. Továbbá meghatározták a biztonsági vizsgálatok során alkalmazott állatfajok közül az emberhez metabolikus szempontból legközelebb álló fajt, amely alapján a patkány tekinthető legmegfelelőbb modell állatnak.

A Fehérje Kutatócsoport eredményei alap kutatás természetűek voltak és ezeket nemzetközi folyóiratokban publikálták. Megjelent egy közleményük, amelyben vizsgálták a kalcium kötő S100B fehérje hatását a jelátviteli szempontból aktív ERK2-RSK1 komplex összeállítására. Munkájuk tehát egy, a bőrrák kialakulásában szerepet játszó fehérje komplex kialakulását vizsgálta. Azt találták, hogy a melanóma egyik ismert marker fehérjéje (S100B) befolyásolja a sejtek osztódásában fontos szerepet játszó jelátviteli komplexek összeállítását. Ez a tanulmány a Journal of Biological Chemistry újságban a „Paper of the week” kategóriába került, ahova az itt megjelent cikkek közül a szerkesztők által a legfontosabbnak tartott publikációk kerülnek (kb. az összes 1-2%-a). Egy másik munka kapcsán a rákban felhalmozódó mutációk eloszlását vizsgálták a fehérjék szekvenciáiban. Ezzel hozzájárultak a rák során katalogizálható mutációk oki tényezőinek jobb megértéséhez. Egy összefoglaló természetű munka kapcsán a csoport által több éve kutatott MAP kináz enzim család egyik tagjának fehérje-fehérje kölcsönhatásait értelmező tanulmányt írtak. Továbbá egy másik összefoglaló munkában a jelátviteli szempontból érdekes fehérje-fehérje komplexek előállításában szerzett sokéves tapasztalataikat tették közzé.

A 2014. július 1-jén megalakult Reprodukció Rendszerbiológiája Lendület Kutatócsoport 2016-ban nyolcfősre nőtt. A csoport laboratóriumának felszerelése folytatódott és egy új iroda is kialakításra került. A csoport kollaborációs kutatásokat folytatott az MTA Természettudományi Kutatóközpont csoportjaival, a Semmelweis Egyetem I. sz. Patológiai és Kísérleti Rákkutató Intézetével, Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézetével és a Kútvölgyi Klinikai Tömb Maternity Klinikájával, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Immunológiai Tanszékével és Proteomikai Munkacsoportjával, az MTA Szegedi Biológiai Központ Genetikai Intézetével, a Wayne State University Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Detroit, MI, USA), a National Institutes of Health Perinatology Research Branch-ével (Detroit, MI, USA), a University of Southern California Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Los Angeles, CA, USA), a Zymo Research Corporation-nel (Irvine, CA, USA), a Ben Gurion University Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Beer Sheva, Israel), valamint a University of Basel Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikájával (Bázel, Svájc). A munkacsoport mintagyűjtési- és kutatási tevékenysége folytatódott a kollaborátor laboratóriumokban az Eötvös Lóránd Tudományegyetemen és a Semmelweis Egyetemen. Ezen együttműködések közül egy szakmai könyvfejezet, valamint hét tudományos közlemény került publikálásra. Az eddigi kutatások főleg a terhességek 5-8%-ában előforduló praeclampsia kialakulásának lehetséges útvonalaira és biomarker molekuláira fókuszáltak, így jelentős társadalmi, népegészségügyi és gazdasági kihatásuk lehet, ezért ezen területeket illetően relevanciájuk kiemelt.

A génextpresszió szabályozásának egyik fiziológiás rendszerét alkotják a sejtekben meglévő miRNS-ek. Az Onkológiai Biomarker Kutatócsoport munkatársai létrehoztak egy olyan online elérhető elemző rendszert, amelynek segítségével emlőtumoros betegekben lehet egyes kiválasztott miRNS-ek túlélésre gyakorolt hatását vizsgálni. A rendszer négy különböző vizsgálatból több mint 2000 betegmintát tartalmaz. Az egyes klinikai és patológiai alcsoportokra, valamint az alkalmazott kezelésekre való szűrés után lehet az expresszióknak a teljes túléléssel való kapcsolatát számolni. Bár a kísérletesen alkalmazott RNS interferencia mára egy rutinszerűen felhasznált technológiává vált, a módszer független validálása még mindig várat magára. Kutatásaik során feldolgoztak 429 olyan korábbi RNS interferencia vizsgálatot, ahol gén chip adatok is rendelkezésre álltak. A gén chip mérések lehetővé teszik, hogy az egyes gének csendesítésében bekövetkező változásokat mérni is lehessen. Azt az eredményt kapták, hogy a kísérletek 18.5%-ában egyáltalán nem volt sikeres a csendesítés. Szolid tumorok esetében egyre nagyobb teret kap a molekuláris altípusok feltérképezése és klinikai használata. Colon tumorok esetén azonban még nincsen konszenzus, hogy melyik legyen klinikailag is felhasználva. Az irodalomban leírt összesen 22 colon molekuláris altípus osztályozót újra-programozták. Ezután egy közös mintahalmazon az egyes osztályozókat egymással összehasonlították, illetve külön-külön a túlélésre gyakorolt hatást is megvizsgálták. Végezetül a későbbi preklinikai vizsgálatok lehetővé tétele érdekében az irodalomban leggyakrabban használt sejtvonalakat osztályozták. Az emlőrák molekuláris altípusai már ma is meghatározzák az alkalmazott kezelést. Megvizsgálták a DNS metilációt az emlőrák molekuláris alcsoportjaiban. Azt figyelték meg, hogy az altípusok között az egyes gének metilációs állapota szempontjából és ezeknek a túléléssel való összefüggése között jelentős eltérések vannak.

b) Tudomány és társadalom

A Jelátviteli és Funkcionális Genomika Kutatócsoport az eredményeiről számos fórumon (cikkek, konferenciák) és a médiában (rádiós beszélgetés, mta.hu honlap, Innotéka magazin, stb.) is beszámolt.

A Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport vezetője az MTA Kommunikációs Főosztályának segítségével sajtóközleményben ismertette a csoport 2016-ban publikált áttörő eredményeit a rákos génmutációk kialakulása területén, valamint interjút adott az Info Rádió tudományos műsorának és a Kossuth Rádióknak az eredmények értelmezéséről. Emellett a kutatócsoport vezetője ismeretterjesztő előadást tartott a DNS károsodásáról és javításáról a Kutatók Éjszakája rendezvénysorozat keretében.

Az Aktív Transzport Fehérjék Kutatócsoport csoportvezetője több, a tudomány és a társadalom kapcsolatát elemző cikket publikált az Élet és Irodalom c. hetente megjelenő lapban („Két ifjú tudós”, 2016. jún. 10. – „Lélek és légcső”, 2016. február 19 – „Boncolás a mázsaházban” 2016. január 15).

A Genom Metanolizmus Kutatócsoport megszervezte a Kutatók Éjszakáján belül laboruk bemutatását. A csoport vezetője számos rádió és TV interjút adott.

A Membránfehérje Bioinformatika Lendület Kutatócsoport által kapott eredmények és a már kidolgozott, illetve kidolgozandó eljárások rendkívül fontosak a gyógyszerkutatás szempontjából, amit jól mutat, hogy a csoport által fejlesztett és fenntartott szerverek segítségével a világ kutatói évente több százezer becslést végeznek (lásd: <http://counter.enzim.hu/counter>).

A Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport számos ismeretterjesztő programban vett részt:

A Károlyi Mihály Gimnázium látogatása az MTA TTK-ban (2016. febr. 3.). Az Apáczai Csere János Gimnázium látogatása az MTA TTK-ban (2016. március. 5.). Interjúbeszélgetés a csoport két vezető kutatójával a Duna-Word televízió Növum című műsorában (2016. márc. 26.). Trefort Gimnázium pályaválasztási nap az MTA TTK-ban (2016. jún. 10.) Kölcsey Gimnázium látogatása az MTA TTK-ban (2016. dec. 9.). Tájékoztató nap a NAP projekt második munkaszakaszáról: a pályázatok eredményeinek közérthető összefoglalása (Mátraháza, MTA Üdülő, TTK, 2016. nov. 10-12.).

A Biomembrán Kutatócsoport tagjai számos esetben tartottak a tudományos kutatásról és módszertanról szóló tájékoztatót középiskolás diákok részére, valamint tudománynépszerűsítő előadást egyetemi hallgatóknak (pl. ELTE „Élő adás” sorozat).

A Metabolikus Gyógyszerkölsönhatások Kutatócsoport munkatársai a Servier Gyógyszerkémiai Kutatóintézetben szervezett tudományos fórumon bemutatták a CYPtestTM alapú, gyógyszer-lebontó képességhez igazított terápia lehetőségeit és klinikai eredményeit. A Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából szervezett nyílt napon pedig középiskolás diákoknak bemutatták a DNS hibák (mutációk) kimutatásának PCR alapú módszerét.

A Fehérje Kutatócsoport 2016 elején publikált cikke kapcsán, ami a bőrrák kialakulásához kapcsolható, több felkérésnek tett eleget munkájuk szélesebb körben való ismertetésére. A melanóma (bőrrák) kialakulásának újszerű gátlására tett javaslatuk járta meg a sajtót (Ma délelőtt, MTV1; Novum, Duna World). Továbbá a Természet Világa, 2016 májusi számában tettek közzé egy ismertetőt „A sejtes élet és halál urai. A protein-kináz alapú jelátviteli komplexek” címmel.

A praeclampsia területén elért kollaborációs kutatási eredményekről a Reprodukció Rendszerbiológiája Kutatócsoport vezetője 2016. április 11-én egy webinar keretében számolt be, melyet a világ 67 országából 739-en követtek figyelemmel élőben, és amely továbbra is elérhető az interneten az érdeklődők számára.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

Téma címe: Challenging drug target for Parkinson's disease: Pathological complex of the chameleon TPPP/p25 and alpha-synuclein proteins

Együttműködő partnerintézmény: ELTE Szerves Kémiai Intézet

Eredmények: A patológiás szinuklein-TPPP/p25 komplex kötőfelszínének atomi szintű karakterizálása multinukleáris NMR spektroszkópiával. Egy cikk fog megjelenni 2017-ben.

Téma címe: α -szinuklein és TPPP/p25: A Parkinson-kór biomarker fehérjének jellemzése
Együttműködő partnerintézmény: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Eredmény: Az intézet munkatársának témavezetésével elkészült TDK dolgozat.

Téma címe: A rákos megbetegedésekkel kapcsolatos pont mutációk analízise
Együttműködő partnerintézmény: ELTE
Eredmények: közös publikáció.

Téma címe: MDR-szelektív vegyületek szerkezet-hatás összefüggései
Együttműködő partnerintézmény: TTK SZKI
Egyezmény neve: Lendület pályázat
Eredmények: MDR-szelektív vegyületek szintézise, közös publikáció előkészületben.

Téma címe: ABCB6 membrántopológiája
Együttműködő partnerintézmény: TTK SZKI
Eredmény: egy közös publikáció.

Téma címe: MDR-szelektív kelátorok bioinorganikus kémiája
Együttműködő partnerintézmény: SZTE
Egyezmény: Lendület pályázat
Eredmény: egy közös publikáció.

Téma címe: A kemoterápiás kezelések mutagenikus hatása
Együttműködő partnerintézmény: Országos Korányi Pulmonológiai Intézet, Budapest
Eredmények: A csoport magyar rákbetegek normál és tumoros szövetmintáiból meghatározta a teljes genom szekvenciát és a daganatot okozó mutációkat. Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: A komplementrendszer specifikus gátlása
Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK Biokémiai Tanszék
Egyezmény neve: OTKA konzorciális pályázat
Eredmények: Specifikus inhibitorokat fejlesztettünk a lektin út proteázai ellen. Közös publikációk száma: 4

Téma címe: Klinikai molekuláris patológiai diagnosztika újgenerációs szekvenálás segítségével
Együttműködő partnerintézmény: Országos Onkológiai Intézet
Eredmények: Az Intézet Sebészeti és Molekuláris Daganatpatológiai Központjában az osztályvezető főorvossal és kutatócsoportjukkal a formaldehidbe és parafinba ágyazott daganatsejt minták DNS analízisén, valamint klinikai adatok feldolgozásának témáján dolgozott a csoport, idén ebből a munkából az Applied Immunohistochemistry & Molecular Morphology folyóiratban jelent meg egy cikke a csoportnak.

Téma címe: Virus RNS diagnosztika növényekben újgenerációs szekvenálás segítségével
Együttműködő partnerintézmény: NAIK-Mezőgazdasági Biotechnológiai Kutatóintézet
Eredmények: A csoport az MBK Genomikai Főosztály Diagnosztikai Csoportjával együttműködve dolgozik egy újfajta - újgenerációs szekvenáláson és bioinformatikai feldolgozásán alapuló – diagnosztikai módszer fejlesztésén patogén vírusok azonosítására. Az eredményeket számos hazai és nemzetközi folyóiratban publikálták és konferenciákon jelentették meg.

Téma címe: NF- κ B –mediált, immunkomplex által kiváltott válasz detektálására alkalmas sejtes modell rendszer fejlesztése
Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK, Immunológia Tanszék

Eredmények: A létrehozott GFP-alapú riporter sejtet validáltak, és reumatoid artritiszes betegek mintáin vizsgálták, egy közös publikáció született.

Téma címe: Kalcium szignalizáció vizsgálata, melanóma sejtek migrációjának elemzése

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, II. Patológiai Intézet

Eredmények: Megjelent 2 publikáció kalcium szignálok vizsgálatáról GCaMP2 kalcium indikátort kifejező patkány modellben, az újabb vizsgálatok kiterjednek a Ca pumpáknak a melanóma sejtek migrációjára gyakorolt hatására.

Téma címe: transzporterek bioinformatikai vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

Eredmények: A partnerek adatbázist hoztak létre a különböző transzporterek mutációiról és polimorfizmusairól. Egy közös kézirat elkészült, megjelentetése folyamatban van.

Téma címe: Indukált pluripotens őssejtek felhasználása pszichiátriai betegségmodellekben

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika

Eredmények: A NAP program keretében jellemezték humán pluripotens őssejtekből nyert neurális progenitorokat, valamint ezek differenciáltásával kapott neurális tenyészeteket, skizofrén betegekből létrehoztak iPS vonalakat, amelyek betegségmodellként használhatók. Az eredményeket 4 poszter és 2 nemzetközi előadás formájában bemutatták, 3 közös kézirat elkészült.

Téma címe: Indukált pluripotens őssejtekből nyert idegi sejtek elektrofiziológias jellemzése

Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK, Biokémia Tanszék

Eredmények: A NAP program keretében az indukált pluripotens őssejtekből differenciáltatott neurális tenyészetek elektrofiziológias jellemzését végezték. Az eredményeket 2 poszter formájában bemutatták, kézirat előkészületben.

Téma címe: Humán indukált pluripotens őssejtekből nyert neurális progenitor sejtek neurit növekedésének és annak szabályozásának vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: ELTE TTK, Biokémia Tanszék

Eredmények: A nem izom miozin gátolja a neurit növekedést, specifikus inhibitorokkal ez a gátlás felszabadítható. Az eredményeket 3 poszteren bemutatták, kézirat előkészületben.

Téma címe: Indukált pluripotens őssejtek felhasználása komplex betegségmodellben (DiGeorge szindróma)

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Városmajori Szív- és Érgyógyászati Klinika, Kardiológiai Tanszék

Eredmények: DiGeorge szindrómában szenvedő betegekből létrehoztak iPS vonalakat, amelyek később betegségmodellként használhatók. Közös állami ösztöndíjas PhD hallgató.

Téma címe: MSC-k immunológiai tulajdonságainak vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: Debreceni Egyetem, Immunológiai Tanszék

Eredmények: A partnerek 2015-ben publikálták közös kutatómunkájuk eredményét és közös kutatási pályázatot nyújtottak be (GINOP2.1.1), amely 2016-ban megkapta a támogatást. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: A PSMB1 proteaszóma fehérje polimorfizmusának szerepe a mielóma multiplex kezelésében

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, 3. Belgyógyászati Klinika, Országos Vérellátó Szolgálat

Eredmények: Egy bizonyos polimorfizmus a proteaszóma gátláson alapuló kezelés kimenetelét hátrányosan befolyásolja. Egy közös kézirat megjelentetése folyamatban van.

Téma címe: ABCG2 polimorfizmusok keresése a hazai populációkban

Együttműködő partnerintézmény: Országos Vérellátó Szolgálat

Eredmények: ritka mutációk azonosítása. Egy közös kézirat publikálása folyamatban van.

Téma címe: Kószvényes betegek membránfehérjéinek vizsgálata vörösvérsejteken

Együttműködő partnerintézmény: Országos Reumatológiai és Fizioterápiás Intézet

Eredmények: A kószvényre hajlamosító biomarkerek kimutatása.

Téma címe: Membránfehérjék szerkezetének vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: MTA-TKI Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport

Eredmény: Két közös publikáció született.

Téma címe: Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpózium megrendezése

Együttműködő partnerintézmény: Magyar Kísérletes és Klinikai Farmakológiai Társaság

Eredmények: A szimpózium, amely 2016. április 6-8. között került megrendezésre Galyatetőn, teret adott a transzporter fehérjékkel, a kábítószerrel, új gyógyszer-formulációk farmakokinetikai vonatkozásaival, bioinformatikai elemzésekkel, új terápiás lehetőségekkel, engedélyeztetési irányelvek változásaival, valamint az új analitikai megoldásokkal kapcsolatos problémák megvitatásának. A rendezvényt támogatta a három nagy magyarországi gyógyszergyár. A konferenciáról kiadvány jelent meg.

Téma címe: A személyre szabott gyógyszeres terápia lehetőségei a pszichiátriában

Együttműködő partnerintézmény neve: SOTE, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika

Egyezmény: Felkérés a Pszichiátriai Továbbképzésben való oktatásra

Eredmények: A képzés keretében a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő citokróm P450 enzimeket, a metabolikus gyógyszer-interakciókat és lehetséges klinikai következményeit ismerhették meg a hallgatók.

Téma címe: A személyre szabott pszichofarmakoterápia lehetőségei

Együttműködő partnerintézmény: SOTE, Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinika

Kapcsolat formája: Intézmények közötti együttműködési megállapodás, OTKA104459

Eredmények: Skizofréniában és bipoláris zavarban szenvedők gyógyszer-metabolizáló képessége befolyásolja a pszichofarmakon vérszinteket, ezért a betegek előzetes CYP-status vizsgálatával beazonosíthatók a magasabb mellékhatás kockázatú gyenge metabolizálók vagy a terápiás hatástalanságot rejtő gyors metabolizálók. CYP-status alapú gyógyszerelés javasolható, mivel igazolták, hogy: a CYP3A4 expresszió és a CYP3A5 genotípus meghatározza a clozapine terápiát; a betegek CYP3A4 expressziójának és NAT2 acetiláló fenotípusának ismerete javítja a clonazepam biztonságos alkalmazását; a glukuronidáció és a mitochondriális beta-oxidáció gyengesége esetén a CYP2C9-alapú valproát terápia csökkenti a hibás dozírozásból fakadó, a terápiás vérszinttől eltérő valproát koncentrációk kialakulását; az aripiprazole, risperidone és quetiapine kiürülését a betegek CYP2D6 genotípusa alapjaiban befolyásolja. A gyógyszer-metabolizáló képességhez igazított terápia a dózis optimalizálásával a betegek hatékonyabb pszichoterápiáját és a mellékhatás kockázatának csökkenését teszi lehetővé. Közös publikációk száma: 5.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés.

Együttműködő partnerintézmény: SE, I.Sz. Patológiai és Kísérleti Rákkutató Intézet

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Két tudományos közlemény és egy könyvfejezet jelent meg. A csoportvezető a Semmelweis Egyetem Doktori Iskolájában vezetett PhD témát.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés

Együttműködő partnerintézmény: SE, Kútvölgyi Klinikai Tömb, Maternity Klinika

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Két tudományos közlemény és egy könyvfejezet jelent meg. A csoportvezető a Semmelweis Egyetem Doktori Iskolájában vezetett PhD témát.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés

Együttműködő partnerintézmény: SE Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézet

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Két MedInProt pályázatot nyertek el, egy-egy OTKA és svájci kutatási pályázatot nyújtottak be, továbbá előkészítettek egy tudományos közleményt.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés.

Együttműködő partnerintézmény: ELTE, Természettudományi Kar, Immunológiai Tanszék

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Egy FIEK pályázatot nyertek el, és egy tudományos közleményt készítettek elő.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés

Együttműködő partnerintézmény: MTA Szegedi Biológiai Központ Genetikai Intézet

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Egy tudományos közlemény jelent meg.

Téma címe: Veserák vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: SE II. Patológiai Intézet

Eredmények: Igazoltuk, hogy a HIF1 alfa és HIF2 alfa gének hatása prognosztikai szempontból ellentétes csontáttétes világos sejtes veserák esetén. Az eredményeket az Oncotarget folyóiratban közzétettük.

Nemzetközi kapcsolatok

Téma címe: Selective Sirt2-inhibition by ligand induced rearrangement of the active site

Együttműködő partnerintézmény: Institute of Pharmaceutical Sciences, Albert-Ludwigs-University Freiburg, Németország

Egyezmény: EU COST: Epigenetics Bench to Bedside (2011-2014); EU COST: Epigenetic Chemical Biology (EPICHEM) (2014-2018)

Eredmények: Az együttműködés több éve tart, COST pályázat keretében. Kísérletes munka, gyógyszerjelölt vegyületek biológiai vizsgálata. Három közös publikáció született, köztük Nat. Commun.-ben.

Téma címe: Immunolocalisation of Tubulin Polymerisation Promoter Protein TPPP/p25 in the retina

Együttműködő partnerintézmény: UCL Institute of Ophthalmology, London, UK

Egyezmény: EU COST: Zn-Net Zinc biology (2013-2017)

Eredmények: Az együttműködés tavaly kezdődött, COST pályázat keretében. A partner intézet koordinálja a network munkáját. Két közös publikáció jelent meg. A projekt TPPP/p25 retinában való lokalizációjának konfokális mikroszkópiás analízise, amely egy marosvásárhelyi kutató témája, aki Collegium Talentum ösztöndíjat nyert el. (1 konferencia-előadás)

Téma címe: HDAC inhibitors

Együttműködő partnerintézmény: Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers, UMR CNRS France

Egyezmény: EU COST: Epigenetics Bench to Bedside (2011-2014); EU COST: Epigenetic Chemical Biology (EPICHEM) (2014-2018)

Eredmények: Közös részvételük a COST Epigenetics projektben vezetett az eredményes kollaborációhoz. Kísérletes munka, gyógyszerjelölt vegyületek biológiai vizsgálata. Egy közös publikáció és egy konferencia-előadás született. Közös EU-pályázatot adtak be (H2020-MSCA-ITN-2017).

Téma címe: Challenging drug target for Parkinson's disease: Pathological complex of the chameleon TPPP/p25 and alpha-synuclein proteins

Együttműködő partnerintézmény: Department of Molecular Medicine and USF Health Byrd Alzheimer's Research Institute, Morsani College of Medicine, University of South Florida, USA

Eredmény: egy közös publikáció született.

Téma címe: A stabilitási centrumok szerepe a fehérjék hőstabilitásában

Együttműködő partnerintézmény: Indian Institute of Technology Madras, India

Eredmény: egy közös publikáció született.

Téma címe: Targeting the Achilles heel of cancer

Együttműködő partnerintézmény: Medical University of Vienna

Eredmény: egy közös publikáció született.

Téma címe: Genomic Approaches for Discovery of Predictors and Improvement of Therapy Response

Együttműködő partnerintézmény: Johns Hopkins Medicine, Baltimore, Maryland, USA

Eredmények: Az együttműködésben elvégezte a csoport a daganatokban gyakori BRCA1 és BRCA2 génhibák mutagenikus hatásának vizsgálatát sejtenyészetekben egész genom szekvenálással, és további genetikai kísérleteket végzett a BRCA mutáns daganatokban kialakuló kemoterápia-rezisztencia mechanizmusainak modellezéséhez. Közös publikációk száma: 2.

Téma címe: Egyes rákban szerepet játszó rendezetlen fehérjék szerkezeti és funkcionális vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: Korean Research Institute of Biotechnology and Bioscience, Daejeon, Dél-Korea

Egyezmény neve: KRCF-MTA Joint Laboratory Project

Eredmények: A rendezetlen linker régiók szerepének jellemzése a domén-linker-domén típusú processzív enzimek működésében. Bioinformatikai módszerekkel jellemzésre került a linker régiók aminosav összetétele, konzerváltsága és flexibilitása. Sikerült egy elméleti modellt is kidolgozni, mely alkalmas a linker régiók térbeli mozgásának modellezésére. Közös publikációk száma: 1.

Téma címe: A rendezetlen fehérjék kötőmotívumainak szerkezeti elemzése

Együttműködő partnerintézmény: Max F. Perutz Laboratories, Konrat Group, Bécs, Ausztria

Egyezmény neve: ANN-FWF OTKA együttműködés

Eredmények: Bioinformatikai módszerekkel meghatározhatók voltak a rendezetlen fehérjék fő funkcionális egységeinek, a kötő motívumoknak a biofizikai jellegzetességei. Kidolgozásra került egy módszer, amely megbízhatóan elkülöníti a különböző fizikai jellemzőjű motívum csoportokat, és ezáltal alkalmas lehet egy predikciós módszer kialakítására is. 10 motívum és a határoló régiók bakteriális kifejeztetése és NMR vizsgálata történt meg.

Téma címe: Modellrendszerek PXE-re

Együttműködő partnerintézmény: Thomas Jefferson University, Philadelphia, USA

Egyezmény neve: NIH együttműködési támogatás, R01 közös pályázat
Eredmények: Új preklinikai állatmodellek az arteriális kalcifikációs betegségek vizsgálatára.
Egy közös publikáció született.

Téma címe: ABCC6 és a puhaszövetek meszesedése
Együttműködő partnerintézmény: University of Hawaii USA
Egyezmény: NIH együttműködési támogatás, R01 közös pályázat
Eredmények: Az ABCC6 és mutánsainak vizsgálata. Egy közös publikáció született.

Téma címe: Metabolikus megbetegedések hatása az epigenetikai mintázatra
Együttműködő partnerintézmény: Université d'Angers, Franciaország
Egyezmény: Commission de recherche pályázat
Eredmények: Vad típusú és ABCC6 génkiütött egerek epigenetikus mintázatának vizsgálata.

Téma címe: Alternative transcript in kinase genes
Együttműködő partnerintézmény: Pediatrics, Harvard Medical School; Pediatrics, Boston Children's Hospital
Eredmények: Az együttműködés célja olyan kináz gének azonosítása, amelyek alternatív transzkripció révén konstitutívan aktiválódnak, és ezáltal járulnak hozzá a rákos folyamatok kialakulásához.

Téma címe: Sejtpolaritás és trafficking vizsgálata májsejtekben
Együttműködő partnerintézmény: National Institute of Child Health and Human Development, NIH, Bethesda, USA
Eredmények: az ABCB11 epesó transzporter szabályozása májsejtekben (egy közös publikáció született).

Téma címe: Kalcium transzport fehérjék vizsgálata
Együttműködő partnerintézmény: Institut National de la Santé et de la Recherche Médicale, PRES Sorbonne Paris-Cité, Bobigny, France
Eredmények: a Ca^{2+} pumpák és ezen belül is a SERCA pumpák szerepének vizsgálata neurális progenitorokban.

Téma címe: Multidrog rezisztencia fehérjék expressziójának vizsgálata tumor sejteken, a mezenchimális őssejtek és a mikrokörnyezeti stressz hatások függvényében
Együttműködő partnerintézmény: Laboratory for Experimental Hematology and Stem Cells, Institute for Medical Research, University of Belgrade
Eredmények: beadott TÉT-2016/ Szerb-magyar pályázat

Téma címe: Őssejtek vizsgálata
Együttműködő partnerintézmény: Max-Delbrück-Center for Molecular Medicine
Eredmény: egy közös publikáció.

Téma címe: Pharmacological research and analytical approaches (Italian-Hungarian Symposium on Spectrochemistry)
Együttműködő partnerintézmények: Magyar Kísérletes és Klinikai Farmakológiai Társaság, Water Research Institute (Italian Research Council)

Egyezmény neve: Magyar-olasz projekt alapú kutatói mobilitás
Eredmények: 1. A természetes vizekbe kijutó gyógyszer-hatóanyagok és bomlástermékeik befolyásolják a vizekben élő természetes mikroorganizmusokat és állati szervezeteket, valamint az ivóvízbe kerülve hatással vannak az emberre. A kutatók a nemzeti hatóságoknál fellelhető adatok alapján kigyűjtötték a legmagasabb felhasználású gyógyszer-hatóanyagokat, amelyek azonosítását végzik a Dunában és a Tiberisben. 2. Megszervezték 2016. június 12-16. között Pisa-ban a XV. IHSS konferenciát, amelynek központi témája volt a gyógyszer-

hatóanyag szennyezések okozta problémáknak, a farmakológiai vizsgálatok új irányvonalainak, a személyre szabott terápia lehetőségeinek bemutatása.

Közös publikációk száma: 4 tudományos publikáció (3 elfogadva, 1 benyújtva)

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés.

Együttműködő partnerintézmény: Wayne State University és National Institutes of Health, Perinatology Research Branch (Detroit, MI, USA).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban öt tudományos közlemény jelent meg.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés.

Együttműködő partnerintézmény: University of Basel (Bázel, Svájc).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban egy tudományos közlemény jelent meg, egy-egy svájci és MedInProt pályázat került elnyerésre, és egy OTKA pályázat került beküldésre.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés.

Együttműködő partnerintézmény: Ben Gurion University (Beer Sheva, Israel).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban egy-egy cikk és nemzetközi pályázat került előkészítésre.

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés.

Együttműködő partnerintézmény: University of Southern California (Los Angeles, CA, USA).

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat.

Eredmények: Ezen kollaborációból 2016-ban egy-egy cikk és nemzetközi pályázat került előkészítésre.

Téma címe: Kemoszenzitivitás előrejelzése

Együttműködő partnerintézmény: Yale Egyetem, USA

Eredmények: A triple negatív emlőrákokban a kemorezisztenciát előrejelző faktorokat genom-szintű vizsgálata. Az eredményeket a PLoS Medicine folyóiratban közzétettük.

Téma címe: Colon tumorok vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: Michigani Egyetem, USA

Eredmények: Igazoltuk, hogy a vasfelvétel szabályozásában részt vevő DNMT1 gén a JAK-STAT3 jelátviteli úton keresztül serkenti a colon tumorok kialakulását. Az eredményeket a Cell Metabolism folyóiratban közzétettük.

Téma címe: DNS repair vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: John Hopkins Egyetem, USA

Eredmények: Azonosítottuk a HOXC10 gén, mint a kemorezisztencia kialakulásának egyik oki génjét emlőtumoros sejtekben. Az eredményeket a Cancer Research folyóiratban közzétettük.

Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok

Téma címe: TagetExKft-vel több gyógyszeripari szempontból fontos fehérje közös vizsgálata

Együttműködő partnerintézmény: TagetExKft

Eredmények: egy közös publikáció.

Téma címe: CRISPR genom-editálási módszer alkalmazása humán indukált pluripotens őssejt vonalakon neuropszichiátriai betegségek *in vitro* modellezése és genetikai hátterének vizsgálata céljából

Együttműködő partnerintézmény: Richter Gedeon Nyrt.

Egyezmény neve: Gyógyszercélpont felfedezésére, azonosítására, validálására szolgáló kutatási javaslat és megvalósítási terv kidolgozása” tárgyban meghirdetett Richter Témapályázat

Eredmények: Még nincsenek, 2016 decemberében indult a projekt.

Téma címe: Bioszimiláris monoklonális antitestek fejlesztése

Együttműködő partnerintézmény: Richter Gedeon Nyrt.

Egyezmény neve: VKSZ pályázat

Téma címe: Köldökzsínórvér-eredetű pluripotens őssejtbank technológiai kifejlesztése és biobank megalapítása (GINOP-2.1.1-15)

Együttműködő partnerintézmény: Aktogen Hungary Kft.

Téma címe: Reagens és szolgáltatás csomag kialakítása gyógyszerek abszorpciójának – disztribúciójának – metabolizmusának - eliminációjának (ADME) vizsgálatához

Együttműködő partnerintézmény: SOLVO ZRt

Téma címe: Diflovidazine és clofentezine *in vitro* farmakokinetikai viselkedésének és metabolizmusának vizsgálata, a metabolit képződés mechanizmusa

Együttműködő partnerintézmény: Toxi-Coop Toxikológiai Kutató Központ ZRt (Budapest)

Téma címe: Jelátviteli útvonalak szerepe az immuntolerancia és trophoblast invázió zavarainak kialakulásában: rendszerbiológiai megközelítés

Együttműködő partnerintézmény: Zymo Research Corporation (Irvine, CA, USA)

Egyezmény neve: MTA Lendület pályázat

Eredmények: Egy közleményt és egy nemzetközi pályázatot készítettek elő.

Részvétel a tudományos közéletben

Az Enzimológiai Intézet Kutatócsoport vezetői aktívan részt vesznek a tudományos közéletben, valamint számos tudományos testület vezetőségi tagjai (Magyar Biokémiai Egyesület, Magyar Biofizikai Társaság, Magyar Bioinformatikai Társaság, MTA Jelátvitel Szakosztály, MTA Molekuláris Biológiai, Genetikai és Sejtbiológiai Tudományos Bizottság, Bioinformatika Osztályközi Állandó Bizottság, Magyar Genetikusok Egyesülete RNS Bizottsága stb). Képviseltetik magukat az Európai Komplement Hálózat bizottságában, valamint közülük került ki a FEBS Advanced Course Committee elnöke. Az EU-OPENSREEN projekt, és egyben a Magyar Kémia Biológiai hálózat itthoni koordinátora is közülük kerül ki, valamint egyikük részt vett egy nagyátesztő-képességű (HTS) hatóanyagszűrésre alkalmas európai szintű, akadémiai infrastruktúra kiépítésére és koordinálására létrejött nemzetközi konzorcium munkájában.

A kutatócsoport vezetők számos szakfolyóirat szerkesztőségi tagjai, mint pl. Plos One, FEBS Letters, Immunobiology, CPPS, J. Pathol. Translational Med., Journal of Bacterology and Parasitology, Journal Physics, Biology Direct, The Open Applied Informatics Journal.

2016 októberétől az egyik csoport vezetője a 2017 Central European Genome Stability Meeting nemzetközi konferencia főszervezője, és ezen kívül is számos hazai és nemzetközi konferencia, illetve szimpózium szervezésében vállalnak jelentős szerepet a kutatócsoportok vezetői és tagjai (Gárdos György Szimpózium, Farmakokinetika és Gyógyszermetabolizmus Szimpózium).

Felsőoktatási tevékenység

Az intézet fontos feladatának tekinti a nemzetközileg beágyazott alapkutatás mellett az oktatást. Munkatársaik hat egyetemen (ELTE, BME, Semmelweis Egyetem, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Debreceni Egyetem, Szegedi Tudományegyetem Doktori Iskolája) tartanak előadásokat, illetve gyakorlatokat mind az alapképzésben mind posztgraduális oktatásban. Az intézet ezzel egyidőben több mint 60 doktorandusz hallgató oktatását is ellátja, akik munkájukkal nagymértékben hozzájárulnak az intézet eredményeihez.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat megnevezése: Kutatási infrastruktúra fejlesztése (FIEK-16)

A pályázati téma megnevezése: Molekuláris biomarker kutatási és szolgáltatási központ kialakítása az ipari igények kiszolgálása érdekében

A pályázat azonosító száma: FIEK_16-1-2016- 0005

A pályázati támogatás mértéke: 2 712 184 794 Ft (ebből 2016-ra 0 Ft)

A pályázat megnevezése: NKFIH PD pályázat

A pályázati téma megnevezése: Investigation of genomic mutagenesis and chemotherapy treatment resistance

A pályázat azonosítószáma: 121381

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 15 087 000 Ft, ill. 419 E Ft

A pályázat megnevezése: Richter Kutatási Témapályázat

A pályázati téma megnevezése: „CRISPR genom-editálási módszer alkalmazása humán indukált pluripotens őssejt vonalakon neuropszichiátriai betegségek in vitro modellezése és genetikai hátterének vizsgálata céljából”

A pályázat azonosítószáma: RG-IPI-2016 TP10/15

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 26 M Ft, ill. 4 M Ft

A pályázat megnevezése: BCRF (Breast Cancer Research Foundation) társpályázat

A pályázati téma megnevezése: Genomic Approaches for Discovery of Predictors and Improvement of Therapy Response

A pályázat azonosítószáma: BCRF 00087415

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 28436 USD, ill. 7109 USD

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: A kutatócsoport génmódosított sejtvonalakat hozott létre a BRCA mutáns daganatokban kialakuló kemoterápia-rezisztencia mechanizmusainak modellezéséhez.

A pályázat megnevezése: Collaborative Research Fund from NST

A pályázati téma megnevezése: Biophysical and biochemical characterization of the recognition motifs in IDPs.

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 21 M Ft (0 Ft)

A pályázat megnevezése: OTKA K 119374

A pályázati téma megnevezése: Kapcsolatok a komplementrendszer három aktiválódási útvonala között.

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 24,916 / 1,557 M Ft

A pályázat megnevezése: OTKA K 119287

A pályázati téma megnevezése: Transzmembrán fehérjék transzkriptom analízise

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 40 788 E Ft

A pályázat megnevezése: GINOP-2.1.1-15

A pályázati téma megnevezése: Köldökszínórvér-eredetű pluripotens őssejtbank technológiai kifejlesztése és biobank megalapítása

A pályázat keretében a munka 2017-ben indul.

A pályázat megnevezése: University of Basel Innovation Pilot Project Grant

A pályázati téma megnevezése: The effects of pregnancy-specific galectin-13/PP13 on maternal neutrophil functions and its implication in the disease pathways of preeclampsia

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 50.000 CHF (összesen, 2016-ra)

A pályázat keretében az eredményekből egy OTKA pályázat és egy tudományos közlemény került előkészítésre.

A pályázat megnevezése: OTKA K119283

A pályázati téma megnevezése: Párbeszéd a daganatsejtek és környezetük között. A fibroblaszt aktiváció szerepe a tumornövekedésben és invázióban.

A pályázati támogatás mértéke: 35 M Ft (4 évre), 8 M Ft a 2016/17-es pályázati évre.

A pályázat megnevezése: OTKA K 119493

A pályázati téma megnevezése: A DNS-beli uracil prevenciójában, javításában, fenntartásában és esetleges jelátviteli szerepében fontos útvonalak kapcsolata.

A pályázati támogatás mértéke (összesen, ill. 2016-ban): 47,8 M Ft

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Dülk M, Kudlik G, Fekete A, Ernszt D, Kvell K, Pongrácz JE, et al. (8, Merő BL, Szeder B, Radnai L, Vas V, Buday L): The scaffold protein Tks4 is required for the differentiation of mesenchymal stromal cells (MSCs) into adipogenic and osteogenic lineages. *Sci. Rep*, 6: 34280 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41820>
2. Schiedel M, Rumpf T, Karaman B, Lehotzky A, Gerhardt S, Ovádi J, et al. (3): Structure-based development of an affinity probe for sirtuin 2. *Angewandte Chemie - international edition*, 55(6): 2252-2256 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/34687>
3. Magyar C, Gromiha MM, Sávolgy Z, Simon I: The role of stabilization centers in protein thermal stability. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 471: 57-62 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/34677>
4. Bársony O, Szalóki G, Türk D, Tarapcsák S, Gutay-Tóth Z, Bacsó Z, et al. (5, Szakács G): A single active catalytic site is sufficient to promote transport in P-glycoprotein. *Sci. Rep*, 6: 24810 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36200>
5. Szikriszt B, Póti Á, Pipek O, Krzystanek M, Kanu N, et al. (7, Molnár J, Szeltner Z, Tusnády GE, Szüts D): A comprehensive survey of the mutagenic impact of common cancer cytotoxics. *Genome Biol*, 17: 99 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36039>
6. Guharoy M, Bhowmick P, Sallam M, Tompa P: Tripartite degrons confer diversity and specificity on regulated protein degradation in the ubiquitin-proteasome system. *Nature Communications*, 7: 10239 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/36031>

7. Oroszlán G, Kortvely E, Szakács D, Kocsis A, Dammeier S, Zeck A, et al. (5, Závodszky P, Gál P, Dobó J): MASP-1 and MASP-2 Do Not Activate Pro-Factor D in Resting Human Blood, whereas MASP-3 Is a Potential Activator: Kinetic Analysis Involving Specific MASP-1 and MASP-2 Inhibitors. *J. Immuno*, 196: 857-865 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/34689>
8. Varga J, Dobson L, Tusnady GE: TOPDOM: database of conservatively located domains and motifs in proteins. *Bioinformatics*, 32: 2725-2726 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/41864>
9. Sándor S, Jordanidisz T, Schamberger A, Várady G, Erdei Z, Apáti Á, Sarkadi B, Orbán TI: Functional characterization of the ABCG2 5' non-coding exon variants: Stem cell specificity, translation efficiency and the influence of drug selection. *Biochim Biophys Acta*, 1859(7): 943-51 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/41881>
10. Tóth K, Csukly G, Sirok D, Belic A, Kiss Á, Háfra E, et al. (4, Déri M, Monostory K): Optimization of clonazepam therapy adjusted to patient's CYP3A-status and *NAT2* genotype. *International Journal of Neuropsychopharmacology*, 19(12): 083 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/46236>
11. Zeke A, Misheva M, Reményi A, Bogoyevitch MA: JNK signaling: Regulation and functions based on complex protein-protein partnerships. *Microbiology and Molecular Biology Reviews*, 80(3): 793-835 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/40186>
12. Than NG: A praeeclampsia kórélettana. *In: A perinatológia kézikönyve*, Medicina Könyvkiadó, 23. Fejezet: 232-248 (2016)
13. Sztupinszki Z, Györffy B: Colon cancer subtypes: concordance, effect on survival and selection of the most representative preclinical models. *Sci Rep*, 16(6): 37169 (2016)
<http://real.mtak.hu/id/eprint/46466>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A párhuzamosan beszélők hangjának szétválasztására hatással lévő legfőbb változók vizsgálata. Az újszülött csecsemők hallási képességeit felderítő kutatás lezárása és az eredmények publikációra történő előkészítése.

Az elterelődéssel, illetve a kockázattal járó döntésekkel kapcsolatos végrehajtoi működés egyes alapfolyamataiban megfigyelhető életkori különbségek feltárása. Az automatikus változásdetekció vizsgálata a látás területén, kapcsolata ingerspecifikus adaptációs folyamatokkal, és a parvo- és magnocelluláris rendszer szerepe ezekben a működésekben.

A vizuális információfeldolgozás elemi működésének idői jellemzőinek feltárása időseknél és fiataloknál.

Úranalóg szimulációban, szélsőséges körülmények között (Antarktiszon) élő kiscsoportok pszichodinamikájának tartalomelemzéses vizsgálata, az ehhez szükséges automatikus elemzőprogramok kifejlesztése korszerű nyelvtechnológiai eszközökkel.

A Nemzetközi Űrállomáson végzett, űrhajósok kognitív képességeit és agyműködését vizsgáló kísérletsorozat adatainak elemzése és publikálása.

A kognitív fáradás agyműködésre és teljesítményre gyakorolt hatásának vizsgálata.

A humán fiziológiás és kóros agyi aktivitási mintázatok vizsgálata. Az epilepsziák bizonyos formáinak közös idegi mechanizmusainak feltárása széles módszertani alapon.

A rendszer idegtudományi kutatásokra alkalmas bionikai interfészek tervezése és validálása.

A viselkedés és kognitív feldolgozási mechanizmusok közötti összefüggések feltárása, szisztematikus adatgyűjtés és elemzés a kutya és ember szociokognitív készségeinek különböző megnyilvánulásairól.

A csecsemőkortól utánkövetett serdülő populáció kérdőíves és viselkedési adatainak feldolgozása és genetikai elemzése.

A versengés és a pszichés és szomatikus egészség összefüggéseinek vizsgálata különböződemográfiai mutatójú csoportok esetén.

Annak vizsgálata, hogy a versengő attitűd változik-e kulturális hatásokra, hogy az iskolai versengő légkör hatással van-e a diákok pszichés és szomatikus egészségére.

A kollektív áldozati szerepnek a nemzeti identitásban betöltött szerepének a feltárása.

A tehetség megbízható számítógépes mérésének a kidolgozása.

A női szerepek társadalmi reprezentációjának a feltárása.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények **a) Kiemelkedő kutatási eredmények**

A párhuzamosan beszélők hangjának szétválasztását vizsgáló, a Lendület pályázat által támogatott kutatás során 1) összefoglalták a hallási jelenetelemzés különböző elvi alapokon

nyugvó komputációs modelljeit, és megadták ezek integrációjának lehetséges irányát; 2) leírták a párhuzamos hangok szétválasztását kísérő agyi elektromos oszcillációkat és az akusztikus alak-háttér megkülönböztetés során a spektrális és temporális jelzőmozzanatok integrációját jelző agyi válaszokat; 3) bizonyították, hogy a hallási szabálysértések detektálása a hangok közötti átmeneti valószínűségek reprezentációjára épül, ami megalapozza a hangsorok agyi prediktív modellezését, valamint, hogy a lokális prediktív modellen túl az elsőbbségi hatás is befolyásolja a hangsorban megjelenő hangok jelentőségének értékelését; és 4) kimutatták, hogy a hangsorok szétválasztásában megmutatókozó egyéni különbségek összefüggenek az egyén ego-rugalmasságával és egyes végrehajtó funkciókat vizsgáló feladatokban mutatott teljesítményével.

Megmutatták, hogy a hangok végződése – hasonlóan a hangok kezdetéhez – jellegzetes, a figyelemi irányultság függvényében változó eseményhez kötött potenciál mintázatot vált ki, ami szenzoros és végrehajtói folyamatokat is tükröz.

Agyi elektromos tevékenység vizsgálatával kimutatták, hogy nem-figyelt környezeti változások azonosításában két egymást követő folyamat játszódik le: az egyik a környezeti szabályszerűségekre mutató aktivitás csökkenés, a másik olyan aktivitási többlet, melyet a szabálytól eltérő esemény vált ki. Amikor a változás a látvány háttérében jelentkezik, az előbbi folyamat dominál. A vizuális objektumok változásakor viszont megjelenik az utóbbi is. Egy olyan módszer alkalmazásával, mely a szabályos ingerlésre csökkenő aktivitás hatását kiszűri, az objektumok változásának automatikus azonosítása vált vizsgálhatóvá. E hatások a felnőtt korban keveset változnak.

Vizuális maszkolási helyzetben igazolták, hogy az idős személyeknek a fiataloknál hosszabb időre van szüksége a célinger azonosításához. Az inger megnövekedett perzisztenciája viszont előny is lehet. Egy olyan feladatban, ahol az inger észlelése két egymás után bemutatott részlet integrációjával volt lehetséges, a vizuális eltérési negativitással kimutatták, hogy ez az integráció fiataloknál nem történik meg, időseknél azonban még 20 ms-os késés után is létrejön. Az eredmény jelzi, hogy speciális esetekben a gyengébb gátló folyamatok jobb teljesítményhez – a konkrét példában jobb vizuális észleléshez – vezethetnek.

Az emocionális tartalmú szavakra történő emlékezéssel összefüggő kiváltott potenciál változások arra utalnak, hogy fiatal személyek a negatív érzelmi töltésű ingereket hatékonyabban dolgozzák fel. E hatás csökkenése idősekben az adaptív magatartás károsodását jelezheti.

Azt találták, hogy sorozatos, kockázattal járó döntési feladatban a következmények mérlegelése fontos a fiatalok számára a megfelelő hatékonyságú lépések tervezéséhez és elvárások kialakításához. Ez a folyamat idősekben kevésbé hatékony.

Eseményhez kötött kiváltott potenciálok módszerével és viselkedési adatokkal igazolták, hogy az antarktisi szélsőséges viszonyok (főleg a hipoxia, fény-sötétség ciklus megváltozása, izoláció) között is jól működnek a figyelmi funkciók.

Megállapították, hogy az aritmetikai feladat végzése közben elvezetett agyi elektromos tevékenység „minimális feszítő fák” módszerével történő elemzése lehetővé teszi a folyamatban résztvevő neurális hálózatok azonosítását.

Partnereikkel korábban közösen fejlesztett újszerű, innovatív megoldásokat is tartalmazó elektrofiziológiai mérőrendszer alkalmazhatóságát vizsgálták különböző kísérleti

körülmények között. Kimutatták, hogy e módszerrel (elektronikus mélységszabályzós eszköz) nagy mennyiségű hasznos adat nyerhető ki az egyes kísérletekből, ezáltal csökkenthető a kísérleti állatok száma. A rendszer jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható egyik partnerüknél (ATLAS Neuroengineering).

Megvizsgálták az altatás és a mélyalvás fázisában kialakuló lassú hullámú aktivitás generátorainak eloszlását patkány agykérgének különböző rétegeiben. Azt találták, hogy az V. kérgi rétegnek jelentős szerepe lehet ennek az agyi ritmusnak a kialakításában, de a talamusznak is jelentős hatása lehet a kérgi lassú hullám aktivitásra a IV. rétegen keresztül.

Az ELTE és a Semmelweis Egyetem kutatóival együttműködésben végzett vizsgálatok nyomán elsőként sikerült arra bizonyítékot találni, hogy a kutya esetében az oxytocinnak mint neurohormonnak jelentős, de fajtánként változó befolyása van a társas ingerek feldolgozására és az emberrel szemben mutatott társas viselkedésekre. Ezek az eredmények fontos előrelépést jelentenek a humán társas készségek evolúciós gyökereinek és neurohormonális hátterének mélyebb megismeréséhez.

A kutya viselkedéses vizsgálatokat alvási EEG mérésekkel kombináló kutatás fontos új információkkal szolgált az alvás memória konszolidációban játszott szerepét illetően. A világon elsőként sikerült noninvazív módszerekkel kimutatni, hogy a kutyák humán-analóg társas tanulási képességei alvás-függő memória konszolidációs folyamatokkal hozhatók kapcsolatba.

Mivel a korábbi kutatások ritkák és ellentmondóak abban, hogy a gondozó milyen szerepet játszhat a csecsemő közös figyelem képességének fejlődésében, anya-csecsemő triádikus (felnőtt–csecsemő–tárgy) interakciókat vizsgáltak 9 hónapos korban. Az anya kezdeményező viselkedése befolyásolta az egyszerű közös figyelem kialakulását, amely magasabb arányban jellemezte a bizonytalanul kötődő diádok interakcióját, vélhetően az inszenzitív, korlátozó gondozói viselkedés következtében. A fejlődés szempontjából magasabb szintű megosztott közös figyelem azonban nem függött össze a kötődéssel és az anyai viselkedéssel; ellenben a csecsemő idegi érését jellemző változók (születési súly, tekintetváltogatás képessége) jósolták be legjobban 9 hónapos kori előfordulását. Mindez arra utal, hogy a csecsemő fejlődési üteme szabja meg az anyai viselkedés lehetséges befolyását.

Feldolgozták Bálint Alice pszichoanalitikus naplóját, melynek eredményeképpen pontosabban rekonstruálható az analitikus személyes és szakmai fejlődésének és legfontosabb kapcsolatainak története.

A leszbikusság államszocializmus ideje alatti magyarországi pszichiátriai reprezentációinak elemzése feltárta, hogy a pszichiátria a hagyományos nemiszerep-normákat és családi ideálokat erősítette meg, s elsőrendű terápiás célja a megfelelő társadalmi adaptáció elérése volt.

A versengés kutatása során reprezentatív mintán kimutatták, hogy a fiatalabbakra, a magasabban iskolázottakra, a budapestiekre erősebb versengés, jobb pszichés megküzdési mechanizmusok jellemzőek. Az idősebbekre, az alacsonyabban iskolázottakra, a vidékiekre erősebben jellemző a versengéskerülés, mint a fenti csoportokra. A versengő attitűd negatívan korrelál a kardiovaszkuláris megbetegedésekkel.

A versengés moralitásával és igazságosságával kapcsolatos személyes élmények erősen együtt járnak a magyarországi versengési folyamatok általános percepciójával. A budapestiek

személyes versengés élményei pozitívabbak, mint a vidékieké. A reprezentatív minta alapján a magyar lakosság túlnyomó többsége átélt igazságtalan versengést és azt, hogy mások csaltak vele szemben a versengésben; egyharmaduk pedig maga is csalt a versengésben.

Az európai történelmi események szociális reprezentációja szerepet játszik az európai identitás jelentésének meghatározásában, és a magyar nemzeti identitásra jellemző kollektív áldozati azonosulás az európai identitás konstrukcióját is meghatározza. Kidolgozták a Kollektív Büntudati Skála magyar változatát.

A diszlexiás felnőttek online vizsgálatához a tanulási képességek és a neurokognitív tesztek kombinációjával kialakítható egy egyéni optimalizált profil, amely könnyen értelmezhetően jelzi az egyén számára az erősségeinek és gyenge oldalainak a mértékét.

Validáltak több olyan mérőeszközt, melyek a következő problémás és nem problémás viselkedésekhez tartoznak: 1) TV sorozatnézés, 2) Tinder-használat és 3) Facebook használat. Emellett feltárták az összeesküvés elméletekbe vetett hit csökkentésének lehetőségeit.

b) Tudomány és társadalom

Több hazai és nemzetközi online folyóiratban közölték, hogy milyen okai és következményei vannak a [sorozatnézéssel kapcsolatos szenvedélynek](#) és a [Tinder-használatnak](#), valamint, hogy milyen lehetőségek vannak az összeesküvés elméletekben való hit csökkentésére.

Az ESA „Space for Inspiration” rendezvényén bemutatták a Neurospat kísérletet, mint a zsűri által kiválasztott *ESA Success Stories* egyikét.

Szervezőként és közreműködőként rész vettek az Agykutatás Hete rendezvénysorozatban, tudománynépszerűsítő interaktív bemutatókat vezettek, előadásokat tartottak a humán csoportok szerveződéséről és a megszaladási jelenségekről a rendezvényen.

Tudományos népszerűsítő előadásokat tartottak a Magyar Pedagógiai Társaság jubileumi találkozóján a társas tanulás neurofiziológiai alapjairól, valamint a World Wide Free Seminar of the Family Dog Project webináriumon a legújabb kutatási eredményeikről. Ez utóbbi rendezvényt világszerte több ezer, tudomány iránt érdeklődő ember kísérte figyelemmel.

Előadást tartottak az *Oknyomozás tudományos módszerekkel* című nyílt napon, illetve több alkalommal laborbemutatót, és a PPKE ITK-n nyílt napot tartottak érdeklődő középiskolás diákoknak.

A Nemzeti Agykutatási Program 1. – Tudomány és Parlament című, 2016. november 10-én megtartott rendezvényen, amely a Nemzeti Agykutatási Program (NAP) eredményeit és társadalmi hasznát mutatta be, előadást tartottak, amelyen a NAP infobionikai kutatási és fejlesztési eredményeit ismertették.

Kutatásaikról IT cégek felsővezetőinek, informatikai szakmapolitikai vezetőknek tartottak előadást, a Tudomány Napja alkalmából az MTA II. Osztálya által szervezett Oktatási Konferencián, valamint számos pedagógiai fórumon adták elő a kutatásaikat. Több újságnak, illetve rádióműsoroknak adtak interjút (pl. Irány a Mars! Honfoglalás a Világűrben, 168 óra, 2016. november 21. szám; Klub Rádió, Nagy Generáció – 2016. június 1.; Klub Rádió, Többet ésszel – 2016. április 7.).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Téma címe: A hallási alak-háttér megkülönböztetés idegi korrelátumai

Együttműködő partnerintézmény: Center for Computational Neuroscience and Neural Technology, Boston University, USA

Eredmények: A kölcsönös post-doc látogatások során közös kísérletek tervezésére, a kísérleti adatok elemzésére és értékelésére került sor. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Előítélet csökkentés „élő könyvtár” által.

Együttműködő partnerintézmény: University of Massachusetts Amherst, Amherst, USA

Eredmények: Előítélet csökkentő intervenciók kidolgozása. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Viselkedéses addikciók feltárása

Együttműködő partnerintézmény: University of Nottingham, UK

Eredmények: Közös publikáció a munkafüggőség témájában.

Téma címe: Effect of artificial gravity regimens on neurocognitive performance during head down tilt bedrest (NeuroGravity)

Együttműködő partnerintézmény: German Sport University, Köln

Egyezmény: közös pályázat és kutatás

Eredmények: nyertes pályázat és 2017-ben kezdődő kutatás: kognitív képességek és agyműködés űr analóg helyzetben (ESA/NASA Bedrest Study)

Téma címe: Psychological Status Monitoring by Content Analysis and Acoustic-Phonetic Analysis of Crew Talks and Video Diaries (CAPA)

Együttműködő partnerintézmény: University of British Columbia, Vancouver, Canada

Egyezmény: közös pályázat és kutatás

Eredmények: Sikeres közös pályázat és folyamatban lévő kutatás: déli-sarki kutatóállomáson áttelelő legénység naplójának tartalomelemzése.

Téma címe: Magas transzlációs értékkel bíró viselkedéses modell kifejlesztése kutyában

Együttműködő partnerintézmény: Richter Gedeon Vegyészeti Gyár NyRt., Magyarország

Egyezmény: Felek közti szerződés (KK/327/ 2016) tudományos együttműködésre, az autizmussal funkcionálisan analóg viselkedési tünetek leírására és azok genetikai hátterének tanulmányozására.

Eredmények: Mivel a jelenleg 2 éves időtartamra tervezett együttműködés csak 2016 novemberében kezdődött, a beszámolási évben még csak a kutatási előkészületek (előkísérletek végzése N=36 laboratóriumi beagle kutyán, a kutya társas kompetenciáját mérő kérdőíves eszköz kidolgozása, adatfelvétel N= 1000 alannal) történtek meg.

Téma címe: Multimodális és humán elvezetésre alkalmas elektrofiziológiai struktúrák kutatása

Együttműködő partnerintézmény: IMTEK, Freiburg, Németország

Egyezmény: Brain Links Brain Tools

Eredmények: Mikroelektromechanikai rendszereket terveztek multimodális elektrofiziológiai és két-foton mérésekhez. Teszt struktúrák tulajdonságait kutatták olyan elektrofoziológiai rendszerekhez, melyet a humán gyógyászatban és kutatásban egyaránt felhasználhatnak a jövőben. Közös publikációk száma: 1

Téma címe: Sok ezer csatornás elektrofiziológiai struktúrák kutatása

Együttműködő partnerintézmény: IMEC, Leuven, Belgium

Egyezmény: Neuroseeker konzorcium

Eredmények: Sok ezer csatornás elektrofiziológiai rendszert fejlesztettek ki és teszteltek sikeresen in vivo körülmények között. Közös publikációk száma: 1

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A pályázat címe: Automatikus és feladatfüggő információ-feldolgozás: válaszdetekció feladathelyzetben

A pályázat kódja: NKFIH 119587

A pályázat kezdete: 2016.10.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 47 781 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: A kutatások kísérleti terveinek összeállítása, a téri figyelem és az automatikus válaszdetekció kapcsolatát vizsgáló kísérlet programozása.

A pályázat címe: Effect of artificial gravity regimens on neurocognitive performance during head down tilt bedrest

A pályázat kódja: ESA (European Space Agency) AO-16-BR

A pályázat kezdete: jelenleg nem ismert (2017)

A pályázat időtartama: 24 hónap

A pályázat teljes összege: jelenleg nem ismert

Vezető intézmény: German Sport University, Köln

Résztvevő intézmények: MTA TTK KPI, Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Szlovénia

A pályázat címe: Agykérgi szinkron populációs aktivitás vizsgálata epilepsziás és nem epilepsziás tumoros betegekben

A pályázat kódja: NKFIH K 119443

A pályázat kezdete: 2016. 10.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 47 680 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: 2016 során előkészítő munka történt. Elkezdték a humán mérések szervezését.

A pályázat címe: Agy-gép interfészek új perspektívában: a neocortex egyidejű vizsgálata nagy sűrűségű mikroelektród rendszerekkel és kétfoton mikroszkópiával

A pályázat kódja: NKFIH PD 121015

A pályázat kezdete: 2016.12.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 15 087 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Beszerezték a vizsgálatokhoz szükséges speciális (GCaMP6f) egértörzset, és megtervezték a speciális in vivo elektródot, amelyet a mérésekhez fognak használni.

A pályázat címe: A periszomatikus beidegzés szerepe a spontán szinkron populációs aktivitások kialakulásában epilepsziás és nem epilepsziás (tumoros) betegek neocortikális szeletpreparátumaiban

A pályázat kódja: NKFIH PD 121123

A pályázat kezdete: 2016.10.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 15 087 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: 2016 során előkészítő munka történt.

A pályázat címe: A kérgi visszacsatolás szerepe a talamokortikális aktivitásban

A pályázat kódja: NKFIH K 119650

A pályázat kezdete: 2016.12.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 47 504 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Megkezdték a kísérletek előkészítését (optogenetika beállítása, előkísérletek végzése), valamint az analízishez szükséges programok megírását.

A pályázat címe: A kortikotalamikus innerváció szerepének vizsgálata a szomatoszenzoros talamikus magvakban

A pályázat kódja: NKFIH PD 121307

A pályázat kezdete: 2016.12.01.

A pályázat időtartama: 48 hónap

A pályázat teljes összege: 15 087 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: A tavalyi évben elkezdtek a szabadon mozgó állatokkal tervezett optogenetikai kísérletek beállítását. Előkísérleteket végeztek hagyományosan beültetett elektródok segítségével, melyekben a szomatoszenzoros kérgi területekről vezettek el lokális mezőpotenciált optikai ingerléssel kombinálva. Ezen felül dolgoztak az in vivo EEG regisztráláshoz alkalmazni kívánt microdrive megtervezésén is.

A pályázat címe: A dajkabeszédre való reaktivitás összehasonlító vizsgálata kutyán és emberen

A pályázat kódja: NKFIH PD 121038

A pályázat kezdete: 2016.10.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 15 264 E Ft

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Protokollok kidolgozása, pilóta tesztek megszervezése és elvégzése ezek eredményeinek feldolgozása.

A pályázat címe: Az oxytocin rendszer külső ingerekkel való stimulálásának hatása a kutya társas készségeire.

A pályázat kódja: BIAL Foundation, Portugália 503 323 055

A pályázat kezdete: 2017.01.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 41.500 EUR

Vezető intézmény: MTA TTK KPI

Részvevő intézmények: „Alexandru Ioan Cuza” University, Románia

A pályázat címe: Youth Activism, engagement and the development of new civic learning spaces

A pályázat kódja: Leverhulme Foundation, UK IN-2016-002

A pályázat kezdet: 2016.05.01.

A pályázat időtartama: 36 hónap

A pályázat teljes összege: 122 857 GBP

Vezető intézmény: University of York, UK

Részvevő intézmények: University of York (Anglia), University of South Australia (Ausztrália), Ontario Institute of Studies in Education, University of Toronto (Kanada), American University of Beirut (Libanon), Nanyang Technological University (Szingapur), MTA TTK KPI.

A pályázat keretében 2016-ban végzett munka fontosabb eredményei: Az összes résztvevő ország tanulmányt készített az ifjúsági aktivizmussal kapcsolatos tudományos kutatásokról és az aktív állampolgáriságra való nevelés történetéről és gyakorlatáról az országukban.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Barkaszi I, Takács E, Czigler I, Balázs L: Extreme Environment Effects on Cognitive Functions: A Longitudinal Study in High Altitude in Antarctica. *Frontiers in Human Neuroscience*, 10: (2016)
<http://journal.frontiersin.org/article/10.3389/fnhum.2016.00331/full>
2. Fiáth R, Kerekes BP, Wittner L, Tóth K, Beregszászi P, Horváth D, et al. (1, Ulbert D): Laminar analysis of the slow wave activity in the somatosensory cortex of anesthetized rats. *European Journal of Neuroscience*, 44:(3) 1935-1951 (2016)
<http://real.mtak.hu/38757/>
3. Hagelkruys D, Böhm C, Motschnig R, Kertzman S, Sirota A, Bernard Lerer B, et al. (1, Gyarmathy E): Adapting a stand-alone computerized cognitive test battery for online use. A case-study in the context of users with special needs. *Computers in Human Behavior*, 63: 757-768 (2016) <http://real.mtak.hu/42300/>
4. Kardos Zs, Kóbor A, Takács Á, Tóth B, Boha R, File B, et al. (1, Molnár M): Age-related characteristics of risky decision-making and progressive expectation formation. *Behavioural Brain Research*, 312: 405-414 (2016) <http://real.mtak.hu/37957>
5. Kovács K, Kis A, Pogány Á, Koller D, Topál J: Differential effects of oxytocin on social sensitivity in two distinct breeds of dogs (*Canis familiaris*). *Psychoneuroendocrinology*, 74: 212-220 (2016) <http://real.mtak.hu/42020/>
6. Mittag M, Takegata R, Winkler I: Transitional probabilities are prioritized over stimulus/pattern probabilities in auditory deviance detection: Memory basis for predictive sound processing. *The Journal of Neuroscience*, 36:(37) 9572-9579 (2016)
<http://real.mtak.hu/38008/>
7. Tauzin T, Kovács K, Topál J: Dogs identify communicative agents in third-party interactions based on the observed degree of contingency. *Psychological Science*, 27:(8) 1061-1068 (2016) <http://real.mtak.hu/44988/>
8. Tóth B, Kocsis Z, Háden GP, Szerafin Á, Shinn-Cunningham B, Wler I: EEG signatures accompanying auditory figure-ground segregation. *Neuroimage*, 141: 108-119 (2016)
<http://real.mtak.hu/37880/>

MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT

SZERVES KÉMIAI INTÉZET

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.
telefon: (1) 382 6400; e-mail: soos.tibor@tk.mta.hu
honlap: <http://www.ttk.mta.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az elmúlt évben a korábbi akadémiai intézetek bázisán létrejött Szerves Kémiai Intézet célja a különböző kutatási irányok összehangolása, és a kutatócsoportok közötti együttműködés hatékonyra tétele volt. A 2016-os év elején az MTA vezetése által felkért bizottság szakmai és működési szempontból áttekintette az intézet működését, és javaslataik alapján a TTK vezetése jelentős szervezeti átalakítást hajtott végre az intézetben. Az elsődlegesen szerkezeti kémia irányultságú csoportok a központi igazgatás alá tartozó és nagy műszereket üzemeltető Műszer Centrummal kerültek összevonásra 2016 második félévében. Így az intézet kutatási profilja letisztult, elsősorban a szerves kémia és biológiai kémia jellemzi, a kutatócsoportok céljai alapján gyógyszerkémiahoz, az organokatalízishez, a kémiai biológiához, elméleti kémiához, a szupramolekuláris kémiához, proteomikához, illetve funkcionális farmakológiához kapcsolódik. A Szerves Kémiai Intézetben zajló alap és alkalmazott kutatás mellett az intézet munkatársai nagy hangsúlyt fektetnek az oktatói munkára is, aktívan részt vesznek az ELTE, BME, SOTE egyetemeken zajló elméleti és gyakorlati oktatásokban, valamint PhD hallgatók témavezetésében.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

A kutatócsoport jelentős felfedezést tett a vérképzőszervi daganatos megbetegedések gyógyításában ígéretes Janus kináz JAK1 és JAK2 inhibitorok azonosításával. Ezen kutatásaikat a Floridai Egyetem Patológiai Centrumával végzik. A Nemzeti Agykutatási Program támogatásával és a Richter Gedeon NyRt-vel együttműködve új D-aminosav oxidáz gátló vegyületeket fedeztek fel, amelyek hatékonyságát in vivo vizsgálatokkal igazolták.

Organokatalízis Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói egy új organokaszád reakciót írtak le, amely segítségével új típusú szén kvaterner sztereocentrumot tartalmazó ciklohexén állítható elő nagyfokú enantioszelektivitással. Az így kapott alapvázlat sikeresen, többféle módon alakították tovább a terpenoid természetes vegyületek egyik kulcs építővázává, a dekalin vázzá. Kutatásaik eredményét a Chemistry-A European Journal-ban közzölték.

Az organokatalizátorok természetes vegyületek szintézisében való alkalmazása mellett új királis szintetikus startégiákat lehetőségeit is vizsgálta a kutatócsoport. Ezek a kutatások hozzásegítenek a katalizátorok működésének mélyebb megismeréséhez és használatuk további kiterjesztéséhez. Ilyen újszerű alkalmazás egy speciális kinetikus rezolválási eljárás a kénorganikus vegyületek körében. A módszer segítségével közvetlen addíciós reakcióval elő nem állítható királis kénorganikus vegyületeket tudnak kerülő úton előállítani jó hozammal és magas enantioszelektivitással. Az előállított vegyületek szintetikus hasznát is bizonyították: egy diasztereoselektív redukció, majd gyűrűzárás segítségével egyedülálló módon lehetőséget nyújtanak 2,4-diaril-tietánok szelektív előállítására.

Kémiai Biológia Lendület Kutatócsoport

A kutatócsoport munkatársai kutatásaik során polaritás-szenzitív fluorogén vegyületeket állítottak elő, melyeket sikeresen használtak előzőleg élő sejtekbe juttatott ciklooktinnal módosított oligonukleotidok szelektív jelölésére. A vegyületek lehetővé tették a nukleinsavak háttérfluoreszcencia mentes jelölését. Továbbá szintetizáltak egy új, kétpontos jelölést lehetővé tevő, kétszeresen tompított fluoreszcenciával jellemezhető fluorogén jelzővegyület-családot. Megállapították, hogy e jelzővegyületek alacsony háttérfluoreszcenciával jellemezhető jelölési eljárásokban lehetnek használhatók a jövőben. A kísérletek során sikerült azonosítani egy ideális, két ciklooktin egységet tartalmazó peptidszekvenciát, mely a jövőben ún. "self-labeling peptide tag" alapú jelölési eljárásokban alkalmazható. Ugyancsak sikeresen állítottak elő tetrazin-fenoxazon típusú bioortogonálisan alkalmazható, távoli vörös/NIR emisszióval jellemezhető két fluorogén jelzővegyület családot, melyek élő sejtek intracelluláris jelölését teszik lehetővé. Továbbá rézmentes azid-alkin cikloaddícióra alkalmas bifunkciós cisztein-specifikus kémiai hírvivőket fejlesztettek ki, melyek alkalmazásával sikerrel valósítottak meg fehérjék ciszteinen keresztüli fluoreszcens jelzését különféle fluorogén vegyületekkel.

Elméleti Kémiai Kutatócsoport

A kutatócsoport vizsgálta a széles körben alkalmazott Schreiner-féle elektron hiányos tiokarbamid organokatalizátor működését. Az eddigi elképzelések szerint a vegyület katalitikus hatása a tiokarbamid két N-H csoportjának köszönhető, mely dupla hidrogén-híd kölcsönhatással stabilizálja az anionos jellegű átmeneti állapotokat. A dihidropirán (DHP) és metanol katalitikus addíciójára elvégzett elméleti mechanisztikus tanulmányok rávilágítottak arra, hogy ebben a katalitikus folyamatban a tiokarbamid Brønsted savként (és nem dupla H-híd donorként) funkcionál. A számítások szerint az addíciós folyamatot (C-O kötés létrejöttét) a DHP protonálása segíti elő. Az Organokatalízis Kutatócsoporttal együttműködésben az újfajta mechanizmust kísérletileg is alátámasztották. Az új mechanisztikus elképzelés feltehetőleg más reakciókra is kiterjeszhető, és a gyakorlatban felhasználható organokatalizátorok kifejlesztésében. Eredményeiket az Amerikai Kémiai Társaság Catalysis folyóiratban közzétették, ahol június hónapban az egyik legtöbbet olvasott közlemény volt.

Pirit (FeS_2) - víz határfelület reaktivitásának vizsgálatát végezték el az "Iron-Sulfur-World" elmélet keretei között. Sikeresen felderítették NO_x^- ionok NH_3 -hoz vezető redukciójának lehetséges útjait, amelyek a korábbi kísérletek eredményeivel összhangban voltak. A számítások során azonosított közti termékek figyelemreméltó analógjai a nitrid-reduktáz enzim működése során kimutatott közti termékeknek. Ez a hasonlóság eredhet a mindkét rendszerben megtalálható 5-ös koordinációjú vas reaktivitásának hasonlóságából. A számítások tisztázták a víz és a pirit felszín szerepét. A jelenlévő szuperkritikus víz egyszerre reaktáns, és alkalmas közeg a termodinamikai feltételek biztosításához. A pirit felszín pedig egyszerre reaktáns és hordozó: reagensként részt vesz az O atomok lépésenkénti absztrakciójában, míg hordozóként biztosítja a vízmolekulák és az NO_x^- specieszek szimultán kölcsönhatását a felszíni redukáló atomokkal. A kapott redukciós modell alkalmas arra, hogy megmagyarázza ammónia képződését hidrotermális áramokban a földi élet keletkezésének korai szakaszában. Az eredményeiket az Inorganic Chemistry folyóiratban publikálták, ahol a szerkesztőség az eredmény újdonsága és várható tudományos hatása miatt a cikket nyílt hozzáférésűvé választotta.

Kombinált kvantumkémiai és molekulamechanikai számítások segítségével tanulmányozták aromás gyűrűk O_2 -vel történő oxidációját a nem-hem divas enzimekben, a benzoil-koenzim A példáján keresztül. Megállapították, hogy általában mind a peroxo-divas(III), mind a bis- μ -oxo-divas(IV) szerkezet reagálhat aromás gyűrűkkel; jellemeztek különféle gyökös és

elektrofil oxidációs utakat. Mindez lehetővé tette a korábbi, irodalmi eredmények egységes képbe foglalását. A BoxB esetében a divas(IV) szerkezetet („Q”) találták a legreaktívabbnak annak ellenére, hogy a rokon metán monooxigenázhoz képest itt jelentősen destabilizált. Rávilágítottak, hogy az epoxidáció iránti kemoselektivitáshoz a szubsztrát elektronszerkezete és az enzim által megszabott geometria egyaránt hozzájárul. A kutatási eredmények a tekintélyes Journal of American Chemical Society hasábjain közzéttek.

Szupramolekuláris Kémiai Lendület Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói megmutatták, hogy a flexibilis difoszfín ligandumokból és arany(I) ionokból felépített új, kétmagvú komplexek intramolekuláris aurofil kölcsönhatásának a módosításával hangolható a szilárdfázisú fotolumineszcencia. Megmutatták továbbá, hogy ezek az új szupramolekulák a termokróm, mechanokróm és vapokróm lumineszcens tulajdonságuk mellett igen ritka gerjesztési hullámhosszfüggő lumineszcenciával is rendelkeznek. Igazolták, hogy a külső fizikai és kémiai hatások intramolekuláris aurofil kölcsönhatás kialakulását indukálhatják a kétmagvú arany-komplexekben, ami a lumineszcenciás tulajdonságok drasztikus megváltozását vonja maga után. A kísérleti munkával párhuzamosan a kutatócsoportban végzett kvantumkémiai számítások nagymértékben segítettek a fotolumineszcenciás tulajdonságok értelmezésében. A gyakran használt külső stimulusok (pl. nyomás, hőmérséklet, oldószerzőzők stb.) mellett a gerjesztési fényenergia hangolása újabb lehetőséget nyújt az arany-komplexek fotolumineszcens tulajdonságának a további módosítására.

Több éves munkával feltérképezték egy kétmagvú arany-komplex kristályainak termikus bomlását, mely elvezetett egy unikális cikloaurált Au–C kötést tartalmazó hárommagvú komplex felfedezéséhez. Értelmezték továbbá a C–Cl és C–H kötés aktiválásával járó kétmagvú és hárommagvú arany-komplex képződését. Megmutatták, hogy az aggregáció indukált emissziós aktivitást mutató hárommagvú arany-komplex potenciálisan felhasználható ezüst ionra szelektív választ adó szenzorként.

MS Proteomika Kutatócsoport

A kutatócsoport tömegspektrometria alapú proteomikai, glikoproteomikai és foszfoproteomikai vizsgálati módszerek kidolgozásával, fejlesztésével és biokémiai, orvosi-biológiai alkalmazásával foglalkozik. Kutatásaik során VKSZ pályázat keretében adaptáltak és optimaláltak glikozilációs mintázat meghatározására szolgáló módszereket bioszimiláris antitest minták jellemzésére. Továbbá növelték fehérjék HPLC-MS/MS alapú aminosav szekvencia lefedettségét. Ezenkívül módszert dolgoztak ki monoklonális antitestek gazdasejt fehérje (HCP) szennyezésének analizálására.

A Nemzeti Agykutatás Program keretében jellemezték a szinaptikus fehérjék poszt-transzlációs módosulásait (foszforiláció és glikoziláció), és megállapították, hogy az alvásdepriváció ezt jelentősen befolyásolja.

A Kutatócsoport módszereket dolgozott ki a biomolekulák tömegspektrometriai energetikai jellemzéséhez. Olyan új szoftvert fejlesztettek ki, amelynek segítségével MS/MS spektrumokból energetikai információk nyerhetők ki igen nagy mennyiségű (több ezer) HPLC-MS/MS felvételből.

MS Metabolomika Kutatócsoport

A kutatócsoport munkatársai számos kihívást jelentő analitikai feladatot oldottak meg, illetve módszert fejlesztettek ki ezek megoldására együttműködő partnereikkel. E kutatásaik keretében módszert fejlesztettek ki és alkalmaztak biológiai mintákban DNS metilációs

profiljának meghatározására; Baicalin, Quercetin-szulfát és Quercetin-glükuronid mérését membrán vezikulumokból; oxitocin mennyiségi meghatározására különböző állati (kutya) és humán eredetű mintákból. Továbbá módszert fejlesztettek ki szteroidok meghatározásra humán eredetű mintából, illetve megvizsgálták a származékképzésének a hatását a kimutatási határ csökkentése érdekében.

Tiol-specifikus kovalensen kötő fragmens molekulák peptidekhez történő kapcsolását vizsgálták LC-MS/MS módszerrel, meghatározták a kötőhely pontos helyét. Vizsgálták Cisztein-specifikus fluoreszcens jelzőmolekulák peptidekhez, proteinekhez történő kötődését. Relatív kvantitatív mérésekkel azonosították a kötőhelyet, és meghatározták a kötődés mértékét. A Szupramolekuláris Kémiai Lendület Kutatócsoporttal együttműködve arany komplexek szerkezetének meghatározásában vettek részt.

NMR Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói a Pannon Egyetem Nanotechnológia Tanszékének kutatócsoportjával együttműködve meghatározták egy a flagelláris transzportfolyamatokban szerepet játszó szignál peptid térszerkezetét, valamint jellemezték a FliS flagelláris chaperon szerkezeti sajátosságait. Eredményeiket a Biochemical and Biophysical Research Communications és a FEBS Letters folyóiratokban publikálták. Az intracelluláris lipiddkötő fehérjék feltekeredési folyamatait vizsgálva azonosítottak több, stabilitás szempontjából meghatározó kooperatív kölcsönhatást a humán epesav kötő fehérjében, mely munkából készült kézirat bírálólat alatt áll. Tanulmányozták az SH3 domének foszforilációjának és lipid-kölcsönhatásainak szerkezeti aspektusait és ezek szerepét a jelátvitelben. A BME és a Szegedi Tudományegyetem munkatársaival közösen módszert dolgoztak ki a kristályosság mértékének meghatározására a gyógyszeriparban is alkalmazott többrétegű pelletekben, melyet az International Journal of Pharmaceutics folyóiratban tettek közzé.

Kémiai Krisztallográfia Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói szerves vegyületek és komplexek konstitúciós és sztereokémiai jellemzésében nyújtanak elengedhetetlen segítséget. Kiterjedt magyar és nemzetközi együttműködéseiken keresztül számos szilárdfázisban vizsgálják a másodlagos kölcsönhatásokat, illetve az ezeket befolyásoló tényezőket. Továbbá szilárd fázisban lejátszódó kémiai átalakulásokat, átrendeződéseket is kutattak. ESR spektroszkópiával kiegészítve biológiailag aktív réz(II)-komplexeket tanulmányoztak.

Funkcionális Farmakológia Kutatócsoport

A kutatócsoport kutatói feltárták, hogy az asztrociták jelentős szerepet játszanak a neuronális oszcillációk kialakulásában mind fiziológias (lassú hullám oszcillációk), mind patofiziológias (epileptikus rohamok) körülmények között. Kalcium-szenzor fehérjét expresszáló transzgenikus patkányt alkalmazva *in vivo* kimutatták, hogy az asztrogliá hálózatok a fenti állapotokban szinkronizált aktivitást mutatnak, sőt az asztrocita szinkronizáció gátlása csökkenti a neuronális szinkronizáció mértékét is. Igazolták a potenciálisan gyógyszercélpont részkapcsolat fehérjék szerepét ezen folyamatokban. Új inhibitor vegyületeket szintetizáltak és karakterizáltak az asztrogliális GABA transzporterek specifikus gátlására.

Igazolták, hogy a hepatocita-Kupffer sejt ko-kultúra alkalmasabb modell toxikus mellékhatások előrejelzésére, mint a hagyományos hepatocita mono-kultúra. Igazolták, hogy a Kupffer sejtek megnövelik a hepatociták Bsep és Ntcp transzporter expresszióját a sejtmembránon, és ezáltal növelik a sejtek epesó transzportját. A Solvo Biotechnológia Zrt-vel közös pályázatot nyertek ennek az *in vitro* modellnek a kidolgozására és validálására.

Kimutatták, hogy patkány májban a portális véna leköttése után a nem leköttött lebenyek képesek átvenni a leköttött lebenyek funkcióját.

Előállították az irodalomban eddig nem közölt fluoreszcens epesav származékot, az N-(24-[7-(4-nitro-2,1,3-benzoxadiazol)]amino-3 α ,7 α ,12 α -trihidrox-27-nor-5 β -kolesztán-26-ol)-2'-aminoetán-szulfonátot (tauro-THCA-24-NBD) organikus anion transzporter polipeptidek vizsgálatához.

b) Tudomány és társadalom

A Szerves Kémiai Intézet kutatói témavezetőként aktívan részt vettek a kutatóközpont által már sok éve megrendezésre kerülő AKI Kíváncsi Kémikus középiskolai tudománynépszerűsítő táborban.

A Kölcsey Ferenc Gimnázium, Szinyei Merse Pál Gimnázium és az ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium érdeklődő diákjai számára szerveztek intézet látogatást, amely során a középiskolások bepillanthattak a kutatói munka szépségeibe.

Az ELTE Eötvös Collegiumában tartottak tudománynépszerűsítő előadást.

Az intézetben folyó kutatásokkal kapcsolatos módszereket és eredményeket az együttműködő egyetemek hallgatói körében laboratóriumi gyakorlatokon népszerűsítették.

Az intézet munkatársai részt vesznek a középiskolai tehetséggondozásban a Középiskolai Kémiai Lapok, az Országos Közoktatási Tanulmányi Verseny, valamint a Nemzetközi Kémiai Diákolimpiai csapat felkészítésén keresztül.

A kutatóintézetben működik a Cambridge Krisztallográfiai Adatbázis Magyar Nemzeti Központja.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

A Gyógyszerkémiai Kutatócsoport a Richter Gedeon NyRt-vel együttműködésben Dopamin D2/D3 receptorokra ható vegyületek kutatását végzik. Az EGIS ZRt-vel közösen generikus hatóanyag laboratóriumi eljárás-fejlesztését végzik, míg a TEVA Pharmaceuticals-al generikus hatóanyagok szennyezésének azonosításában vesznek részt.

Az Organokatalízis Kutatócsoport a Servier Gyógyszerkémiai Kutatóintézet zRt-vel új (hetero)ciklusos vegyületeket hoztak létre, amelyek az együttműködő partner gyógyszerkémiai kutatásaiba illeszkedtek. A felmerült szintetikus kémiai kihívások megoldására új szerves kémiai módszereket, eljárásokat fejlesztettek ki, és kimutatták azok alkalmazhatóságát alapkutatói vizsgálataik során.

A Kémiai Biológia Lendület Kutatócsoport kutatói által fejlesztett jelzővegyületek és bioortogonális reagensek alkalmazhatóságát elméleti módszerek segítségével vizsgálja a BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködésben. Közös kutatásuk során elméleti kémiai számításokkal igazolták tetrazinok reakciókészségét, illetve meghatározták kettősen tompított fluoreszcenciájú bisz-azidok és peptidek konjugátumainak konformációját. A közös kutatás 2016-ban egy közös publikációt eredményezett.

Az Elméleti Kémiai Kutatócsoport együttműködésen keresztül segíti a Ximo AG-t olefin metatézis reakciókat elősegítő új Mo és W katalizátorok fejlesztésében és reaktivitásuk értelmezésében.

Az MS Proteomika Kutatócsoport a Richter Gedeon Nyrt. által fejlesztett és vizsgált terápiában alkalmazott fehérjék glikozilációs mintázatának meghatározásában vesz részt.

A Funkcionális Farmakológia Kutatócsoport a SOTE I. sz. Sebészeti Klinikájával együttműködve májregenerációs vizsgálatokat végez portális véna lekötés után patkány modellben. Kutásaik során megállapították, hogy a patkány máj 2/3 részének portális keringését lekötve a nem lekötött 1/3 rész 14 nap alatt átveszi a teljes máj szerepét méretben és működésben egyaránt. Az epeszekréció mértéke ez idő alatt nem csökken, de az epe összetétele a transzporterek expressziója és aktivitása változik. A lekötés utáni 14. napra a lekötött lebenyek mérete és aktivitása jelentősen csökken.

Az MS Metabolomika Kutatócsoport a Richter Gedeon NyRt-vel VKSZ pályázat keretében fermentáció során keletkező metabolitok azonosítását és mennyiségi meghatározását végezték el. Így a korábban kifejlesztett módszert validálták, és eredményesen alkalmazták fermentációs folyamatok során keletkező metabolitok mennyiségi meghatározására.

Az NMR Kutatócsoport a TTK Enzimológia Intézet és a Pannon Egyetem Nanotechnológia Tanszékével együttműködve NMR spektroszkópiai és biofizikai módszerekkel tanulmányozták a Salmonella flagelláris transzportjában szerepet játszó fehérje kölcsönhatásokat. Ennek részeként egy a transzportfolyamatokban meghatározó szignál peptidről megállapították, hogy alfa-hélix konformáció iránti preferenciát mutat, és in vitro körülmények között membrán aktivitással rendelkezik. Egy másik munkában a FlIS flagelláris chaperon fehérjéről kimutatták, hogy kompakt maggal rendelkező, vélhetően atipikus molten globula szerű fehérje, melynek konformációs plaszticitása a chaperon funkció elengedhetetlen feltétele. A közös kutatásokból kettő közlemény készült.

A BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével és a Szegedi Tudományegyetem Gyógyszerkeletológiai Intézetével együtt kutatva többretegű pelletekben (gyógyszeriparban is alkalmazott formula) vizsgálták a hatóanyag morfológiáját, és minta előkészítés nélkül is alkalmazható módszert dolgoztak ki a kristályosság mértékének meghatározására. Polimer gélekben és polimer oldatokban NMR spektroszkópiai módszerekkel jellemezték a hatóanyag leadás időprofilját meghatározó hatóanyag-polimer kölcsönhatások erősségét, és azonosították a kölcsönható funkciós csoportokat. Eredményeik kettő publikáció alapját képezték.

A Kémiai Krisztallográfia Kutatócsoport a BME Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszékével η^1 -szilolil-FeCp(CO)₂ komplexek szintézisét és kristályszerkezetének feltárását végezték szila-ferrocének előállításának céljából. A Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszékkel együttműködésben királis 1-ciklohexiletaminok rezolválását, termikus vizsgálatát és szerkezetigazolását valósították meg. Az ELTE Kémiai Intézetével együttműködésben kroméno-kinolonok moduláris réz katalizált szintézisét és szerkezeti analízisét végezték. A Pannon Egyetemmel együttműködve az NMR krisztallográfia fejlesztése céljából bis(glicinátó) réz komplexek összehasonlító NMR és krisztallográfiai szerkezetelemzését valósították meg.

Az intézet aktívan részt vesz a felsőoktatásban. Az intézet kutatói speciálkollégiumot tartanak, és laboratóriumi gyakorlatokat vezetnek mind az ELTE-n, a BME-n, illetve a SOTE-n. Részt vesznek a Doktori Iskolák munkájában is.

Nemzetközi kapcsolatok

A Gyógyszerkémiai Kutatócsoport a Lengyel Tudományos Akadémia Farmakológiai Intézetével (Institute of Pharmacology, Polish Academy of Sciences) együttműködésben 5HT₆ receptoron hatásos antagonistákat fedezett fel. A Ljubjanai Egyetem, Gyógyszerkémiai Tanszékével (Department of Pharmaceutical Chemistry, University of Ljubljana) közös kutatás során vendégkutatót fogadtak és cisztein proteázok kovalens gátlására alkalmas vegyületeket vizsgáltak. A kovalens fehérjemódosítókat vizsgáltak további nemzetközi

együttműködésben a University College London-nal, amely során antitest-gyógyszer konjugátumok előállítására alkalmas kovalens fehérjemódosításokat vizsgáltak. Továbbá a VIB Vrije Universitet Brussels kutatóival együtt rendezetlen fehérjék kovalens módosításra alkalmas vegyületeket tanulmányoztak. A kutatócsoport a nemzetközi kapcsolatainak tovább fejlesztéséhez 2016-során elnyert egy magyar-szlovén TÉT pályázatot a Department of Pharmaceutical Chemistry, University of Ljubljana, DAAO inhibitorok kutatására, valamint egy COST pályázat tagja, melynek címe CM1207 GLISTEN the European GPCR Network.

A Kémiai Biológia Lendület Kutatócsoport az ERA-Chemistry pályázat keretei között működik együtt a németországi Karlsruhe Institute of Technology-val, amely során a kutatócsoportban kifejlesztett bioortogonális reagenseket az együttműködő partner oligonukleotidokban teszteli. A magyar fél meghívott előadóként részt vett e KIT által szervezett előadás-sorozaton (Pforzheim) és a közös munkából egy közlemény készült. A Freiburgi Egyetem munkatársai a kifejlesztett fluoreszcens bioortogonális reagenseket az együttműködő partner mesterséges organellumok jelölésére használta fel, és eredményeiből egy közlemény született. A heidelbergi European Molecular Biology Laboratory-val való kooperációjuk során az együttműködő partner a magyar laboratóriumban előállított vegyületeket modellfehérjék genetikai módosítására használja fel, illetve vizsgálja a kifejlesztett jelző vegyületeket. Közös kutatásaikat kettő publikációban közzé tették.

Az Elméleti Kémiai Kutatócsoport az év során két vendégkutatót fogadott (Helsinki University, illetve Concordia University, Montreal) és ők bekapcsolódtak a náluk folyó kutatásokba.

A Szupramolekuláris Kémiai Lendület Kutatócsoport együttműködése a New York University Abu Dhabi-val (Egyesült Arab Emírségek) során az előállított új szupramolekuláris arany komplexek korszerű szerkezet- és anyagvizsgálata, valamint a szerkezet és tulajdonságok közötti összefüggések együttes feltárása valósult meg. Eredményeiket kettő közleményben írták le.

Az MS Proteomika Kutatócsoport az MTA és a CNR (Olasz Kutatási Tanács) bilaterális egyezménye által támogatva vesz részt a Mass Spectrometry and Proteomics Laboratory at Institute of Biosciences and Bioresources Napoli of National Research Council of Italy kutatócsoporttal a NutriC@rgo: Növényi nanovezikulák molekuláris jellemzése című projektben. A klementin gyümölcs levéből izolált vezikulumokat közvetlen oldatban történő tripszines emésztést követően vizsgálták. A triptikus peptidek nanoHPLC-MS analízise során 664 fehérjét sikerült legalább 2 peptiddel azonosítani, és 116 fehérje funkcionális annotációja volt ismert. A korábban az olasz partnernél SDS-PAGE gél-elektroforézist követően azonosított fehérjék a fő találatok között szerepeltek ezekben a mérésekben is. További céljuk az ismeretlen fehérjék manuális annotációja. Elért eredményeiket közös publikációban jelentették meg.

A Kémiai Krisztallográfia Kutatócsoport a Freiburgi Műszaki Egyetem (Bergakademie) Szerves Kémiai Intézetével szterikus és elektrosztatikus kölcsönhatásokon keresztül intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolását valósították meg. A Cape Peninsula Műszaki Egyetemmel együttműködésben a molekulák és molekula egységek szimmetria kontrollált átrendeződését tanulmányozzák kristályban. A dublini Institute of Technology, Tallaght-val együttműködésben bioaktív réz(II) komplexek összehasonlító vizsgálatát végzik szilárd fázisban egykristály röntgendiffrakciós és oldatban ESR mérésekkel.

A Funkcionális Farmakológia Kutatócsoport az MTA KOKI, a Femtonics Kft., a Semmelweis Egyetem, a Johannes Gutenberg University (Mainz) és az Australian National

University (Canberra) tudományos kutatásai megmutatták, hogy az asztrociták jelentős szerepet játszanak a neuronális oszcillációk kialakulásában mind fiziológiás (lassú hullám oszcillációk), mind patofiziológiás (epileptikus rohamok) körülmények között. Azonosították a réskapcsolat fehérjék szerepét ezen folyamatokban. Eredményeikből egy közlemény született. Az University Leuvennel ERA-Chemistry kutatási pályázaton keresztül fejlesztenek asztroglialis GABA transzporter altípus specifikus vegyületeket. A neuroprotektív Glu/GABA mechanizmus gyógyászati célú kiaknázásának céljából 33 új spirobicyclusos származékot, illetve prekuzort állítottak elő és vizsgáltak. A prekuzolok közül 4 altípus szelektívnek bizonyult. Kutatásaik eredményit két közleményben írták le.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Pályázat: NKFIH-NVKP (16-1-2016-0037)

Pályázati téma: A rossz prognózisú gyermekkori szolid tumorokra predisponáló mutációk szűrése és biomarkerek azonosítása az egyénre szabott kezelésük optimalizálására

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 589 M Ft, 2016-ben: 0 Ft

Projekt kezdete: 2017.01.01.

Résztevő intézmények: Semmelweis Egyetem (vezető intézmény), Meditop Gyógyszeripari Kft.

Pályázat: NKFIH OTKA (PD 121070)

Pályázati téma: Új elméleti módszerek fejlesztése és alkalmazása (bio)katalitikus reakciók vizsgálatára

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 15 M Ft, 2016-ben: 0 Ft

Projekt kezdete: 2017.01.01.

Pályázat: NKFIH OTKA (K 119459)

Pályázati téma: Fehérjék glikozilációjának összehasonlító vizsgálata Rheumatoid Arthritisben

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 45,8 M Ft, 2016-ben: 0,8 M Ft

Projekt kezdete: 2016.12.01.

Résztevő intézmények: Semmelweis Egyetem Genetikai, Sejt és Immunbiológiai Intézete; Budai Irgalmasrendi Kórház II. Reumatológia; Eötvös Loránd Tudományegyetem, Immunológiai Tanszék; ELTE MTA Peptidkémiai Kutatócsoport; Bajcsy Zsilinszky Kórház

Pályázat: NKFIH OTKA (PD 121187)

Pályázati téma: Proszтата daganat biomarkerek tömegspektrometrián alapuló azonosítása szöveti mikroarray-ek vizsgálatán keresztül

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 15 M Ft, 2016-ben: 0,4 M Ft

Projekt kezdete: 2016.12.01.

Pályázat: GINOP-2.1.1-15

Pályázati téma: Membrán transzporter panel kialakítása és karakterizálása gyógyszerek toxicitásának, mellékhatásainak tesztelésére

A pályázati támogatás mértéke: Összesen: 94 M Ft,

Projekt kezdete: 2016.04.01

Résztevő intézmények: Solvo Biotechnológiai zRt. (vezető intézmény)

Eredmények 2016-ban: 3D humán és patkány hepatocita-Kupffer ko-kultúra modellt fejlesztettek ki, jellemeztek és validáltak gyógyszerek toxicitásának vizsgálatára.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Keserű GM, Erlanson DA, Ferenczy GG, Hann MM, Murray CW, Pickett SD: Design Principles for Fragment Libraries: Maximizing the Value of Learnings from Pharma Fragment-Based Drug Discovery (FBDD) Programs for Use in Academia. *Journal of Medicinal Chemistry*, 59: 8189-8206 (2016) <http://real.mtak.hu/46271/>
2. Berkes B, Ozsváth K, Molnár L, Gáti T, Holczbauer T, Kardos G, et al. (1, Soós T): Expedient and Diastereodivergent Assembly of Terpenoid Decalin Subunits having Quaternary Stereocenters through Organocatalytic Robinson Annulation of Nazarov Reagent. *Chemistry-A European Journal*, 22: 18101-18106 (2016) <http://real.mtak.hu/46273/>
3. Demeter O, Fodor EA, Kállay M, Mező G, Németh K, Szabó PT, et al. (1, Kele P): A Double-Clicking Bis-Azide Fluorogenic Dye for Bioorthogonal Self-Labeling Peptide Tags. *Chemistry-A European Journal*, 22: 6382-6388 (2016) <http://real.mtak.hu/37518/>
4. Madarász Á, Dósa Zs, Varga Sz, Soós T, Csámpai A, Pápai I: Thiourea Derivatives as Bronsted Acid Organocatalysts. *ACS Catalysis*, 6: 4379-4387 (2016) <http://real.mtak.hu/38061/>
5. Rokob TA: Pathways for Arene Oxidation in Non-Heme Diiron Enzymes: Lessons from Computational Studies on Benzoyl Coenzyme A Epoxidase. *Journal of the American Chemical Society*, 138: 14623-14638 (2016) <http://real.mtak.hu/45629/>
6. Jobbágy Cs, Baranyai P, Marsi G, Rácz B, Li L, Naumov P, et al. (1, Deák A): Novel gold(I) diphosphine-based dimers with aurophilicity triggered multistimuli light-emitting properties. *Journal of Materials Chemistry C*, 4: 10253–10264 (2016) <http://real.mtak.hu/46016/>
7. Bazso FL, Ozohanics O, Schlosser G, Ludanyi K, Vekey K, Drahos L: Quantitative Comparison of Tandem Mass Spectra Obtained on Various Instruments. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry* 27: 1357-1365 (2016) <http://real.mtak.hu/39802/>
8. Horváth G, Bencsura Á, Simon Á, Tochtrop GP, DeKoster GT, Covey DF, et al. (2, Tőke O): Structural determinants of ligand binding in the ternary complex of human ileal bile acid binding protein with glycocholate and glycochenodeoxycholate obtained from solution NMR. *FEBS Journal* 283:541-555 (2016) <http://real.mtak.hu/46468/>
9. Kirischuk S, Héja L, Kardos J, Billups B: Astrocyte sodium signaling and regulation of neurotransmission. *Glia*, 64:1655-1666 (2016) <http://real.mtak.hu/46011/>
10. Kardos J, Szabó Z, Héja L: Framing neuro-glia coupling in antiepileptic drug design. *Journal of Medicinal Chemistry*, 59:777-787 (2016) <http://real.mtak.hu/46012/>

**AZ MTA TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS
PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Természettudományi Kutatóközpont

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	456	Ebből kutató ² :	318
PhD, kandidátus:	167	MTA doktora: 28	Rendes tag és levelező tag: 6
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			6
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			146
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			416
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			410
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			15
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			16
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			352
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			344
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 6	idegen nyelven:	7
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	1433,161	Összes független hivatkozás száma (2015):	18045
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			20881
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	2	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			211
		poszterek száma:	223
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	38	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	68
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			15
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			97
Témavezetések száma: TDK munka:	63	Diplomamunka (BSc):	134
Diplomamunka (MSc):	112	PhD:	173
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	2904 359	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	42	Teljes saját bevétel:	2470 178 E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			99
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	470 666	E Ft
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			13
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	831 250	E Ft
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			112
	A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	619 050	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			5
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	190 949	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		358 263	E Ft

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Természettudományi Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	2904 359	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	2470 178	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	470 666	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	831 250	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	471 309	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	147 741	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	190 949	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	133 237	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	88 679	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	136 144	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	203	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK központ vezetése alá tartozó csoportok

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	52	Ebből kutató ² :	25
PhD, kandidátus:	12	MTA doktora:	3
		Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			11

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			11
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			11
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	26,619	Összes független hivatkozás száma (2015):	51
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			60

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			31
		poszterek száma:	38
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			3

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	27
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:	18

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	121	Ebből kutató ² :	92
PhD, kandidátus:	56	MTA doktora:	8
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			31

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	156		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	151		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	7		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	13		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	121		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	117		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	418,209	Összes független hivatkozás száma (2015):	4970
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			5728

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	2	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	89		
	poszterek száma:	59	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	22
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	30		
Témavezetések száma: TDK munka:	30	Diplomamunka (BSc):	35
Diplomamunka (MSc):	36	PhD:	34

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Enzimológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	150	Ebből kutató ² :	109
PhD, kandidátus:	55	MTA doktora:	6
		Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			51

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			122
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			121
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			115
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			111
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 2	idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	588,791	Összes független hivatkozás száma (2015):	3703
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			4396

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	1	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			31
		posztterek száma:	48
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	19
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			6

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			22
Témavezetések száma: TDK munka:	8	Diplomamunka (BSc):	17
Diplomamunka (MSc):	20	PhD:	56

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	62	Ebből kutató ² :	42
PhD, kandidátus:	17	MTA doktora: 5	Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatóhelyi állományban levő kutatók száma ⁴ :			24

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			59
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			59
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			5
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			3
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			45
mindezekből recenzió, kritika magyarul: 0		idegen nyelven: 0	
Megjelent könyv/monográfia, atlasz magyarul: 0		idegen nyelven: 0	
könyvrész, könyvfejezet, térkép magyarul: 4		idegen nyelven: 1	
Könyv szerkesztése ⁷ magyarul: 0		idegen nyelven: 0	
Folyóirat, vagy sorozatszerkesztés magyarul: 2		idegen nyelven: 1	

3. IDÉZETTSÉGI MUTATÓK (2015)

Összes hivatkozás száma ⁸ :	3618	Összes független hivatkozások száma:	3052
--	------	--------------------------------------	------

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 4	MTA doktora:	0
---	--------	--------------	---

5. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Tud. előadások száma nemzetközi rendezvényen ¹⁰ :	38	hazai:	44
Nyilvános esemény megrendezése:	6	kulturális rendezvények:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹¹ :			1
Nemzetközi tudományos bizottsági tagság:	6	hazai:	18
Nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagság:	12	hazai:	3

6. A HAZAI FELSZŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹² :			22
Témavezetések száma: TDK munka: 6		Diplomamunka (BSc):	36
Diplomamunka (MSc): 33		PhD:	31

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: TTK Szerves Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	71	Ebből kutató ² :	50
PhD, kandidátus:	27	MTA doktora:	6
		Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			28

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			87
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			87
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			3
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			82
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			77
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	308,975	Összes független hivatkozás száma (2015):	2515
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			2985

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			22
		poszterek száma:	36
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			4

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			14
Témavezetések száma: TDK munka:	16	Diplomamunka (BSc):	19
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	34

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT

1121 Budapest Konkoly-Thege Miklós út 29-33.; 1525 Budapest Pf. 49.
telefon: (1) 392 2512; fax: (1) 392 2598,
e-mail: titkarsag@wigner.mta.hu; honlap: wigner.mta.hu

I. A kutatóközpont egészét érintő kutatási és tudományszervezési eredmények 2016-ban

Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontban (Wigner FK) a kutatási tevékenység két szervezeti egységben koncentrálódik, nevezetesen a Részecske- és Magfizikai Intézetben (RMI) és a Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézetben (SZFI). Az intézetek tudományos beszámolóit a következő oldalakon megtalálhatók. A Kutatóközpont úgy került eredetileg megszervezésre, hogy a tudományos kutatást folytató intézetek kutatási tevékenységéhez logisztikai és kiegészítő támogatást nyújtson. Így jöttek létre a Kutatóközpont központi részét alkotó, a főigazgató, valamint a helyettese közvetlen irányítása alá tartozó egységek, nevezetesen a Titkarság, a Gazdasági Osztály (GO), a Műszaki vezetés, a Műhely, a Könyvtár, a Számítástechnikai Hálózati Központ (SZHK) és a Wigner Adatközpont. Ez 2016-ban kiegészült a Technológia Transzfer Irodával és a Kommunikációs Irodával. Mindehhez hozzászámíthatjuk még a 2015-ben a konvergencia régiókban (Piszkéstető, Nagycenk, Miskolc, Pécs, Székesfehérvár és Zalaegerszeg) létrehozott külső Telephelyeket, amelyek avatása 2016-ban Miskolccal megkezdődött. A hat Telephelyről a 2015-ben született Alapító Okirat már rendelkezett, a 2016-os változások SZMSZ-ben történő rögzítését 2017-re tervezik. A telephelyek alapítása egyrészt meglévő K+F együttműködéseiket volt hivatott támogatni, másrészt lehetőséget biztosított arra, hogy partnereikkel konzorciumot alakítva pályázatot nyújthassanak be az NKFIH kutatás-fejlesztést támogató pályázataira. 2016-ban egy infrastruktúra fejlesztő pályázat támogatást is nyert a Nagycenki Telephelyre. Nevezetesen a GINOP 2-3-3-15-2016-00016 szerződés számú „Mágneses nulltér laboratórium létrehozása” projekt, amelyben Nagycenken, az MTA CSFK-val közösen egy speciális laboratóriumot építenek űrtechnikai, geofizikai és orvos-biológiai kutatásokra.

A két intézetben a tudományos kutatás és a kutatás-fejlesztési feladatok jól meghatározott tematikájú kutatócsoportokban folynak, összesen 40-ben. Ezek vezetői felelősek a tudományos munka minőségéért, a nemzetközi színvonal biztosításáért, a csoport kutatásának sikerességéért. A kutatóosztályok a hasonló tematikájú kutatócsoportokat fogják össze. Eddig 8 MTA Lendület Kutatócsoport került megalapításra, amelyből 3 már befejezte működését és kiváló minőség mellett véglegesítésre került. Párhuzamosan megkezdte működését egy új kutatócsoport is, amely a Nemzeti Agy Program (NAP) kiemelt támogatásában részesült. 2016 februárjában harmadszor is megtörtént a kiemelt anyagi elismerésben és helyi támogatásban részesülő Wigner Kutatócsoportok kiválasztása. Összesen 7 ilyen csoport indult, így 2016 közepén a két intézet 11 kutatóosztályból és 40 kutatócsoportból állt, amelyek között 16 rendelkezett kiemelt támogatással. A kutatócsoportok hazai és nemzetközi workshop-okat és konferenciákat rendeztek, ezek az események az intézeti beszámolóikban kerülnek felsorolásra.

Titkarság: 2016-ra a Titkarság tevékenysége véglegesítődött. A kutatók és a vezetőség aktuális, napi problémáinak megoldását folyamatosan segíti 3 kolléganő, akik abban is tájékozottak és segítőkészek, ha esetenként specialisták bevonására is szükség van. Például a kutatóközpont saját jogászt ugyan nem alkalmaz, de szükség esetén jogászt bíz meg a speciális feladatokkal. A Titkarság folyamatosan gondoskodik a kutatóintézetekben folyó kutatási tevékenység zökkenőmentességéért, biztosítja a Gazdasági Osztállyal való kapcsolatot,

valamint segíti a külső intézményekkel való kapcsolattartást. Mindezt rendkívül magas szinten teszi.

Tudományos titkár: gondoskodik a szakmai jelentések és beszámolók véglegesítéséről, a belső szakmai pályázatok kiírásáról és elbírálásáról, az MTA pályázatok és a kutatási EU pályázatok előkészítéséről és benyújtásáról. 2016 végéig a Wigner FK 70 db HORIZON2020 pályázatot nyújtott be, amelyekből eddig 9 nyert támogatást (ez 13 %-os támogatási ráta, ami kiemelkedő eredménynek tekinthető). Miután az ERC pályázatok sikeressége jóval szerényebb (eddig 1 ilyen pályázat érkezett a Wigner FK-ba), ezért megbíztak egy pályázati specialistát a potenciális jelöltek felkészítésével. 2016-ban 1 Advanced Grant és 2 Starting Grant javaslatot sikerült benyújtani, ezek elbírálása 2017-re várható.

Technológia Transzfer Iroda: Az innovációs titkár eredeti feladata az NKFIH által kiírt pályázatok nyomon követése, a pályázatok benyújtásának támogatása, a K+F pályázatoknál szükséges ipari kapcsolatok megalapozása és fejlesztése, az intézményen belüli szellemi tulajdon kezelése, az intézeti szabadalmak benyújtásának előkészítése és gondozása, az innováció és a technológia transzfer területén létrehozott hazai és H2020 pályázatok benyújtása és nyomon követése. Miután megtörtént az első, szolgálati szabadalomra javasolt kutatói ötletek meghallgatása és elbírálása, az év során folytatódott ezen szabadalmi javaslatok szabadalommal nyilvánítása. Az év során előkészítésre került az Európai Űrügynökség (ESA) Broker Network Point-jának (BNP) megpályázása, ami sikeresen lezajlott. A Nemzeti Fejlesztési Minisztérium által felügyelt Magyar Űrkutatási Irodával együttműködve a Wigner FK-nak sikerült elnyerni az ESA BNP megalapítási jogát, amely 2016. december 1-vel megkezdte működését. Ehhez szükség volt az innovációs titkár tevékenységének specialistákkal történő megtámogatására. Így jött létre a Wigner FK Technológia Transzfer Irodája, amelynek működésért az innovációs titkár felelős.

Kommunikációs Iroda: A Wigner FK-ban kiterjedt ismeretterjesztő, utánpótlás-nevelő és rendezvényszervező tevékenység folyik. A kutatók sokat tesznek a saját kutatási eredményeik és a Wigner FK láthatóságának növelése érdekében, a szélesebb nagyközönség tájékoztatásáért, a fiatalok tudományos ismereteinek kiszélesítéséért. A Wigneres eredmények és azok alkotói sokszor szerepeltek a sajtóban és a médiában, az MTA és MTI honlapokon. Ezt a tevékenységet támogatják a kommunikációs titkár és a vezetése mellett működő Kommunikációs Iroda munkatársai. Az iroda munkatársai mostanra már rutinszerűen kezelik a kollégák által kitalált és benyújtott kommunikációs ötletek megvalósítását, rendezvények, kiállítások, szimpóziumok külső helyszínen való megszervezését. Ezek az események jelentősen növelik a Wigner FK láthatóságát. A kommunikációs iroda munkatársai szervezik az intézetbe látogató csoportok programját, ideértve a novemberi Intézményi Nyílt Napot, valamint a hagyománnyá vált Lányok Napját. Az egész évi tevékenységből kiemelkedett a Sokszínű Fizika Busz aktivitása, amelynek logisztikai és módszertani támogatását az iroda adja, a kutatók pedig az előadásokról gondoskodnak. 2016-ban a busz, illetve a felkért önként vállalkozó kollégák több mint 20 helyszínen folytattak ismeretterjesztő tevékenységet, előadást tartottak és bemutatták legújabb kutatási eredményeiket. Az év során számos hazai és nemzetközi delegáció és érdeklődő csoport járt a Wigner FK-ban, számukra is érdekes előadásokat és laborlátogatásokat szerveztek a Kommunikációs Iroda munkatársai, s mindezen tevékenységek összehangolásával magas színvonalon támogatták a kutatók tudásátadó, ismeretterjesztő tevékenységét. Az év során sikerült egy új Wigner WEB-szervert elindítani, oda a szükséges anyagokat feltölteni. Ezzel a kutatóközpont láthatósága, WEB-en való megjelenése minőségi fejlődésen ment át.

Gazdasági Osztály (GO): a GO munkatársai most már nagy gyakorlattal kezelik a munkájukat megkönnyítő számítógépes szoftvereket, így a központosított, illetve a belső fejlesztésű program-rendszereket. Megtörtént a korábban bevezetett Központosított Illetmény-számfejtési Rendszerről (KIR) való áttérés az újonnan bevezetett KIRA-rendszerre. Ez sok problémát okozott, amelyek kijavítása jelentős energiákat kötött le a GO munkatársainál. Ezzel párhuzamosan az elszámolási rendszerük (ECOSTAT) új elemekkel bővült. A fő törekvés az volt, hogy a kutatási tevékenység pénzügyi háttérének nyomon követése, elemzése kutatócsoporti szintig megtörténhessen. Ez most már lehetséges. A korábban bevezetett anyagrendelési és szabadság-nyilvántartó rendszer kiegészült és véglegesítődött a kiküldetések papírintes kezelésével. Minden fejlesztésnél fontos szempont volt, hogy a kialakított informatikai rendszerek képesek legyenek a kutatási feladatok nemzetközi színvonalon történő támogatására, az EU-szabályok szerinti elszámolási módszerek integrálására. Az év során megkezdődött a lezárt MTA és NKFIH pályázatok ellenőrzése, amelyek sikerrel végződtek: az ellenőrök lényegi hibát nem tártak föl, csak apró problémákra, azok kijavítására hívták fel a figyelmet. 2016 szeptemberében új gazdasági vezető váltotta fel az addigi vezetőt. Az átmenetet és az átadás/átvételt sikerült a GO munkájának megzavarása nélkül lebonyolítani.

Műszaki vezetés és a műhely: A műszaki vezető kolléga sikeresen folytatta a Wigner FK épületeink megújítását, amelyeket az MTA-tól 2015 és 2016 során megpályázott és elnyert pénzügyi támogatások tettek lehetővé. A kisebb költségigényű felújítások elvégzése után már nagyobb költség-igényű épület-rehabilitációra lenne szükség, amire viszont egyelőre nem látszik a szükséges forrás. Nagy szükség lenne a Wigner FK által használt, nagymértékben elöregedett épületegyüttes műszaki állapotának komplex fejlesztésére. Erre vonatkozólag folyamatos előkészületeket végeznek. A műhely által használt helyiségek felújításával sikerült jelentős mértékben megjavítani a kollégák munkakörülményeit. Időközben megkezdődött a műhely tevékenységének átalakítása, egy új belső elszámolási rendszer kialakítása.

Könyvtár: A KFKI Telephelyet kiszolgáló Könyvtár szervezetenként a Wigner FK kezelésébe tartozik. 2016-ban folytatódott a Könyvtár könyvállományának gazdagítása. Az újabb könyvbeszerzések során előnyben részesültek az „e-book” formátumú művek, igazodva a legújabb, elektronikus alapú könyvtári szolgáltatások terjedéséhez. A Könyvtár személyi állományának továbbképzése jelentős mértékben hozzájárul ahhoz, hogy egy, a 21. század kihívásaihoz igazodó könyvtár álljon a kutatók rendelkezésére a KFKI Telephelyen.

Számítógépes Hálózati Központ (SZHK): az SZHK feladata a KFKI Telephely összes kutató és fejlesztő intézményének számítástechnikai hálózattal és kapcsolattal való ellátása, a helyi hálózat működtetése, fejlesztése, a hálózati és adat-biztonságot növelő eljárások és eszközök bevezetése. Az SZHK látja el a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program regionális központi feladatait is. Az SZHK ezeknek a feladatoknak csak akkor tud eleget tenni, ha a berendezéseket megfelelően magas színvonalon üzemelteti és képes folyamatosan fejleszteni a rendelkezésre álló technikát. 2016-ban folytatódtak a korszerűsítési lépések, régi eszközök kerültek lecserélésre, növekedett a belső sávszélesség, ezzel együtt a megbízhatóság és a rendelkezésre állás. Párhuzamosan tovább folytatódott a kutatóközpont területén a központi Wi-fi rendszer kiépítése, modernizálása. A 14-es épület géptermeiben a központi IT eszközök és az azt kiszolgáló infrastruktúra (klíma berendezések) elektromos ellátásának a leválasztását elvégezték, megtörtént az új kapcsolószekrények, a szünetmentes tápegységek és az elektromos generátor beszerzése, telepítése és üzembe helyezése. Az SZHK munkatársai jelentősen hozzájárultak a Wigner FK új WEB-lapjának létrehozásához, működésének felgyorsításához.

Wigner Adatközpont: A negyedik éve üzemelő Wigner Adatközpontban tovább folyt a CERN@WIGNER projekt végrehajtása. A CERN által elfoglalt 300 rack-szekrényi területen mostanra 2,3 MW IT-teljesítményt kötnek le az ott elhelyezett számítógépek. 2016 nyarán ismét megtörtént a korábbi szerződés meghosszabbítása, amely egyértelműen az adatközpont működésének magas színvonalát bizonyítja. A CERN projekttel párhuzamosan, 2016 végére már rutinszerűen működött a Wigner Felhő, valamint a 2016 nyarán létrehozott MTA Felhő. Mindkét Felhő közel 1000 magból és 0,5 PB adattárolóból álló egységből áll, így együttesen jelentős számítási potenciált képviselnek. Megtörténtek az első tesztelések is, majd 2016 őszétől már folyamatosan használták a Wigner FK és az MTA hálózat kutatói mindkét felhő szolgáltatását. 2016 végéig 35 nagy számítási igényű projekt nyerte el a hozzáférési jogot, egy részük az év végére sikeresen el is végezte a kitűzött kutatási-számítási feladatot.

Az adatközpont szolgáltatási központként és egyúttal tudásbázisként is működik. 2016-ben is megrendezésre került a GPU Nap, a Big Data Day, és több szakmai fórum is. Az adatközpont nyitott, ezért rendszeresen látogatják iskolás és egyetemi csoportok, valamint a nyílt napokon az érdeklődők. 2016 szeptemberben ismét sikeresen megrendezésre került a CERN-OPENDAYS nevű 2 napos nyílt hétvége, amely során több mint 500 látogató tekintette meg az adatközpontot és a kutatók CERN-el kapcsolatos tevékenységéről szóló kiállítást.

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

Kutatóközponti szintű kutatási projektek és az azokhoz tartozó nyitott infrastruktúrák: A kutatóközpontban a kutatócsoportok alapvetően az intézetek alá tartoznak, méghozzá önállóan kialakított kutatási programmal, amelyért a kutatócsoport vezetője a felelős. Azonban vannak olyan kutatási feladatok, amelyek túlmutatnak az egyes kutatócsoportok lehetőségein, kompetenciáján, és (esetenként a Wigner FK különböző intézeteiben, vagy külső intézetekben található) kutatócsoportok együttműködését igénylik. Ezek a nagy volumenű kutatási projektek már kutatóközponti szintű koordinációval, a kutatóközpont vezetésének figyelme és támogatása mellett kerülnek megvalósításra, természetesen a résztvevő kutatócsoportok saját kutatási tervének figyelembe vételével. Ide tartozik az *ELI Laboratórium* (ELI: Extrem Light Infrastructure, Szeged), a *Budapest Neutron Központ* (BNC: Budapest Neutron Center), a *Magyar EURATOM Fúziós Szövetség* (MEFSZ), a *Magyar Ionnyaláb-fizikai Platform* (HIPP: Hungarian Ion-beam Physics Platform), a *Magyar Mössbauer-laboratóriumok Hálózata* és a *GPU Laboratórium*. Ezen egységekre jellemző a külső partnerek irányába való nyitottság és átláthatóság, ami összekapcsolódik a rendelkezésükre álló infrastruktúra, kutatási berendezések kívülről való elérhetőségével (Open Laboratories).

ELI Laboratórium: a lézerfizikai kutatásokra és alkalmazásokra szakosodott kutatási egység szorosan kapcsolódik a Szegeden épülő és várhatóan 2018 végén üzemelő Extreme Light Infrastructure (ELI-ALPS) nagyteljesítményű lézerberendezéshez, az ott végezhető kutatómunka összehangolásához. Célja az „ELI Wigner User Group”-ok tevékenységének kialakítása, amely igazodik a helyi kutatói és kutatási potenciálhoz. A Wigner FK szakértő munkatársai folyamatosan, rész munkaidőben vesznek részt az ELI-ALPS elindításában. Folytatódott a Helios-I program, tovább erősödött az atto-szekundumos lézerimpulzusok alkalmazását végző ELI Wigner User Group kutatási tevékenysége. Intenzívebbé vált a belső együttműködés a molekuláris folyamatok extrém rövid lézerimpulzusokkal történő vizsgálatában is (ezt a kutatást az ERC is támogatja). Rutinszerűvé váltak az ultrahomogén rubídium-plazma létrehozását célzó kísérletek, felszerelésre kerültek azok a diagnosztikai elemek, amelyekkel sikeresen vizsgálható a lézeres gerjesztés hatékonysága. Az elvégzett

kutatás fontosságát jelzi, hogy az európai lézeres részecskegyorsító kísérleteket összefogó AWAKE együttműködés társult tagként („Associate member”) tekint a Wigner FK-ra.

Budapest Neutron Központ (BNC, <http://www.bnc.hu/>): Ez a legnagyobb hazai, nemzetközileg is nyitott, szolgáltatói kutatási infrastruktúra. A 10 MW teljesítményű Budapesti Kutatóreaktor az EU által támogatott 8 európai neutronforrás központ-hálózat tagja. A BNC az MTA EK és az MTA Wigner FK konzorciuma. Az MTA EK hét, míg az MTA Wigner FK nyolc kísérleti állomást üzemeltet a reaktor mellett. A BNC egyrészt a hazai neutronkutatási közösséget szolgálja ki, másrészt a nemzetközi felhasználók rendelkezésére is áll. Évente mintegy 150 kísérletet végeznek el – igen széles multidiszciplináris körben, szilárdtestfizikai problémáktól anyagtudományi feladatokon át biológiai kutatásokig. A neutronnyaláb felhasználás a nemzetközi szelekciós panel véleményezése alapján történik. A BNC nemcsak a hazai neutronkutató közösség fő bázisa, hanem a nemzetközi csúcserendezésekhez való hozzáférés kiinduló pontja is. 2016-ban felgyorsult az Európai Spallációs Forrás (ESS: European Spallation Source) berendezés megépítése. Folytatódtak a magyar in-kind beszállítások is (évente összesen 300 MFt értékben). A beszállítások pontos teljesítéséhez szükséges az ERIC státusz következményeinek tisztázása, így az ÁFA mentesség és a speciális közbeszerzési eljárás tisztázása. Ezeket a feladatokat 2016-ban sikerült tisztázni a Magyar ESS Bizottságban.

Magyar EURATOM Fúziós Szövetség (MEFSZ, <http://www.magfuzio.hu/>): A Fúziós Szövetség célja az európai nukleáris kutatási szervezet (EURATOM) társult tagjaként a szabályozott magfúziós kutatásokban való részvétel. A 2000-ben több magyarországi kutatóintézet illetve egyetem részvételével megalakult szövetség irányítója és legjelentősebb résztvevője a Wigner FK: erőforrásainak, költségvetésének és tudományos eredményeinek mintegy 85 százalékát a kutatóközpont adja. 2016-ban folytatódott a F4E (Fusion for Energy) H2020 projekt, amely jelentős mértékben biztosítani tudja a fúziós kutatások hazai anyagi hátterét. Sikeresen folytatódott a németországi Greifswaldban található Wendelstein 7-X (W7-X) reaktor tudományos programja. Ez a világ legnagyobb sztellarátor típusú fúziós kísérleti berendezése. Az Európai Unió fúziós kutatási program egyik alappillérenek számító berendezésnél a plazmaállapot előállításánál és megfigyelésénél a Wigner FK RMI Plazmafizika Osztályának munkatársai kulcsszerepet játszanak: a magyar csoport egy saját fejlesztésű, 10 kamerás intelligens video megfigyelőrendszerrel járul hozzá folyamatosan a sikeres adatgyűjtéshez, a plazmaállapot tanulmányozásához. Ugyanis ennyi kamerával már nagyon jól meg lehet figyelni a létrejött plazmát és az egész berendezés belsejét, valamint monitorozni tudnak egyéb kulcsfontosságú komponenseket.

Magyar Ionnyaláb-fizikai Platform (HIPP, <http://hipp.atomki.hu/index.html>): Az ionnyaláb-fizikai kutatásokkal foglalkozó platform a Wigner FK és az Atomki saját gyorsítóit, ionnyaláb-fizikai laboratóriumait és néhány további, ezekhez kapcsolódó eszközt foglalja közös keretbe. 2016-ban sikerült az EG-2R gyorsítónál további fejlesztéseket végrehajtani, például a vákuumkamra felújítását elvégezni. A fejlesztés jelentős mértékben hozzájárul az IPERION H2020 projekt sikeres folytatásához. Debrecenben átadásra került a HIPP Platform új gyorsítója, amelynél kialakításra került egy olyan kísérleti elrendezés („Wigner-nyaláb”), ahol a Wigner FK kutatói ionimplantációs és más magfizikai kísérleteket végezhetnek majd el. Az Atomki által vezetett magyar E-RIHS konzorcium tagjaként megkezdődött a kulturális örökségek vizsgálatát segítő osztott infrastruktúra kialakítása, a megfelelő Wigner részvétel megalapozása.

Magyar Mössbauer-laboratóriumok Hálózata az anyagtudomány és a szilárdtestfizika aktuális problémáival foglalkozik - újszerű diffúziós vizsgálatokkal rétegszerkezetekben, közelhatások vizsgálatával szupravezető/ferromágnes, ferromágnes/ferromágnes és

antiferromágnes/ferromágnes heterostruktúrákban. Ezekben a területeken a fejlett infrastruktúrára támaszkodva a kutatóközpont munkatársai vezető szerepet töltenek be, 2016-ban szerveztek egy országos szimpóziumot.

GPU Laboratórium (<http://gpu.wigner.mta.hu/>): A Wigner FK több kutatócsoportja is alkalmazza, vagy alkalmazni kívánja a nagysebességű grafikus kártyákat. Ide tartoznak az elméleti és kísérleti részecske- és szilárdtestfizika, a gravitációkutatás és a komplex-rendszerek viselkedésének szimulációs kutatásainak különböző területei, valamint a nagy tömegű adatok analízisével foglalkozó csoportok. A GPU Laboratórium szoftver-támogatást nyújt ezeknek a csoportoknak, egyúttal hardware-oldalról összefogja és integrálja a kutatók fejlesztési elképzeléseit. A grafikus (GPU) és Intel Xeon Phi kártyákat tartalmazó fejlesztő cluster üzemeltetése mellett nagy hangsúlyt helyeztek a jövő kutató-nemzedékének továbbképzésére: az ELTE-n tartott Grafikus processzorok tudományos célú alkalmazása kurzus mellett immár 6. alkalommal rendezték meg a GPU-Day 2016 – Future of Many-core Computing in Science nemzetközi konferenciát, valamint a 2. Lectures on Modern Scientific Computing kurzust is. Mindkét nemzetközi eseményen mintegy 60-80 fő vett részt a Wignerben.

A HORIZON2020 pályázatokon való sikeres szereplés céljából olyan kutatási platformokat szerveztek, amelyek igazodnak a HORIZON2020 által támogatott kutatási irányokhoz, egyúttal tükrözik a magyar oldalról kiemelt „Smart Specialization” témákat. Jelenleg 4 ilyen platform működik: Fizika és Élettudomány („Physics & Life Science), Nanotechnológiai Alkalmazások („Nanotechnology applications”), Környezetvédelem („Environment”) és az Informatikai Alkalmazások a Tudományos Kutatásban („IT-applications in Scientific Research”). 2016-ban folytatták a platformok tematikája mentén történő konzorcium-szervezéseket és pályázásokat. 2016 végéig a Wigner FK 70 db HORIZON2020 pályázatot nyújtott be, amelyekből eddig 9 nyert támogatást. A következő évben eldől, hogy ezt a kiemelkedőnek számító 13 %-os sikerességi arányt a felvázolt taktika tudja-e növelni.

Harmadszor is elnyerték az MTA támogatását ahhoz, hogy egy további, ipari alkalmazásokat létrehozó fókusztema („lézerek és plazmák”) művelése során a Budapesti Műszaki Egyetem (BME) és a Miskolci Egyetem (ME) oktatóival és kutatóival együttműködve közös kutatásokat és K+F tevékenységet folytassanak a lézeres gyorsítók megvalósítása területén. Az eddigi sikerek eredményeként, amelyeket a szuperhomogén rubídium-plazma előállítása és az abban fellépő sűrűség-fluktuációk diagnosztizálása alapozott meg, az MTA harmadszor is megítélte a projekt további anyagi támogatását.

A Wigner FK-ban található kutatóberendezések és mérőműszerek esetében nagy előrelépés volt, hogy 2014 végén a NEKIFUT Regiszter létrehozásakor 8 berendezés Stratégiai Kutatási Infrastruktúra (SKI) státuszt, 13 pedig a Regionális Kutatási Infrastruktúra (RKI) besorolást kapott. 2016-ban folytatták az ily módon kiemelt helyi infrastruktúrák tevékenységének, műszerezettségének modernizálását. A fő cél, hogy jól működő Nyitott Laboratóriumokká váljanak mind az SKI, mind az RKI státuszú berendezések, és hatékonyan illeszkedjenek bele a magyar infrastruktúra hálózatba.

A Wigner Fizikai Kutatóközpont éves beszámolója reményeik szerint bemutatja annak a megközelítésnek a sikerességét, amely során, amennyire az lehetséges volt, leválasztották a kutatási feladatokról a metodikai és logisztikai támogatást nyújtó tevékenységeket, s azokat specialistákkal, magas szakmai színvonalon, nagy hatékonysággal, kutatóközponti szinten végeztetik el. Ez a sikeresség támogatja a kutatóközponti átszervezés gondolatát és követhető gyakorlati példával szolgál.

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT
RÉSZECSKE ÉS MAGFIZIKAI INTÉZET

1121 Budapest Konkoly-Thege Miklós út 29-33.; 1525 Budapest Pf. 49.
telefon: (1) 392 2512; fax: (1) 392 2598
e-mail: titkarsag@wigner.mta.hu; honlap: http://wigner.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Részecske- és Magfizikai Intézet alapító okiratában rögzített feladatainak, valamint az MTA közfeladatainak ellátásából ráháruló teendőknek megfelelően eredményes kísérleti és elméleti felfedező kutatást végzett a részecskefizika, a magfizika, az általános relativitáselmélet és gravitáció, a fúziós plazmafizika, az űrfizika, a nukleáris anyagtudomány és a fizika biológiai alkalmazásai területén. Fejlesztési tevékenységének területei: lézerfizika, nukleáris analitika, fúziós plazmadiagnosztika, űrtechnika, nagy sebességű adatfeldolgozás, spektroszkópia, speciális igényeket kiszolgáló elektronikai, mechanikai és információ-technológiai eszközök előállítása, különböző operációs rendszerek alatt futó szoftverek létrehozása.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények
a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Elméleti fizika

Részecskefizikai és Térelméleti Kutatócsoport

A Térelméleti Kutatócsoport tagjai egy általánosító struktúra, az ún. *Gyenge szorzó bialgebra* axiómáit fogalmazták meg tetszőleges fonott monoidális kategóriában és igazolták, hogy az ilyen algebraik rendelkeznek az alkalmazások szempontjából fontos elvárt tulajdonságokkal. A csoport numerikus számításokkal megmutatta, hogy a *Skyrme modell* dinamikai problémája – a potenciál módosításával – jól kezelhető, a klasszikus megoldások, az effektív modell kvantálásához szükséges oszcillációs frekvenciái mind numerikusan, mind a szoliton-perturbációszámítás segítségével származtathatók. Továbbá megvizsgálták a kétkomponensű Ginzburg-Landau elmélet vortexeit. A kapott eredmények nagy jelentőségűek lehetnek a *nagy nyomású folyékony szupravezető hidrogén* azon fázisátalakulásának közelében, ahol az elektronok mellett a protonok is szupravezetővé válnak. Megmutatták, hogy már az átalakulás feletti hőmérsékleten is eltér a fluxuscsovek viselkedése a szokásos I-es és II-es típusú szupravezetőkéttől, és stabil, sok fluxuskvantumot hordozó óriás vortexek alakulnak ki. Emellett a csoport tanulmányozta az excentrikus kompakt kettősök általános és gravitációs sugárzás által okozott disszipatív mozgását a vezetőrendű spin-pálya kölcsönhatás figyelembevételével. Meghatározták a mozgás pályaelemeit az ún. spin mellékfeltételek (SSC) függvényében. Bebizonyították, hogy a gravitációs hullámok okozta pillanatnyi energia- és pálya-impulzusmomentum-veszteségek függenek az SSC-től, ám az egy keringési pályára vett átlagolásával az SSC-függés eltűnik.

Gravitációfizikai Kutatócsoport

2016. február 11-én bejelentette a LIGO/VIRGO Együttműködés, hogy a LIGO detektorokkal sikerült megfigyelni egy olyan gravitációs hullám jelet (GW150914), amely két feketelyuk összeolvadása során keletkezett és közvetlen kísérleti oldalról bizonyította a gravitációs

hullámok létezését, detektálhatóságát. Ezt a megfigyelést később megerősítette egy második jel (GW151226) detektálása is. Így kísérletileg is igazolódott Einstein 100 évvel ezelőtt tett elméleti jóslata, miszerint nagy tömegű csillagászati objektumok képesek gravitációs hullámok kibocsátására egymással való kölcsönhatásuk során, ebben az esetben összeolvadásuk során. Továbbá ezek a fontos kísérleti eredmények kitolták a detektált fekete lyukak tömegének határát a 60 Nap-tömegnyi tartományba. Az RMI Gravitációs Kutatócsoportjának 3 kutatója vett részt azokban az adatanalízisekben, amelyek elvezettek a fontos felismerésekhez. Ezért 2016-ban a LIGO/VIRGO Együttműködés többi tagjával együtt mindhárman elnyerték a „Special Breakthrough Prize in Fundamental Physics” elismerést, valamint a „Gruber Cosmology Prize” díjat. A csoport tagjai folytatták a gravitációs hullámokra vonatkozó adatok elemzését a PyCBC programmal, ehhez 2 millió CPU-óra gépidőt kaptak a Wigner Felhőn.

Lichnerowicz és York alapvető fontosságú felismerései alapján lényegében hetvenkét év óta az Einstein-elmélet kényszereire úgy tekintenek, mint egy szemilineáris elliptikus parciális differenciálegyenlet-rendszerre. Az összes jelenleg használt megoldási módszer erre a rendszerre épül, amelyre mint a konformis módszerre is szokás hivatkozni. A *Class. Quantum Grav.* 33, 015014 (2016) munkában egy új alternatív módszert javasoltak, mely lehetővé teszi azt, hogy a kényszereket, mint evolúciós egyenleteket kezelhessék. Konkrétan, a kényszeregyenletekre vagy mint egy parabolikus-hiperbolikus rendszerre, vagy pedig mint egy erősen hiperbolikus rendszer és egy algebrai egyenlet együttesére tekinthetnek. Ezen egyenletek egyértelmű megoldásainak lokális (több esetben globális) létezése garantált, így a kényszerek megoldására a javasolt új módszer radikálisan új lehetőségeket teremt.

MTA Lendület Holografikus Kvantumtérelmélet Kutatócsoport

A maximálisan szuperszimmetrikus négydimenziós mértékelméletben a gluonok szórási amplitúdói megegyeznek a fényzerű Wilson hurkok vákuum várható értékeivel. A holografikus dualitás következményeként ezen vákuum várható értékeket ki lehet számolni úgy, hogy a hurkok fölé kifeszülő (anti-de Sitter térbe beágyazott) minimális felület nagyságát határozzuk meg. Ezen minimális felületek nagyságára aztán olyan termodinamikai Bethe Ansatz (TBA) egyenleteket lehet származtatni, melyek egy kétdimenziós, több tömegparamétert tartalmazó integrálható kvantumtérelmélet alapállapotú energiájának felelnek meg. A TBA egyenletek analitikus kifejtéséhez azonban ismerni kell az integrálható modellben a tömegek és a Lagrange-i csatolások kapcsolatát. Egy japán csoporttal együttműködve jelentős eredményeket értek el ebben a kutatási irányban. Sikerült egzaktnak meghatározniuk a legegyszerűbb, két független tömegparamétert tartalmazó integrálható modell csatolás-tömeg relációját.

Nehézion-fizikai Kutatócsoport

Az erősen kölcsönható anyag tulajdonságai nehézion ütközésekben, valamint extrém állapotú égi objektumok viselkedésén keresztül vizsgálhatóak. Így kapcsolódik össze a CERN Nagy Hadronütköztető ALICE kísérlete, az épülő GSI/FAIR gyorsító CBM kísérlete, az Extreme Light Infrastructure (ELI) mellé tervezett párkeltési kísérlet a már futó NewCompStar MP1304 és a 2016-ban indult THOR CA15213 COST programok keretében folytatott elméleti kutatásokkal. Az erősen korrelált rendszerek esetében a hidrodinamikai leírás jól működik, így sikeresen írja le a táguló kvark-gluon plazma időfejlődését. De az nem érthető pontosan, miért viselkedik az egyébként plazma-szerű rendszer ideális folyadékként. Egy effektív térelméleti leírással kapcsolatot teremtettek a mikroszkopikus állapotsűrűség és a lineáris válaszelméletből származtatott transzportegyütthatók között. Egy skalárcsatorna

esetében meghatározták az ún. folyékonysági mértéket (η/s). Kiderült, hogy minél jobban csökken a kvázi-részecskeszerű, hosszú élettartamú gerjesztések szerepe, az anyag annál inkább folyékonyabb lesz. A sok-részecske állapotok (pl. szórási állapotok) járuléka erősíti a folyadék-szerű viselkedést, s ez az effektus fontos lehet a kvark-gluon plazma állapot tulajdonságainak megértésében.

A nehézion-ütközések fenomenologikus leírására alkalmas HIJING részecskefizikai Monte Carlo generátor kód LHC energián való alkalmazása megkövetelte a programcsomag modernizálását. A 2016-ban zárult Kínai–Magyar TÉT pályázat keretében a kínai kollégákkal együtt megtörtént a kód átírása FORTRAN nyelvről C++ programozási nyelvre, s ez nagymértékben felgyorsította a használatot, mivel így már multi-core környezetben is használható lett az MC generátor. Új fizikai jelenségek is beillesztésre kerültek, s így már jóslatokat lehetett kapni a proton-ólom ütközésekben LHC energián keletkező hadronok spektrumára.

Az alacsony hőmérsékletű erősen kölcsönható anyag tulajdonságainak vizsgálatára alkalmas királis kvantumszindinamikai (QCD) modell segítségével nemcsak a neutroncsillagok anyagának állapotegyenletét vizsgálták, hanem egy effektív Lagrange függvény bevezetésével leírták a pion-nukleon ütközésben történő elektron-positron pár keltés szögeloszlását is. Az elért eredmények segítségével elméleti becslések adhatóak a HADES (GSI, Darmstadt) kísérletnél meghatározott anizotrópia együtthatóra. Párhuzamosan a transzport modellben kiszámolták a dilepton-keltést egészen 10 AGeV energiájú nehézion ütközésekre.

Megkezdődtek az ALICE TPC és ALICE O2 fejlesztések. A TPC esetében a kialakításra került új tiszta térben felállították az optikai és erősítési szkennelő berendezéseket és elvégezték az első TPC GEM tesztfoliák minőségellenőrzését. Az O2 projekthez kapcsolódóan felújították az ALICE DAQ csoport eszközparkját az új fejlesztések végrehajtásához.

Femtoszkópiai Kutatócsoport

A hidrodinamikai egyenletek egzakt megoldásai a legbonyolultabb matematikai problémák közé tartoznak. 2016 során két fontos cikket is publikáltak ebben a témában, a forgó és táguló tűzgömb hidrodinamika nem-relativisztikus és parametrikus egzakt megoldásait mind a kéttengelyű (szferoidális) és a háromtengelyű (forgásszimmetria nélküli, ellipszoidális) tűzgömbökre. Megoldásaik a realisztikus, rács-QCD állapotegyenletet használják a táguló anyag jellemzésére, és analitikus kifejezések segítségével adják meg a hadronok végállapotbeli spektrumait, annak azimutális Fourier együtthatóit és Bose-Einstein korrelációit. Felfedezték, hogy a térbeli, az impulzustérbeli és a kétrészecske relatív impulzusának terében mérhető elfordulási szögek a forgó megoldások esetén eltérnek egymástól. Megmutatták, hogy ezek az elfordulási szögek hogyan mérhetőek meg, és hogy miért fontos a meghatározásuk a QCD kritikus pont keresése szempontjából.

Elméleti Idegtudomány és Komplex Rendszerek Kutatócsoport

Közreműködtek egy optikai alapú, statisztikai tanulórendszerrel támogatott ipari hibafelismerő berendezés kifejlesztésében. A fejlesztés célja egy olyan mobil berendezés létrehozása volt, amely könnyen áthelyezhető a terméksor bármely szakaszára és a működéséhez szükséges információkat automatikusan meghatározza: a vizsgálandó objektum, előtér, háttér ill. többféle objektum esetén külön modellek kialakítása. A rendszer képes a képméret 2%-át meghaladó látható eltérések detektálására az automatikusan megtanult statisztikai modellek alapján.

MTA Lendület Komputációs Rendszerszintű Idegtudományi Kutatócsoport

A vizuális válaszok általunk korábban kidolgozott hierarchikus modelljének fontos jóslata, hogy a stimulus-ismétlések nyomán az idegsejtek között mért korrelációk függenek a stimulus-tartalmától az elsődleges vizuális kéregben (V1). Ezen stimulus-függés egy része feltételezéseik szerint olyan területeken megjelenő aktivitásra vezethető vissza, ami a magasabb-szintű érzékelést segíti. Ezen feltételezés kritikus következménye az, hogy az idegsejtek közötti korrelációk stimulus-függése akkor jelenik meg, mikor komplex, magasabbrendű statisztikával jellemezhető stimulust használunk, ám a stimulus-függés megszűnik, mielőtt a magasabb rendű struktúra hiányzik a képekből. Kísérleteket terveztek annak ellenőrzésére, hogy azok a vizuális stimulusok, amelyek magasabb szintű érzékletet keltenek, specifikusabb korrelációs mintázatokat váltanak-e ki, mint azok a stimulusok, amelyek független képelemeket tartalmaznak. Figyelmi feladatot végző makákók V1-éből vezettek el neurális válaszokat a frankfurti Ernst Strüngmann intézetben. A mérési eredmények megerősítették a modell jóslatait. Megvizsgálták, milyen típusú vizuális struktúra szükséges ahhoz, hogy hasonlóan specifikus eredményt kapjunk fotorealisztikus információ nélkül. Eredményeik megerősítették azt a korábbi felfedezést, hogy a másodlagos vizuális kéreg részt vesz a textúrák reprezentációjában.

Nemzeti Agykutatási Program (NAP) Neurális Aktivitás-Mintázat Elemző Kutatócsoport

A csoport 2015 márciusában kezdte meg 2017 végéig tartó működését a NAP 125 MFT-s támogatásával a Wigner FK, RMI Elméleti Osztály keretei között szoros együttműködésben a két másik idegtudományi csoporttal. A csoport további fontos együttműködő partnere az MTA KOKI. A kutatócsoportban a Wigner FK, KOKI és a BME kutatóinak együttes szakértelmére támaszkodva, a hippokampális aktivitás-mintázatok vizsgálata során eddig szerzett tapasztalatok alapján a statisztika, gépi tanulás, illetve elméleti idegtudomány eszközeit kombinálva dolgozott ki új analízis eszközöket. Ezek alkalmasak a populációs aktivitás-dinamika finomszerkezetének feltárására, amellyel nyomon lehet követni a hálózatban zajló jelfeldolgozást. Optogenetikai módszerekkel és képalkotó eljárásokkal *in vitro* és *in vivo* mért hippokampális serkentő sejtek nagy csoportjainak aktivitását különböző dinamikájú állapotok alatt vetik össze, így nyerve bepillantást ezek memória-folyamatokban betöltött szerepébe. A komoly számítási kapacitást igénylő adatfeldolgozást a Wigner FK Adatközpont segíti. A csoport által tervezett elemzésekhez a 2-foton adatok mind a mai napig nem állnak rendelkezésre, az eszköz nem megfelelő működése miatt. A csoport ezért egy spanyol (Instituto Cajal, Madrid), illetve egy amerikai (University of Washington) kutató adatain kezdte meg az V1 és hippokampális populációk dinamikájának elemzését.

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion-fizika

Hadronfizika Kutatócsoport

Megfigyelték a proton-proton és centrális Pb-Pb ütközésekben keltett Z-jet párok jellemzőit, 5,02 TeV nukleonpáronkénti tömegközépponti energián. A Z-bozonok és jetek közötti szögkorrelációk és a merőleges impulzusok kiegyensúlyozatlansága, azok mértéke megfelel a jetek elnyomása alapján várt értékeknek. Megmérték az 5,02 TeV nukleonpáronkénti tömegközépponti energián proton-proton és Pb-Pb ütközésekben keltett töltött részecskék impulzus-eloszlásait. Centrális Pb-Pb ütközésekben a részecskék eloszlása a megfelelően skálázott proton-proton eloszlásokhoz képest 7–8-szorosan elnyomódik a 6–9 GeV-es tartományban. A minimumot egy fokozatos emelkedés követi, amely egészen a legnagyobb mért impulzusig kitart. Tanulmányozták a töltött pionok, kaonok és (anti)protonok keltését p-

Pb ütközésekben, szintén 5,02 TeV-es energián. Közepes merőleges impulzusnál a proton/pion arány a részecskeszámmal növekszik, míg hasonló effektus a kaon/pion arányban nincs jelen. A növekedés alakja hasonló a pp és nehézion-ütközésekben tapasztaltakhoz. Az (anti)protonok nukleáris módosulási tényezője egy Cronin-szerű kiemelkedést mutat, de hasonló módosulás a pionoknál vagy a kaonoknál nem látható.

MTA Lendület Innovatív Detektorfejlesztő Kutatócsoport

A kutatócsoport mind detektorfizikai (azaz a nagyenergiás mérés technika alapelveit érintő), mind pedig alkalmazásorientált kutatásokat folytat. Az előbbit tekintve, sikerült megmérniük az egyetlen elektron által indított lavinák eloszlását GEM fóliáknál, és számszerűsíteni a várt exponenciális eloszlástól való eltérést. Alkalmazások területén kiemelendő az előző évek fejlesztéseit magába foglaló "Müográfiai Megfigyelő Rendszer" (MOS) létrehozása, ami japán-magyar mintaoltalmat kapott Japánban. A MOS eszköz a vulkánok belsejében folyó folyamatok vizsgálatára, megjelenítésére alkalmas (pl. a forró magma kitörés előtti mozgása). Egy új képalkotási módszer is kifejlesztésre került, amely a kozmikus részecskék (műonok, elektronok) másodlagos gamma-emissziójával tud alacsony rendszámú anyagokat mérni.

Standard Modell és Új Fizika Keresése Kutatócsoport

A csoport tagjai részt vettek a CERN-ben az antiprotonokat használó ASACUSA kísérletben, amelyben áttörést sikerült elérni a CPT invariancia tesztelésében: egy új hűtési rendszer segítségével megmutatták, hogy a protonok és anti-protonok közötti relatív tömegkülönbség nagyságrendje kisebb, mint 10^{-9} .

Végrehajtották a szimulációs számolásokat olyan szuperszimmetrikus folyamatokban, amelyekben top kvarkok erősen „boost”-olt állapotban keletkeznek. Kidolgozták a vonatkozó háttérbecslési módszereket és demonstrálták azok hatásait. A 2016-os adatgyűjtés során egy új kalibrációval javították a CMS pixel detektorának felbontását. Megállapították a detektor hatásfokát nagy esemény-átlapolások esetén, amely fontos meghatározója a CMS minden analíziséhez használt luminozitmérésnek. Részt vettek a felújított, 2017-ben beszerelésre kerülő Phase-I pixel detektorhoz tartozó installációs üreg helyzetének meghatározásában a nyomkövető detektorban mérhető nukleáris kölcsönhatások sűrűségének megállapításával. A csoport legyártotta a felújított pixel detektor vezérlő- és kiolvasó elektronikáját a 2015-ben kidolgozott terveik szerint. Meghatározó szerepet játszottak a Phase-I pixel detektor adatgyűjtő rendszerének tesztelésében, és az új rekonstrukciós szoftver kifejlesztésében. Az FCC szeptem mágnese projekt keretében az első két szupravezető pajzs prototípusa megtervezésre került az általuk végzett részletes szimuláció alapján.

Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel

MTA Lendület Femtoszekundumos spektroszkópia és Röntgenspektroszkópia Kutatócsoport

Hatékony molekuláris kapcsolók és fényhasznosító rendszerek kifejlesztésének fontos jelöltjei a fényvel aktiválható átmenetifém-tartalmú funkcionális molekulák. Az ezekkel a molekulákkal megvalósítható spinállapot-kapcsolás jelenségét vizsgálták a stanfordi LCLS (*Linac Coherent Light Source*) szabadelektron-röntgenlézernél. A femtoszekundumos röntgenszondával világosan el tudták különíteni a fényvel kiváltott elektronszerkezeti és molekulaserkezeti változások időskáláját, a gerjesztett állapot potenciálgödrében történő rezgési relaxációs folyamatokat, és az energiaátadást a molekula közvetlen molekuláris környezetének. Kvantumdinamikai számításokkal föltárták egy anomálishan viselkedő Fe(II) molekula szerkezeti dinamikáját, amelynek szingulett alapállapotát fényvel gerjesztve a

rendszer nem jut el a kvintett állapotba az analógjainál megszokott módon, hanem a gerjesztett elektron a ligandumokon lokalizálódik viszonylag sokáig, ezért e komplex hatékony kromofórként használható fényhasznosító rendszerekben. Laboratóriumi Hámos-féle röntgenspektrométert építettek az elektron- és lokális szerkezet abszorpció finomszerkezetéből történő meghatározásához rutinmérésekben, amellyel kiválthatók eddig csak szinkrotronoknál elvégezhető mérések.

Funkcionális Nanostruktúrák Kutatócsoport

A Fe/V ferromágneses/nem mágneses fémrétegszerkezet széles hőmérséklettartományban érdekes mágneses tulajdonságokat mutat. Különösen figyelemreméltó a határfelület közelében tapasztalt indukált mágnesezettség. A szerkezeti és mágneses tulajdonságok finomhangolásának céljából a Fe-réteg párolgatása közben a Fe/FeV kettősréteg ill. többréteg rendszereket egyidejűleg Ar-ionokkal bombázták. Míg a Fe/FeV kettősréteg mágnesezettsége a vizsgált széles hőmérséklettartományban a várakozásnak megfelelőnek bizonyult, addig a Fe/Fe-oxide/Fe/FeV multirétegben az antiferromágneses Fe-oxid rétegnek köszönhetően alacsony hőmérsékleten jelentősen megnövekedett a koercitív erő és a kicserélődési eltolódás. Polarizált neutron-reflektometria méréseikből meghatározták az ionbesugárzás következtében összekeveredett határfelülethez tartozó koncentráció rétegprofilokat.

A határfelület érdekességét és annak változását tanulmányozták egyenáramú porlasztással készült különböző Fe/Ti multiréteg-szerkezetekben, offspekuláris neutronreflektometria alkalmazásával. A neutron szupertükrök a neutron optika fontos elemei. Több száz olyan kettősrétegből állnak, amelyek vastagsága a hordozótól távolodva lassan változik. A vizsgált Ni(Mo)-Ti aperiodikus szupertükrök-szerkezetekben a neutronok rezonáns diffúz szórását (RDS) tapasztalták. A csúcsok és platók elhelyezkedése alapján kísérletileg igazolták az érdekesség hosszútávú ismétlődését. A hagyományos és fordított rétegszerkezetű szupertükrökben eltérő diffúz neutron szórást elméletileg és – a perturbált hullám Born közelítést alkalmazva – numerikusan részleteiben is sikerült megmagyarázniuk.

Ionnyaláb-fizikai Kutatócsoport

A Řež-i Magfizikai Intézettel (Cseh Köztársaság) és az Atomkival együttműködve mikrolencsákat terveztek és készítettek 30 μm -es PDMS (polydimethylsiloxane) vékonyrétegekben. A mikrolencsék 10,5 MeV-es N^{4+} fókuszált ionnyalábbal készültek. Az ionnyalábbal 15, 25 és 75 μm belső átmérőjű gyűrűket sugároztak be nagyon alacsony, 7.8×10^{11} és 4.68×10^{13} ion/ cm^2 közötti fluenciával. A PDMS rugalmassága miatt a besugárzott gyűrű kompaktálódása a körbezárt korong nem egyenletes duzzadását okozta, és egy gömbszerű tárgy, mikrolencse jött létre. Amint azt az atomerő mikroszkópia (AFM) képei mutatták, az alacsony és mérsékelt fluenssel besugárzott lencsék profilja szférikus volt, a legnagyobb fluensek pedig lapos tetejű profilokat eredményeztek. A mikroszkóppal meghatározott fókuszolt intenzitáseloszlása közel diffrakciólimitált volt.

Az alkáli-szilikát üvegek összetétele gyakorlatilag nem változott az ókortól napjainkig, a fő összetevői szilícium-dioxid (kvarc), folyósító adalékok – szóda vagy növényi hamu és stabilizátorok (kalcium-karbonát). Az ókori üvegművesek széles körű tapasztalati ismeretekre tettek szert az üvegek színezése, valamint az átlátszóság és az opacitás létrehozásához szükséges eljárások területén. A gyártás során kis mennyiségben hozzáadott ásványi anyagokkal módosították az üveg színét és más optikai tulajdonságait. A festékanyagok és az optikai tulajdonságokat hangoló adalékok nyomelemeként analizálhatók az üvegtárgyakban, elemzésük alkalmas lehet a gyártási recept meghatározására, valamint segíthet az üveg-készítő műhely azonosításában is. Az IPERION CH HORIZONT 2020 project keretében

megvalósított kutatások során kihozott nyalábos milli-PIXE eljárással analizálták a 10-12. századra datált festett bizánci karkötők és késő középkori (17-18. századok) üvegtárgyak fő és nyomelem összetételét. A vizsgálat kimutatta az üvegekészítő eljárások folytonosságát a 10-18. század folyamán, valamint azonosította az alkalmazott színezékeket és az opacitás létrehozásához használt adalékokat.

Plazmafizika és hűtött atomok fizikája

Hideg Plazma és Atomi Fizika Erős Lézer Térben Kutatócsoport

A csoport az AWAKE Együttműködés társult tagjává vált, amelynek a célja a töltött részecske gyorsítás egy új módszerének a kidolgozása. Ezzel a módszerrel lényegesen kisebb méretben és sokkal olcsóbban lehet a részecskéket gyorsítani, mint a hagyományos RF gyorsítóknál. Ez az új, plazmában működő gyorsító jelenleg építés alatt áll a CERN-ben, és a Nagy Hadron Ütköztetőben (LHC) előállított proton csomaggal fogja gyorsítani az elektronokat (illetve pozitronokat) TeV energiára egyetlen gyorsító fokozatban. Ennek a gyorsítási módszernek egy elengedhetetlenül fontos része egy kiterjedt méretű, extrém homogén plazma létrehozása. Ezt a plazmát fogják használni arra, hogy az LHC-ben előállított proton csomagot felhasítsa mikro-csomagokra az önmodulált instabilitás segítségével, amelyekkel az elektronok koherens ébredő-tér általi gyorsítását lehet megvalósítani.

Az MTA-tól az EXMET Kiválósági program 2. és 3. fázisának a keretében elnyert pénzügyi támogatás segítségével továbbfejlesztették a kísérleti berendezésüket, és sikeresen előállítottak egy kiterjedt méretű homogén plazma oszlopot rubídium gőz ionizációjával. A Rb plazma valós idejű diagnosztizálására kifejlesztettek egy interferometrikus módszert. Az előállított plazma sűrűségét és rekombinációjának időbeli lefutását lehet mérni ezzel a módszerrel, a semleges Rb gőz különböző kezdeti sűrűségű eseteiben.

Ezzel az interferometrikus módszerrel és a plazma oszlopra merőleges irányban végzett abszorpciós spektroszkópiával feltárták a Rb plazma keletkezésének folyamatát, időbeli és térbeli viselkedését. A lézer plazma előállítására kifejlesztett kísérleti berendezésük a CERN-ben, az AWAKE programban használt lézer plazma forrás „asztali méretű” változatának tekinthető, melynek segítségével lehetséges az előállított lézer plazma valós idejű diagnosztikája.

Lézerplazma Kutatócsoport

A Max Planck Institute of Quantum Optics intézetben végzett kollaborációs kísérletben az 5 fs / 80 mJ lézerrel sikerült szilárdtestek felületén magas harmonikusokat kelteni 100 eV fotonenergiáig. A kétciklusúnál is rövidebb lézerimpulzus párhuzamos monitorozásával sikerült bizonyítékot találni arra, hogy a harmonikusok spektruma a lézerimpulzus hordozóburkoló fázisának véletlenszerű változásával a fázis függvényében eltolódik. Elkészült egy új vákuumkamra, amelyben a Szegedi Egyetemen az ott felújított KrF lézerrel végeznek lézeres iongyorsítós kísérleteket. Első lépésként nemesgáz klaszterek ionizálása után fellépő Coulomb-robbanásban felgyorsított ionokat sikerült detektálniuk több keV energiáig.

ITER és Fúziós Diagnosztikai Fejlesztések Kutatócsoportja

Az ITER teljes kisugárzott teljesítményének eloszlását mérő bolométer kamerák kifejlesztését célzó projektben a csoport fő eredménye a vákuumkamra falán, a köpenyelemek mögött elhelyezett kamerák kapcsolt hőtani-mechanikai és elektromágneses analízisének elvégzése,

aminek következtében a kamerák 3D CAD modelljei véglegesíthetőek. Az ITER diagnosztikai rendszereinek kiszolgálását végző elektromos-elektronikus infrastruktúra kifejlesztéséért felelős projektben a csoport sikeresen tervezett meg több lehetséges alternatív alkatrészt, amelyekkel a jelátvivő kábelek a vákuumkamra falához rögzíthetőek. A tervek birtokában gyártási rajzokat készítettek és a prototípusokat gyártották. Szintén a csoport eredménye, hogy megtervezték és felépítették azt a kísérleti elrendezést, amellyel a kábelek elektromos, mechanikai és vákuumszempon tú kvalifikációját el lehet végezni.

Nyalábemissziós Spektroszkópia Kutatócsoport

A BES csoport a Joint European Torus (JET) és az ASDEX Upgrade (AUG) tokamak berendezés lítium atomnyaláb szonda diagnosztikájának (JET Li-BES) működtetésében és fejlesztésében nagy részt vállalt magára. A 2011-2016 közötti időszakban számos fejlesztést hajtott végre mindkét diagnosztikán, bár a fejlesztések főleg a JET rendszerre fókuszáltak. A fejlesztések eredményeképpen mindkét diagnosztikával képesek mérni a határréteg plazma sűrűségfluktuációit százvezred másodperc időfelbontással, és a sűrűségeloszlásokat meghatározni ezred másodperces időskálán. Ezzel számos gyors jelenség vált megfigyelhetővé. Az M-mode a JET berendezésen, illetve az I-phase az AUG berendezésen ELM mentes H-mode üzemállapotok. Diagnosztikáikkal kimutatták, hogy a két jelenség nagyjából 1kHz frekvencián modulálja a plazma széli elektronsűrűséget, illetve a plazma és a fal közötti transzportot, továbbá, hogy a sűrűség profil dinamikája a két berendezésen nagyon hasonló. További tervük, hogy más berendezéseket is bevonnak a vizsgálatba, és még átfogóbb analízist végeznek a hasonló plazma üzemállapotban végrehajtott méréseken. Az összetartott tartományt elhagyó forró plazmaanyag energiáját a berendezés falának, illetve a divertoron lévő hőelnyelő lemezeknek adja le. Ezen szilárd anyagok különböző véges mértékű hőterhelést tudnak elviselni, ezért a leadott hő eloszlása a berendezés védelme szempontjából kulcskérdés. Ezt pedig a határréteg plazma transzportja írja elő, sűrűségeloszlásokat kialakítva a határréteg plazmában. A profilok alakja általában egy bizonyos sűrűség felett hirtelen megváltozik, egy úgynevezett váll jelenik meg az összetartott tartomány közelében, majd egyre kijjebb. A JET tokamakokon ezen átmenetet vizsgálták a lítium nyalábemissziós spektroszkópia mérőrendszerrel, és kapcsolatot találtak az átmenet létrejötté és a határréteg plazma turbulenciájának megváltozása között.

Pellet és Videódiagnosztika Kutatócsoport

A csoport kiváló eredményeket ért el az EDICAM videódiagnosztika rendszer üzemeltetése során – amelyet a megelőző évek során fejlesztettek ki és telepítettek – a németországi Wendelstein 7-X sztellarátor típusú fúziós kísérlet első, 3 hónapos kampányában: minden plazmakisülést sikeresen rögzítettek, beleértve az első hidrogén plazmát is, amelyet Angela Merkel német szövetségi kancellár személyesen indított el. Megfigyelőrendszerüket egy gyorskamerával bővítették, amelynek felvételein turbulens, filamentáris struktúrák figyelhetők meg a plazma teljes keresztmetszetében – szemben a tokamakokkal, amelyeknél ez a jelenség leginkább a külső oldalon észlelhető.

Űrfizika és űrtechnika

Űrfizikai Kutatócsoport

Kutatóik több, a 67P/Csurjumov-Grasimov üstökös indukált magnetoszférájával kapcsolatos fontos eredményhez járultak hozzá. Részt vettek az üstökös diamágneses üregének felfedezésében, majd kidolgoztak egy módszert, amellyel egy mágnese

szennyezett űrszonda esetén is megtalálhatók a diamágneses üreg átmetszések. Ezzel az új módszerrel több, mint száz diamágneses üreg átmetszési eseményt észleltek. Ezen események vizsgálata feltárta és meg is magyarázta az üreghatár átmetszését kísérő plazmajelenségeket. Kutatóik továbbá fontos összefüggéseket mutattak ki a kölcsönható plazmapopulációk szögeloszlásai között; hozzájárultak egy új típusú plazma határfelület felfedezéséhez; a szupratermális elektronok energia eloszlásának analíziséhez; valamint a mágneses erővonal felhalmozódás és a „tükör-módusú” hullámok tanulmányozásához az üstökös körül. Szintén vizsgáltak űridőjárás jelenségeket, és a bolygóközi mágneses fluxusnak a Nap forgásával összefüggő jelentős modulációját figyelték meg. Új eredményeket prezentáltak a Mars és a Vénusz ionizált környezetének a különböző napszél viszonyokra adott válaszárol. Azt is megmutatták, hogy a napszél ionjai csíra-populációként szolgálhatnak, mely ionok a későbbiekben nagy energiára gyorsítódnak. Az óriásbolygók környezetének megértéséhez való hozzájárulásuk a Szaturnusz mágneses lemezének közelében végzett mágneses- és plazmamérések komplex időfüggésének magyarázata, valamint az E-gyűrű részecskéinek pálya-evolúcióját leíró javított modell.

Űrtechnikai Kutatócsoport

Húsz éve indult az ESA Rosetta projektje, aminek a célja a Naprendszer keletkezésének kutatása. Ebben vettek részt a leszálló egység fedélzeti számítógépének fejlesztésével. A leszálló egység az üstökös felszínén történt 2014. november 12.-i landolása után részt vettek a misszió irányításában, az adatok feldolgozásában annak 2016. szeptember 29.-i befejezéséig. Az üstökösök a Naprendszer keletkezésének korai idejéből származnak, annak mintegy öt milliárd évvel ezelőtti állapotát őrizték meg. Az eredmények kiértékelése a Naprendszer keletkezésének kutatásához járul hozzá.

Rehabilitáció-technológiai Csoport

Az emberi mozgás szabályozásának kutatásához kinematikai és izomelektromos (electromyogram) méréseket végeztek karmozgásokról 24 ember esetén. Az ismételt végrehajtott mozgások varianciájának a külső ellenállástól és testhelyzettől való függését vizsgálták. A mozgások varianciáit a kéz pozíciójának, az ízületi hajlásszögváltozásoknak, és az izomaktivitásoknak a szintjén vizsgálták, az utóbbiakat több dimenziós, „természetes biológiai” terekben. Ez lehetővé teszi a mozgások stabilitásának leírását, a mozgásszabályozás jobb megértését és orvosi rehabilitációs módszerek kialakítását. Az alsóvégtagok mozgás-szabályozásában elért eredményeik alapján 2016-ban az Országos Orvosi Rehabilitációs Intézetben 10 gerincvelősérült, alsóvégtag bénult ember számára tették lehetővé, hogy a hiányzó idegi szabályozást, mesterséges funkcionális elektromos ingerléssel helyettesítve, terhelés ellenében kerékpározó mozgást végezzenek. A résztvevők fizikai teljesítményét, mozgási energiáit mérték és nyomon követték.

Összehasonlító méréseket végeztek vakok számára készült, braille bevitelű eszközök és módok hatékonyságáról. Autisták támogatott kommunikációját (két személy együttműködését) vizsgálták video felvételek segítségével. Újabb 40-50 felhasználó számára biztosították a TalkPad beszédpótló programjuk használatát. Négy rádióamatőr nyelvi szintű morze oktatását végezték el legalább 20 wpm sebességgel a korábbi vizsgálatok kiterjesztése céljából a HA5RST állomáson. Fejlesztették a vakos és a siket-vakos MOST (Mobil Segítőárs) programjaikat a folyamatosan változó operációs rendszerek adta kihívások miatt.

b) Tudomány és társadalom

Kutatók társadalmi tevékenysége

Elméleti fizika

Gravitációfizikai Kutatócsoport

A gravitációs hullámok első közvetlen megfigyelése 2016 februárjában, 100 évvel Einstein eredeti jóslatát követően, fokozott érdeklődést váltott ki mind a kutatók, mind pedig a szélesebb nagyközönség körében. A VIRGO kutatócsoport tagjai maguk is részt vettek a gravitációs hullámok kimutatásához vezető adatok elemzésében, így részletesen ismerték a felfedezés körülményeit, a kutatási feladat nehézségeit. Az év során tucatnyi meghívásnak tettek eleget és a csoport tagjai több tudományos és népszerűsítő előadásban, valamint rádióinterjúkban mutatták be a kutatási területet, a gravitációs hullámok felfedezését és az elért eredmények hosszú távú következményeit.

Nehézion-fizikai Kutatócsoport

A kutatócsoport elméleti munkája során kidolgozott matematikai eljárások lehetővé teszik nem-egyensúlyi, véges rendszerek pontosabb fizikai jellemzését. A nehézion-fizikai kutatások során publikált nem-extendív termodinamikai és statisztikai módszerek jelfeldolgozási és hálózatelméleti kérdések megoldásában nyújthatnak segítséget, pl. elősegítheti jobb felbontású egészségügyi-diagnosztikai szoftverek, illetve gyorsabb IT-hálózatok megépítését. A nagyenergiás mag- és részecskefizikai kísérleti kutatások eközben magas szintű technológiai kihívások elé állítják az ipari partnereket és a mérnököket. A kutatócsoportban folyó munkához a CERN LHC ALICE, a GSI/FAIR, és az IMP Lanzhou kísérleti berendezésekhez kapcsolódó K+F tevékenységek tartoznak. Az Innovatív Gázdetektorok Lendület Kutatócsoporttal együttműködve az ALICE TPC fejlesztése során újfajta töltött részecske-detektorok fejlesztése zajlik. Az ALICE detektor nagy sebességű adatgyűjtő és adatfeldolgozó (DAQ) rendszerének tervezése során születő megoldások a jövő gyors távközlési rendszereiben jelenhetnek meg.

Femtoszkópiái Kutatócsoport

Megszervezték a [Berze Gimnázium Természettudományi Önképzőkörének 9. nyári táborát](#) (Visznek, 2016. július 4-8.), ahol 30 tudományos és ismeretterjesztő előadás hangzott el, közülük 7 előadást Wigner kutatók tartottak. Megszervezték a Modern Fizika Napját ([Day of Modern Physics](#), KRF, Gyöngyös, 2016. március 31.), a 2. Femtoszkópiái Napot ([Day of Femtoscopy](#), Eszterházy Károly Egyetem, Gyöngyös, 2016. november 4.) és a [16. Zimányi Nehézionfizikai Téli Iskolát](#) (Wigner+ELTE, Budapest). Részt vettek a 2016-os CERN@Wigner Nyílt Napon és a Kutatók Éjszakáján Gyöngyösön, az Eszterházy Károly Egyetemen. Népszerű tudományos ismeretterjesztő előadásokat tartottak Gyöngyösön, Nyíregyházán, Egerben és Budapesten, összesen 10 alkalommal.

Elméleti Idegtudomány és Komplex Rendszerek Kutatócsoport

Az agyi információ-feldolgozással, valamint új típusú elektróda rendszerekkel kapcsolatos új eredményeik új típusú agy-számítógép kapcsolat létrehozását tehetik lehetővé. Az idegrendszeri valamint egyéb betegségek, mint például az ebola dinamikájáról szerzett új ismereteik hatékonyabb terápiák kidolgozását segíthetik. Az intelligens hibadetektáló rendszerek ipari alkalmazásával magasabb megbízhatóság és minőség érhető el az autóiipari gyártás során.

MTA Lendület Komputációs Rendszerszintű Idegtudományi Kutatócsoport

Az egyik legrangosabb idegtudományi folyóiratban, a Neuronban publikált tanulmányuk nyomán számos média megjelenésük volt az írott sajtóban (MTA honlapján publikált riport, National Geographic Magyarország, MNO, Origo), rádióban (Szertár podcast, Info Rádió) és mozgóképes médiában (MTVA).

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion-fizika

Hadronfizika Kutatócsoport

A kutatócsoport tagjai nagy hangsúlyt fektetnek arra, hogy megismertessék az érdeklődő középiskolás diákokkal a tudományos kutatás szépségét, a kutatói életpálya elemeit. Rendszeresen fogadnak látogató csoportokat, tartanak népszerűsítő előadásokat. Bevonják a középiskolás fizika tanárokat is, segítve továbbképzésüket, emelve felkészültségüket. 2016 márciusában is megszervezésre került a Részecskefizikai Diákműhely, megismételt extra nappal, megduplázva így a résztvevők számát. Szeptember közepén a Wigner Adatközponttal együttműködve megszervezték a CERN@WIGNER nyílt hétvégét, amelyen kb. 500 vendéggel ismertették meg a CERN-ben folyó kutatómunkát. Egész évben üzemelt a Sokszíni Fizika Busz, az így szervezett előadásokhoz folyamatosan biztosították az előadókat.

MTA Lendület Innovatív Detektorfejlesztő Kutatócsoport

A korábban említett MOS rendszer a vulkanológiai kutatások jelentős eszközévé válhat, óriási gazdasági hasznot hajtva. A japán együttműködő partnerrel (Tokiói Egyetem) együtt kifejlesztett előrejelző- és monitorozó rendszer alapja alkalmazható lesz más műion-radiográfiás mérésekben (barlangászat, régészet, építészeti struktúrák feltérképezése).

Standard Modell és Új Fizika Keresése Kutatócsoport

Megszervezték a CERN Magyar Tanárok programját augusztus 15-21 között 20 magyar fizikatanár részvételével. Ezt követte november 12-én egy szélesebb körű rendezvény, amely során a 2006. és 2016. között CERN továbbképzésen résztvevő 400 tanár közül 140-en jöttek el a Sapientia Szerzetesi Hittudományi Főiskolán rendezett találkozóra. A kutatók részt vettek az évente megrendezésre kerülő CERN Részecskefizikai Műhely lebonyolításában is.

Plazmafizika és hűtött atomok fizikája

Hideg Plazma és Atomi Fizika Erős Lézer Térben Kutatócsoport

Az újfajta kisméretű lézerplazmás részecskegyorsítók új területet nyitnak meg az orvosi diagnosztika és kezelés területén is, amelynek óriási gazdasági jelentősége lesz. A kutatócsoport folyamatosan figyelemmel kíséri kutatási eredményeinek gazdasági vonatkozásait. 2016-ban a kutatócsoport (és a Wigner FK RMI) csatlakozása a CERN AWAKE Együttműködéshez tovább erősíti a kutatócsoport lehetőségeit a későbbi gazdasági hasznosítás területén. A nemzetközi kapcsolatok megerősítésének egyik fontos lépése volt a Wigner-AWAKE értekezlet, melyet a Wigner FK-ban rendeztek 2016. április 8-án.

ITER és Fúziós Diagnosztikai Fejlesztések Kutatócsoportja

A világméretű együttműködésben épülő ITER fúziós reaktor megvalósulásához számos nemzetközi pályázaton keresztül kapcsolódik a csoport. Ezen pályázatok révén közvetlen hozzáférése van a csoportnak ahhoz a high-tech tudásbázishoz, ami a berendezés megépítéséhez nélkülözhetetlen. Munkatársaik és diákjaik segítségével olyan modern mérnöki

kultúra honosodik meg Magyarországon, ami alapja lesz későbbi fejlesztéseknek és az ipari hasznosulásnak. Pályázati forrásaik egy 12 főből álló mérnöki csoport foglalkoztatását teszik lehetővé, ilyen módon a kutatócsoport tevékenysége a foglalkoztatottsági mutatók javításához is hozzájárul.

Nyalábemissziós Spektroszkópia Kutatócsoport

A kutatócsoport fontos feladatának érzi a kutatási, fejlesztési eredmények kommunikációját a társadalom irányába. Számos ismeretterjesztő előadást tartottak kollégáik az ország középiskolaiban, valamint részt vettek a nagyobb nyári fesztiválok is a Nukleáris Sátor rendezvény keretei között a Magyar Nukleáris Társasággal együttműködve. Kivették részüket a Wigner rendezte nyilvános, ismeretterjesztő rendezvényeken is, úgy mint a Lányok Napján, vagy a Tudomány Ünnepe nyílt napján, valamint a Kutatók Éjszakája rendezvénysorozatán.

Pellet és Videódiagnosztika Kutatócsoport

A csoport jelentős energiát fektet a fúziós energiatermeléssel kapcsolatos kérdések nyilvános megvitatására, többek közt a nagy zenei fesztiválok (Sziget, VOLT, EFOTT) civil szervezetek számára fenntartott rendezvényein való részvétellel, valamint gimnáziumokban megrendezett ismeretterjesztő előadásokkal, amelynek az is célja, hogy a fiatalok számára bemutassa a tudományos karrierlehetőségeket.

Űrfizika és űrtechnika

Űrfizikai Kutatócsoport és Űrtechnikai Kutatócsoport

A csoport a jelenlegi és jövőbeli űrmissziókon az SGF Kft-vel, egy magyar űripari kisvállalkozással szoros együttműködésben dolgozik. Kutatóik aktívan részt vesznek az ismeretterjesztésben, több ismeretterjesztő előadást tartottak, és a médiában is népszerűsítették a tudományt. Az üstökös kutatásban szenzációs eredményeket elért Rosetta program meghatározó résztvevőjeként a kutatók sok ismeretterjesztő előadást tartottak.

Rehabilitáció-technológiai Csoport

A Magyar Rádió a Szigma című műsorában interjúkat sugárzott a kutatócsoport munkájáról. Az MTA honlapján fényképes riport jelent meg a kutatócsoportról. A Springer kiadó kiadásában megjelent „Progress in Motor Control - Theories and Translations” c. könyvet szerkesztette a kutatócsoport vezetője.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A Wigner FK Részecske és Magfizikai Intézet (RMI) kutatási és kutató-fejlesztő tevékenységének jelentős részét aktív hazai és nemzetközi együttműködések keretében végzi. Az RMI kutatói rendszeresen vállalnak oktatási feladatokat a legjelentősebb magyar egyetemeken (ELTE, BME, Óbudai Egyetem, SZTE, DE, ME, PTE, SzIE, Pannon Egyetem, Eszterházy Egyetem, UBB), részt vesznek a doktori iskolák tevékenységében, a kutatókkal és diákokkal együttműködve közös kutatási projekteket vállalnak föl és hajtanak végre, közös projekteken vesznek részt. A Pécsi Tudományegyetem és a Miskolci Egyetem fizikai intézeteivel még szorosabb az együttműködés az ott megalapított és kialakított Wigner FK Telephelyeknek köszönhetően.

Az RMI-s kutatók az MTA kutatóhálózat társintézményeivel is szoros együttműködést folytatnak. Hosszú múltra tekintenek vissza és nagyon gyümölcsözőek az MTA Atomki, az

MTA Rényi Intézet, valamint az MTA Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont (MTA CSFK), az MTA Energiatudományi Kutatóközpont (MTA EK) és az MTA Természettudományi Kutatóközpont (MTA TTK) tudományos intézeteivel folytatott tudományos együttműködések.

Az RMI kutatói számára kiemelkedő fontosságú a nemzetközi együttműködésekben való részvétel és a nemzetközi szervezetekben való tagság nyújtotta lehetőségek. Ezek mögött hosszútávú állami és intézményi kötelezettségvállalások állnak. Magyarország állami szinten vállalt tagországi státuszt és így kutatási kötelezettséget a CERN (Nukleáris Kutatások Európai Centruma, Genf), az EUROFUSION (Európai Fúziós Energia Kutató együttműködés), az ESS (Európai Spallációs Forrás, Lund), az ESRF (Európai Szinkrotron Forrás, Grenoble), az XFEL (Európai Szabadelektron Lézer Együttműködés, Hamburg) és az ESA (Európai Űrügynökség) szervezetekben. Az RMI kutatócsoportjaira támaszkodva biztosítja a magas szintű részvételt, a kutatók jelentős súlyú kutatási programokat valósítanak meg az együttműködések keretében.

Ilyen a CERN-ben az ALICE, CMS, TOTEM, valamint az RD51, az NA61/SHINE, az AWAKE és az FCC együttműködésekben található RMI-s jelenlét és aktivitás. A fúziós energia hasznosításának kutatása terén együttműködnek a Franciaországban épülő ITER, a koreai KSTAR, a kínai EAST, a német W7-X és ASDEX, valamint a brit JET körül folyó kísérleti munkában a mágneses bezárású plazmák lézeres illetve szupergyors-kamerás diagnosztika terén. Az ESA űrmissziói közül részt vesznek az üstökös-kutató ROSETTA, a bolygók és holdak mágneses terét tanulmányozó Venus Express, Bepi Colombo és JUICE missziókban, továbbá az űridőjárás megfigyelésében és modellezésében az ISEE szatellitok, a SOHO LION projektje, valamint az orosz OBSTANOVKA és ROY együttműködések tagjaként.

Intézményi szintű tagsággal vesznek emellett részt az EGO (Európai Gravitációs Observatórium) VIRGO detektoránál futó gravitációs hullám kutatásban, valamint 2016 végén megerősítették intézményi részvételüket a GSI FAIR (Nehéziongyorsító Társaság Antiproton és Ion Kutató Üzeme, Darmstadt) együttműködésben az építés alatt álló CBM detektornál. Ez utóbbi két esetben intézményi, főként in-kind jellegű beszállítással biztosítják a tagságot.

Ezeket az együttműködések kiegészítik az MTA, valamint az NKFIH kétoldalú TÉT együttműködései, valamint az NKFIH/OTKA által finanszírozott nemzetközi (NN) kutatási pályázatok. 2016-ban lengyel-magyar, japán-magyar, kínai-magyar és ukrán-magyar együttműködések futottak.

Folyamatosan formálódnak alkalmi és kisebb volumenű nemzetközi kapcsolatok az elméleti és kísérleti kutatások területén is. Rendezvényeik számos külföldi vendéget vonzanak, pl. a 2016-ban 16. alkalommal megrendezett Zimányi Téli Iskola.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az intézet alapkutatói tevékenységét rendszeresen támogatják a tematikus OTKA pályázatok. 2016 elején indult el a K116505 OTKA projekt „Integrálhatóság és a holografikus dualitás” címmel, amely az erős kölcsönhatás térelméleti aspektusait volt hivatott vizsgálni évi 5 M Ft támogatással. Továbbá 4 évre 46 M Ft-ot nyert el a K120660 projekt, amely a CERN-ben folyó elméleti és kísérleti nehézion-fizikai kutatásokat fogja össze, a címe: „Azonosított hadronok keletkezésének vizsgálata az LHC megnövelt luminozitású nehézion ütközéseiben az ALICE kísérlettel”. Ehhez járult egy, az idegtudomány területén nemzetközi

együttműködéssel végrehajtandó projekt támogatásának elnyerése (NN118902) „FLAG-ERA: A szenzoros integrációért felelős kanonikus kérgi hálózat vizsgálata” címmel, amely 3 éves futamidőre 34 MFt-ot kapott. A korábban elnyert 12 db futó tematikus és 1 db posztdoktori pályázatok támogatási összegével együtt így már évi 105 M Ft áll rendelkezésre OTKA alap kutatásokra.

Az NKFIH bilaterális Tét pályázatai szintén fontos támogatást nyújtanak a kutatási feladatok végrehajtásához. 2016-ban egy kis összegű magyar-ukrán pályázat indult, valamint az év végén egy új típusú, nagy összegű magyar-kínai Tét pályázatot sikerült elnyerni. Ez utóbbi egy kutatás-fejlesztés centrikus, megnövelt támogatási összegű projekt (TÉT_16_CN-1-2016-0008), amely a Wigner FK és a Lanzhou-i IMP intézet között lévő K+F együttműködést, valamint a 2016-ben Csillebércen létrehozott Magyar-Kínai Közös MAP (Modern Application for Physics) Laboratórium K+F tevékenységet finanszírozza majd 57 M Ft összeggel 3 évig.

A magyar-kínai Tét pályázat sikeréhez jelentős mértékben hozzájárult egy, az RMI kínai kapcsolatainak kiépítését és megerősítését lehetővé tevő 3 M Ft-os MTA mobilitási támogatás, amely a CAS-HAS közös laboratóriumok kiépítését támogatta. Ezek létrehozását az MTA és a Kínai Tudományos Akadémia együttműködési szerződése rögzítette.

Az MTA Kiválósági Együttműködési Programja keretében harmadszor is sikerült elnyerni az MTA támogatását, ami 50 M Ft-ot biztosít a 2016-17-es akadémiai évre a fény-anyag kölcsönhatás tanulmányozásának folytatására és a lézerplazma gyorsítók fejlesztésére (EXMET). A támogatás nagyobb részét az RMI és SZFI kutatócsoportjai használják fel, kisebb része a BME és az ME Fizikai Intézeteiben folyó közös kutatást és kutatás-fejlesztést támogatja.

Mindehhez hozzájárul az NKFIH Operatív programja keretében 2016-ban elnyert, de várhatóan csak 2017 közepétől induló GINOP 2-3-3-15-2016-00016 szerződésszámú „Mágneses nulltér laboratórium létrehozása” projekt, amelyben Nagycenken, az MTA CSFK Kutatóközponttal közösen egy speciális laboratóriumot építenek ürtechnikai és geofizikai kutatásokra.

2016-ban elindult a 632893 számú EU FI-Core FP7-2013-ICT-FI - „Future Internet Core Platform Extension, Availability and Sustainability” című projekt, melyet a korábbi FP7-es XIFI pályázat és annak egy éves meghosszabbításának sikeres teljesítése alapozott meg. A projekt során a jövő internetét támogató programokat fejlesztenek ki a résztvevők.

A HORIZON 2020 program keretében a technológia transzfert segítő ARIES pályázat került támogatásra, azonban a CERN-el közös végrehajtás várhatóan csak 2017-ben kezdődik el.

A benyújtott EU COST projektek közül az elméleti nagyenergiás magfizikai és asztrofizikai kutatásokat támogató THOR projekt nyert és a 2016-2020-as évekre jelentős támogatást kapott.

Az elméleti idegtudománnyal foglalkozó kollégák 2016-ban alvállalkozóként bekapcsolódtak az amerikai National Institute of Health (NIH) „Neural basis of tactile object perception in SI cortex” témájú konzorciális pályázatba, amely 2016-2019 között 64 800 \$ támogatást biztosít. A pályázat célja, hogy főemlősökben feltérképezzék a kéz és az ujjak tapintásban játszott szerepének neurobiológiai alapjait.

Ipari kapcsolat: Az Elméleti Osztály egyik munkatársa tanácsadóként részt vett az Opel Szentgotthárd Kft. vezette kutatás fejlesztési projekt keretében egy autonóm hibafelismerő rendszer kialakításában. Az így megszerzett tapasztalatokat és ipari kapcsolatokat az intézet jövőben igyekszik kamatoztatni.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Abbott BP, ..., Barta D, Debreczeni G, Vasuth M, et.al. (LIGO/VIRGO Coll.): Prospects for Observing and Localizing Gravitational-Wave Transients with Advanced LIGO and Advanced Virgo. Living. Rev. Rel., 19: Lrr-2016-1 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1007/lrr-2016-1>
2. Orbán G, Berkes P, Fiser J, and Lengyel M: Neural variability and sampling-based probabilistic representations in the visual cortex. Neuron, 92(2): 530 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.neuron.2016.09.038>
3. Hori M, Aghai-Khozani H, Sótér A, Barna D, Dax A, Hayano R, Kobayashi T, Murakami Y, Todoroki K, Yamada H, Horváth D, Venturelli L: Buffer gas cooling of antiprotonic helium to 1.5 to 1.7 K, and antiproton to electron mass ratio. Science, 354: 610 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1126/science.aaf6702>
4. Pápai M, Vankó G, Rozgonyi T, Penfold TJ: High-Efficiency Iron Photosensitizer Explained with Quantum Wavepacket Dynamics. Journal of Phys. Chem Lett., 7: 2009 (2016) <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcclett.6b00711>
5. Li XN, Yuan LH, Wang JH, Jiang LH, Rykov AI, Nagy DL, Bogdan Cs, Ahmed MA, Zhu KY, Sun GQ: A "copolymer-co-morphology" conception for shape-controlled synthesis of Prussian blue analogues and as-derived spinel oxides. Nanoscale, 8: 2333 (2016) <http://dx.doi.org/10.1039/C5NR07193C>
6. Bajnok Z, Balog J, K. Ito, Y. Satoh, Tóth GZ: Exact Mass-Coupling Relation for the Homogeneous Sine-Gordon Model. Phys. Rev. Lett., 116: 181601 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.181601>
7. Pradip R, Piekarz P, Bosak A, Merkel DG, Waller O, Seiler A, Chumakov AI, Ruffer R, Oleś AM, Parlinski K, Krisch M, Baumbach T, Stankov S: Lattice Dynamics of EuO: Evidence for Giant Spin-Phonon Coupling. Phys. Rev. Lett., 116: 185501 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.185501>
8. Seiler A, Piekarz P, Ibrahimkuty S, Merkel DG, Waller O, Pradip R, Chumakov AI, Ruffer R, Baumbach T, Parlinski K, Fiederle M, Stankov S: Anomalous Lattice Dynamics of EuSi₂ Nanoislands: Role of Interfaces Unveiled. Phys. Rev. Lett., 117: 276101 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.276101>
9. Biasin E, ..., Pápai M, Németh Z, Vankó G, Wärnmark K, Canton SE, Haldrup K: Femtosecond X-Ray Scattering Study of Ultrafast Photoinduced Structural Dynamics in Solvated Co(terpy)₂²⁺. Phys. Rev. Lett., 117: 013002 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.013002>
10. Abbott BP, ..., Barta D, Debreczeni G, Vasuth M, et.al.: (LIGO/VIRGO Coll.): Observation of gravitational waves from a binary black hole merger. Phys. Rev. Lett., 116: 061102 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.221101>
11. Abbott BP, ..., Barta D, Debreczeni G, Vasuth M, et.al. (LIGO/VIRGO Coll.): Tests of general relativity with GW150914. Phys. Rev. Lett., 116: 221101 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.221101>

12. Khachatryan V, ..., Hajdu Cs, Horvath D, Sikler F, Veszpremi V, Vesztergombi Gy, Zsigmond AJ (CMS Collab.): Measurement of long-range near-side two-particle angular correlations in pp collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV. Phys. Rev. Lett., 116: 032301 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.032301>
13. Adams J, ..., Barnaföldi GG, Bencédi Gy, Berényi D, Biro G, Boldizsár L, Hamar G, Kiss G, Lévai P, Lowe A, Olah L, Pochybova S, Varga D, Volpe G (ALICE Collab.): Anisotropic flow of charged particles in Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}}=5.02$ TeV. Phys. Rev. Lett., 116: 132302 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.132302>
14. Adams J, ..., Barnaföldi GG, Bencédi Gy, Berényi D, Biro G, Boldizsár L, Hamar G, Kiss G, Lévai P, Lowe A, Olah L, Pochybova S, Varga D, Volpe G (ALICE Collab.): Centrality dependence of the charged-particle multiplicity density at midrapidity in Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ TeV. Phys. Rev. Lett., 116: 222302 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.222302>
15. Adams J, ..., Barnaföldi GG, Bencédi Gy, Berényi D, Biro G, Boldizsár L, Hamar G, Kiss G, Lévai P, Lowe A, Olah L, Pochybova S, Varga D, Volpe G (ALICE Collab.): Correlated Event-by-Event Fluctuations of Flow Harmonics in Pb-Pb Collisions at $\sqrt{s_{NN}}=2.76$ TeV. Phys. Rev. Lett., 117: 182301 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.182301>
16. Bajnok Z, Balog J, Ito K, Satoh Y, Tóth GZ: On the mass-coupling relation of multi-scale quantum integrable models. J. High Energy Phys., 1606: 071 (2016) [http://dx.doi.org/10.1007/JHEP06\(2016\)071](http://dx.doi.org/10.1007/JHEP06(2016)071)
17. Abbott BP, ..., Barta D, Debreczeni G, Vasuth M, et.al. (LIGO/VIRGO Coll.): Astrophysical Implications of the Binary Black Hole Merger GW150914. Astrophys J. Lett., 818: L22 (2016) <http://dx.doi.org/10.3847/2041-8205/818/2/L22>
18. Nemeth Z, Burch J, Goetz C, Goldstein R, Henri, Koenders C, Madanian H, Mandt K, Mokashi P, Richter I, Timar A, Szego K; Charged particle signatures of the diamagnetic cavity of comet 67P/Churyumov–Gerasimenko. MNRAS, 462: S415 (2016) <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stw3028>
19. Antchey G, ..., Csörgő T, Csanád M, Nemes F, Sziklai J, (TOTEM Collab.): Measurement of elastic pp scattering at $\sqrt{s}=8$ TeV in the Coulomb–nuclearinterference region: determination of the ρ -parameter and the total cross-section, Eur. Phys. J., C76: 661 (2016) <http://dx.doi.org/10.1140/epjc/s10052-016-4399-8>
20. Forgács P, Lukács Á: Vortices with scalar condensates in two-component Ginzburg-Landau systems. Phys. Lett. B, 62: 271 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.physletb.2016.09.003>
21. Khachatryan V, ... Bencze G, Hajdu Cs, Hazi A, Hidas P, Horvath D, Sikler F, Veszpremi V, Vesztergombi Gy, Zsigmond AJ (CMS Collab.): Study of Z boson production in pPb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ TeV. Phys. Lett. B, 759: 36 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.physletb.2016.05.044>
22. Adams J, ..., Barnaföldi GG, Bencédi Gy, Berényi D, Biro G, Boldizsár L, Hamar G, Kiss G, Lévai P, Lowe A, Olah L, Pochybova S, Varga D, Volpe G (ALICE Collab.): Multiplicity dependence of charged pion, kaon, and (anti)proton production at large transverse momentum in p–Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ TeV. Phys. Lett. B, 760: 720 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.physletb.2016.07.050>

23. Fekete Z, Pálfi E, Márton G, Handbauer M, Bérces Zs, Ulbert I, Pongrácz A, Négyessy L: Combined in vivo recording of neural signals and iontophoretic injection of pathway tracers using a hollow silicon microelectrode. *Sensors and Actuators B-Chemical*, 236: 815 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2015.12.099>
24. Horváth M, Jakovác A: Shear viscosity over entropy density ratio with extended quasi-particles. *Phys. Rev. D*, 93: 056010 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.93.056010>
25. Olbrich L, Zétényi M, Giacosa F, Rischke DH: Three-flavor chiral effective model with four baryonic multiplets within the mirror assignment. *Phys. Rev. D*, 93: 034021 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.93.034021>
26. Kovács P, Szép Zs, Wolf Gy: Existence of the critical endpoint in the vector meson extended linear sigma model. *Phys. Rev. D*, 93: 114014 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.93.114014>

MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT
SZILÁRDTEST-FIZIKAI ÉS OPTIKAI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.; 1525 Budapest, Pf. 49.
telefon: (1) 392 2212; fax: (1) 392 2215
e-mail: szfi@wigner.mta.hu; honlap: wigner.mta.hu/

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Felfedező kutatásokat végeznek a kondenzált anyagok fizikája, az elméleti és matematikai fizika, a hűtött atomok fizikája, a komplex rendszerek, valamint a lágy anyagok fizikája, a nanoszerkezetek, a vékonyrétegek és felületek fizikája, a neutronfizika, a fémfizika, az optikai kristályok fizikája, a kvantumoptika és lézerfizika egyes területein.

Alkalmazott kutatásokat végeznek a felfedező kutatásokhoz csatlakozó területeken, kiemelt feladatnak tekintve új anyagok előállítását, minősítését és vizsgálatát, új anyagvizsgálati módszerek fejlesztését, új optikai kristályok, új vékonyréteg eszközök és új lézeres eszközök előállítását és alkalmazását.

Fejlesztési tevékenységet végeznek a felfedező és alkalmazott kutatásokhoz csatlakozó területeken, kiemelt feladatnak tekintve a nanotechnológia, a lézertechnika, a spektroszkópia, a kristályfizika területét, speciális elektronikus és mechanikus eszközök fejlesztését, a kristálynövesztési technológiák fejlesztését, a szoftverfejlesztést, valamint új optikai mérés technikai módszerek és eszközök fejlesztését.

Működtetik a területükön található és felügyeletére bízott nagyberendezéseknél, amelybe beletartoznak ultravákuum-berendezések, neutronyaláb-kutatási eszközök, lézerek, számítógépek, számítógép hálózatok, valamint a hélium cseppfolyósító.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények
a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Elméleti szilárdtestfizikai kutatások

Erősen korrelált rendszerek (Lendület kutatócsoport)

A világon elsőként fejlesztették ki a sűrűségmátrixos renormálási csoport (DMRG) algoritmus és az úgynevezett Coupled Cluster algoritmus ötvözéseként a DMRG-TCCD algoritmust. Ez a forradalmian új módszer lehetővé teszi mind a statikus mind pedig a dinamikus korrelációk pontos meghatározását, és olyan nagyméretű rendszerek numerikus szimulációját, mely eddig nem volt lehetséges. Ezáltal napjaink legnagyobb számításait végezték el, és módszerük hatékonyságának köszönhetően korábban vitatott kérdések megválaszolása is lehetővé vált számukra. Elsőként használták az általuk bevezetett sokrész-korreláció elméletet molekulafizikai rendszerekre. Ez lehetővé teszi, hogy kvantitatívan jellemezzék, hogy egy adott kötési kép mennyire jól írja le a rendszert. Az elmélet alkalmazásaként vizsgálták számos prototipikus molekula kötési szerkezetét. Megmutatták, hogy a jól definiált sokrész-korrelációs felosztás hiánya okot szolgáltat a kötési szerkezet vitatottságának. Elsőként határozták meg grafén nanoszalagra az élállapotok közötti összefonódottsági struktúrát, és magyarázatot adtak a különböző kísérletekben mért gapekre. Egy új bázisoptimalizációs eljárást dolgoztak ki mátrix szorzat állapot kifejtésre, mely univerzálisan alkalmazható kvantum rendszerekre.

Komplex rendszerek

A nyitott, kvantumozott Ising-lánc hirtelen változást követő nemegyensúlyi dinamikáját vizsgálták sztochasztikusan változó merőleges mágneses tér jelenlétében. A modell fermion-reprezentációját használva, egy ez idáig nem dokumentált kapcsolatot mutattak ki a modell dinamikája és a folytonos idejű kvantumozott bolyongások között. Az állandó időtartamú, kétértékű zaj esetében egy hatékony rekurzív sémát dolgoztak ki az átlagolt mennyiségek időbeli változásának közvetlen számítására. Megmutatták, hogy ebben az esetben létezhetnek olyan gerjesztési módusok, amelyek a zaj ellenére koherensek maradnak. A fentiekben leírt vizsgálataik alapvető jellegűek.

A kristallográfia fázisproblémájának hatékonyabb megoldására bevezettek egy új módszert, az ún. térfogat-kihagyási leképezést, amely felgyorsítja és így a gyakorlatban is alkalmazhatóvá teszi a lassú konvergenciára hajlamos és önmagában kevésbé hatékony, duális térbeli, iteratív eljárásokat. A módszer potenciálisan a diffrakciós szerkezet-meghatározás számos területén nyerhet felhasználást.

Hosszú távú rend kondenzált rendszerekben

A skyrmionok olyan nemkollineáris mágneses struktúrák, amelyeket olyan kölcsönhatások stabilizálnak, amik nem szerepelnek a standard Heisenberg modellben. Ilyen kölcsönhatások közül a legismertebb az úgynevezett Dzyaloshinskij-Moriya (DM) kölcsönhatás. Megmutatták, hogy ezen kívül az izotrop kölcsönhatásban fellépő frusztráció is vezethet skyrmion állapotokra, és ezek a skyrmionok másképp viselkednek. Ab-initio számításokkal alátámasztották, hogy a Pt/IRMN ultravékony mágneses rétegekben mind a két kölcsönhatás jelen van és a skyrmionok tulajdonságait elsősorban a frusztrált Heisenberg csatolás határozza meg. Következésképpen lehetővé vált olyan skyrmion rendszerek létrehozása, ahol a skyrmionok periodikusan rendeződtek, ami nem lehetséges a DM kölcsönhatás által stabilizált skyrmionok esetében a közöttük ilyenkor fellépő taszító kölcsönhatás miatt. Megmutatták, hogy a frusztrált Heisenberg kölcsönhatás más lokalizált mágneses struktúrák kialakulására is vezet, amelyek nem henger-szimmetrikusak. Ezeket az eredményeket nemrég STM kísérletek is igazolták.

Félvezető nanoszerkezetek (Lendület kutatócsoport)

Nanoskálájú anyagokat terveznek nagy pontosságú szimulációval, amelyek a bioszenzorikában, kvantuminformációs technológiában és napenergia hasznosításában megkívánt tulajdonságokkal rendelkeznek. Emellett szilícium-karbid alapú nanorészecskéket fejlesztenek és állítanak elő in-vivo fluoreszcencias biológiai képalkotás céljából. Ebben az évben a szilícium-karbid nanorészecskéket, mint nanoméretű biomarkerek jellemzésében jelentős eredményként meghatározták, hogy a felületükre épülő egyes funkcionális csoportok hogyan befolyásolják a bennük levő aktív pontok viselkedését. A nanorészecskébe épült pontok, mint nanorendszerek általános leírását jelentősen javították azzal, hogy a különféle gyémánt- és SiC-pontokban az elektronikus folyamatok fononokkal való csatolását tanulmányozták. Ez szükséges ahhoz, hogy ezeknek a rendszereknek a kvantuminformatikai és biomarker-felhasználását tudományosan megalapozottabbá, kifinomultabbá tegyék. A kvantumoptika területén kidolgoztak egy eljárást a fényel vezérelt dinamikus optikai magspin-polarizáció teljes leírására, amely nagy jelentőségű a jövőbeli fMRI (funkcionális mágneses rezonanciavizsgálat) és ahhoz kapcsolódó alkalmazásokban. Az oxigéntartalmú gyémántbeli pontok úttörő és egyben összefoglaló jellegű feldolgozását végezték el.

Nemegyensúlyi Ötvözetek Kutatócsoport

A mágneses nanorészecskékből összerakott különböző nagyobb struktúrákat intenzív érdeklődés kíséri mind a nanorészecskék közti kölcsönhatások megértése, mind az új anyagok és eszközök tervezése szempontjából.

Mágneses és Mössbauer spektroszkópiai mérések megmutatták, hogy Fe/Ag granuláris multirétegek szuperparamágneses blokkolási hőmérséklete növekszik a Fe/Ag kettősrétegek számának növelésével. A Monte Carlo szimulációk megmutatták, hogy a granuláris rétegek közötti mágneses dipólus kölcsönhatásokon túlmenően, ezek összjátéka a nem síkirányú mágneses anizotrópiával, döntő szerepet játszhat a tapasztalt nagymértékű változásban.

A szuperparamágnesség jól ismert jelenség, mely pl. korlátozza az információtároláshoz használható mágneses klaszterek minimális térfogatát. Legtöbbször a spinek *homogén rotációval* fordulnak meg, melynek során a klaszterek anizotrópiája ellenében történik a forgás. Egy másik spin-átfordulási mechanizmus a *curling*, amelynél a forgás során az egyes spinek nem maradnak párhuzamosak, hanem egymáshoz képest elfordulnak a kicserélődési erők ellenében. Kiszámolták az energiagátat curling esetén nulla térben. Curling-típusú spin-átfordulási mechanizmuson alapuló klaszter-üveg-modellt alkalmaztak Fe-dús $\text{Fe}_{100-x}\text{Zr}_x$ ($x = 7$ to 12) fémüvegek nyomásfüggő alacsony hőmérsékleti anomális viselkedésének magyarázatára. Bár számos kísérleti eredmény az anizotrópia-típusú modellel is magyarázható, az általuk kifejlesztett értelmezés a kísérleti tények egyszerűbb és átfogóbb magyarázatát adja.

Szerkezetkutató laboratórium

Három területen értek el jelentős eredményeket:

(1) Szén alapú anyagok vizsgálata: Kutatásuk a fullerénekre, nanocsövekre, nanocső alapú hibridekre és a kétdimenziós rendszerekre összpontosult. Új módszereket vezettek be: a szinkrotron alapú infravörös spektroszkópiát, a közelítér infravörös mikroszkópiát és a fotoindukált spektroszkópiát. Ezekkel vizsgálták a szén és bór alapú nanocsöveket mind tiszta, mind kis molekulákkal töltött formában, a grafén alapú anyagokat és a metilamine- PbI_3 perovszkitra épülő napelem-anyagokat. Ezen túl megmérték egy másik ígéretes napelem-anyag a szilícium-karbid lumineszcencia tulajdonságait.

(2) Fázisátmenetek modellezése: Egy egyszerű dinamikus sűrűségfüggvény elmélet, az ún. atomisztikus fázismező modell keretében a heteroepitaxiát, a kétlépcsős nukleációt és a növekedési front menti nukleációt tanulmányozták. Megvizsgálták, hogy a Stranski-Krastnov növekedési módus esetén a kritikus vastagság hogyan függ a rácsállandók különbségétől. Megmutatták, hogy nagy túlhűtések esetén a kristályos szerkezet megjelenése kétlépcsős nukleáció során, egy amorf prekursor fázison keresztül történik. Sikeresen modellezték az ún. növekedési front menti nukleáció jelenségét is, aminek során egy növekvő kristályos részecske peremén új, attól eltérő orientációjú kristályszemcsék keletkeznek.

(3) Röntgen technikák: Röntgen diffrakciós kísérleteket végeztek a mintában lévő atomi röntgenforrással. A minta atomjait, melyek pontszerű forrásként sugároztak, igen intenzív és erősen fókuszált szinkrotron sugárással gerjesztették. A diffrakciós képet, amely egy vonalrendszert alkot (Kossel vonalak), egy kétdimenziós helyzet-érzékeny detektorral vették fel. A dinamikus diffrakció elméletének segítségével analizálták a vonalak finomszerkezetét és ebből meghatározták a szerkezeti tényezők fázisát. Ezek a kísérletek utat nyitnak a röntgen szabadelektron lézerek egyetlen impulzusa segítségével történő szerkezet meghatározáshoz.

Rádiófrekvenciás spektroszkópia

A rendezetlen fehérjéknél a víz-fehérje kölcsönhatások erőssége igen kevéssé változik, és közel van a tömbfázisú víz-víz kölcsönhatásokhoz. Az ilyen fehérjék felszíne nyitott a víz felé, és nagy mennyiségű vízmolekulát kötnek meg. Széles jelű $^1\text{H-NMR}$ jelintenzitás- és differenciális pásztázó kalorimetria mérések történtek egy rendezetlen, tumorokkal kapcsolatos fehérjén. E fehérje két peptidjét is vizsgálták: az egyik a teljes fehérjének a hélixet képző részlete, a másik pedig ennek erre képtelen mutációja. Meghatározták a fehérje-víz kapcsolatok számát. A teljes fehérje szerkezete nagyon rendezetlen. A kalorimetriás mérések megmutatják a fehérje kölcsönhatásait az oldatban lévő só ionokkal. A teljes fehérje és a peptidek nagy mennyiségű sót kötnek meg. Mindkét módszer a vízmolekulákkal és más kémiai egységekkel (só ionok) való kölcsönhatásuk szempontjából különbséget is tud tenni a hélixet képző peptid és a hélixet törő mutációkat tartalmazó változat között.

Komplex folyadékok kutatása

Részben rendezett rendszerek

A lágy anyagok különböző tulajdonságait vizsgálták kísérleti és numerikus módszerekkel. Röntgen-tomográfias mérések segítségével meghatározták a tartályban folyó nem gömbszerű részecskékből álló szemcsés anyag sűrűségének, irány szerinti rendezettségének térbeli eloszlását. Egy rugalmas gömbökből álló rendszerre numerikus szimulációk segítségével kiszámolták, hogy a rendszer meddig írható le a lineáris rugalmasság elméletével. Nematikus folyadékkristályokban elektromos térrel keltett mintázatok tulajdonságait vizsgálva megállapították, hogy az egyen- és váltófeszültség szuperpozíciója jelentősen megnöveli a mintázatképződés küszöbét. Potenciálisan UV indikátorként alkalmazható, pirimidin alapú, ötgyűrűs komponenseket szintetizáltak és karakterizáltak. Megadták a ferronematikusok ac mágneses szuszceptibilitásában a dc előfeszítő mágneses tér hatására az izotróp-nematikus fázisátmenetnél létrejövő változás fenomenológikus magyarázatát.

Elektrolitikus nanoszerkezetek

Elektrolitikus úton leválasztott nikkelt kristály-szerkezetének tanulmányozásával elemezték a leválasztáshoz használt különféle adalékanyagok hatásait. Elektrolitikus úton leválasztott kobalt vékonyrétegek mágneses tulajdonságainak elemzésén keresztül következtettek a rétegek mágneses doménszerkezetére és a kobaltot tartalmazó multiréteges anyagok mágneses rétegeinek csatolási viszonyaira. Multiréteges nanohuzalok termoelektromos tulajdonságainak vizsgálatával igazolták, hogy a mágneses/nem-mágneses multiréteges szerkezetek magnetotermoelektromos teljesítmény-tényezője összemérhető a hagyományos félvezető termoelektromos anyagokéval. Elektrolitikus nikkelt/réz multirétegek mélységi komponens-analízisével megmutatták, hogy a leválasztási folyamat során a szennyezők a rézrétegben halmozódnak fel.

Folyadékszerkezet

Neutrondiffrakcióval tanulmányozták argon abszorpcióját zeolitokban. A kísérleti adatokat az RMCPOW programmal - a Reverse Monte Carlo (RMC) szimulációs technika kristályos rendszerekre kidolgozott változatával - értelmezve megmutatták, hogyan változik a zeolitok szerkezete a csatornáikban abszorbeált gáz hatására. A Ge-Sb-Se összetételű üvegek szerkezetét neutrondiffrakció, EXAFS és RMC szimuláció segítségével vizsgálták. A kémiai rövidtávú rendet összevetve három analóg rendszer (Ge-As-Se, Ge-As-Te, Ge-Sb-Te) rövidtávú rendjével megmutatták, hogy As \rightarrow Sb és Se \rightarrow Te csere hatására a kémiai rövidtávú

rend erősödik, azaz nagyobb bizonyossággal meg lehet jósolni, hogy adott atomnak milyen típusú szomszédjai vannak. Diffrakciós technikákkal, RMC és ab initio molekuláris dinamikai szimulációval tanulmányozták a $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ „fázisváltó” ötvözet szerkezetét a folyadék fázisban. Az elméleti modellek összhangban voltak a szerkezeti mérésekkel, a modellekből nyert viszkozitás aktivációs energia pedig jó egyezést mutatott a viszkozitás mérésekből nyert értékkel.

Elektromos gázkisülések

Kapacitív gerjesztésű elektronegatív plazmákban megfigyelték önszervező térbeli struktúrák kialakulását. A kísérleti eredményeket részecskealapú szimulációkkal értelmezték. A kidolgozott elméleti modell számot adott az ionok mozgásának sajátfrekvenciája és a plazmát gerjesztő frekvencia rezonanciájának fontosságára a jelenség értelmezésében. Meghatározták egy felülethullám mikrohullámú kisülésen alapuló utókisülési rendszer jellemzőit üres és kezelendő felülettel töltött utókisülési reaktor esetén, rávilágítva a rendszerparamétereknek az utókisülés összetételére gyakorolt hatására. Számítógépes szimulációk segítségével külső homogén mágneses térnek az erősen csatolt Yukawa rendszerekben megfigyelhető részecskék kvázi-lokalizációjára kifejtett hatását vizsgálták. A részecskék anizotróp transzportja a lokalizáció jelentős növekedését mutatja a mágneses indukció-vonalakra merőleges irányban, miközben a mágneses tér mentén csak gyenge növekedés lép fel.

Neutronspektroszkópia

Nanoszerkezet kutatás neutronszórásal

A kutatócsoport több kutatási téma és felhasználói mérés elvégzésében vett részt, amelyeknek megvalósítását a csoport által működtetett berendezések tették lehetővé: SANS – kisszögű neutronszórásvizsgáló berendezés, TOF – repülési idő diffraktométer, háromtengelyű spektrométer, REF – neutron reflektométer és PSD diffraktométer. Az *out-of-plane* korrelációs hossz becslése periódikus $\text{Ni}(\text{Mo})\text{-Ti}$ rétegrendszerekre röntgen reflektometriával történt, kinematikus közelítést alkalmazva. A vad típusú és a *vccn1-1* (Cl csatorna) *Arabidopsis* mutáns levelében található tilakoidmembránok ultrastruktúráját tanulmányozva (SANS) az eredmények azt sugallják, hogy a tilakoidmembrán dinamikusan válaszol a membrán energizálódására és aktívan részt vesz különböző szabályozó mechanizmusokban. Új, több-komponensű mátrixüveg kifejlesztése valósult meg, amely alkalmas a radionuklidok stabil befogadására (PSD). A maximálisan adalékolható UO_3 mennyiség, amit még stabilan magában tud tartani a mátrix-összetétel 40tf%-nak adódott. SANS segítségével lineáris összefüggést mutattak ki a Keszthely régészeti lelőhely kerámia mintáira jellemző úgynevezett Porod kitevő és a kiégetési hőmérséklet között, így meghatározhatták a vizsgált késő római / kora középkori kerámia minták maximális kiégetési hőmérsékletét. A polisztirol membránok vizsgálata szintén kisszögű neutronszórással történt. Először a 8 monomerből álló csillagmolekula polimer-kar szegmentációs sugarának méretét (0,3 nm), és a fulleréncsillag szegmentációs girációs sugarát (1nm) határozták meg, majd a szegmentális hosszat, a csillagok korrelációs sugarát és a szomszédos molekulák közti átlagtávolságot. Az eredmények alapján sikerült előállítani és jellemezni a gázszeperációs célokra is használható jó permeabilitású membránokat.

Neutronoptika

A BrightnESS Horizon2020 projekt keretében a csoport kutatói megvalósították a Budapesti Kutatóreaktor Műszerközpont (BKR) hidegneutron moderátorának energia szelektív neutron-képalkotáson alapuló vizsgálati rendszerét és részt vettek az ESS hasonló célú tesztnyalábjának tervezésében. A projekt keretében lezajlott az ESS-ben fejlesztett szilárd bór konverter alapú detektor széleskörű tesztelése.

Kadmiummal szennyezett ón egykristállyal kapcsolatos kutatások folytatásaként, ón egykristályba beágyazott kadmium szennyezők körüli lokális szerkezetet állították vissza nagy pontossággal és megmutatták, hogy ebben az esetben nem lehetséges egyedül a Friedel oszcillációkkal magyarázni a rács torzulásait, hanem be kell építeni a modellbe az eltérő atomok közötti potenciál hatását is annak érdekében, hogy a modell paramétereit illeszteni lehessen a mérési eredményekhez. Ebben a mérésben először sikerült a szennyező atom körüli háromdimenziós elmozdulásvektorok visszaállítása, aminek segítségével megmutatták, hogy a Cd szennyező körül a fogadó rács az alacsonyabb hőmérsékleten stabil, a fehér-ón szerkezetének irányába torzul.

Alkil és aril szubsztituált szilika géleket állítottak elő és jellemeztek kiegészítő fizikai kémiai módszerekkel. A szilika hordozókat úgy tervezték meg, hogy baráti környezetként szolgáljanak biomolekulák vagy szerves színezékek (enzimek vagy porfirinek) számára.

A kutatócsoport tagjai részt vesznek az Európai Spallációs Neutronforrásnál (ESS) épülő makromolekuláris repülési-idő diffraktométer (NMX) neutronoptikai rendszerének fejlesztésében. Az NMX a világon az első TOF neutron fehérje-diffraktométere lesz.

Alkalmazott és nemlineáris optika

Lézeralkalmazások és optikai mérés technika

Sikeresen alkalmaztak interferometrikus módszert nagyintenzitású, ultrarövid lézer impulzussal keltett rubídium plazma homogenitásának vizsgálatára. Az RMI-vel együttműködve nagy időbeli felbontással megvizsgálták a lézer által keltett plazma dinamikai tulajdonságait. Felépítettek egy új kísérleti berendezést aeroszol gyógyszerkészítmények vizsgálatára és meghatározták az időzírási paraméter hatását a légtakba jutó permet méreteloszlására és koncentrációjára. Az MTA EK MFA-val együttműködve, kifejlesztették a közösen szabadalmaztatott „Pinhole kamerás Optikai Anyagvizsgáló Rendszer” egy korszerűsített változatát. A fejlesztés célja a gyorsan vizsgálható minták méretének növelése volt, amit a pontszerű fényforrás fényességének jelentős növelésével, a precíz mintamozgatás sebességének és tartományának kiterjesztésével, valamint az adatfeldolgozási sebesség növelésével értek el.

Femtosekundumos lézerek a nemlineáris mikroszkópiában

A kutatócsoport által 2016. szeptember elsején a Biomedical Optics Express-ben publikált tudományos közlemény megjelenése után több napig a legtöbbször letöltött cikkek listáján szerepelt, többek között az első helyen is. A cikkben egy új, Yb-szállézerrel mint impulzusüzemű fényforrással felszerelt, kézben tartható, új nemlineáris kétfoton abszorpciós fluoreszcencia (2PEF) és másodharmónikus keltéses (SHG) mikroszkópról számoltak be. A bemutatott új mikroszkópiás képalkotó rendszer legfontosabb előnyeit a következőkben foglalhatjuk össze: a használt impulzusüzemű lézer alacsony ára, az optikai szálalátvitel által biztosított flexibilitás, a kisméretű mérőfej által biztosított könnyű kezelhetőség, valamint az alkalmazott lézerhullámhossznak és lézerteljesítménynek köszönhető minimális biztonságtechnikai kockázat *in vivo* alkalmazások esetén.

Egyéb eredmények: Az elmúlt évben a zsírszerű anyagok mérésére kifejlesztett CARS módszert alkalmazták sclerosis multiplex (SM) állatmodelleken, hogy az állatok szervezetébe kuprizon hatását vizsgálják az idegsejtek axonjait borító myelin hüvelyre. Ebben az évben a CARS módszert továbbfejlesztették az élő szervezetben (pl. bőrben, agyban) lévő fehérjék, és NO jelölésmentes mikroszkópiás méréséhez, ami CARS rendszerükben mind az optikai, mind a lézerrendszer továbbfejlesztését igényelte.

Ultragyors és Attoszekundumos Fizika (Lendület kutatócsoport)

Új nanooptikai mérési módszert demonstráltak, amellyel fém nanorészecskék közvetlen, nanométeres közelében megmérhető az elektromos térerősség. Az új mérési módszernek a napelemek továbbfejlesztésétől kezdve a biológiai/kémiai szenzorok fejlesztésén át egészen egyes rákterápiás módszerekig nagy jelentősége lehet, hiszen tetszőleges nanostrukturált fémfelület optimalizálható és az alkalmazásokhoz illeszthető a térrnövekmény közvetlen mérése által, amihez mindössze egy femtoszekundumos lézerforrásra és egy elektron-spektrométerre van szükség.

Kristályfizika

Kiemelkedő minőségű nemlineáris optikai oxid-egykristályokat állítottak elő különböző kristálynövesztési és minősítési eljárások felhasználásával újabb alkalmazások és kutatás céljára, például lítium-ittrium ortoborátot ($\text{Li}_6\text{Y}(\text{BO}_3)_3$, LYB), β -bárium metaborátot (BBO) és egy nagyméretű $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$ prizmat THz-es impulzusok generálására.

Fundamentális jelentőségű eredményük a polaronos ráctorzulás közvetlen jellemzése lítium niobátban. A ps-os pumpáló impulzusokkal generált O^- kis-polaronok körüli ionos elmozdulásokat egy molekuláris szonda, hidroxil ionok segítségével határozták meg. A szennyezőként jelenlevő OH^- ionok közvetlen közelében O^- -ként csapdázott lyukak kimutatása infravörös (IR) próbaimpulzusok segítségével történt, detektálva az OH^- nyújtási módus abszorpciós frekvenciájának tranziens vöröseltolódását.

LYB:Yb-ban ESR és nagyfelbontású IR spektroszkópia segítségével jellemezték az Yb^{3+} centrumokat, ill. az Yb párok megjelenését, amit SIESTA-kódos kvantumkémiai számítással is alátámasztottak. Szaturációs spektroszkópiával LYB:Er-ban kimérték az Er^{3+} ionok IR átmeneteinek homogén vonal-szélességét, kinetikáját és mágneses térbeli spektrális lyukfelhasadását. AAS és más analitikai eljárásokat optimalizáltak például Mg és Al kimutatására LiNbO_3 tömbi illetve SiC nanokristályokban.

Nanoszerkezetek és alkalmazott spektroszkópia

Egy új kutatási irányvonalat indítottak el az egyfoton-emitter centrumok kialakítására nanogyémántban femtoszekundumos impulzuslézeres technológia alkalmazásával. Az eddig elvégzett kísérletek igazolták a nanogyémánt szemcsék jelenlétét és a szilíciumatom szerkezetbe való beépülését a szén- és szilícium-tartalmú kiindulási anyagból ultrarövid lézerimpulzusokkal előállított mintákban.

Először vizsgálták kísérletileg a szilícium-vakancia centrum spektrális tulajdonságait nagyszámú, mikrohullámmal erősített kémiai gőzfázisú leválasztással előállított gyémánt vékonyrétegen, hogy meghatározzák a centrum zérus-fonon vonalának spektrális paramétereiben mások által is megfigyelt jelentős szórását. Igazolták, hogy a centrumok előállítási paraméterek módosításával változtatható lokális környezete jelentősen befolyásolja a kialakuló SiV-centrumok spektrális paramétereit. A SiV-centrumok környezetében meghatározott belső húzófeszültség nyomófeszültséggé alakulása a SiV-csúcs kékeltoledését és vonalkiszélesedésének csökkenését eredményezi. Ennek magyarázata, hogy a nagyobb

lokális nyomófeszültség az alap- és a gerjesztett állapotban egyaránt megnöveli a SiV centrum energianívóinak felhasadását, visszaszorítva ezáltal a kis energiájú akusztikus fononok közreműködésével végbemenő pályarelaxációt.

Az agysejtek jelölésmentes megkülönböztetésére és aktivitásának érzékelésére alkalmas új eljárások kifejlesztése céljából Raman-spektroszkópiás vizsgálatokat végeztek élő agyszöveten. Kimutatták, hogy a stimulált Raman-spektroszkópia ígéretes eljárás az agysejtek aktivitásának követésére és az idegrendszeri betegségek és rendellenességek diagnosztizálására.

Kvantumoptika és kvantuminformatika

Kvantumoptika (Lendület kutatócsoport)

A Dicke-féle szuperradiáns kvantum fázisátalakulás létezése régóta nyitott kérdése a kvantumelektrodinamikának. Megmutatták, hogy kritikus pont valóban létezik, bár az atomok közötti kontakt kölcsönhatás miatt a Dicke-modell jóslatánál nagyobb sűrűségek felé tolódik. Az atomok és az elektromágneses sugárzás ultraerős csatolási tartományát a regularizált elektromos dipól mértékben írták le. Átlagtérelméletben figyelembe vették az atomok közötti rövid hatótávú kölcsönhatást, ami depolarizációt okoz az egymást az atomi méretskálán megközelítő atomokban. Kimutatták a kritikus sűrűség közelségét a szilárd anyag sűrűségéhez, ami alapján azt a sejtést fogalmazták meg, hogy a kritikus sűrűségnél az atomok valójában a kondenzált állapotba mennek át, de ennek a bonyolult mikroszkópikus folyamatnak a leírása már túlmutat a kvantumelektrodinamikai modellen.

Kvantuminformatika és a kvantummechanika alapjai

Megmutatták, hogy a kaotikus viselkedés viszonylag általános az állapot-szelektív kvantumprotokollok között: egy optikai eszközökkel megvalósítható elrendezésben exponenciális érzékenységet találtak minden kezdőállapotra. Megmutatták, hogy bármely komplex racionális leképezés, köztük a Mandelbrot halmazt definiáló polinom leképezés is közvetlenül megvalósítható megfelelő kvantumkapuk alkalmazásával. Az iterált, állapotszelektív protokollokban, kezdetben egy sokaságból indulunk ki, amelynek mérete minden iterációs lépésben csökken. Bebizonyították, hogy a kezdeti állapotokra való exponenciális érzékenység szükségszerűen a sokaság méretének exponenciális csökkenésével jár. Eredményeik szerint kvantumállapotok közötti kezdeti különbségek fokozatos nagyítása lehetséges („Schrödinger mikroszkóp”), azonban a szükséges másolatok számára létezik egy szigorú alsó korlát.

Belátták, hogy kvantumcsatornák egy általános osztályára a várható visszatérési idő megadható úgy, mint a kezdeti állapot állandósult állapotban vett súlyának inverze. Állításuk a klasszikus Markov láncokra vonatkozó Kac lemma általánosítása.

A Bonni Egyetemen működő kísérleti csoporttal együttműködve tanulmányozták a dekoherencia hatását topologikusan nem-triviális kvantum bolyongások élállapotaira, amelyeket optikai rácsban csapdázott atomokkal valósítanak meg. Ez fontos kérdés, ha kvantum bolyongásokkal szimulálunk szilárdtestfizikai modell-Hamilton operátorokat, mivel itt a dekoherencia más jellegű, mint a szilárd testekben. Olyan dekoherencia modelleket használtak, amelyeket korábban már alkalmaztak és teszteltek egydimenziós kvantum bolyongást megvalósító kísérletekben. Egyszerű analitikus modellt fejlesztettek ki ezen élállapotok robusztusságának kvantifikálására spin illetve térbeli fázisvesztéssel szemben, megjósolva populációjuk exponenciális bomlását.

Egy atomlézer rádiófrekvenciás kicsatolási sémáját tekintették át, figyelembe véve a gravitáció hatását is. Egy intuitív modellt és az egzakt, háromdimenziós, teljes kvantummechanikai megközelítést is alkalmazva levezették különböző méretű és alakú kondenzátumok helyfüggő spektrális felbontási függvényét.

b) Tudomány és társadalom

Noha az intézet elsődleges feladata a felfedező kutatás, a vizsgált problémák, fizikai rendszerek, mérési módszerek tetemes része különböző szinteken kapcsolatban áll a létező vagy potenciális alkalmazásokkal. A kutatástól az alkalmazásig terjedő lánc minden pontjához csatlakozik az intézet tevékenysége. A felfedező kutatás témájának megválasztását sok esetben egy még nem körvonalazódott, de potenciálisan igen jelentős alkalmazás motiválja.

Az alap kutatások terén a kvantuminformáció-elmélet számos koncepciójára építve olyan új algoritmusokat (tenzor-hálózat-renormálás) dolgoztak ki, melyek molekuláris és erősen korrelált spin-, illetve elektronrendszerekben hatékonyabban kezelik az egymással kölcsönhatásban álló távoli szomszédok ún. összefonódott állapotait, és ezzel a jövőben jóval nagyobb rendszerek vizsgálatát teszik lehetővé.

Más esetekben a kutatás közvetlenül új alkalmazások kifejlesztését szolgálja. Végül a már létező alkalmazások javításában, továbbfejlesztésében is részt vesz az intézet.

A Kristályfizika Csoport által előállított kristálymintáknak jelentős kereslete van mind itthoni, mind külföldi egyetemeken és kutatóintézetekben. Analitikai EPMA, XRF és XRD vizsgálataik olyan mellékes eredményeket is hoztak, mint egyes szállóporok szennyezési szintjeinek meghatározása közutakon, mellyel kapcsolatban a légutakban történő kiülepedést is modellezték.

A tüdő modell megépítésén kívül más egészség fenntartását, ill. a megelőzést szolgáló kutatást is végeznek az intézet több kutatócsoportjában. Az in vivo nemlineáris mikroszkópián és mikroendoszkópián alapuló orvosi diagnosztikai módszerek segíthetnek különböző betegségek, mint pl. a bőr daganatos elváltozásai, vagy a cukorbetegség korai diagnosztizálásában, sebészeti kezelésében, valamint megfelelő gyógyszerkészítmények kifejlesztésében, tesztelésében, a társadalom egészségének megőrzése, védelme érdekében.

Míg egy másik kutatócsoport tagja szemészorvosokkal együttműködve a különböző gyártmányú és anyagú beültethető műlencsét vizsgálták abból a szempontból, hogy milyen fizikai, kémiai hatások érik a műlencse anyagát a beültetés folyamata során, illetve a szemben eltöltött idő alatt. Az eredmények segítenek a legmegfelelőbb műlencsék kiválasztásában.

Egy új irány az intézet és a Femtonics Kft. közös projektje, mely keretében az agysejtek működésének vizsgálatára, idegrendszeri betegségek és rendellenességek diagnosztizálására használható új spektroszkópia módszerek kifejlesztése zajlik. Az együttműködés lehetővé teszi az tudományos eredmények piacra vitelét.

Az interdiszciplináris kutatások területén a tudomány és a társadalom közötti párbeszéd erősítésében fontos szerepet kap a kulturális örökség tárgyainak természettudományos vizsgálata, ami az utóbbi években nagy léptekkel fejlődik. Az intézet korábbi EU CHARISMA projekt folytatódásaként elnyert H2020-as IPERION elnevezésű projekt Európa legjelentősebb múzeumait (British Museum, Louvre, Prado, Rijks Museum stb.) valamint természettudományi kutatóközpontokat, nevezetesen analitikai kutatási infrastruktúrákat egyesítenek. A nanoszerkezet kutatásával foglalkozó csoport fő feladata a projektben hogy nemzetközi neutron csoportokkal közösen spektrométereivel roncsolásmentes vizsgálatokat végezzen a műtárgyakon.

A hazai régészeti és múzeumi kutatások segítésére pedig pl. a Szépművészeti Múzeum egyiptomi gyűjteményének egy új beszerzését és más szobrokat vizsgálták, valamint a "Lendület" Mobilitás Kutatócsoport keretében számtalan régészeti réz, bronz, acél és kerámia leletet. A csoportot az MTA BTK Régészeti Intézetének kutatói hozták létre számos hazai múzeum, egyetem és kutatóintézet – köztük a Neutronspektroszkópai Osztály – munkatársaival közösen. Nagy érdeklődés kíséri a Seuso kincsek Magyarországra került darabjainak vizsgálatát ehhez kapcsolódóan fontos neutronos vizsgálatokat végeztek hasonló késő római ezüsttálakon.

A kulturális örökség kutatási témái igen közel állnak, ill. kiválóan hozzájárulnak a hazai társadalmat foglalkoztató kérdések megválaszolásához, a laikusok számára is könnyen érthető módon lehet a nukleáris technikákról alapvető tudományos ismereteket tolmácsolni és szemléletes magyarázattal lehet szolgálni az egyébként elvontnak és költségesnek vélt reaktoros kutatásokról is.

Az intézet vezetése aktívan támogatja a technológia transfert. Az intézetben kifejlesztett technológiák átadására példa a H-ION kutató, fejlesztő és innovációs Kft.-vel közösen végzett munka a nagyentrópiás ötvözeteket illetően. Továbbá a Lézeralkalmazási Osztály munkatársai K+F szerződés keretében optikai és spektroszkópai módszerekkel vizsgálták ipari környezetben mintavételezett aeroszolok tulajdonságait (Az elkészült Pinhole kamerás Optikai Anyagvizsgáló berendezést sikeresen installálták az IISB (Erlangen, Németország) tisztaszoba rendszerére. (Részletek: <http://www.ellipsometry.hu/>).

Az Elektrolitikus Nanoszerkezetek Csoport részt vesz a Paksi Atomerőmű korróziós problémáit és az ezzel kapcsolatos élettartam-hosszabbítási kérdéseket elemző szakértői csoport munkájában.

Az intézet kutatói széleskörű oktatási tevékenységet végeznek nemcsak magyar egyetemeken, hanem részt vesznek különböző területeken a szakember képzésben is. A lézeralkalmazási osztály kutatói orvos elektronikai technikusokat (korábban: orvosi műszerészek) oktattak kétszer 3 alkalmas tréning keretében a Lézertechnika, Orvosi lézerek, Fény-anyag kölcsönhatás/Lézer biztonságtechnika területén. Továbbá Budapesten négy, Oroszlányban és Veszprémben további két alkalommal tartottak előadásokat „Lézerek és holográfia” címmel.

A Neutron Optikai Csoport tagjai, előadóként, gyakorlatvezetőként és szervezőként részt vettek a 10-ik Közép-európai Neutron Iskola (CETS2016) gördülékeny lebonyolításában. A CETS2016 betekintést nyújtott a változatos anyagszerkezeti és dinamikai vizsgálatokat megvalósító neutron-szórás technikák elméletébe és gyakorlatába. Szakmai továbbképzések keretében a csoport tagjai, aktívan részt vettek a Mirrotron Budapest Kft. mérnökeinek oktatásában, valamint NAÜ-s együttműködés keretében az Indonéziai szakértőt készítették fel a kiküldetésre.

Ugyanakkor erős részvétel az Eötvös Loránd Tudományegyetem (vagy ELTE) BSc, MSc és PhD képzési programjában, illetve az Eötvös Loránd Fizikai Társulat vezetésében és programjaiban, melyek jól példázzák a szoros kapcsolatot tudomány és a társadalom között.

Az oktatás és továbbképzés mellett a tudomány népszerűsítő tevékenység is fontos. Az Országos kínai „Tudományos Hét” c. rendezvényen Pekingben népes hallgatóság előtt tíz tudományos előadás hangzott el „Silo music” címmel, Pekingben 2016. május 14-21 között. Ezen kívül a Peking melletti, Hebei 15. sz. gimnáziumában érettségi előtt álló tanulóknak (900 fős hallgatóság) tartottak tudományos előadást a fenti témában.

Az Elméleti Szilárdtest-fizikai Osztály több munkatársa tartott ismeretterjesztő előadásokat. Egyikük a 2016. évi fizikai Nobel-díj kapcsán adott nyilatkozatot két országos napilapnak,

valamint cikket írt a Fizikai Szemlében és a Magyar Kémikusok Lapjában, melyben a díjazott eredményeket laikusok számára foglalta össze.

Az egyik Lendület csoport vezetője az MTA Környezettudományi Elnöki Bizottsága és más szervezeti egységei által szervezett, „A napenergia hasznosításának helyzete és perspektívái” című ankétján az ipari alkalmazás szempontjait is kiemelten kezelve foglalta közérthető formába a fotovoltaiikus rendszerek fejlesztésének aktuális legfontosabb kihívásait és a kutatások jelenlegi irányait.

A Lézeralkalmazási Csoport tagjai szintén kiterjedt tudományos ismeretterjesztő tevékenységet folytattak. Diákcsoportok tekintették meg az optikai mérés-technikai laboratóriumot. Az itt még aktívan tevékenykedő emeritus professzort 2016-ban az év ismeretterjesztő tudósának választották. A legkülönbözőbb közép- és felsőoktatási, politikai, civil képviselőkkel folytatnak aktív párbeszédet a fotonikai tudományok társadalmi szerepéről.

Az SZFI-ből hat kutatócsoport vett részt a Lányok Napja és a Wigner Nyílt Napok szervezésében. Ismeretterjesztő előadásokat tartottak középiskolákban a “Sokszínű Fizika Roadshow” keretében, egyik kutatócsoport tagja volt az eseménysorozat projektvezetője. Ahogy azt a Science Meet Up és a Kutatók Éjszakája Szegeden, vagy akár a Boston Hungarian Science Club rendezvényei mutatja, az intézet kollégái úgy helyi, mint hazai és nemzetközi tudományos életben igen aktívak a nagyközönségnek nyújtott tudomány-népszerűsítő tevékenységekben.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok

Együttműködések

Az intézet kutatásai során széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésekre támaszkodik. Történelmi előzmények, tematikai hasonlóságok és a közös infrastruktúra használata folytán korábban is léteztek formális és informális kapcsolatok a KFKI campus akadémiai intézetei között. A campuson működő másik kutatóközpont az MTA Energiatudományi Kutatóközpont az intézet fontos együttműködő partnere, mellyel a Budapesti Neutron Központ keretében folynak közös kutatások a kísérleti atomreaktor hasznosítása érdekében. Az MTA intézményhálózatán belül közös kutatások folynak még a MTA EK, MTA BTK Régészeti Intézet és TTK Enzimológiai Intézettel. Az intézetben működő Budapesti Lézertechnológiai Kutatólaboratóriumban a különböző intézetekhez és az ELI-HU Kft-hez tartozó kutatócsoportok eredményes interdiszciplináris együttműködése valósul meg. Az interdiszciplináris kutatás felértékelődése kapcsán a kulturális örökség védelme és az ehhez kapcsolódó kutatások kibontakozása vezetett a Szépművészeti Múzeum egyiptomi gyűjteményével és nemzetközi szinten is több múzeummal (British Museum, Louvre, Prado, Rijks Museum stb.) kialakult kapcsolatok bővüléséhez, mely intézmények számára műtárgyak roncsolásmentes vizsgálatát végzik neutronspekroszkópiai módszerekkel. A tudományos eredmények hasznosítása szempontjából fontos szerepe van az ipari kapcsolatoknak (pl. Lasram Kft, Technoorg-Linda Kft, Optilab Kft).

Felsőoktatás

Az intézet munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtest-fizika, az anyagtudomány és az optika tárgykörében. 2016-ban az intézet 38 kutatója vett részt az egyetemi oktatásban rendes és speciális előadások tartásával, illetve laboratóriumi gyakorlatok vezetésével. Az intézet kutatói 41 elméleti és 16 kísérleti kurzust tartottak doktoranduszok részére. 23 kutató tagja különböző egyetemek doktori iskoláinak, 1 kutató doktori iskola vezetője, 11-en pedig törzstagok. Különösen eredményes együttműködés alakult ki az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán (ELTE TTK) és a BME TTK Fizikai Intézetében folyó fizikus képzésben a BSc szinttől a PhD képzésig. A vidéki egyetemek közül a Szegedi Egyetem és a Pécsi Egyetem fizikai intézeteivel való kapcsolat a legsokrétűbb. Egyes munkatársak az Óbudai valamint a Veszprémi Pannon Egyetem PhD hallgatóinak is külső konzulensei.

2016-ban az előző évhez képest megduplázódott (9-ről 17-re nőtt) az intézetben MSc diplomamunkát készítő diákok száma: 31 hallgató dolgozott BSc ill. MSc diplomamunkájá, 49 pedig PhD dolgozata összeállításán. E hallgatók nagy része olyan kísérleti berendezéseken végezhetette munkáját, melyek másutt nem állnak rendelkezésre az országban.

Az intézet egy kutatóját az MTA rendes tagjává választották, egy kutató szerezte meg az MTA doktora címet, kilencen pedig a PhD fokozatot.

Hazai rendezvények

Kutatóik 2016-ban aktívak voltak a hazai és nemzetközi rendezvények szervezésében. 2 hazai és 6 nemzetközi rendezvényt szerveztek.

Két kutatócsoport is részt vett a Szegeden, 2016. augusztus 24-27. között megrendezésre került Magyar Fizikus Vándorgyűlés, különös tekintettel a Statisztikus Fizika. Szekció szervezésében. Egy másik kutatócsoport az "ELTE University lectures reloaded: the peer instruction method" Nativitás Minikonferencia szervezésében 2016. december 29-én vett részt az ELTE TTK-n.

Kutatóik több nemzetközi konferencia szervezőbizottságában is részt vettek:

2016. júniusban Mátrafüreden tartották a Magnetomechanical properties of functional materials témájú konferenciát és 2016. májusban Budapesten a CETS2016 – Central European Training School on Neutron Techniques képzést.

Bécsben 2016. április 17-22 között tartott European Geosciences Union General Assembly ülésen egyik kollégájuk az "Experimental sedimentology, grain interaction and granular mechanics" szekció szervezője volt.

Továbbá munkatársaik részt vettek a következő konferenciák szervezésében: 2016. szeptemberben, a Lausanne-ban megrendezésre került "Recent Progress In Low-Dimensional Quantum Magnetism LDQM2016" konferencián; a Görögországban megrendezésre került "European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ECSCRM)" című kétévente megrendezésre kerülő rendezvényen; A COST MP 1407 program keretében 61 fő résztvevővel és 9 előadóval megtartott tréning kurzuson, mint előadó és szervező, és tréning kurzus koordinátor; valamint a novemberben Prágában megtartott "Workshop on Quantum Simulation and Quantum Walks 2016" rendezvényen.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet munkatársai szoros együttműködést ápolnak több mint 35 ország kutatóival. A nemzetközi kapcsolatok alapját főleg az EU keretprogramjához tartozó és egyéb nemzetközi projektek (ESA, IAEA, COST), kétoldalú akadémiai és Tét egyezmények, továbbá intézetek közötti kétoldalú megállapodások képezik.

Ennek eredményeképpen 2016-ban az intézet mintegy 250 publikációjának közel kétharmadában szerepel külföldi társszerző. Az intézet nyitott a külföldről érkező munkavállalók felé, bár számuk 2016-ban jelentősen csökkent. A nemzetközi kapcsolatok építése szempontjából nagyobb jelentőségűek az intézet kutatóinak külföldi munkavállalása és ösztöndíjai is. Az év folyamán 40 kutató dolgozott külföldön fél évnél hosszabb ideig.

Az intézetbe érkező külföldi vendégkutatók száma a 2016. év során összesen 81 volt. Közülük azonban csak 2 vendég töltött egy hónapnál hosszabb időt az intézetben. Két kutatócsoport igen aktívan vesz részt nyári iskolák, nemzetközi oktatási programok szervezésében. Kétoldalú akadémiai megállapodások keretében 10 ország kutatóival 11 területen folytak kutatások, közülük 7 téma indult 2016-ban. A kormányközi tudományos és technológiai megállapodások (Tét) keretében 4 új együttműködés kezdődött 2016-ban, melyek közül egy osztrák, egy szlovén és két francia partnerrel közösen.

A nemzetközi, de különösen a német tudományos együttműködések erősítése szempontjából fontos egy hagyományosnak nem mondható, a német szövetségi Tudományos Minisztérium által kiírt ERA-Fellow pilote projektben való részvétel, mely az EU-hoz újonnan csatlakozott 13 ország kutatás menedzsmenttel foglalkozó, elsősorban az adminisztrációs területen dolgozó szakértőknek kiírt program volt. A program keretében az ERA-Fellow-nak lehetősége volt egy kétszer egy hetes képzésben részt vennie, valamint a választott a Wigner FK esetében egy Max Planck partnerintézményben egy hónapos szakmai gyakorlatot eltölteni, melynek célja egy közösen kidolgozott munkaprogram végrehajtása volt.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban tovább növekedett az elnyert OTKA-támogatás. Az intézet kutatói 11 új projektet indítottak a teljes futamidőre 299,7 M Ft támogatással. Ezek közül az új projektek közül a 4 posztdoktori pályázat együttesen 60,3 M Ft összegben részesül. Ezen kívül négy elméleti kutatási projekt indult: K115959, K116036, K120569 K119357. Kettő kísérleti jellegű, melyek valamilyen újszerű anyag vagy eljárás vizsgálatára irányulnak: SNN 11801, valamint Japán és a Visegrádi országok részvételével alakult NN 118161 „JST V4” konzorcium. Továbbá egy, az SNN 116198 számú pályázat egyaránt tartalmaz elméleti és kísérleti jellegű kutatásokat. A hét kutatási pályázat összesen 239,4 M Ft bevételt jelent a teljes időszakra.-

Az NKFIH 2016-ban a Wigner FK SZFI-ben egy két éves „Nanorendszerek atomi szerkezetének vizsgálata” című VEKOP2.3.3.-15-2016-0001 pályázatot és 12 Tét pályázatot finanszírozott. 2016-ban 4 Tét pályázat zárult, és ugyancsak 4 új pályázat indult, 2 francia, egy szlovén és egy osztrák.

A H2020 keretprogram második munkaprogramja utolsó évében, 2016-ban már jelentősen lecsökkent a pályázati kiírások száma. Ezért még nagyobb a jelentősége az intézet számára az év két nyertes nemzetközi pályázatának. 2016. október 1-én indult a NEURAM – H2020-FETOPEN-2014-2015-RIA, (No. 712821, 2016-2019), mely az első EU FET Open keretében kapott 4 271 481Euro (1,3 milliárd forint) összegű támogatást. A Wigner FK költségvetése a projektben közel 220 M Ft (mintegy 712 250 Euro) a teljes 3 éves időszakra. A NEURAM

projekt keretében 3 ország 4 szervezete dolgozik azon, hogy az agysejtek megkülönböztetésére és működésének jelölésmentes monitorozására alkalmas új eljárásokat fejlesszen ki, továbbá kutassa a sejtmagban a DNS-transzkripció során végbemenő folyamatokat. A projekt keretében kifejlesztendő új eljárás és mikroszkóp a stimulált Raman-szórás alapul. A Wigner FK feladata a stimulált Raman-szórás alapuló eszköz kifejlesztése és optimalizálása, valamint az idegsejtekre jellemző Raman-sávok feltérképezése.

Technológiai transzfer szempontjából fontos együttműködések /pályázatok

VISGEN 734862 Transcribing the processes of life: Visual Genetics egy H2020-MSCA-RISE-2016 pályázat, melynek teljes költségvetése (1 269 000 Euro) A Wigner FK a második legnagyobb költségvetésű partner 211 500 Euroval. A konzorciumban 11 partner vesz részt, közöttük kutatóintézetek, egyetemek és ipari partnerek 6 különböző országból (UK, HU, G, F, NL, NO)

Jelentős kutatási megbízások

A kutatóhellyel szerződéses kapcsolatban egy nagyvállalat, Robert Bosch Kft kilenc KKV-val, (pl. a *Trampus és Társa Kft., HNF-Tech Kft, ANTE Kft., MIRROTRON Kft, Optilab Kft*). Az intézetnek a cégekkel kötött megbízásokból befolyó bevétel összege 30 M Ft.

Amerikai egyetemektől (mint pl.: Oak Ridge National Laboratory, a Magnetic interactions in distorted systems témában végzett kutatásokért 2016-ban 1,6 M Ft árbevételt könyvelhetett el az intézet. Külső megrendelésre a NAÜ-nek nyújtott nemzetközi tréning szolgáltatásért 2 300 euro árbevételt könyvelhetett el az intézet.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Gali A, Demján T, Vörös M, Thiering G, Cannuccia E, Marini A: Electron-vibration coupling induced renormalization in the photo-emission spectrum of diamondoids. Nat. Commun., 7: 11327 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms11327>
2. Herdean A, Teardo E, Nilsson AK, Pfeil BE, Johansson ON, Ünnep R, Nagy G, Zsiros O, Dana S, Solymosi K, Garab G, Szabó I, Spetea C, Lundin B: A voltage-dependent chloride channel fine-tunes photosynthesis in plants. Nat. Commun., 7: 11654, 11 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms11654>
3. Veis L, Antalic A, Brabec J, Neese F, Legeza Ö, Pittner J: Coupled cluster method with single and double excitations tailored by matrix product state wave functions. J. Phys. Chem. Lett., 7:(20) 4072 (2016) <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcclett.6b01908>
4. Krumnow C, Veis L, Legeza Ö, Eisert J: Fermionic orbital optimisation in tensor network states. Phys. Rev. Lett., 117: 210402 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.210402>
5. Nataf P, Lajkó M, Wietek A, Penc K, Mila F, Läuchli AM: Chiral spin liquids in triangular lattice SU(N) fermionic Mott insulators with artificial gauge fields. Phys. Rev. Lett., 117: 167202/1-6 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.167202>
6. Ivány V, Klimov PV, Miao KC, Falk AL, Christle DJ, Szász K, Abrikosov IA, Awschalom DD, Gali A: High-fidelity bidirectional nuclear qubit initialization in SiC. Phys. Rev. Lett., 117: 220503 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.220503>

7. Rózsa L, Deák A, Simon E, Yanes R, Udvardi L, Szunyogh L, Nowak U: Skyrmions with attractive interactions in an ultrathin magnetic film. *Phys. Rev. Lett.*, 117: 157205 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.157205>
8. Liu YX, Schuengel E, Korolov I, Donkó Z, Wang YN, Schulze J: Experimental observation and computational analysis of striations in electronegative capacitively coupled radio-frequency plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 116: 255002 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.255002>
9. Spina M, Náfrádi B, Tóháti HM, Kamarás K, Bonvin E, Gaal R, Forró L, Horváth E: Ultrasensitive 1D field-effect phototransistors: CH₃NH₃PbI₃ nanowire sensitized individual carbon nanotubes. *Nanoscale*, 8:(9) 4888-4893 (2016) <http://dx.doi.org/10.1039/c5nr06727h>
10. Faigel G, Bortel G, Tegze M: Experimental phase determination of the structure factor from Kossel line profile. *Sci. Rep.*, 6: 22904 (2016) DOI: 10.1038/srep22904 <http://dx.doi.org/10.1038/srep22904>
11. Russina M, Kemner E, Mezei F: Intra-cage dynamics of molecular hydrogen confined in cages of two different dimensions of clathrate hydrates. *Sci. Rep.*, 6:(7) 27417 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/srep27417>
12. Kiss A, Szolnoki L, Simon F: The Elliott-Yafet theory of spin relaxation generalized for large spin-orbit coupling. *Sci. Rep.*, 6: 22706 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/srep22706>
13. Freytag F, Corradi G, Imlau M.: Atomic insight to lattice distortions caused by carrier self-trapping in oxide materials, *Sci Rep.*, 6: 36929 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/srep36929>
14. Gilyén A, Kiss T, Jex I: Exponential sensitivity and its cost in quantum physics. *Sci. Rep.*, 6: Paper 20076. 10 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/srep20076>
15. Schumacher M, Weber H, Jóvári P, Tsuchiya Y, Youngs TGA, Kaban I, Mazzarello R: Structural, electronic and kinetic properties of the phase-change material Ge₂Sb₂Te₅ in the liquid state. *Sci Rep*, 6: 27434. 1-11 (2016) <http://dx.doi.org/10.1038/srep27434>
16. Sánchez-Gil V, Noya E, Guil J, Lomba E, Valencia S, Da Silva I, Pusztai L, Temleitner L: Evidences of a structural change in pure-silica MEL upon the adsorption of argon. *J. Phys. Chem. C*, 120: 2260-2270 (2016) <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b11264>
17. Kolokathis PD, Káli G, Jobic H, Theodorou DN: Diffusion of aromatics in silicalite-1: Experimental and theoretical evidence of entropic barriers. *J. Phys. Chem. C*, 120:(38) 21410-21426 (2016) <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b05462>
18. Beke D, Jánosi TZ, Somogyi B, Major DÁ, Szekrényes Zs, Erostyák J, Kamarás K, Gali A: Identification of luminescence centers in molecular-sized silicon carbide nanocrystals. *The Journal of Physical Chemistry C*, 120: 685-691 (2016) <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b09503>
19. Timár M, Barcza G, Gebhard F, Veis L, Legeza Ö: Hückel-Hubbard-Ohno modeling of π -bonds in ethene and ethyne with application to trans-polyacetylene. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 28: 18617 (2016) <http://dx.doi.org/10.1039/c6cp00726k>
20. Dravecz G, Bencs L, Beke D, Gali A: Determination of aluminium and silicon in SiC nanocrystals by high-resolution continuum source graphite furnace atomic absorption spectrometry. *Talanta*, 147: 271–275 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.talanta.2015.09.067>

21. Éber N, Salamon P, Buka Á: Electrically induced patterns in nematics and how to avoid them. *Liq. Cryst. Rev.*, 4: 101-134 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1080/21680396.2016.1244020>
22. Csire G, Schonecker S, Újfalussy B: First-principles approach to thin superconducting slabs and heterostructures. *Phys. Rev. B*, 94: 140502 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.140502>
23. Thiering G, Gali A: Characterization of oxygen defects in diamond by means of density functional theory calculations. *Phys Rev B*, 94: 125202 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.125202>
24. Jarmola A, Bodrog Z, Kehayias P, Markham M, Hall J, Twitchen DJ, Acosta VM, Gali A, Budker D: Optically detected magnetic resonances of nitrogen-vacancy ensembles in ¹³C-enriched diamond. *Phys. Rev. B*, 94: 094108 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.094108>
25. Roósz G, Juhász R, Iglói F: Nonequilibrium dynamics of the Ising chain in a fluctuating transverse field. *Phys. Rev. B*, 93: 134305/1-11 (2016)
arXiv:1512.00731 <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.93.134305>
26. Kiss LF, Kemény T, Bednarčík J, Gamcová J, Liermann HP: Influence of the critical Fe atomic volume on the magnetism of Fe-rich metallic glasses evidenced by pressure-dependent measurements. *Phys. Rev. B*, 93: 214424/1-14 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.93.214424>
27. Náfrádi B, Antal Á, Fehér T, Kiss LF, Mézière C, Batail P, Forró L, Jánossy A: Frustration-induced one-dimensionality in the isosceles triangular antiferromagnetic lattice of δ -(EDT-TTF-CONMe₂)₂AsF₆. *Phys. Rev. B*, 94: 174413/1-6 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.174413>
28. Pisoni A, Katrych S, Arakcheeva A, Verebélyi T, Bokor M, Huang P, Gaál R, Matus P, Karpinski J, Forró L: Single crystals of superconducting SmFeAsOH_x: Structure and properties. *Phys. Rev.*, 94: 024525 (2016) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.024525>
29. Bridges F, Mackeen C, Kovács L: No difference in local structure about a Zn dopant for congruent and stoichiometric LiNbO₃. *Phys. Rev. B*, 94: 014101 1-5 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.014101>

**AZ MTA WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI
ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Wigner Fizikai Kutatóközpont

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	352	Ebből kutató ² :	208
PhD, kandidátus:	115	MTA doktora: 38	Rendes tag és levelező tag: 4
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			8
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			64
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			980
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			963
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			9
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			821
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			806
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 1	idegen nyelven:	11
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	2935,435	Összes független hivatkozás száma (2015):	21778
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			31628
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 15	MTA doktora:	1
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			167
		poszterek száma:	179
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 89		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	27
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			19
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			82
Témavezetések száma: TDK munka: 13		Diplomamunka (BSc):	23
Diplomamunka (MSc): 33		PhD:	89
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	2404 177	E Ft	
Fiatal kutatói álláshelyen fogl. sz. ¹⁶ :	29	Teljes saját bevétel: 2698 711	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			56
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	282 018	E Ft	
Az év folyamán az egyéb NKFIH forrásból támogatott témák száma:			14
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	291 587	E Ft	
Az év folyamán az összes uniós forrásból támogatott témák száma:			18
A tárgyévre vonatkozó bevétel ¹⁷ :	711 494	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	900 332	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	513 280	E Ft	

VI/A. A kutatóhely részletezett pénzügyi adatai 2016-ban

A kutatóhely neve: Wigner Fizikai Kutatóközpont

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege:	2404 177	E Ft
Az időszak folyamán a teljes saját bevétel összege:	2698 711	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
OTKA - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	282 018	E Ft
Egyéb NKFIH forrásból - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	291 587	E Ft
ÚMFT - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Egyéb hazai pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	380 536	E Ft
EU-s pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	330 958	E Ft
Egyéb külföldi pályázatok - a tárgyévre vonatkozó bevétel:	900 332	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - kutatásra:	46 565	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozásoktól származó bevétel - egyéb:	291 425	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb kutatási bevétel:	67 135	E Ft
A tárgyévre vonatkozó egyéb nem kutatási bevétel:	108 155	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Wigner FK Részecske- és Magfizikai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	172	Ebből kutató ² :	102
PhD, kandidátus:	55	MTA doktora:	19
		Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			25

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	753		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	738		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	6		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	1		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	634		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	627		
Könyv, atlasz	magyarul: 1	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	2392,604	Összes független hivatkozás száma (2015):	16 969
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			25 216

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	6	MTA doktora:	0
---	------	---	--------------	---

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
--	---	---	---

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	78		
	poszterek száma:	91	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	50	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			19

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	44		
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	40

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatóhely neve: Wigner FK Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	153	Ebből kutató ² :	106
PhD, kandidátus:	60	MTA doktora:	19
		Rendes tag és levelező tag:	3
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			7
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			39

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :	218		
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :	217		
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:	2		
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:	0		
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:	186		
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció	178		
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	6

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	541,79	Összes független hivatkozás száma (2015):	4768
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			6368

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :	89		
	posztterek száma:	88	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	39	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	16
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :	38		
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	14
Diplomamunka (MSc):	17	PhD:	49

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI TÁMOGATOTT
KUTATÓCSOPORTOK**

MTA–BME GÉPEK ÉS JÁRMŰVEK DINAMIKÁJA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Stépán Gábor, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 5.
telefon: (1) 463 1369; fax: (1) 463 3471
e-mail: stepan@mm.bme.hu; honlap: www.mm.bme.hu/~gjd
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoportban végzett munka az öt éves kutatási tervben vázolt feladatokkal folytatódott a beszámolási évben. A *robotok és számítógéppel szabályozott gépek dinamikája* témakörben a kutatócsoport céljai között szerepelt a többtest-dinamikai rendszerek, például *alulaktuált robotok* szimulációs és szabályozási módszereinek fejlesztése és alkalmazása. A kifejlesztett eljárás már lehetővé teszi a valós idejű szabályozást. Mivel az eredményeket az emberi járás és futás biomechanikájának témakörében is sikerült alkalmazni, 2016-ra a korábbiak mellett további kísérleteket terveztek és valósítottak meg a kutatók a talaj-láb ütközéssel és az emberi mozgástervezési stratégiákkal kapcsolatban. A *digitális szabályozási problémák* kapcsán a tetszőleges méretű problémára alkalmazható hibabecslési módszer kidolgozása a munkatervvel összhangban valósult meg. A *közlekedés biztonságának növelése* témakörben a kutatók az előirányozottnak megfelelően véglegesítették a *gumikerék görbülésének* vizsgálatához épített kísérleti berendezést és egy numerikus módszer segítségével kijelölték a mérésre leginkább alkalmas paramétertartományokat. A *száraz súrlódású rendszerek* vizsgálata kapcsán a kutatómunka a mechanikai érintkezés jellemzése – elsősorban a testek közötti normálerő eloszlásának kísérleti vizsgálata – irányába tolódott el. A *két forgórészes rezgéskeltő* berendezés kutatása során egy olyan eszköz kifejlesztése volt a cél, amellyel a piacon lévőkhöz képest új funkciók valósíthatók meg, például rezgések keltése független amplitúdó és frekvencia mellett, széles frekvenciatartományban. Emellett a mechanikai szinkronizáció és a teljesítményrezonancia jelensége állt a vizsgálatok előterében.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A *robotok és számítógéppel szabályozott gépek dinamikája* témakörben folytatódott az emberi, és általában a lábakon történő *járas és futás* vizsgálata. A futás jellegétől függően erős ütközések jöhetnek létre, amit lehetőség szerint el kell kerülni a sérülések kockázatának minimalizálása, illetve az energiahatékonyság növelése érdekében. A kutatócsoport új eredményei azt mutatták, hogy nem csupán a szakirodalomban vizsgált talajfogási mintázat számít, hanem a lábszár szöge is fontos a talaj-láb ütközés során. A kutatók által bevezetett, szabályozással ellátott elméleti mechanikai modell lehetővé teszi a paraméterek hangolását különböző költségfüggvények mellett, melyek figyelembe veszik a futási sebességet, az energiahatékonyságot vagy az ütközési intenzitást. A modell alkalmas a stabil, futás-szerű mozgás generálására. Az elvégzett laboratóriumi vizsgálatok szerint a talaj-láb ütközés pillanatszerű jelenségként modellezhető és valóban jelentős energiavesztéssel jár. A feladattól függően az emberi test szabadsági fokainak száma nagyobb, mint amennyire minimálisan szükség lenne, ezért többféle módon is végre lehet hajtani ugyanazt a mozgást. Az emberi mozgástervezés megértése segíthet egyes mozgásszervi vagy idegrendszeri rendellenességek diagnosztizálásában és a gyógytornáztatásban is hasznos lehet. A természet utánzásán alapuló mozgások létrehozása kívánatos az emberekkel együttműködő robotok esetén. 2016-ban a kutatók behatárolták azoknak az algoritmusoknak a csoportját, amelyek megfelelően visszaadják az emberi mozgást. A megszerzett ismeretek birtokában reprodukálni lehet az emberi kar mozgását, amely a későbbi kutatómunkához szükséges.

2016-ban általánosították a kutatók az *alulaktuált* rendszerek szabályozására korábban kifejlesztett prediktív szabályozó módszert. Az eljárás lényege, hogy a rendszer nem

szabályozott részének mozgási lehetőségeit előre kiszámolva és azokból valamely szempontok szerint a legjobbat kiválasztva a teljes mozgás ismertté válik. Ezáltal a mozgáshoz szükséges erők, nyomatékok már meghatározhatók az inverz dinamika eszközeivel. A robotok mellett más alulaktuált szabályozott mechanikai rendszerek is vannak, melyekre alkalmazható a kifejlesztett prediktív módszer. Ilyenek például a járműszerelvények, ahol az alulaktuáltság különösen fékezés vagy tolatás során számottevő.

Számítógéppel szabályozott rendszerekben a *digitális hatások* kaotikus rezgésekhez és nagy szabályozási hibához vezethetnek. A beszámolási évben sikerült tisztázni a hibát befolyásoló legfontosabb folyamatokat. Az eredmények szerint border collision bifurkációk során újabb és újabb kaotikus attraktorok alakulhatnak ki. Ún. krízisek esetében ezek az attraktorok kinyílnak, így repellorokból álló nagyobb fázistérbeli struktúrák alakulnak ki, melyeken belül véletlenszerűen változhat a rendszer állapota. Nagy mintavételi idő és kis arányos erősítési tényező esetén a megkívánt állapottól távolodó irányú „ugrások”, míg ellenkező esetben túllendülések következnek be. Bizonyítást nyert, hogy a viszkózus csillapítás a szabályozási hibát csökkenti, míg a differenciális erősítési tényező növelése bizonyos tartományokban – a várakozásokkal ellentétben – a szabályozási hiba növekedése irányában hat. A konfigurációk nagy száma miatt nem lehetséges az összes bifurkáció analitikus leírása. Ezért egy olyan módszert dolgoztak ki a kutatócsoport tagjai, mellyel felülről becsülhető az összes fázistérbeli koordináta hibája tetszőleges dimenziójú leképezés esetében. Emellett, a tervekkel összhangban, megtörtént a cella leképezés továbbfejlesztése, mely lehetővé teszi a fázistér különböző tartományainak elemzésével kapott eredmények összefűzését.

A *közlekedés biztonságának növelése* témakörben a kutatócsoport tagjai olyan bistabil tartományok elemzését végezték el, ahol a *vontatott kerék* stabilitása jelentősen korlátozott. Meghatározták azon sebességtartományokat, melyekben az egyenes vonalú mozgás és a kerékszítálás együtt jelentkezik. Igazolták, hogy a vontatott kerék bistabil viselkedését az általuk kifejlesztett, „emlékező” gumikerék modell nagy pontossággal leírja, míg a járműdinamikában klasszikusan alkalmazott kvázi-statisztikus modellek erre nem képesek. Az „emlékező” modell validálásához nagy pontosságú mérésekre van szükség. Ezért a kísérleti berendezés átépítésére és azon egy speciális jeladó elhelyezésére került sor, amellyel akár a korábban feltárt „mikrosimmi” jelenség is vizsgálható. A bistabil viselkedéssel járó sebességtartományokat a járműből és vontatmányból álló járműszerelvényre is kimutatták a kutatók egyszerű elméleti modellek segítségével. Ezen tartományok jelenléte nagy kockázatot jelent a közúti közlekedésben, mivel veszélyes mozgások indulhatnak be teljesen biztonságosnak hitt sebességtartományokban.

2016-ban a *két forgórészes rezgékeltő* rendszer vizsgálata a nem szinkronizálódott, de stacionárius mozgások kutatására és leírására fókuszált. Bár ez az eszköz funkciójához nem kapcsolódik szorosan, mindenképpen fontos ismerni azt az üzemállapotot is, amikor a két forgórész szögsebessége eltér. Nagymértékű zavarás esetén ugyanis előfordulhat, hogy rövid ideig ilyen üzemállapotba kerül a rendszer. Ennek felismerése és optimális kezelése lehetőséget nyújt a szabályozás hatékonyságának javítására. A mozgás során a két forgórész fordulatszámja eltérő, azonban a forgórészek egymáshoz képesti helyzetének megfelelően periodikusan változik. Ennek a pulzálásnak a frekvenciája közelíthető a két forgórész átlagos fordulatszámának különbségével. A nem szinkron mozgások részletes kísérleti vizsgálata megtörtént 2016-ban, az eredmények igazolták az elméleti becsléseket és a numerikus szimulációkat. A két forgórészes rendszer esetében a szinkron és a nem szinkron mozgások határa nem egyértelmű, vannak olyan paraméter együttesek, ahol mindkét állandósult állapot lehetséges. A mérések során az egyes állapotok határait sikerült kimutatni attól függően, hogy milyen irányú az állapotok közti váltás.

A *száraz súrlódású rendszerek* vizsgálata kapcsán a kutatómunka a mechanikai érintkezés jellemzése – elsősorban a testek közötti normálerő eloszlásának kísérleti vizsgálata – irányába toltódott el. A más kutatókkal együttműködésben kidolgozott módszer azon alapul, hogy a fém testek közötti mechanikai erő eloszlás és az elektromos átmeneti ellenállás eloszlása

összefügg. A feladat kísérleti vizsgálatát elsősorban az nehezíti, hogy az érintkezés során rendkívül összetett kémiai folyamatok indulnak el, melyek során időben változik az elektromos ellenállás. Sikerült kimutatni, hogy lehetséges ezeknek a változásoknak a kompenzálása. A módszer szabadalmi eljárása folyamatban van.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai a 6-18 éves korosztály számára korcsoportonként kialakítandó, tudományos robotika oktatási modell létrehozásában vettek részt és ismeretterjesztő előadásokat tartottak a témában. Emellett középiskolás diákokat készítettek fel a Nemzetközi Fizika Versenyre (International Young Physicists Tournament, <http://iypt.org/>). A kutatócsoport vezetője előadást tartott a Bosch ECB Akadémián és 1 órás interjút adott a Tudáspresszó c. műsorban. A kutatók aktívan részt vesznek a BME-n szervezett nyílt napokon is. A kutatási témák közül elsősorban a járás és futás tanulmányozása tarthat számot széles körű érdeklődésre, mert szükség van arra, hogy tudományosan alátámasztott instrukciók segítsék az embereket a sérülések nélküli sportolásban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Új felsőoktatási kapcsolat: South-East University (Nanjing, Kína)

Nemzetközi konferenciák szervezése: Az European Nonlinear Dynamics Conference (ENOC 2017), az 14th IFAC Workshop on Time Delay Systems (2018) és a 8th CIRP Conference on High Performance Cutting (2018) konferenciák szervezése van folyamatban.

Új ipari kapcsolatok: MÁV Zrt., Műszaki szakértői munka.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport vezetője elnyerte a „State Key Laboratory of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics” pályázatát. A magyar-kínai projekt az időkéséses rendszerek vizsgálatával foglalkozik.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Beregi S, Takács D, Stépán G: Tyre induced vibrations of the car-trailer system. Journal of Sound and Vibration, 362: 214-227 (2016) <http://real.mtak.hu/32788>
2. Várszegi B, Takács D, Stépán G, Hogan SJ: Stabilizing skateboard speed-wobble with reflex delay. Journal of the Royal Society Interface, 13:(121) 1-9 (2016) <http://real.mtak.hu/40759>
3. Zelei A, Bencsik L, Stépán G: Handling Actuator Saturation as Underactuation: Case Study With Acroboter Service Robot. Journal of Computational and Nonlinear Dynamics, 12:(3) Paper 031011 (5) <http://real.mtak.hu/48142/>
4. Bencsik L, Zelei A: Effects of human running cadence and experimental validation of the bouncing ball model. Mechanical Systems and Signal Processing, Paper MSSP16-335R1, (10) (2016) <http://real.mtak.hu/48143/>
5. Csernák G: Quantization-induced control error in a digitally controlled system. Nonlinear Dynamics, (ISSN: 0924-090X) 84:(4) 1-15 (2016) <http://real.mtak.hu/39438>

MTA-BME INFORMATIKAI RENDSZEREK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Telek Miklós, az MTA doktora
1117 Budapest, Magyar Tudósok krt. 2.
telefon: (1) 463 2084; fax: (1) 463 3263; e-mail: telek@hit.bme.hu
honlap: <http://webspn.hit.bme.hu/~telek/kutcsop/>
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

5 éves kutatási terv rövid összefoglalása

Hálózati forgalmak sztochasztikus modellezése és sorbanállási rendszerek viselkedésének vizsgálata.

Megfelelő technikák kidolgozása hálózatoknak és elemeinek tervezésére, analízisére, optimalizálására, és méretezésére különböző típusú forgalmak együttes jelenléte esetén. A forgalom sztochasztikus jellemzőinek kutatása. Hatékony közelítő eljárások kidolgozása.

Kommunikációs stratégiák elméleti és gyakorlati vizsgálata. Az internet topológiájának vizsgálata, hatékony útvonal választási metódusok kidolgozása. Az útvonalválasztáshoz kapcsolódó adatstruktúrák tervezése, vizsgálata és alkalmazása.

Nagy-hatótávolságú kvantum kommunikáció vizsgálata. A jövő kvantum-kommunikációs hálózataiban rejlő lehetőségek feltérképezése a zajos kvantumcsatornák kapacitás visszaállíthatóságán keresztül.

Korábbi eredmények

Diszkrét és folytonos Markovi forgalommodelleket fejlesztettek kiszolgáló hálózatokhoz, a modelleket hatékonyan elemezték, az elméleti eszköztárat bővítették és gyakorlati alkalmazásokat is adtak. Nagyméretű számítógépes rendszerek viselkedését vizsgálták.

Komplex hálózatokban hatékony útvonalválasztás kialakítását vizsgálták helyben tárolt információk alapján, különös tekintettel a helyi memóriakorlátokra, a sebességre és a hibakezelésre. SDN hálózatokban innovatív csomagtovábbítási és hibakeresési megoldásokat adtak.

Kvantum-kommunikáció. Vizsgálták kvantum titkosító rendszerek biztonsági kérdéseit. Egy új kvantumcsatorna típust tártak fel és meghatározták annak kapacitásformuláit. Elemezték a kvantum-kommunikációs hálózatok információátviteli képességét.

Számítógépes rendszerek védelmét vizsgálták, WSN (Wireless Sensor Network) protokollokra automatizált biztonsági ellenőrző eljárást adtak.

2016-os feladatok

Dinamikus működésű tömörítési eljárások kidolgozása gyorsítótárakhoz, EPROM kezelés. Általános csomagosztályozók hatékony tömörítése. Elosztott rendszerek gazdasági modellezésének két új területe: SDN hálózatban megvalósított többutas útvonalválasztó rendszer elemzése, valamint multi-operátor környezetben szolgáltatások árazása és minőségének kapcsolata. Optimális OpenFlow csomagosztályozó architektúra tervezése, alkalmazás IPv6 adattovábbításra.

Különböző markovi modellek és struktúrák kanonikus alakja alapján pontos vagy a korábbiaknál jobb sorbanállási elemzés Markovi rendszerekre. Markov folyadék hálózatok dekompozíció alapú elemzése folytonos forgalom esetén; a rendszert jól leíró statisztikai paraméterek azonosítása és illesztése.

Kvantum-információ. CVQKD (continuous-variable quantum key distribution) rendszerek biztonsági elemzése.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Kidolgoztak olyan software-alapú kapcsolóelemeket, amelyek egy speciális alkalmazás-specifikus kód segítségével végzik a csomagok feldolgozását és így akár több nagyságrenddel is hatékonyabbak lehetnek a korábbiaknál [1]. Elosztott rendszerekhez gazdasági ösztönző mechanizmusokat dolgoztak ki, melyek biztosítják a rendszer részvevői működőképességének fenntarthatóságát az egyes szereplők preferenciáit is figyelembe véve [2].

A CVQKD kvantumtitkosító protokollokhoz új eljárásokat definiáltak a CVQKD rendszerek teljesítményének növelésére. Az optimalizáláshoz újszerű modulálási, átviteli, dekódolási és utófeldolgozási metódusokat definiáltak. Növelték a zajos kvantumcsatornákon keresztüli összefonódottság átvitel és megosztás minőségét és hatékonyságát. Elemezték a kvantum-algoritmusok alkalmazhatósági lehetőségeit a kvantum-kommunikációs hálózatokban és kvantumhálózatokban [3].

Bebizonyították, hogy a Markovi sorbanállási rendszerek egy nagyon általános családjának, a többszörös érkezéseket és kiszolgálásokat is megengedő QBD soroknak az egyensúlyi eloszlása mátrix-geometrikus, az eloszlás paramétereinek kiszámolására pedig numerikus eljárást adtak [4]. Numerikus eljárást adtak a Markovi érkezési folyamatok többszörös kiterjesztésének, a MMAP-ok távolságának kiszámítására, mely újabb illesztő algoritmusok kidolgozását teszi lehetővé [5].

A teljesítmény modellezés területén több eredményt is elértek: kiszámították folyadék vakációs modellekre teljesítményjellemzők momentumait, a sorrend átalakító kiszolgálók késleltetési idejének eloszlását [8], továbbá új módszereket adtak Markovi modellek illesztésére [9], és a térátlag (mean field) közelítést kiterjesztették egy új modell osztályra [6].

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport egy tagja a H2020 5GEx projekten is dolgozik, ami a jövőbeni 5G hálózat operátorok közös együttműködésében nyújtandó szolgáltatások gazdasági és műszaki kihívásait próbálja megoldani. A projekt partnerei (Ericsson, HP, Huawei, Deutsche Telekom, Orange, Telecom Italia, Telenor, Telefonica) közül többen jelentős magyarországi munkaadók. Az együttműködés bizonyosan növeli a résztvevő cégek versenyképességét.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A következő nemzetközi konferenciák köthetőek a kutatócsoport tagjaihoz:

a 2016-os ASMTA konferencián a programbizottság tagja volt egy csoporttag és a csoportvezető; a csoportvezető az irányítóbizottság tagja is volt

a 2016-os VALUETOOLS konferencián a programbizottság tagja volt egy csoporttag és a csoportvezető

a 2016-os, Budapesten tartott nemzetközi MAM konferencia főszervezője egy csoporttag, a program bizottság társ elnöke a csoportvezető volt, helyi szervezői két csoporttag volt

a 2016-os QUEST konferencián a programbizottság tagja volt a csoportvezető

a 2016-os EPEW konferencián a programbizottság tagja volt egy csoporttag és a csoportvezető

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport 2016-ban nem nyert el jelentős pályázatot.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Molnár L, Pongrácz G, Enyedi G, Kis Z L, Csikor L, Juhász F, Körösi A, Rétvári G: Dataplane specialization for high performance OpenFlow software switching. Proceedings of the 2016 conference on ACM SIGCOMM: 539-552 (2016)
<http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2934887>
2. Heegaard P E, Biczok G, Toka L: Sharing is Power: Incentives for Information Exchange in Multi-Operator Service Delivery. IEEE GLOBECOM, 2016: 1-7 (2016)
<http://real.mtak.hu/41377/>
3. Gyongyosi L, Imre S: Gaussian Quadrature Inference for Continuous-Variable Quantum Key Distribution. Proceedings of Spie - The International Society for Optical Engineering, 9873: 1-15 (2016) <http://arxiv.org/abs/1504.05574>
4. Horváth G: Analysis of generalized QBD queues with matrix-geometrically distributed batch arrivals and services. Queueing Systems, 82:(3) 353-380 (2016)
http://real.mtak.hu/34410/1/batchqbd4_revised2.pdf
5. Horváth G, Telek M: Fitting Methods Based on Distance Measures of Marked Markov Arrival Processes. Seminal Contributions to Modelling and Simulation: 30 Years of the European Council of Modelling and Simulation, 159-183 (2016)
webspn.hit.bme.hu/~telek/cikkek/horv16d.pdf
6. Horvath I, Telek M: Mean field for performance models with deterministic delays and interrupts. Performance Evaluation, 105: 1-21 (2016)
<http://webspn.hit.bme.hu/~telek/cikkek/horv15i.pdf>
7. Nikolenko S I, Kogan K, Retvari G, Berczi-Kovacs ER, Shalimov A: How to represent IPv6 forwarding tables on IPv4 or MPLS dataplanes. 35th IEEE Conference on Computer Communications Workshops, 521-526 (2016)
<http://ieeexplore.ieee.org/document/7562132/>
8. Saffer Zs, Telek M: Exhaustive fluid vacation model with Markov modulated load. Performance Evaluation, 98: 19-35 (2016)
<http://webspn.hit.bme.hu/~telek/cikkek/saff15a.pdf>
9. Horváth G, Reinecke P, Telek M, Wolter K: Heuristic representation optimization for efficient generation of PH-distributed random variates. Annals of Operations Research 239 (2): 643-665 (2016) <http://webspn.hit.bme.hu/~telek/cikkek/horv15c.pdf>

MTA-BME IRÁNYÍTÁSTECHNIKAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Vajk István, az MTA doktora
1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2. Q/B206
telefon: (1) 463 2870; fax: (1) 463 2871; e-mail: vajk@aut.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatási terv az alábbi témaköröket tartalmazza

Új tudományos eredmények elérése a többváltozós lineáris, nemlineáris és hibrid dinamikus rendszerek modellezése és irányítása terén. Új robusztus irányítási módszerek kidolgozása. Alkalmazásokat előkészítő innovatív kutatások végzése energetikai rendszerekben, valamint autonóm járművek és robotok optimális irányításában. Etológiai viselkedési modell alapján működő robot fejlesztése.

Az eddig elért főbb eredmények

Kétszabadságfokú szabályozási rendszerek parametrizálására és irányítására olyan új módszerek kifejlesztése, amelyek egységes szemléletmódot tesznek lehetővé a különböző szabályozási algoritmusokra. Új módszerek kidolgozása nagyméretű zajos adathalmazból történő rendszeridentifikációra. Nemlineáris rendszerek lineáris paraméterfüggő (LPV) modelljeire hatásos irányítási algoritmusok kidolgozása. Új módszerek kifejlesztése a formációban haladó közúti és légi járművek ütközésmentes pályatervezésére. Nagy fordulatszámú indukciós hajtások esetén újszerű, az öngerjesztési folyamatot szabályozó egységek kifejlesztése. Etológiai viselkedés beépítésére alkalmas mobil robotok építése, tesztelése.

A beszámolóév (2016) fő feladatai

Új módszerek kidolgozása robusztus irányítási rendszerek tervezésére. Robusztus irányítási algoritmusok alkalmazása közúti és légi járművek irányítására. Autonóm (embernélküli) járművek robusztus, költséghatékony irányítási kérdéseinek vizsgálata, formációban haladó járművek irányítása. Teljesítményelektronikai eszközök és energetikai rendszerek irányítási algoritmusainak kidolgozása és alkalmazása. Az eto-robot továbbfejlesztése.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Számos kutatási és alkalmazási eredményről számolhatnak be a közúti és légi járműirányítás területén.

Robusztus és hibatűrő, pálya- és sebességekvető járműirányítás került bemutatásra négy független kerékagymotorral szerelt jármű számára. Újrakonfigurálható irányítás került alkalmazásra, amely képes a kanyarodási ellenállás minimalizálása érdekében újratervezni a beavatkozásokat.

Kidolgozásra került egy integrált járműirányítás tervezési módszer, ami a kormányzás és differenciális fékezés integrált megoldásáról gondoskodik. A szabályozó tervezés az LPV (Lineáris Változó Paraméterű) módszeren alapul.

Egy robusztus sebességszabályozó rendszer implementációjára került sor, mely képes üzemanyag takarékos utazást biztosítani. A módszer előnye a kis számú paraméterek alkalmazása, így különféle személygépjárművekben egyaránt alkalmazható jelentősebb módosítás nélkül.

Egy kerékagymotoros járművek számára tervezett változtatható geometriájú futómű rendszer került bemutatásra, mely képes a jármű kormányzására a független kerekenkénti kerékdőlési szög és kerékkormányzás alkalmazása révén.

A robusztus irányításelmélet geometriai vonatkozásait vizsgálva új elméleti eredmények születtek (Jordan párok elmélete). A szerzők rámutatnak a matematikai elmélet és a robusztus irányításelmélet fő kapcsolódási pontjaira és lehetséges alkalmazásaira.

A rendszeridentifikáció területén új eredmények születtek erősen zajos környezetben történő identifikációs eljárásokra.

A BME Villamosmérnöki és Informatikai Karán átalakították a Szabályozástechnika tárgy tematikáját. Az új megközelítés a csoport néhány tagja által kutatott, az ún. Youla paraméterezésen alapul. A megújítás keretében új egyetemi jegyzeteket készítettek magyar és angol nyelven. Az angol jegyzetből ma már más európai egyetemek is oktatnak. A piaci igény alapján a közeljövőben a Springer is ki fogja adni az angol jegyzetet.

Az elmúlt évtizedben a hajtásszabályozásokban a nagyfordulatszámú villamos motorok előtérbe kerültek, számos új kihívást jelentve. E kutatási téma keretén belül több témakörben végeztek kutatásokat, vizsgálták az öngerjesztés, az optimális impulzusszélesség moduláció (ISZM) alkalmazását illetve a vasveszteség mérését.

A nagyfordulatszámú indukciós gépes hajtások öngerjesztése, így a motorok sziget üzemmódban generátorként való alkalmazása esetén az indukciós generátor állórészéhez kapcsolt ISZM vezérelt konverterek kiváltása egy Magnetizing Current Control (MCC) egység segítségével történik, amelyben kapcsolt passzív elemek, kapacitások és induktivitások segítségével valósítható meg a mechanikai energia villamos energiává alakítása. Három újszerű öngerjesztési folyamatot szabályozó egységet fejlesztettek ki. Az eredmények alapján az újfajta MCC topológiák alkalmazása komoly lehetőségeket jelenthet.

A nagyfordulatszámú hajtások egyik különleges tulajdonsága, hogy a névleges fordulatszám körül a motort tápláló háromfázisú inverter az úgynevezett túlmodulációs tartományban üzemel, ráadásul a kapcsolási frekvencia és a villamos frekvencia aránya is alacsony érték, ami komoly többletveszteséget jelenthet. Ennek kapcsán egy veszteségre optimalizált ISZM technika vizsgálatára került sor. Az analitikai számítások, szimulációs eredmények és laboratóriumi mérések megmutatták az ISZM technika alkalmasságát és előnyeit nyílt hurkú működés esetén, még nagyon alacsony frekvenciaarány mellett is.

Ipari partnerrel való együttműködés keretében nagyfordulatszámú szinkrongépek vasveszteségét mérő automata mérőberendezés került kifejlesztésre. A mérőberendezés alkalmas a vasveszteség pontos mérésére különböző fordulatszámokon és állórész hőmérsékleteken.

Az élőlényszerű mozgás egyik fontos követelménye, hogy a robot orientációja és mozgásiránya egymástól függetlenül is változtatható legyen (az ember oldalra is tud lépni, az autó csak előre vagy hátra mehet). Elkészült egy akadályelkerülő algoritmus, amely különböző állatokhoz, illetve emberekhez köthető szociális viselkedési formákat is figyelembe tud venni. A javasolt módszert kísérleti körülmények között tesztelték.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport három tagja az MTA rendes tagja, a kutatócsoport vezető az MTA Automatizálási és Számítástechnikai Tudományos Bizottságának elnöke. A kutatócsoport egyik tagja az MTA Elektrotechnikai Tudományos Bizottságának az elnöke.

A kutatócsoport tagjai részt vesznek a BME-n, a Pannon Egyetemen és a Széchenyi István Egyetemen az irányítástechnika oktatásában és a doktori képzésben.

PhD-s hallgatóik sikeresen szerepeltek a BME-n rendezett konferencián (AACCS'2016).

A kutatócsoport tagjai több népszerűsítő előadást tartottak, számos rádió és újság interjút adtak az év során, valamint nagyon sikeres bemutatókat tartottak a Kutatók éjszakája rendezvénysorozat keretében.

A csoport tagjai közül néhányan aktívan részt vesznek egy, az interneten is hozzáférhető anyag készítésében (<http://sysbook.sztaki.hu>), mely a mindenütt jelenlevő rendszerekről és szabályozásokról szól több szinten, szakembereknek éppúgy, mint nem műszaki háttérű érdeklődőknek. Az anyag várhatóan a szakképzésben is felhasználásra kerül.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport tagjai részt vesznek az IEEE és az IFAC több műszaki bizottságának munkájában, többen vezető tisztséget töltenek be.

A csoport tagjai közül néhányan plenáris és szekció előadásokkal, valamint szervezői munkával járultak hozzá a BME-n megrendezett SVCS'2016 szimpózium (13th Int. Symposium on Stability, Vibrations and Control of Machines and Structures) sikeréhez. A kutatócsoport egyes tagjainak aktív részvételével (előadások tartásával és szervezési tevékenységével) került megrendezésre a CERiS'16 (Workshop on Cognitive and Etho-Robotics in iSpace és az EEMC'16 (Electrical Engineering and Mechatronics Conference) párhuzamosan Debrecenben és Budapesten.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Japán-Magyar TÉT pályázat etorobotikai területen kutatók kölcsönös cseréjére.
Együttműködés a Vrije Universiteit Brussel egyetemmel PhD kutatásban.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Mihály A, Gáspár P: Robust and fault-tolerant control of in-wheel vehicles with cornering resistance minimization. European Control Conference ECC 2016, Aalborg, DK, 2590-2595 (2016) (ISBN:[978-1-5090-2590-9](#)) Link(ek): [SZTAKI](#), [DOI](#)
2. Németh B, Gáspár P, Bokor J: LPV-based integrated vehicle control design considering the nonlinear characteristics of the tire. Proceedings of the American Control Conference ACC2016, Boston, USA, 6893-6898 (2016) (ISBN:978-1-4673-8681-4) Link(ek): [SZTAKI](#), [REAL](#), [DOI](#), [Scopus](#)
3. Bars R, Bányász Cs, Keviczky L: Introducing new paradigm in basic control education using the Youla parameterization. International Conference on Engineering Education and Research ICEER2016, Sydney, AUS, (2016) Link(ek): [SZTAKI](#), [Teljes dokumentum](#)
4. Járdán R K, Stumpf P, Varga Z, Nagy I: Novel solutions for high-speed self-excited induction generators. IEEE Transactions on Industrial Electronics, 63(4): 2124-2132 (2016) Link(ek): [DOI](#), [WoS](#), [Scopus](#)
5. Kovács B, Szayer G, Tajti F, Burdelis M, Korondi P: A novel potential field method for path planning of mobile robots by adapting animal motion attributes. Robotics and Autonomous Systems, 82: 24-34 Link(ek): [DOI](#), [WoS](#), [Scopus](#)

MTA–BME KOMPOZITTECHNOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Czigány Tibor, az MTA levelező tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
telefon: (1) 463 2003; fax: (1) 463 1527; e-mail: czigany@eik.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A Kompozittechnológiai Kutatócsoport 2016. évi fő feladatának tekintette, hogy a hibridkompozitok, nanokompozitok és biokompozitok kutatási témáiban a kutatómunkát, ütemezetten tovább folytassa és ennek eredményeit rangos publikációk formájában tegye közzé.

A hibridkompozitok területén fő feladatként határozták meg az epoxigyanta mátrixú üveg (GF)-, bazalt (BF)- és szénszövet (CF) erősítésű mono- és hibridkompozitok elkészítését és tönkremeneteli folyamatainak elemzését; szívós viselkedésű hibridkompozitok károsodásának jellemzését; a szintaktikus fémhabok anyag-fáradási vizsgálatainak elvégzését. A nanokompozitok kutatási témára vonatkozóan célul tűzték ki a nanoadalékolású gumik szerkezeti jellemzői és (törés) mechanikai tulajdonságai közötti összefüggések további feltárását; a politetrafluoretilén (PTFE) grafénnal való módosítását; hőre lágyuló polimer nanokompozitok előállítását szívósságuk növelése mellett; poliamid mátrixú szénszál és szén nanocső tartalmú kompozitok fáradási tulajdonságainak elemzését és e viselkedés anyagszerkezettani magyarázatainak feltárását; a nanoszálak termomechanikai vizsgálatát. A biokompozitok esetén feladatként határozták meg az emberi arcidegek további vizsgálatát; a plazmanitridáló berendezés továbbfejlesztését; a politejsav hosszú távú viselkedésének feltárását; cellulózzal erősített politejsav határfelületi adhéziójának vizsgálatát; politejsav alapú fizikai úton habosított biohabok fejlesztését.

Az 5 éves kutatási tervükben a fő hangsúlyt a megkezdett kutatások továbbfolytatására, eredményeik publikálására és ipari területekre történő adaptálásra helyezték. Feladataikkal az ütemtervben közölteknek megfelelően, a hibridkompozitok témában a tönkremeneteli folyamatok elemzésén és a fémhabok fejlesztésén; a nanokompozitok területén a nanokompozitok vizsgálatán; míg a biokompozitok területén az implantátumanyagok, és biológiai úton lebontható kompozitok fejlesztésén keresztül, ütemezetten haladnak.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport a *hibridkompozitok* területén jelentős eredményként értékelte, hogy az akusztikus emisszióval követett húzó vizsgálatok alapján meghatározásra kerültek az epoxigyanta mátrixú GF-, BF- és CF erősítésű mono- és hibridkompozitok tulajdonságai. A rögzített jelek amplitúdója és száma szerint a legjobb adhézió az üvegszál és az epoxigyanta között alakult ki, emellett az üveg- és bazaltszállal történő társítás hatására a szénszálak kompozit károsodási formája a kezdeti szál-mátrix elválásról szálszakadásra módosult. A gumiörleménnyel társított epoxigyanta esetén megállapították, hogy a részecskék homogén elosztatására a mágneses és ultrahangos keveréssel szemben a nagy nyírás eredményező mechanikus keverés a legalkalmasabb. Megállapították, hogy 1 tömeg% mennyiségű gumiörlemény részecske több mint kétszeresére növelte a Charpy-féle ütőszilárdságot, a repedésterjedés gátlása révén. Sikeres vizsgálatsorozatot folytattak az unidirekcionális hibridkompozitok károsodás jelző funkcióinak demonstrálására is. Kimutatták, hogy a kifejlesztett túlterhelés érzékelők jelentősen növelhetik a felügyelt alkatrész merevségét, ezért az érzékelőt az alkatrészszel egy egységként kell megtervezni. Az érzékelők működését valós kompozit alkatrészekben is (pl. gáztartály, kerékpár kormány) sikeresen demonstrálták. Az

égésgátolt önerősített polipropilén (PP) kompozitok esetében kimutatták, hogy egy jól konszolidált kompozit esetében jóval alacsonyabb égésgátló tartalom mellett is önkioltó (V-0) kategória érhető el az erősítetlen PP-hez képest. Meghatározták a kerámia gömbhéjakkal, illetve építőipari perlittel töltött szintaktikus fémhabok fáradási tulajdonságai lüktető nyomó igénybevételi körülmények között. Akusztikus emissziós eljárással kiegészített nyomóvizsgálatok segítségével ugyancsak kimérésre kerültek az Al99,5 mátrix anyagú, kerámia gömbhéjakkal töltött szintaktikus fémhabok nyomóvizsgálati jellemzői és párhuzamosan elkülönítésre kerültek a nyomóvizsgálat egyes szakaszaihoz tartozó alakváltozási mechanizmusok.

A *nanokompozitok* területén a nanoadalékolású gumik szerkezeti jellemzői vizsgálták. Azonos keménységű korommal, szilikával és felületkezelt szilikával töltött hidrogénezett akrilnitril-butadién gumiknál megállapították, hogy a felületkezelés előnyösen befolyásolta a Payne-hatás (dinamikus terhelésnél megváltozik az anyag csillapító képessége) és Mullins-hatás (terhelés hatására bekövetkező lágyulás) alakulását. A PTFE grafénnal való módosításából megállapították, hogy a PTFE tribokorroziójára vonatkozó ismeretek figyelembevételével sikerült olyan grafén felületkezelést alkalmazni, amely révén a PTFE kopási tulajdonságai számottevően javultak. Befejezték a poliamid 6/szén-szál/szén nanocső hibrid kompozitok fárasztási vizsgálatait és kimutatták, hogy a nanocsövek fáradási tulajdonságokra gyakorolt kedvező hatásának az okai a nanocsövek repedésterjedést gátló, illetve hővezetést okozó tulajdonságaiban keresendők. Nanoszálal fonalakat állítottak elő, amelyeket sikeresen termomechanikai vizsgálatok segítségével minősítettek. Megállapították, hogy a nanoszálak üveges átmeneti és olvadási hőmérséklete hasonló az azonos anyagból készült fóliákéhoz, kúszási hajlama azonban szignifikánsan kisebb annál. A korábban kifejlesztett elektro-szálképző berendezést továbbfejlesztették, amelynek eredményeképpen sikerült folyamatos üzemben mintegy 250 mm széles, 300 nm átmérőjű szálakból álló szalagot előállítani. Megépítettek egy a kompozitok és a felületi rétegek koaptatására alkalmas vizsgálóberendezést. Olyan, kerámiaszemcsés erősítésű, alumíniummátrixú kompozit prototípusokat terveztek és állítottak elő, amelyeket az együttműködő partnerük lövésteszteken minden korábbi energiaelnyelő rendszerrel jobbnak talált. Ipari partnerük megkezdte a kerámia nanokompozit anyagú fogászati abutmentek gyártását.

A *biokompozitok* területén tovább folytatták az emberi arcidegek vizsgálatát és az ideg húzására vonatkozó erő-tartomány meghatározását, valamint a különböző tárolási módok hatását minősítették. További fejlesztéseket hajtottak végre a plazmanitridáló berendezésen, amelynek köszönhetően elindították a bioanyagok aktív ernyős és előfeszítéses plazmanitridálásának kutatását. A szakirodalomban elsőként publikálták, hogy a politejsavból (PLA) fröccsöntött és egyben fröccsöntés után hőkezeléssel kikristályosított termékek hőalakítását nem csak a kristályos részarány, hanem azonos kristályos részarány esetén a PLA-ra jellemző α és α' kristály-módosulatok aránya is döntő mértékben befolyásolja. A PLA kúszással szembeni ellenálló-képességének vizsgálata során kimutatták, hogy annak kristályossága jelentős mértékben növeli ezt az ellenálló-képességet. Igazolást nyert továbbá, hogy azonos kristályos részarány mellett, a rendezettebb α típusú kristálymódosulat kialakításával a kúszási ellenállás tovább fokozható. Cellulóz erősítésű fröccsöntött PLA biokompozitok esetén kimutatásra került, hogy a cellulóz szálak és a PLA között nem alakul ki erős adhéziós kötés, amely a cellulóz nagymértékű természetes nedvességtartalmára vezethető vissza. Igazolást nyert továbbá, hogy maleinsav-anhidriddel ojtott PLA-t alkalmazva kapcsolószerként a PLA cellulóz szállal kialakított adhéziója javítható. Folytatták a PLA szuperkritikus fluidum állapotban lévő szén-dioxiddal történő habosíthatóságának vizsgálatát és az így gyártott biohabok széleskörű vizsgálatát is.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai szakmai utat szerveztek a K-2016-os düsseldorfi műanyagipari világkiállításra, ahol több mint 60 hallgatóból álló csoporttal vettek részt. 2016 decemberében aktívan részt vettek „Az ember alkotta anyag – a XXI. század anyaga” című, több mint 300 fős, az MTA-n megrendezett konferencia szervezésében és lebonyolításában. A 2016-os év témája az intelligens műanyagok voltak. A rendezvény célja közérthetően bemutatni a polimerek és kompozitok alkalmazásának előnyeit. A kutatócsoport részt vett az MTA Szál és Kompozittechnológiai Tudományos Bizottság üléseinek szerzésében, valamint Magyarország legnagyobb impakt faktorú folyóiratának, Express Polymer Letters kiadásában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport 2016-ban is számos új együttműködést alakított ki. A „Nano- és makroméretű részecskék ultrahangos elosztatásának fejlesztése” című Magyar-Japán TÉT pályázat keretében sikeresen kapcsolatot létesített Innovative Composite Centerrel (Kanazava, Japán). A hegesztési szakterületre vonatkozóan együttműködést alakítottak az Universitatea Politehnica din Bucuresti, centrul CAMIS-sal (Bukarest, Románia). A nanoadalékolt gumik esetén együttműködést alakítottak ki a Vietnámi Tudományos és Technológiai Akadémiával (Hanoi, Vietnám). A fogászati implantátumok felületkezelésével összefüggésben együttműködést alakítottak ki a Semmelweis Egyetem, Fogorvostudományi Kar, Arc,-Állcsont,-Szájsebészeti és Fogászati Klinikával.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai 2016-ban is számos pályázatot nyújtottak be és nyertek el, amelyek a következők: „Égégátolt polimer kompozitok fejlesztése mérnöki alkalmazásokhoz” című NKFIH pályázat (NKFIH K 120592), 47 340 000 Ft elnyert támogatás. A kutatás során célul tűzték ki az autópárhazban használható, sorozatban gyártható, bonyolult 3 dimenziós alkatrészek előállítását szálerősített kompozitból.

„Értéknövelt, multifunkcionális biopolimer csomagolási rendszer kifejlesztése és gyártástechnológiájának megtervezése” című NVKP pályázat (NVKP_16-1-2016-0012) 194 822 964 Ft elnyert támogatás. A kutatás során célul tűzték ki innovatív biopolimer csomagolási rendszerek prototípusainak kifejlesztését.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szebényi G, Czigány T, Vermes B, Ye XJ, Rong MZ, Zhang MQ: Acoustic emission study of the TDCB test of microcapsules filled self-healing polymer. Polymer Testing, 54: 134-138 (2016) <http://real.mtak.hu/42892>
2. Kádár Cs, Máthis K, Orbulov IN, Chmelik F: Monitoring the failure mechanisms in metal matrix syntactic foams during compression by acoustic emission. Materials Letters, 173: 31-34 (2016) <http://real.mtak.hu/34644>
3. Tábi T, Hajba S, Kovács JG: Effect of crystalline forms (α' and α) of poly(lactic acid) on its mechanical, thermo-mechanical, heat deflection temperature and creep properties. European Polymer Journal, 82: 232-243 (2016) <http://real.mtak.hu/40168>

MTA–BME KONDENZÁLT ANYAGOK FIZIKÁJA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Mihály György, az MTA rendes tagja

1111 Budapest, Műegyetem rkp. 1-3.

telefon: (1) 463 2312; fax: (1) 463 4180; e-mail: mihaly.gyorgy@mail.bme.hu

a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az 5 éves kutatási tervben a nanométer mérettartományú szerkezetekben megvalósuló elektromos és mágneses jelenségek kísérleti és elméleti vizsgálata játszotta a központi szerepet: a nanotechnológiai eljárásokkal épített szerkezetek spin-polarizált elektrontranszportja és spin-rendeződése, az atomi önszerveződés folyamatát is kihasználó nanoelektronika, valamint a félvezető nanopálcák és grafén-alapú áramkörök.

A kutatócsoport a 2012-2016 időszakban alacsony hőmérsékletű és nagy mágneses terű elektromos transzport méréseket, magneto-optikai spektroszkópiai kísérleteket, valamint nanométerű heteroátmenetek STM technikával történő előállítását és vizsgálatát végezte. E kísérleti témák mellett fontos szerepet töltött be az egzotikus mágneses rendeződések és kölcsönhatások elméleti kutatása.

A 2016 évi munkaterv a nanométer méretű analóg memóriaelemek (memrisztorok) vizsgálatát és a grafén alapú elektronikai áramkörök készítését és minősítését emelte ki elsődleges célként.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport kiterjesztette az ezüstsulfid alapú memrisztorok kísérleti vizsgálatát a kémiai összetétel szempontjából szimmetrikus Ag-Ag₂S-Ag felépítésű rendszerekre. A vékony ezüst szál elszakításával létrehozott, majd kénezett ezüst nanokontaktus jól reprodukálta a memrisztorokra jellemző feszültség-áram karakterisztikát, és a korábban tanulmányozott rendszerekhez hasonlóan néhány tizedvolttal kapcsolva a rosszul vezető OFF és a jól vezető ON állapot között. A várakozásnak megfelelően az állapotok közti kapcsolás polaritása, azaz az feszültség-áram hurok körbejárás iránya, ebben a teljesen szimmetrikus elrendezésben véletlenszerű volt. Ezzel szemben azonban az STM technikával kialakított Ag-Ag₂S-Ag memrisztor esetében – amikor egy hegyes ezüst tű érintkezik a tömbi ezüst felületen kialakított ezüst-szulfid nanoréteggel – a polaritást egyértelműen meghatározza a geometriai aszimmetria. A felismerés jelentősége, hogy nem szükséges kémiailag semleges komponenst alkalmazni reprodukáló viselkedést mutató memrisztorok létrehozásához, mert az elektromos tér inhomogenitása önmagában elegendő a kapcsolás polaritásának rögzítéséhez. Erre alapozva a kutatócsoport munkatársai elsőként hoztak létre – egyszerű elektronsugaras litografálással – egy olyan aszimmetrikus planáris Ag-Ag₂S-Ag memrisztor, amelyben az aktív zóna egy litografált ezüst rétegben elektromigrációval és az azt követő kénezéssel lett kialakítva. A kutatócsoport fenti eredményei a (Nature) Scientific Reports folyóiratban jelentek meg [1].

A kutatócsoport új eredményeket ért el a felfüggesztett grafén áramkörök vizsgálatában. Nagy mágneses térben ez a kétdimenziós rendszer egzotikus állapotokat vehet fel: a fél-egész és frakcionális kvantum Hall-effektuson kívül például kvantált völgy Hall-effektus is

megjelenhet. Ezen állapotokban a kvantált vezetőképességű él-állapotok szállítják az áramot a minta szélein, azonban ezek között erős az átszórások jöhetnek létre a széleken jelentkező rendezetlenség miatt. A Bázeli Egyetemmel együttműködve a csoport megvizsgálta, hogyan lehet olyan vezetési csatornákat létrehozni, amelyek távol kerülnek a minta szélétől és a nem kívánt szórásoktól. A kapuelektrodákra kapcsolt feszültségek segítségével kialakított p és n adalékolási tartományok határán sikerült létrehozni olyan kvantált vezetési csatornákat, amelyek segítségével hatékonyan lehet az áramot bevezetni a nagy tisztaságú grafén lemez belsejébe [2].

A kutatócsoport új eljárásokat fejlesztett ki félvezető InAs nanopálcán alapuló áramkörök előállítására és vezérlésére. Sikerült egy olyan áramkört fejleszteni, amiben a spin-pálya kölcsönhatás erősségét jelentősen lehet hangolni (két-háromszorosára) kapuelektrodákra kapcsolt feszültséggel [3]. Egy új marási technológiát is megvalósított a kutatócsoport, amely nagyon előnyösnek bizonyult a nanopálcák kontaktálásánál [4]. Ezek a munkák a Bázeli és a Koppenhágai Egyetemmel együttműködésben készültek.

A spintronikai kutatások kiterjedtek a szilícium kristályba ágyazott foszforatomra lokalizált vezetési elektron spinjének kvantumbitként történő alkalmazásának elméleti vizsgálatára is. A kvantumbit hatékony elektromos vezérlése válik lehetővé egy olyan elrendezésben, amikor a foszforatom a szilícium és egy szigetelő réteg határfelülete közelében helyezkedik el, és a rá ható elektromos tér fém-elektrodákkal szabályozható. A kutatócsoport részletesen vizsgálta, hogy a kvantumbitben tárolt információ milyen időskálán törlődik ki a környezettel való kölcsönhatás következményeként. A kutatás legfontosabb eredménye, hogy egy ilyen nanoszerkezetben a kvantumbit élettartama akár nyolc nagyságrenddel is rövidebb lehet, mint a tömbi szilíciumba ágyazott foszforatomot jellemző élettartam. Az eredmények várhatóan elősegítik a szilícium-alapú nanoszerkezetekkel megvalósított kvantumbit-kísérletek értelmezését, és az ilyen eszközök optimalizált tervezését [5].

Az elméleti kutatások *ab initio* számolásai megmutatták, hogy Pt/Fe/Pd(111) vékonyrétegben a platinát kismértékben irídiummal ötvözve frusztrált kicserélődési kölcsönhatások jelennek meg, melynek következtében mágneses tér jelenlétében vonzó mágneses skyrmionok alakulnak ki. Ezek a skyrmionok fűrtöket képezhetnek, melyek termikus stabilitását a kutatócsoport tagjai spin-dinamika szimulációkkal vizsgálták [6]. Új módszert vezettek be mágneses pásztázó alagút elektronmikroszkópban (STM) alagutazó elektronok töltés és vektor-spin transzportjának kombinált számítására. Az Fe/W(110) felületre végzett számolásaik arra utalnak, hogy mágneses STM kontaktusban a spin-transzfer nyomaték (STT) és áram kapcsolata hatvány-függést mutat, valamint demonstrálták, hogy mágneses STM kontaktusokban az STT hatékonysága növelhető, amelyet technológiai alkalmazásokban ki lehet aknázni [7].

b) Tudomány és társadalom

Az ezüstsulfid alapú memrisztorok alkalmazása szempontjából nagy jelentőségű az elektronsugaras litografálásával történő készítés lehetősége. Ezeknek az analóg memóriaelemeknek a hálózatba szervezése a mesterséges intelligencia előállításának új lehetőségeit nyitja meg. A grafén alapú elektronika és az elméletileg tanulmányozott spin-qubit a kvantum számítógépek megvalósításához járul hozzá, míg az STT technika a modern mágneses adattárolás leghatékonyabb eszköze. Valamennyi terület az interdiszciplináris nemzetközi kutatások központjába tartozik.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kiemelt publikációkban megjelenő eredményekhez hozzájáruló nemzetközi kapcsolatok: Lancaster University (UK), University of Basel (Switzerland), Niels Bohr Institute, University of Copenhagen (Denmark), University of Regensburg, University of Konstanz (Germany).

Matthias Droth 2016 júliusától kezdve 2 éves időszakra náluk dolgozik posztdoktorként, a Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) finanszírozásával.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport egyik tagja az összefonódottság geometriai vonatkozásainak vizsgálatára az Université de Technologie de Belfort-Montbéliard (Franciaország) 4 hónapos kutatói ösztöndíját nyerte el.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Gubicza A, Manrique DZs, Pósa L, Lambert CJ, Mihály G, Csontos M, Halbritter A: Asymmetry-induced resistive switching in Ag-Ag₂S-Ag memristors enabling a simplified atomic-scale memory design. Scientific Reports, 6: Paper 30775. 9 p. (2016) Open Acces
2. Tóvári E, Makk P, Liu MH, Rickhaus P, Kovács-Krausz Z, Richter K, Schönenberger C, Csonka S: Gate-controlled conductance enhancement from quantum Hall channels along graphene p-n junctions. Nanoscale, 8: 19910 (2016) Open Acces
3. Scherübl Z, Fülöp G, Madsen MH, Nygård J, Csonka S: Electrical tuning of Rashba spin-orbit interaction in multigated InAs nanowires. Phys. Rev. B, 94: 035444 (2016) <https://arxiv.org/abs/1601.01854>
4. Fülöp G, d'Hollosy S, Hofstetter L, Baumgartner A, Nygård J, Schönenberger C, Csonka S: Wet etch methods for InAs nanowire patterning and self-aligned electrical contacts. Nanotechnology, 27: Paper 195302 (2016) <https://arxiv.org/abs/1601.01562>
5. Boross P, Széchenyi G, Pályi A: Valley-enhanced fast relaxation of gate-controlled donor qubits in silicon. Nanotechnology, 27: 314002 (2016) <https://arxiv.org/abs/1602.03691>
6. Rózsa L, Deák A, Simon E, Yanes R, Udvardi L, Szunyogh L, Nowak U: Skyrmions with Attractive Interactions in an Ultrathin Magnetic Film. Physical Review Letters, 117: 157205 (2016) <https://arxiv.org/abs/1606.02464>
7. Palotás K, Mándi G, Szunyogh L: Enhancement of the spin transfer torque efficiency in magnetic STM junctions. Physical Review B, 94: 064434 (2016) <https://arxiv.org/abs/1603.01714>

MTA-BME MŰSZAKI ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Horvai György, az MTA rendes tagja

1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.

telefon: (1) 463 4056; fax: (1) 463 3408; e-mail: george.horvai@mail.bme.hu

a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az öt éves kutatási terv összefoglalása

Szelektív, szupramolekuláris kölcsönhatásokra képes receptorokat nanoszerkezetekkel kombinálva, új elveken alapuló mérési eljárások és költséghatékony analitikai mérőeszközök létrehozása, számítógépes modellezéssel alátámasztva. A részfeladatok megnevezései alatt először a 2016 év kezdetéig megvalósult eredményeket mutatják be.

Szintetikus receptorok

Két szívinfarktus marker fehérjére és két vírusra állítottak elő DNS aptamereket, valamint egy baktérium DNS és egy fehérje mikroRNS detektálására peptidnukleinsavakat. RSV vírust kimutató módszert dolgoztak ki. Fehérjékre szelektív MIP-eket és fotokapcsolható MIP mikroszemcséket állítottak elő. Új ion-szelektív receptor molekulákat szintetizáltak nanopórusokban történő mérésekhez. Gázérzékelésre alkalmas Ti és W vegyület nanostruktúrákat állítottak elő és teszteltek.

Érzékelés és elválasztás funkcionális nanoszerkezetekkel

Megoldották vírusok számlálását kvarc nanopipettákkal. Különböző receptorokkal módosított szilárdtest nanopórus membránokat állítottak elő, majd mikrofluidikai rendszerbe integrálták. Elkészítették az integrált nanopórus platform prototípusát, mely 6 különböző biomarkert képes mérni teljes vérből. SERS kémiai érzékelést dolgoztak ki.

Számítógépes modellezés

Fluid határfelületi rendszerek felületi molekuláinak azonosítására korábban kidolgozott módszerükkel értelmezték a víz felületi feszültségének hőmérsékleti anomáliáját. Aceton-víz és aceton-metanol valamint vizes tenzid rendszerek határfelületi viselkedését írták le. Lipid membránokban anesztetikumok tulajdonságait, aeroszolon különböző vegyületek adszorpcióját vizsgálták.

A 2016 év feladatai a fenti témák további kutatása voltak.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Szintetikus receptorok

Originális aptamerek

A proNT-BNP fehérjére N terminális epitópjára történő aptamer szelekció eredményeként kapott oligonukleotidok közül hatot tanulmányoztak AlphaScreen és SPR segítségével. A mérések eredményeként kijelenthető, hogy a szelekció sikeres volt, minden tanulmányozott aptamer szelektíven kötődik a célfehérjéhez. A SELEX eljárásban a DNS egyszálúsítását optimalták. A humán légúti óriássejtes vírusra (RSV) szelektált aptamerek felhasználásával kifejlesztett módszerük klinikai mintákon való alkalmazhatóságát igazolták.

Molekuláris lenyomatú polimerek (MIP-ek)

Tormaperoxidáz és lizozim fehérjékre imprintelt termoreszponzív poli(N-izopropilakrilamid) alapú nanogéleket állítottak elő a templát fehérjét szilárd fázishoz, üveggyöngyökre immobilizálva, majd a polimerizációt a fehérje jelenlétében végezve. Az oldatban képződött nem imprintelődött nanogélt, maradék monomert és iniciátort szobahőmérsékleten történő

mosással eltávolították, míg a fehérjék körül képződött, azokhoz erősen kötődő, imprintelődött nanogél részecskéket a hőmérséklet megváltoztatásával szelektíven lehetett leoldani. Stöber szilikagél szemcsék felületét módosították tormaperoxidáz fehérjével, valamint egy RAFT-ágenssel, majd a felületről kiindulva növesztettek pár nanométer vastagságú polimer héjat a fehérje köré. A fehérjét enzimatis emésztéssel eltávolítva imprintelt mag-héj részecskéket nyertek, amelyeket ligandum-kötő assay-ekben terveznek felhasználni. Feltárták a MIP (és egyéb) izotermák illesztése körüli nehézségek matematikai okait. Új leírást adtak MIP-ek kompetitív izotermájára. MIP-ek prepolimerizációs elejében szupersztöchiometrikus komplexképződést tártak fel.

Nanotechnológiai eljárásokkal előállított szelektív felismerésre alkalmas nanoszerkezetek, nanokompozitok

ALD-vel ZnO nanofilmet (16 nm vastag) növesztettek kvarc kristály mikromérleg gázszenzorra, és kimutatták, hogy már ilyen vékony oxid filmnek is van megfelelő gázérzékelő tulajdonsága. ALD TiO₂ nanofilmme bevont pórusos, ún. multi channel plate (MCP) Kapton membránt állítottak elő elektron detektálás céljára. Fotokatalitikus WO₃ nanoszemcséket és nanoszálakat állítottak elő hidrotermális eljárással és hevítéssel. WO₃ nanoszemcsékre kristályos TiO₂ nanofilmet növesztettek ALD-vel, és tanulmányozták a WO₃/TiO₂ kompozitok fotokatalitikus hatását. Összefoglaló cikket közöltek ALD-vel előállított fotokatalitikus fém-oxid vékony filmekről.

Érzékelés és elválasztás funkcionizált nanoszerkezetekkel

Mikro RNS mérésre nanopórusos szenzor módszert dolgoztak ki, amely a miRNS és nanorészecskék versengésén alapul. Az eljárás során a mérendő molekulánál jóval nagyobb átmérőjű (és ezért könnyebben kezelhető) nanopórusok belső falához immobilizálták a receptor molekulát (peptid nukleinsav), majd a receptorral gyenge komplexet alkotó DNS-sel módosított arany nanorészecskéket kötöttek a receptorhoz. A nanorészecskék bekötődése a nanopórusos membrán elektromos ellenállásának növekedésével járt. A kimutatandó mikro RNS a receptorral stabilabb komplexet alkotva kiszorította nanorészecskéket a pórusból, ezáltal a pórus ellenállása csökkent.

Számítógépes modellezés

Fluid határfelületek vizsgálata

Gyors és pontos módszert dolgoztak ki a laterális nyomásprofil számítására töltéseloszlással rendelkező molekulák folyadékfázisának felülete mentén. A módszert alkalmazták CCl₄, acetone, acetonitril, metanol, víz felületén a felületi feszültség egyes felszín alatti rétegek közötti megoszlásának kiszámítására. Eredményeik azt mutatják, hogy az első molekuláris réteg járuléka a felületi feszültséghez legalább 90%, és a teljes felületi feszültség lényegében az első két molekuláris rétegből származik. Vizsgálták a vízmolekulák dinamikus tulajdonságait víz/levegő határfelületen. A felületi molekulák gyorsabban mozognak, H-kötéseik pedig átlagosan rövidebb ideig élnek, mint tömbfázisbeli társaik esetében. A felületen az átlagosnál hosszabban tartózkodó molekulák klasztereket alkotnak, egymással átlagosan több és erősebb, míg a felület alatti rétegbeli társaikkal az átlagosnál lényegesen kevesebb hidrogénkötést alkotnak.

Szilárd határfelületek vizsgálata

Megállapították, hogy a CH₄ és CF₄ molekulákkal ellentétben a részlegesen fluorozott metánszármazékok erős, többrétegű adszorpciót mutatnak jég felületén. Az első rétegbeli CH₃F molekulák H atomjaikkal fordulnak a jégfázis felé, több gyenge, C-H donált H-kötéseket alakítva ki a felszíni vízmolekulákkal. Ezzel szemben a CH₂F₂ és CHF₃ molekulák legalább egy F atomjukkal a jégfelület felé fordulnak, és erős, O-H donált hidrogénkötéseket alkotnak (akceptorként) a jégfelszíni vízmolekulákkal. Metilamin adszorpciója esetén a telített monoréteg kiemelkedően stabilnak bizonyult. Az adszorbeálódott molekulák nagy orientációs változatosságot mutattak.

b) Tudomány és társadalom

A csoport egy tagja az Elsevier kiadó MethodsX című folyóiratánál Editor in Chief pozíciót tölt be. Másik tagja a European Molecular Liquids Group nevű nemzetközi tudományos szervezet elnöke, az OTDT Kémiai és Vegyipari Szakmai Bizottságának elnökhelyettese. Titkára a Pro Scientia Aranyérem Odaitélő Bizottság természettudományi albizottságának és részt vett a Hevesy György országos kémiaverseny országos döntőjének lebonyolításában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Új tudományos együttműködések: magyar-osztrák kétoldalú együttműködés (OMAA), magyar-francia TÉT együttműködés, PICS francia pályázat, Montenegrói-Magyar TÉT, magyar-román kétoldalú együttműködés, magyar-szerb kétoldalú együttműködés.

Vendégkutatók: 3 kutató a Belgrádi Egyetemről 3-5 hetes időtartamra; 1 kutató a Novi Sad-i Egyetemről 2 hónapra.

Hazai és nemzetközi konferenciák szervezése: European Molecular Liquids Group konferenciájának szervezése (Chania).

Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok: Szerződéses K+F munkákat végeztek KKV-knak és a GE, Wienerberger, Papst, FHL Björn, Axon, CEVA, CF Pharma cégeknek.

Oktatás egyetemeken: A csoport minden tagja aktívan oktat a BME-n, két tagjuk az ELTE-n, az SE-n, a Pázmány Péter Katolikus Egyetem Információs Technológiai és Bionikai Karán és az Eszterházy Károly Főiskolán, többen ezen egyetemek doktori iskoláiban is.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA - Biológiai vagy környezeti szempontból releváns határfelületi rendszerek vizsgálata számítógépes szimulációs módszerekkel;

Magyar-francia TÉT - Biológiai releváns molekulák oldódása szuperkritikus széndioxid társoldószerekkel alkotott elegyeiben;

Magyar-osztrák kétoldalú együttműködés - Wirkungsweise von Anästhetika untersucht durch Computersimulationen;

Montenegrói-Magyar TÉT pályázat - Synthesis, physico-chemical and biological characterization of new transition metal complexes with pyrazole derivatives and their potential application;

Magyar-román mobilitási pályázat - Semiconductor oxide nanostructures for optical and solar applications;

Magyar-szerb mobilitási pályázat - Preparation and characterization of selective molecularly imprinted polymer sorbents.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Sega M, Fábrián B, Horvai Gy, Jedlovsky P: How is the surface tension of various liquids distributed along the interface normal? J. Phys. Chem. C, 120: 27486 (2016)
2. Lautner G, Plesz M, Jágerszki G, Fürjes P, Gyurcsányi RE: Nanoparticle displacement assay with electrochemical nanopore-based sensors. Electrochem. Commun., 71: 13 (2016)
3. Boyadjiev S, Georgieva V, Yordanov R, Raicheva Z, Szilágyi IM: Preparation and characterization of ALD deposited ZnO thin films studied for gas sensors. Appl. Surf. Sci., 387: 1230 (2016)

MTA-BME SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Faigl Ferenc, az MTA doktora
1111 Budapest, Budafoki út 8.
telefon: (1) 463 3652; fax: (1) 463 3648; e-mail: ffaigl@mail.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az 5 éves kutatási célkitűzés rövid összefoglalása

A csoport kutatási céljai az „*Elemorganikus vegyületek regio- és sztereoszelektív reakciói, környezetkímélő szintézis módszerek*” témakörben elsősorban a gyógyszer- és finomkémiai jelentőségű szintézisekhez kapcsolódnak. A fő kutatási területek: A) poláris fémorganikus vegyületek regio- és sztereoszelektív reakcióinak és a foszfororganikus vegyületek újszerű előállítási lehetőségeinek a vizsgálata; b) Speciális környezetbarát szintézismódszerek - nagy szelektivitású heterogén katalitikus reakciók és mikrohullámú aktiválás - alkalmazási lehetőségeinek vizsgálata; c) Új organokatalizátorok előállítása és tesztelése enantioszelektív reakciókban valamint az enantiomer keverékek tulajdonságainak, racémátok hatékony rezolválási lehetőségeinek vizsgálata.

A 2012-2015 időszakban elért legfontosabb eredmények

Nagy szelektivitású fémorganikus reakciók és rezolválás kombinálásával új 1-fenilpirrol alapvázú bifunkciós atropizomer vegyületek két regioizomer sorozatát szintetizálták és sikerrel alkalmazták enantioszelektív katalitikus reakciókban. Nemzetközi együttműködés keretében új módszereket dolgoztak ki 1-fenilpirrol alapvázú, napelemekben szenzibilizátorként használható vegyületek előállítására, valamint új típusú, konjugált kettőskötés rendszerű 5-ildénpirrol-2(5H)-onok szintézisére. Foszfororganikus vegyületek - közöttük a csontritkulás kezelésében fontos dronátok - újszerű, környezetbarát előállítását oldották meg. Kabachnik–Fields-reakciókat újszerű módon, katalizátor hozzáadása nélkül, mikrohullámú körülmények között valósították meg és a foszfororganikus termékeket katalizátorként használható új platina-komplexek szintézisében hasznosították. Új heterogén katalitikus eljárásokat fejlesztettek: ebben a témakörben egy új, originális magyar gyógyszer (cariprazine, Richter Nyrt) kulcsintermedierjének előállítására a csoportban kidolgozott hidrogénezési lépést tartalmazó eljárás szabadalmi oltalmakat kapott újabb 2 országban.

A rezolválásokkal kapcsolatos kutatási eredményeket felhasználva 2015-ben a Richter NyRt számára egy új racémát tiszta enantiomerjeinek elválasztására dolgoztak ki eljárást, a cseh Zentiva gyógyszergyár megbízására pedig két új, találmányi bejelentéssel is védett rezolválási eljárást dolgoztak ki generikus hatóanyagok ipari előállítására. Az eredményeket a 2012-2015 időszakban 77 tudományos cikkben, 30 konferencia közleményben, 3 könyvfejezetben, 5 megadott szabadalomban, 2 találmányi bejelentésben és 3 megvédett PhD értekezésben tették közzé.

A kutatócsoport főbb kutatási feladatai 2016-ban az alábbiak voltak

A) A 9-oxo-9H-pirrolo[1,2-a]indolok hatékony előállítására alkalmas szintézismódszer kidolgozása; a korábban kidolgozott eljárás kiterjeszhetőségének vizsgálata. További új, katalizátor ligandumként használható optikailag aktív 1-fenilpirrol-származékok előállítása és tesztelése. B) Aminofoszfónátok és aminofoszfín-oxidok környezetbarát előállításának kutatása. Egy- és kétfogú foszfín ligandumok előállításának vizsgálata királis aminok, illetve aminosavak Kabachnik-Fields reakciójával mikrohullámú körülmények között. C) A heterogén katalitikus reakciókban katalizátormérgeknek tekintett vegyületek hidrogénezésében a molekulaszervezet és a mérgező hatás közti összefüggések, és a

nemesfém-katalizátorok szelektivitását befolyásoló tényezők vizsgálata. E) A kutatócsoport tagok feladata volt a befogadó tanszék oktatómunkájában való részvétel.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A csoportban előállított új, 9-oxo-9*H*-pirrolo[1,2-*a*]indol összekötő elemű szenzibilizátorokat sikeresen tesztelték a partner olasz kutatócsoportok, az eredményekből közös publikáció készült, melynek on line változata 2017 januárjában megjelent (Eur. J. Org. Chem.). A konjugált kettőskötés rendszerű 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-onok előállítására kifejlesztett új módszert kiterjesztették a pirrol-származékok széles körére, valamint e metódika alkalmazásával egy új, szubsztituált indolokat eredményező indol-szintézist fejlesztettek ki. A csoport által előállított új atropizomer aminoalkohol ligandumok halogénszármazékait előállították és megállapították, hogy ezek a vegyületek az alapvegyületeknél nagyobb mértékű aszimmetrikus indukciót képesek kiváltani (termék ee>95%).

Környezetbarát eljárást dolgoztak ki α -aril- α -aminofoszfónatok és α -aril- α -aminofoszfinoxidok előállítására >P(O)H reagensek iminekre történő addícióján keresztül. A reakciókat mikrohullámú besugárzás hatására, katalizátor nélkül, rövid idő alatt hajtották végre. Tanulmányozták optikailag aktív mono- és bisz-(*S*)- α -feniletil-aminometilfoszfónatok, valamint (*S*)- α -feniletilaminometilfoszfinoxidok előállítását Kabachnik-Fields reakcióval mikrohullámú körülmények között, katalizátor és a legtöbb esetben oldószer nélkül. Az (*S*)-bisz(difenilfoszfinoilmetil)- α -feniletil-amint deoxigénezés után optikailag aktív kétfogú foszfín ligandumként hasznosították királis platina-komplex szintézisében.

Kidolgozták a (\pm)-*transz*-dihidronarciklazin – egy jelentős citosztatikus hatással rendelkező fenantridon alkaloid – és analogonjainak sztereoselektív totálszintézisét, vanillinból kiindulva. Ennek során ciklusos, telített nitrovegyületek heterogén katalitikus hidrogénezését is megvalósították. Új, enantiomertiszta piridino-18-korona-6-étereket állítottak elő és ezeket a koronaéter-származékokat palládiumkatalizált, heterogén katalitikus hidrogénezési reakcióban a megfelelő piperidino-18-korona-6-éterekké alakították át teljes konverziót és jó termelést elérve. A vindolin nevű alkaloid heterogén katalitikus hidrogénezésével (Pd/C, etanol/diklórmetán, légköri nyomás, szobahőmérséklet) kapott termék *N*-bróm-szukcinimides (NBS) reakciója szokatlan eredményt adott: három termék képződött, melyek közül az egyik klórszármazék volt. A reakcióelegyben jelenlévő kloridiont feltehetően az NBS oxidálta elemi klórrá, ami a klórszármazék képződését okozta.

Ebben a munkaszakaszban kidolgoztak egy olyan félfolyamatos rezolváló eljárást, ahol a rezolváló ágens a rezolválás végeztével a reaktorban marad és újból felhasználható. Megoldották a diasztereomer sóképzéses rezolválás invazív in-line nyomon követését RAMAN szondával. Megállapították azt is, hogy az ultrahang alkalmazásának jótékony hatása van a rezolválás eredményére abban az esetben, ha a folyamat során a kinetikus kontrollnak van meghatározó szerepe.

- A kutatási eredményekből 2016-ban összesen 20 cikk, 3 könyvfejezet, 6 konferencia közlemény, 2 találmányi bejelentés, 1 megadott szabadalom 23 külföldi és hazai konferencia előadás készült.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai 2016-ban is részt vettek tudományos diákköri munkát végző, szakdolgozatot, diplomamunkát készítő hallgatók témavezetésében, gyakorlatok, előadások tartásában. A csoportvezető rektori megbízottként felügyelte a BME Tehetségsegítő Tanács

munkáját, emellett a Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar dékánjaként irányította a középiskolásoknak szervezett 2016. évi BME Nyílt Nap kari rendezvényeinek szervezését, valamint a biomérnök képzés megalapításának 40. évfordulójáról megemlékező kari rendezvényt, melyre ipari és társegyetemi partnereket is meghívtak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Az alapkutatások műszeres analitikai támogatásában 2016-ban is elsősorban a Servier Gyógyszerkutató Intézettel és a Bálint Analitika Kft-vel működtek együtt. A beszámolási időszakban a Richter Gedeon NyRt-vel és a cseh Zentiva gyógyszergyárral kötött szerződéses kutatómunkában vettek részt. A Sanofi-Chinoin által támogatott doktoráns dolgozatának elkészítését témavezetőként segítette a kutatócsoport vezetője. Az olasz Nemzeti Kutatási Tanáccsal (CNR) folyó együttműködéshez 2016-ban csatlakozott egy faenzai CNR kutatócsoport is.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai 2016-ban 1 új posztdoktori pályázatot nyertek el, 4 OTKA pályázat teljesítésében vettek részt és sikeresen oldottak meg 3 ipari K+F szerződéshez kapcsolódó feladatot. A kutatócsoport vezető résztvevője a BME által 2016 novemberében elnyert FIEK 16-1-2016-0007 sz. pályázatnak. A projekt megvalósításában a kutatócsoport tagjaira is számítanak. A tárgyévben két külhoni szabadalmi bejelentés született és megadásra került egy korábbi szabadalmi bejelentés. A CNR firenzei intézetével fennálló tudományos együttműködés keretében, az új olasz résztvevők segítségével sikerült az előállított napelem festékek tesztelése, az erről szóló közös közlemény online verziója már megjelent (DOI: 10.1002/ejoc.201601622).

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Faigl F, Deák Sz, Mucsi Z, Hergert T, Balázs L, Boros S, Balázs B, Holczbauer T, Nyerges M, Mátravölgyi B: A novel and convenient method for the preparation of 5-(diphenylmethylene)-1H-pyrrol-2(5H)-ones; synthesis and mechanistic study. *Tetrahedron*, 72(35): 5444-5455 (2016)
2. Lövei K, Bana P, Örkényi R, Túrós Gy I, Éles J, Novák Z, Faigl F: Continuous flow synthesis of heterocyclic scaffolds Design principles of multistep systems – A review. *Chimica Oggi - Chemistry Today*, 34(4): 18-20 (2016)
3. Bálint E, Tajti Á, Dzielak A, Hägele G, Keglevich G: Microwave-assisted synthesis of amino-methylene-bisphosphine oxides and amino-methylene-bisphosphonates by a three-component condensatio. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, 12: 1493-1502 (2016)
4. Tajti Á, Bálint E, Keglevich G: Synthesis of ethyl octyl α -aminophosphonate derivatives. *Current Organic Synthesis*, 13: 638-645 (2016).
5. Varró G, Hegedűs L, Simon A, Kádas I: An efficient stereoselective total synthesis of (\pm)-trans-dihydronarciclasine. *Tetrahedron Letters*, 57: 1544–1546. (2016)
6. Keglevich A, Hegedűs L, Péter L, Gyenese J, Szántay Cs Jr, Dubrovay Zs., et al. (6): Anomalous products in the halogenation reactions of Vinca alkaloids. *Current Organic Chemistry*, 20: 2639–2646 (2016)

MTA-BME SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Tóth Bálint, az MTA doktora
1111 Budapest, Egry József u. 1.
telefon: (1) 463 1101; fax: (1) 463-1677; e-mail: balint@math.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A beszámolási időszak a kutatócsoport tevékenységének tizennyolcadik éve, egyben a negyedik pályázati ciklus ötödik éve. A csoport egy régi-új taggal erősödött, aki sikeres posztdoktori évek után tért haza.

A csoport pályázatában megfogalmazott, 2012-től 2016-ig szóló kutatási tervek három fő területre vonatkoztak: „Sztochasztikus folyamatok”, „Ergodelmélet és dinamikai rendszerek”, valamint „Matematikai statisztika és információelmélet”. Ezen belül a sztochasztikus folyamatok körében voltak legszerteágazóbbak a kitűzött célok. Itt az eddigi eredmények a felsorolt 10 témakör közül 8-at érintenek, leginkább a perkolációval és a kölcsönható részecskerendszerekkel kapcsolatosakat (nem minden eredmény sorolható be egyértelműen), és további 1 témakörben van publikáció előkészületben. Az ergodelmélet és dinamikai rendszerek területén felsorolt 3 témakör közül 2-ben jelent meg eddig cikk, a harmadikban félkész kéziratok vannak. A harmadik, statisztika és információelmélet területen megfogalmazott kérdések mindegyikében született eredmény. Emellett – ahogy az a matematikában természetes – számos olyan eredmény született, ami a tervezett témákhoz lazán kapcsolódik.

A 2015. évi beszámoló kapcsán 2016-ra megfogalmazott konkrét célok bolyongások rekordjainak élettartamára, a Kardar-Parisi-Zhang egyenlet magasságfüggvényének fluktuációikra, affin iterált függvényrendszerek attraktoraira, valamint egy dinamikai hővezetés-modell ritka kölcsönhatás határesetére vonatkoztak. Ezek mindegyike meg is valósult, részben megjelent publikáció, részben kézirat formájában. Ezen kívül számos eredmény született a kutatási terv többi részéhez kapcsolódóan.

A beszámolóban – az elmúlt évek gyakorlatának megfelelően – kizárólag a kutatócsoport alkalmazottainak a témához közvetlenül kapcsolódó munkáiról adnak számot.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Kölcsönható részecskerendszerek

Folytonos és szimmetrikus lépéseloszlású bolyongásokat vizsgáltak. Minden $k=1,2,\dots$ esetére megadták a k -adik leghosszabb ideig fennálló rekordnak a teljes időtartamból vett arányának univerzális aszimptotikus viselkedését, ill. annak a valószínűségnek a viselkedését, hogy a k -adik rekord pontosan az n -edik lépésben dől meg. Megmutatták továbbá, hogy a rekordok fennállási idejeinek sorba rendezett arányai a Poisson-Dirichlet-eloszláshoz konvergálnak. [4]

Dinamikai rendszerek statisztikus viselkedése

Csatolt tágitó dinamikai rendszerek invariáns mértékeit vizsgálták átlagtér-csatolás mellett. A csatolás erősségének az irodalomban korábban két bifurkációs értékét azonosították. Az itt fellépő jelenségeket sikerült most interpretálni a részecskék szinkronizációjának jelenségén

keresztül. Másfelől kiterjesztették a modellt végtelen sok részecske esetére. Ebben az esetben olyan jelenségeket figyeltek meg, amik kis rendszerekben is megjelentek nagyon erős csatolás esetén. [1]

Folytonos idejű síkbeli biliárdokra bizonyítottak exponenciális keverést abban az esetben, amikor a kezdeti eloszlás a fázistéren nem abszolút folytonos, hanem egy instabil görbére van koncentrálva - vagyis egy úgynevezett „standard pár” írja le. A korábbi, abszolút folytonos kezdeti eloszlásokra vonatkozó eredmények ilyen általánosítása elengedhetetlen ahhoz, hogy folytonos idejű biliárdokra is alkalmazható legyen a standard pár módszer, ami az elmúlt évtizedben lassú-gyors rendszerekben az átlagolási folyamatok megértéséhez az egyik leghatékonyabb eszköznek bizonyult.

Egy síkbeli szóró biliárd részecskéből és egy vele időnként ütköző egydimenziós dugattyúból álló kölcsönható rendszert vizsgáltak a ritka kölcsönhatás határesetben. Heurisztikus érveléssel és numerikus eszközökkel megmutatták, hogy a biliárd részecske energiája, mint az idő függvénye, ugró Markov folyamathoz konvergál, és meghatározták a generátort.

Olyan síkbeli szóró biliárdokat vizsgáltak, amiknek konfigurációs terében érintő sarokpontok vannak. Ezekben a kellően sima megfigyelhető mennyiségekre nem-standard normálású centrális határeloszlás tétel érvényes. Megmutatták, hogy a megfelelően normált Birkhoff összegek második momentuma konvergens, de a határérték kétszerese annak, amit a nem-standard határeloszlás tételből várhatnánk.

Attraktorok és fraktálok dinamikai rendszerekben

Olyan affin iterált függvényrendszerek családját vizsgálták, ahol a lineáris részek egyszerre diagonalizálhatók. Meghatározták az önaffin attraktor és az önaffin mértékek Hausdorff dimenzióját, és felső becslést adtak a kivételes paraméterek halmazának dimenziójára. [2]

Információelmélet és matematikai statisztika

Stacionárius folyamatokban a hátralévő várakozási időre kétféle univerzális becslési eljárás van. Az egyikben a hiba majdnem biztosan tart nullához, a másikban pedig valamilyen integrál-normában. Ezek az eljárások többnyire különbözőek, mert a konzisztenciájuk különböző eszközökkel bizonyítható. Most egy olyan eljárást konstruáltak, aminek az átlagos hibája hosszú távon eltűnik minden időpillanatban, míg maga a hiba nullához tart megállási időknél egy teljes sűrűségű sorozata mentén. [3]

b) Tudomány és társadalom

2016-ban nem volt a csoportnak kifejezetten ilyen célú rendezvénye.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A 2016-os év során a korábbi aktív hazai és nemzetközi kapcsolatok mellett intenzív együttműködés alakult ki Lipcsei Egyetemmel. A régi kapcsolatok közül legélénkebb az együttműködés a bécsi (Universität Wien) és a brüsszeli (Université libre de Bruxelles) egyetemmel, valamint a Lengyel Tudományos Akadémia Matematika Intézetével (IMPAN).

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-tól a csoport egy tagja az NKFI posztdoktori pályázatát nyerte el, egy pedig a Nemzeti Kiválóság Program posztdoktori kutatói ösztöndíját. Egy munkatárs Bolyai ösztöndíjat nyert el.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bálint P, Sélley F: Mean-field coupling of identical expanding circle maps. *J. Stat. Phys.*, 164(4): 858-889 (2016)
2. Bárány B, Rams M, Simon K: On the dimension of self-affine sets and measures with overlaps. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 144: 4427-4440 (2016)
3. Morvai G, Weiss B: A Versatile Scheme for Predicting Renewal Times. *Kybernetika*, 52(3): 348-358 (2016)
4. Szabó R, Vető B: Ages of records in random walks. *J. Stat. Phys.*, 165(6): 1086-1101 (2016)

MTA-BME VÍZGAZDÁLKODÁSI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Józsa János, az MTA levelező tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
telefon: (1) 463 1164; fax: (1) 463 1879; e-mail: jozsa.janos@epito.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport tevékenysége, röviden vázolva (1) az 5 éves kutatási tervet; (2) az eddig teljesítetteket és, hogy (3) mi volt a beszámoló év fő feladata:

Vízfolyásokban

(a) folyami áramlások kaotikus jellege és örvénydinamikája: (1) Labor- és terepi vizsgálatok folyószakaszokra. Elméleti és numerikus modellek fejlesztése az elkeveredés Lagrange-féle leírására, felhasználása térbeli modell igazolására. (2) Labor- és terepi vizsgálatok alapján az elméleti és Lagrange-féle numerikus modellek kifejlesztésre kerültek. Kidolgoztak egy újszerű, drón-alapú terepi méréseket megalapozó módszertant. Az eddigi vizsgálatokból rangos folyóiratcikk megjelentetése, további vizsgálati módszerek föltárása. A hidrodinamikai elkeveredést irányító nyereghalmaz vizsgálatának kiteljesítése. (3) PhD értekezés készítése. A sekélyfolyadék-egyenlet örvénytranszport-alakja új formában való felírásra.

(b) folyók hidromorfológiája: (1) Duna- és Tisza-szakaszokon a térbeli áramlások mederfejlődésre gyakorolt hatásának vizsgálata, hordalékhozam-összefüggések felállítása. A mederfejlődés lokálisan finomított rácshálóval való modellezése. A morfometriai elemzés bővítése a folyók hordalékhozamával, nem-meanderező vízfolyástípusok esés- és vízhozam-függésével. (2) Jelentős Duna- és Tisza-szakaszokon adatgyűjtés, elemzés, kereszt-összefüggések fölállítása. A lokális hálófelbontású modellezés sikeres implementálása. Morfometriai megalapozás. Üledékvizsgálatok vízminőségi hatásokra való kiterjesztése. Kanyarfejlettség-esés-vízhozam összefüggés pontosítása. PhD értekezés megvédése. Hajók keltette hullámok folyóparti hatásának mérése és számítógépes modellezése. (3) Vegyes szemösszetételű mederanyag változó tér-idő viselkedésének pontosított szimulálása.

(c) a fitoplankton dinamikája folyóvízben: (1) A finom részecskék kiülepedésének vizsgálata pl. a Rábán, mesterséges árhullám-viszonyok között. Hosszmenti fitoplankton-eloszlások felvétele. Fitoplankton-növekedés modellezése közepes méretű folyókon (pl. Zala, Szamos). A tartózkodási idők hidrodinamikai meghatározása a kaotikus advekciós és örvénydinamikai eredmények felhasználásával. (2) A Szamos vízgyűjtő- ill. fitoplankton-modelljének felállítása, vízgyűjtő-gazdálkodási tervek elemzése. (3) A fitoplankton-kutatás során szerzett tapasztalatok hasznosítása szennyezőanyagok viselkedésének leírásában (pl. PIdent projekt).

Sekély tavakban

(d) dinamikus kölcsönhatás jellegzőnák határfelületein: (1) A tó nádasának átmeneti zónáiban a kölcsönhatás fő jellemzőinek detektálása helyszíni mérésekkel, adatelemzéssel. A kölcsönhatás-mechanizmus matematikai leírása és modellekbe illesztése. A nádasok evapotranszpirációjának örvénykovariancia-elvű meghatározása. (2) A mérőrendszer felállítása, mérési-elemzési módszertan kidolgozása, három év méréseinek végrehajtása. Átfogó elemzés, energia-mérleg felállítása, párolgási és áramlási következtetések. PhD értekezés írása. Hozzájárulás az új Fertő Stratégiához. Energia-mérleg, párolgási és áramlási következtetések véglegesítése, PhD értekezés megvédése. (3) OTKA pályázat készítése.

(e) fitoplankton ökológiai kutatás a Balatonon: (1) Automatikus adatgyűjtés és feldolgozás. Transzport-hatás modellezése a lokális koncentrációváltozásokra. A fitoplankton fotoszintetikus paramétereinek változása a fényviszonyok és a függély menti keveredés hatására. Kísérletek algák tenyésztéssel, fluoreszcens nyomjelzővel. (2) Az adatsorok

szisztematikus bővítése, az elemzési eljárások továbbfejlesztése. A hőmérsékleti rétegződés hatása a felkeveredésre, fénybehatolásra, ezáltal a fitoplankton fejlődésére. A hőmérsékleti rétegződés és hullámozás együttes hatása a felkeveredésre, gázcsere és anyagforgalomra. (3) A modellfejlesztési eredmények publikálása az Inland Waters-ben.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Folyami áramlások kaotikus jellege és örvénydinamikája témakörében a csoport tudományos segédmunkatársa megvédte „A kaotikus advekciónak hatásának vizsgálata folyami sarkantyúk körüli elkeveredési folyamatokban” című PhD értekezését. Ebben kerültek rendszerezésre és összefoglalásra a témában az elmúlt évek kutatási eredményei. Az értekezés téziseiben a dunai mérések alapján kaotikus viselkedésre utaló jellegzetességek (kezdeti feltételekre való érzékenység, időszakosan exponenciális ütemű eltávolodások) kerültek megfogalmazásra. A laboratóriumi mérésekből kimutatásra került a felszíni áramlás kaotikus jellege.

Egy másik csoporttag munkájaként a sekélyfolyadék-egyenlet örvénytranszport-alakja új formában került felírásra, a mélység-gradiens fokozottabb hatásának kimutatására a rotáció-egyensúlyban. Az alkalmazott geometriai objektumokkal a potenciális örvényesség invarianciája is megmutatkozott. Az egyenlet Lie-féle szimmetriacsoportjainak elemzéséből egyszerű csoportinvariáns, analitikus megoldások kerültek felírásra, többek között egy forgásinvariáns megoldás, szoros analógiát mutatva az ún. Duffing oszcillátor fázisképével. A rendszerben a mederalakot befolyásoló és a szélerősség paraméterével bifurkációs vizsgálatok kerültek végrehajtásra. Megkezdődött az új egyenletalak nemlineáris numerikus analízise is.

Folyók hidromorfológiája témakörben a Pannon-medence szabályozás előtti folyómedreire esés-vízhozam-kanyarfejltség értékekből egy modell került létrehozásra és illesztésben pontosításra a meanderező folyók várható kanyarfejltségének megadására.

Egy másik tag által végzett laboratóriumi vizsgálatokra építve kidolgoztak egy számítógépes modellezési eljárást, amelyben a vegyes szemösszetételű mederanyag tér-idő viselkedését (mederpáncélozódás, szelektív eróziós folyamatok, finom hordalék kiülepedése) pontosabban tudják szimulálni; az eredményeket nemzetközi impakt faktoros folyóiratban publikálták. Részben saját terepi adatok alapján összekapcsolt áramlási, hordalékvándorlási és mederanyag-vizsgálati módszerekkel feltárták a Duna felső-magyarországi szakaszának alaktani változásait és becsülték a jövőben várható morfológiai változásokat. Az eredményeket hazai impakt faktoros folyóiratban publikálták. Folytatták a hajóhullámok által a folyópartra kifejtett eróziós hatások vizsgálatát, ehhez módszertani fejlesztést hajtottak végre és teszteltek a Dunára. A helyszíni adatgyűjtésben akusztikus és képalapú mérési eljárásokat alkalmaztak, amivel a hullámjelenségek hatását számszerűsíteni tudják. Az új tudományos eredményeket nemzetközi, impakt faktoros folyóiratban publikálták.

Folyóvízi vízminőség témakörben a szerves mikroszennyezők laboratóriumi kísérletekben és folyóhálózatokban mutatott perzisztenciáját vizsgáló PIdent projekt 2016-ban sikeresen befejeződött, az eredményekből kettő Environmental Science & Technology publikáció született. A projektben kifejlesztett modellszoftvert a Német Szövetségi Környezetvédelmi Hivatal (Umweltbundesamt) felvette eszközei közé.

A sekély tavak témakörében a csoportvezető irányításával négy éves, közel negyven milliós összköltségvetésű OTKA pályázat került elnyerésre, amelyben az eddigi, sekély vízi feltételekre fókuszált eredmények továbbvitele került célkitűzésre.

A fitoplankton ökológiai kutatása keretében a Keszthelyi-medencében meglévő automatikus mérőállomást 2016-ban is üzemeltették, a globális limnológiai mérőhálózatok részeként. A 2016-os szezonban ADCP mérések is folytak. A folyamatos adatgyűjtés és a nagy időbeli

felbontású mérés lehetővé teszi a tavak anyagcseréjének részletes vizsgálatát, a fizikai illetve ökológiai folyamatok szerepének pontosabb megértését. Az immár sokéves adatbázis lehetővé tette javított anyagforgalmi modellek kifejlesztését, és a fitoplankton hosszútávú viselkedésének elemzését. Az eredményekből a XXXIII. SIL konferencián két előadás és cikk született. A témával két csoporttag foglalkozott, külső terepi segédcsapattal.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport több tagja tartott előadást konferenciákon. A csoporttagok több tudományos és ismeretterjesztő előadást tartottak különféle szakmai rendezvényeken (pl. SIL XXXIII. konferencia, Torino). A kutatócsoport képviseltette magát több hazai és nemzetközi konferencián, és részt vett nemzetközi tudományos konferencia szervezésében (Particles in Europe 2016).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A *folyami hidromorfológiai kutatásokban* a csoport továbbra is együttműködik a Norvég Műszaki és Tudományegyetemmel (NTNU), folyók lebegtetett hordalékszállításának akusztikus mérésében. Az Iowai Egyetemmel indirekt görgetett hordalékmérési eljárások fejlesztése folyik. A Svájci Szövetségi Víztudományi és Technológiai Intézettel szerves mikroszennyezők környezeti viselkedését leíró modellek fejlesztése zajlik. A csoport két taggal képviselteti magát a Global Lake Ecology Observatory Network világszervezetben. A csoport részt vett a 2016 végén zárult ES1201 NETLAKE COST projektben, amelynek célja tavak automatikus monitorozása volt. Csoportvezető tagja az Országos Környezetvédelmi Tanácsnak, elnöke a Bolyai Ösztöndíj VI. Szakkollégiumának, tagja az MTA Környezettudományi Elnöki Bizottságának, és irányítótestületi elnöke az MTA Víztudományi programjának. Egy csoporttag az Inland Waters szerkesztője.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Kutatócsoporti részvétellel támogatást kapott a SEDDON II Interreg V-A AT-HU 2014-2020 határon átnyúló projekt, amelyben pl. új folyami hordalékmérő eljárást fejlesztenek. Kutatócsoporti részvétellel indult a 2016-ban elnyert DanubeSediment projekt a Duna Transznacionális Programban, a Duna hordalékviszonyainak feltárása, a hordalékegyensúly és mozgás vizsgálata, megoldások kidolgozása. Csoportvezető irányításával támogatást kapott a „Sekély tavak fizikai folyamatainak kölcsönhatása tér- és időbeli léptékeken keresztül” c. OTKA pályázat, amiben megfigyelés-vezérelt fizikai modellrendszert dolgoznak ki a helyi jelenségek pontosabb leképezésére, ezzel a tőléptékű fizikai folyamatok jobb szimulálására.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Fleit G, Baranya S, Rüther N, Bihs H, Krámer T, Józsa J: Investigation of the Effects of Ship Induced Waves on the Littoral Zone with Field Measurements and CFD Modeling. *Water*, 8:(7) Paper 300. 21 p. (2016)
2. Honti M, Hahn S, Hennecke D, Junker T, Shrestha P, Fenner K: Bridging across OECD 308 and 309 Data in Search of a Robust Biotransformation Indicator. *Environmental Science & Technology*, 50 (13): 6865–6872 (2016)
3. Honti M, Istvánovics V, Staehr PA, Brighenti LS, Zhu MY, Zhu GW: Robust estimation of lake metabolism by coupling high frequency dissolved oxygen and chlorophyll fluorescence data in a Bayesian framework. *Inland Waters* 6(4): 608-621 (2016)

MTA-DE EGYENLETEK, FÜGGVÉNYEK, GÖRBÉK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Pintér Ákos, az MTA doktora
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

telefon: (30) 525 9685; fax: (52) 512 728; e-mail: apinter@science.unideb.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport tagjai különböző matematikai diszciplínákkal foglalkoznak. Fő feladatuk, hogy kutatásokat végezzenek számelméleti és differenciálgeometriai témákban, azokat lehetőség szerint ismertessék magas színvonalú hazai rendezésű illetve nemzetközi konferenciákon. Készüljenek fel tudományos fokozatuk megszerzésére és vegyenek részt aktívan a Debreceni Egyetem Matematikai Intézetének oktatómunkájában. A csoport kiemelt feladata, hogy biztosítsa az intézetnek a kutatói utánpótlást. A csoport az 5 éves kutatási tervben is ezeket a célokat tűzte ki, amelyek megvalósulását a publikációk és a konferencia részvételek is mutatják. A kutatóhely tagjai intenzív oktatómunkát folytatnak a Matematikai Intézetben, továbbá a fiatal kutatók közül hárman is megvédték PhD disszertációjukat.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport tagjai elméleti matematikai kutatásokat folytattak differenciálgeometriai és számelméleti, azon belül is diofantikus egyenletekkel foglalkozó területeken. Korábbi kutatásaik során síkbeli halmazok röntgenfüggvényeik segítségével történő rekonstruálhatóságát vizsgálták. 2014-ben sikerült leírni olyan algoritmust, amely síkbeli, összefüggő, hv-konvex (azaz horizontálisan és vertikálisan konvex), kompakt halmazok közelítőleges visszaállítását teszi lehetővé mindösszesen két koordináta-röntgenfüggvény alapján, amennyiben a halmaz egyértelműen meghatározott. Ennek az algoritmusnak az alapja egy 0-1 változós lineáris programozási feladat megoldása. Ezt az eredményt 2015-ben kiegészítették azzal, hogy bebizonyították, hogy abban az esetben, ha a koordináta-röntgenfüggvényeknek mérési adatai véletlen hibával terheltek, akkor nulla annak a valószínűsége, hogy az eljárás eredményeként kapott halmazsorozat határértékének a rekonstruálni kívánt halmaztól mért Hausdorff-távolsága nagyobb bármely előre rögzített pozitív értéknél (sztochasztikus konvergencia). Mivel az egészértékű lineáris programozási feladatok megoldása általában nehéz, ezért az elmúlt évben a fenti algoritmus olyan módosításán dolgoztak, amely lehetővé teszi a folytonos változók használatát. Cserébe sajnos le kell mondaniuk a célfüggvény linearitásáról, amelyről azonban belátható, hogy konvex. Ennek a célfüggvénynek a minimumát keresik, így egy konvex programozási feladathoz jutottak, amely gyorsan megoldható és a megoldás garantáltan globális minimumhelyet szolgáltat. Egy másik probléma, amivel szintén az elmúlt egy évben foglalkoztak, hogy miként módosítható, a fenti rekonstrukciós eljárás, ha az ismeretlen halmaz diszkrétnek tekinthető abban az értelemben, hogy előállítható egy négyzetrács pontjaiban elhelyezett, diszjunkt, páronként egybevágó körlemezek, vagy négyzetek uniójaként. Jelenleg vizsgálják, hogyan viszonyul az így kapott eljárás a diszkrét tomográfiában már használt algoritmusokhoz. A tavalyi évben folytatták a párhuzamosított Finsler-sokaságok vizsgálatát, ám ezúttal a két struktúra (párhuzamosítás és Finsler-függvény) kompatibilitása helyett az ún. erős kompatibilitást tételezték fel. Kiderült, hogy ha egy Finsler-sokaságon meg tudnak adni a Finsler-függvénnyel erősen kompatibilis párhuzamosítást, akkor a Finsler-sokaság szükségképpen Berwald típusú. Foglalkoztak továbbá J. A. Wolf egy Riemann-geometriai eredményének a Finsler-esetre való általánosításával. Ennek kapcsán sikerült szükséges és elegendő feltételt találni arra, hogy egy párhuzamosított Finsler-sokaság mikor válik Lie-

csoporthá. (A Lie-csoportok – ellátva a kanonikus bal-párhuzamosítással – tekinthetők a legegyszerűbb, legtermészetesebb párhuzamosított sokaságnak.) Ehhez az eredményhez a párhuzamosítás szimmetriacsoportjának vizsgálatára volt szükség. A kutatócsoport diofantikus egyenletekkel foglalkozó tagjai végességi tételeket bizonyítottak az $f_k(x) = g(y)$ egyenletre, ahol $f_k(x) = \sum_{0 \leq i \leq k} \prod_{0 \leq j \leq i} (x+j)$ és $g(x)$ egy racionális együtthatós polinom, továbbá vizsgálták az $f_k(x)$ polinom felbonthatóságát. Részletesen foglalkoztak a centrális figurális számokkal (aritmetikai tulajdonságok, egyenlő értékek), továbbá a diszkrét matematikában is jelentős szerepet játszó Stirling számok általánosításainak tekinthető Legendre-Stirling számokkal. A fenti végességi állítások bizonyításában kulcsszerepet játszik a Bilu-Tichy tétel, amely leírja, hogy egy $f(x)=g(y)$ típusú, úgynevezett szeparábilis diofantikus egyenletnek mikor van végtelen sok egész megoldása. Ehhez kapcsolódóan az egyenletben szereplő f és g polinomok összetételét (decomposition) kell vizsgálni. Izgalmas kérdés, hogyan hat az összeadás a polinomok összetételére. Ez általánosságban meglehetősen nehéz kezelni, azonban abban a speciális esetben, amikor Bernoulli-polinomok lineáris kombinációját tekintjük, sikerült részeredményeket elérni. Analóg állításokat és sejtéseket fogalmaztak meg Euler polinomok lineáris kombinációira is.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai rendszeresen részt vesznek a tudománynépszerűsítő előadások szervezésében és tartásában. Ilyen események voltak a Kutatók Éjszakája, illetve a középiskolás matematikatanároknak tartott ankétok. Témavezetőként aktívan dolgoztak a Természettudományi és Technológiai Kar középiskolásoknak szervezett Nyári Táborában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport illetve a Györy-iskola elismertségét mutatja, hogy egyre többen jelentkeznek hozzájuk külföldről kutatómunkát végezni. A csoport helyzetéből adódóan rendkívül szoros kapcsolatban áll a Debreceni Egyetem Matematikai Intézetével, a PhD hallgatók szemeszterenként 2-4 órát, a többiek 8-9 órát tartanak az alap illetve mesterképzésben. Több hallgatónak szakdolgozat illetve diplomamunka témavezetői. A kutatócsoport vezetője a Matematikai és Számítástudományi Doktori Iskola törzstagja, egyik alprogramjának és két PhD hallgatónak a témavezetője.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Tudományos eredményeiért egy kutatójuk 2016-ban elnyerte a Grünwald Géza Díjat. Egy fő kitüntetéses doktori fokozatot szerzett. Ketten aktív résztvevői voltak az OTKA NK 104208 pályázatnak, továbbá egy fő résztvevője volt a Györy Kálmán akadémikus által vezetett OTKA pályázatnak is.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Aradi B: Parallelisms and Finsler structures, Doktori (PhD) értekezés, 2015/16.
2. Nagy Á: Általánosított kúpszeletek és alkalmazásai, Doktori (PhD) értekezés, 2016.
3. Varga N: Figurális számok és diofantikus egyenletek, Doktori (PhD) értekezés, 2016.
4. Pintér Á, Rakaczki Cs: On the decomposability of linear combinations of Bernoulli polynomials. Monatshefte Math., 180: 631-648 (2016)

MTA-DE HOMOGEN KATALÍZIS ÉS REAKCIÓMECHANIZMUSOK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Joó Ferenc, az MTA rendes tagja
4002 Debrecen, Pf. 400.
telefon: (52) 512 900; e-mail; joo.ferenc@science.unideb.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az 5 éves kutatási célkitűzés fő koncepcionális eleme a koordinációs és fémorganikus komplex katalizátorok alkalmazása volt vizes oldatokban és kétfázisú rendszerekben, szoros egységben a katalizált folyamatok mechanizmusának vizsgálatával. 2011-2015 során a kutatócsoport lényeges előrehaladást tett mind új katalizátorok szintézise, mind azok szerveskémiai folyamatokban történő alkalmazása terén (ez időszakban 45 tudományos dolgozat jelent meg).

A 2016. évre kijelölt főbb kutatási területek a következők voltak:

Új, katalitikusan várhatóan aktív fémkomplexek szintézise, jellemzése és alkalmazása hidrogénezési, hidrogén-átviteli és C-C kapcsolási reakciókban (Suzuki-Miyaura és Heck-kapcsolás) vizes-szerves kétfázisú rendszerekben.

Szén-dioxid hidrogénezése; hidrogén reverzibilis tárolása és fejlesztése

Vizes közegű fémorganikus katalízis mágnesesen hiperpolarizált molekulák előállítására para-hidrogén-indukált polarizáció (PHIP) révén.

Halogénezett szerves vegyületek és ipari jelentőségű szerves festékek redukív és oxidatív lebontása. Nagy oxidatív stabilitású katalizátorok és környezeti szempontból megfelelő oxidálószeres (hidrogén-peroxid, oxon) reakciói, a folyamatok mechanizmusának felderítése.

Heterogén katalízis és heterogén fotokatalízis. Mezopórusos, szilícium-dioxid alapú hibrid és funkcionizált aerogélszármazékok előállítása és felhasználása környezetszennyező anyagok lebontásában.

Elméleti kémiai számítások a katalízis kutatások és új anyagfeleségek előállítása céljából.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Több új vízoldható, *N*-heterociklusos-karbén (NHC)-tercier foszfin vegyes ligandumú Ru(II)-komplexet állítottak elő, melyeket oldatban és szilárd fázisban sokoldalúan jellemeztek. Az új komplexek kiemelkedően aktív katalizátornak bizonyultak szerves halogénvegyületek hidrodehalogénezésében nátrium-formiátról történő hidrogén átvitelrel. Az eredményeket közölték (*J. Mol. Catal. A-Chemical*; editor's choice közlemény).

Felismerték, hogy nátrium-karbonátos közegben a dikloro-Ru(II)-(*p*-cimol) dimer komplex nagy hatékonysággal katalizálja különféle allil-alkoholok redox izomerizációját. Megállapították, hogy ezért a hatásért egy új, karbonáto-Ru(II) komplex képződése a felelős, melyet oldatban és szilárd fázisban egyaránt részletesen jellemeztek spektroszkópiai és egykristály röntgendiffrakciós módszerekkel. Az eredményeket közölték (*Inorg. Chim. Acta*).

Vizes közegben propargil-alkoholt, metanolos oldatban pedig metil-propiolátot hidrogéneztek para-hidrogénnel, [Rh(OH)(NHC)] és *cisz-mer*-[IrH₂Cl(*mtp*pms)₃] (*mtp*pms = monoszulfonált trifenilfoszfin) katalizátorokkal. Előbbi esetben a polarizált H NMR jel élettartama mintegy

10 perc, utóbbiban mintegy 5 perc volt. Mindkét adat nagyon figyelemre méltó, mert a polarizáció lecsengési ideje rendszerint csak 1-2 perc.

Új vízoldható Pd(II)-szalán komplexeket állítottak elő, melyeket sikerrel alkalmaztak az un. Suzuki-Miyaura C-C kapcsolás katalízisére vizes-szerves kétfázisú rendszerekben.

Felismerték, hogy az egyszerű módon nyerhető *cisz-mer*-[IrH₂Cl(*mtp*ppms)₃] komplex kiemelkedő aktivitással képes a hangyasav bontására. Ez a komplex a hangyasav bontásának eddig ismert harmadik legnagyobb aktivitású (óránként 298 000 katalitikus ciklus), emellett stabilis katalizátora. A folyamatban hidrogén és szén-dioxid képződik, aminek a hidrogén (azaz energia) átmeneti tárolásában lehet szerepe. Ezt elősegíti, hogy szén-monoxid koncentrációja a nyert gázelegyben a gázkromatográfiás kimutatási határ alatt volt. Az eredményeket közölték (*Dalton Trans.*).

A számításhoz kémia alkalmazásával több jelentős vizsgálathoz járultak hozzá (fényemittáló polimerek előállítására és szolvatokróm tulajdonságaik vizsgálata; szolvatokróm tulajdonságú un. click-reagensek előállítására; semleges poliizobutilének gázfázisú reakciói és tömegspektrometriás meghatározásuk kidolgozása). Az eredményeket magas színvonalú folyóiratokban (*J. Phys. Chem. B; Dyes and Pigments; J. Am. Soc. Mass Spectrom.; J. Photochem. and Photobiol. A-Chemistry*) közölték.

Nem egymás melletti hisztidil- és ciszteinil- kötőhelyeket tartalmazó hexapeptidek réz(II), nikkel(II)- és cink(II)-komplexeinek egyensúlyi viszonyait vizsgálták potenciometriás és spektroszkópiai módszerekkel és megállapították a kialakuló komplexek oldatbeli szerkezetét. Az eredményeket közölték (*New J. Chem.*).

Az 1,10-fenantrolin peroxomonoszulfáttal (Oxon) végzett oxidációjában a várakozással ellentétben 1,10-fenantrolin-*N,N'*-dioxid képződését is észlelték. A reakció kinetikájának részletes tanulmányozásával javaslatot tettek a reakció mechanizmusára és az 1,10-fenantrolin-*N,N'*-dioxid preparatív előállítására. Az eredményeket közölték (*J. Org. Chem.*).

Ibuprofen is ketoprofen kioldódás kinetikáját vizsgálták módosítatlan és zselatinnal módosított szilika aerogélekből. Annak ellenére, hogy az aerogélek felépítése és pórusszerkezete nem különbözött lényegesen, a kioldódás kinetikája jelentős különbségeket mutatott. Az eredményeket, melyek az aerogélek, mint gyógyszerhordozók alkalmazásának fejlesztését segíthetik, közölték (*Colloids Surfaces B:Biointerfaces; Dyes and Pigments*).

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport kutatásai jelentős mértékben a környezettel összefüggő problémák megoldására (szerves oldószerek használatának kiküszöbölése, oxidációs és redukációs módszerek kidolgozása szennyező anyagok lebontása), fémkomplexek biológiai hatásának, a komplexek képződésének és lebomlásának vizsgálatára tovább hidrogén reverzibilis tárolása/fejlesztése megoldására irányulnak, melyek mind lényeges társadalmi kérdések. E téren elért eredményeikért a kutatócsoport vezetője 2016-ban elnyerte az MTA Debreceni Területi Bizottsága DAB Pro Scientia Érmét, és a kutatásokról áttekintő közlemény jelent meg a Debreceni Szemle c. folyóiratban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Nemzetközi együttműködésben végeztek kutatásokat a kétfázisú katalízis terén az Almeriai Egyetem (Spanyolország) kutatóival. E munkákból közös közlemény jelent meg (*J. Molecular Catalysis A:Chemical*).

Részt vettek a COST CM1205 Akció (Catalytic Routines for Small Molecule Activation; CARISMA) keretében folytatott együttműködésben, az eredményekből közleményt jelentettek meg (*Dalton Trans.*).

A kutatócsoport munkatársai 2016-ban is részt vettek a DE Fizikai Kémiai Tanszékének valamint Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének oktatómunkájában, laboratóriumi gyakorlatok és szemináriumok vezetésével (átlagosan 4 óra/fő/hét).

A kutatócsoport több munkatársa tagja a DE Kémia Doktori Iskolának, törzstagként, témakiíróként vagy oktatóként.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Nagyon jelentős előrelépést hozott, hogy a kutatócsoport részvételével a DE Kémiai Intézete elnyerte a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 (Kémia az életminőség javításáért: stratégiai K+F műhely a Debreceni Egyetemen; DECHEM) pályázati támogatást (1984 M Ft/4 év), ami a kutatócsoport anyagi lehetőségeit is jelentős mértékben javítja. A projekt szakmai vezetőjének feladatait a kutatócsoport vezetője látja el.

A kutatócsoport tagjai szintén részt vettek az ugyancsak támogatást nyert GINOP-2.3.3-15-2016-00004 (Integrált Nagyműszeres Infrastruktúra Molekulatudományi és Molekuláris Gyógyászati Kutatásokhoz; I2N2 – 810 M Ft) kutatási infrastruktúra pályázatban, ami működési támogatást a csoportnak nem jelent, de igen jelentős mértékben javítja a kutatás műszeres lehetőségeit.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Papp G, Ölveti G, Horváth H, Kathó Á, Joó F: Highly efficient dehydrogenation of formic acid in aqueous solution catalysed by an easily available water-soluble iridium(III) dihydride. *Dalton Transactions*, 45: 14516-14519 (2016)
<https://vm.mtmt.hu/kommunikacio/index.php?menuid=541&dbid=36&id=48154>
2. Marozsán N, Horváth H, Erdei A, Joó F: Dehalogenation of organic halides in aqueous media by hydrogen transfer from formate catalyzed by water-soluble Ru(II)-N-heterocyclic carbene complexes. *J. of Molecular Catalysis A-Chemical* 425: 103-109 (2016) <https://vm.mtmt.hu/kommunikacio/index.php?menuid=541&dbid=36&id=48164>
3. Nagy L, Kuki Á, Deák Gy, Purgel M, Vékony Á, Zsuga M, Kéki S: Gas-Phase Interaction of Anions with Polyisobutylenes: Collision Induced Dissociation Study and Quantum Chemical Modeling. *Journal of Physical Chemistry B*, 120:(34) 9195-9203 (2016)
<https://vm.mtmt.hu/kommunikacio/index.php?menuid=541&dbid=36&id=48165>
4. Bellér G, Szabó M, Lente G, Fábián I: Formation of 1,10-phenantroline-N,N'-dioxide under mild conditions: the kinetics and mechanism of the oxidation of 1,10-phenanthroline by peroxomonosulfate ion (Oxone). *Journal Of Organic Chemistry*, 81:(13) 5345-5353 (2016) <https://vm.mtmt.hu/kommunikacio/index.php?menuid=541&dbid=36&id=48167>
5. Kalmár J, Lente G, Fábián I: Kinetics and mechanism of the adsorption of methylene blue from aqueous solution on the surface of a quartz cuvette by on-line UV-Vis spectrophotometry. *Dyes and Pigments*, 127: 170-178 (2016) <http://real.mtak.hu/33178/>

MTA–DE RÉSZECSEFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Trócsányi Zoltán, az MTA rendes tagja
4026 Debrecen, Bem tér 18/A.

telefon: (52) 509 201; fax: (52) 509 258; e-mail: zoltan.trocsanyi@mta.atomki.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport elméleti részecskefizika fenomenológia és kvantumtérelméleti kutatási feladatok megoldása céljából alakult. A fő célkitűzések a következők: (i) sugárzási korrekciók számítása hadronzáró hatáskeresztmetszetekhez és az általános elmélet alkalmazása legalább egy folyamatra; (ii) t-kvarkpárt és más ismert részecskéket tartalmazó események szimulációja a Nagy Hadronütköztető ütközési energiáin a következő végállapotokat tartalmazó ütközések esetén: $t \text{ anti-}t + b \text{ anti-}b$, $t \text{ anti-}t + H$, $t \text{ anti-}t + Z$, $t \text{ anti-}t + \gamma$, $t \text{ anti-}t + \gamma \gamma$, $t \text{ anti-}t + 2 \text{ hadron}$; (iii) térelméleti modellek tanulmányozása a renormálási-csoport módszerrel, különös tekintettel a két-dimenziós sine-Gordon modellre; (iv) kvantumszindinamika tanulmányozása ráctérelmélettel, különös tekintettel az Anderson lokalizáció megjelenésének ellenőrzésére SU(3) dinamika esetén. 2016-ban az (i–iii) területeken új eredményeket értek el. A (iv) kutatási területet tanulmányozó kutató 2012-ben önálló Lendület támogatást nyert saját kutatócsoportja felépítéséhez, ezért ezzel a területtel a továbbiakban nem foglalkoztak.

Az (i) kutatási témában 2016 folyamán közölték az elektron-pozitron ütközésekben keletkező három hadronzárós végállapotok nagy pontosságú elméleti leírását az általuk kifejlesztett CoLoRFulNNLO módszer felhasználásával (meghatározták a második sugárzási korrekciót a hatáskeresztmetszethez). Elvégezték a folyamat végállapotához definiálható összes alakváltozó részletes fenomenológiai analizisét, aminek eredményét részben 2016-ban közölték. További eredmények közzlése a hadronzárók analiziséről 2017 folyamán várható (a szócikkek írása a beszámoló idején folyamatban van). Megkezdték a CoLoRFulNNLO módszer kiterjesztését proton-proton ütközésekre.

A (ii) témában a felsorolt végállapotok közül az utolsó kivételével mindegyikhez sikerült az eseménygenerálást végrehajtani. Az összes folyamattal kapcsolatos elméleti eredmények nagy impaktú nemzetközi szaklapokban jelentek meg. A felsorolás utolsó folyamatát időközben más kutatócsoport sikeresen szimulálta, ezért ezeknek az eseményeknek a generálásáról letettek, és helyette két másik folyamat végállapotát szimulálták: $t \text{ anti-}t + W$ (megjelent 2012-ben) és $W^+W^- + b \text{ anti-}b$ (megjelent 2014-ben). 2016 első felében a CERN Higgs hatáskeresztmetszet munkacsoport tagjaiként részt vettek a 2016. évi összefoglaló tanulmány megírásában, amelyben korábban kidolgozott módszerükkel részletesen tanulmányozták a következő keményszórási folyamatokat: $pp \rightarrow$ (a) $t \text{ anti-}t + b \text{ anti-}b$, (b) $t \text{ anti-}t + H$, (c) $t \text{ anti-}t + Z$. A tanulmány 2016-ban megjelent.

A (iii) területhez kapcsolódóan sikerült a szakirodalomban első alkalommal meghatározni a Zamolodchikov által bevezetett c -függvény értékét a funkcionális renormálási csoport módszer keretében a sine-Gordon modell analitikus elfolytatásából kapott sinh-Gordon skalártér, továbbá a sine-Gordon és a sinh-Gordon között interpoláló modellekre. Elkezdték a nem-differenciálható potenciálok vizsgálatát a funkcionális renormálási csoport módszerrel. Eredményeiket az ERGE2016 nemzetközi konferencián és a Fizikus Vándorgyűlésen, előadás és poszterek formájában mutatták be, az összefoglaló szócikk megírása pedig folyamatban van.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Eseményeket generáltak a Nagy Hadrongyorsítóban (LHC) végbemenő ütközések során nagy energiájú részecskékkel együtt keletkező t anti- t kvarkpárt tartalmazó végállapotokhoz. A nyilvános honlapjukon (<http://grid.kfki.hu/twiki/bin/view/DbTheory/>) szabadon hozzáférhető több millió esemény a következő végállapotokhoz: t anti- t + b anti- b , t anti- t + H , t anti- t + Z , t anti- t + W , t anti- t + γ , t anti- t + $\gamma\gamma$, t anti- t $\rightarrow W^+ W^-$ + b anti- b . Az LHC kísérletei használják ezeket az eseményeket adataik kiértékelése során. Az eseményekkel részletes partonszintű ([10.1007/JHEP11\(2016\)098](https://arxiv.org/abs/10.1007/JHEP11(2016)098)), illetve hadronszintű fenomenológiai analíziseket végeztek. 2016 folyamán a CERN Higgs hatáskeresztmetszet munkacsoport tagjaiként részt vettek a munkacsoport nagy impaktú összefoglaló tanulmányának elkészítésében, amely az év folyamán megjelent: <http://cds.cern.ch/record/2227475>.

Alkalmazták a hadronzapor hatáskeresztmetszetek számításának általuk javasolt új elméletét, a CoLoRFulNNLO módszert az elektron-pozitron szétsugárzásban keletkező három hadronzapor keletkezési valószínűségének minden korábbinál pontosabb meghatározására (DOI: [10.1103/PhysRevD.94.074019](https://arxiv.org/abs/10.1103/PhysRevD.94.074019) és DOI: [10.1103/PhysRevLett.117.152004](https://arxiv.org/abs/10.1103/PhysRevLett.117.152004) közlemények). Olyan külső gerjesztő teret javasoltak mágneses nanorészecskék relaxációjának elősegítése céljából, amely segítségével a szakirodalomban eddig alkalmazott módszerekhez képest lényegesen nagyobb hőveszteség érhető el élő szövetekben mágneses lázterápia alkalmazása esetén. ([10.1103/PhysRevE.93.012607](https://arxiv.org/abs/10.1103/PhysRevE.93.012607)). Megmutatták, hogy az $O(N)$ modell kritikus skálázása a nagy N limesz esetén $1/3$ kitevőjű hatványviselkedést mutat öt téridő dimenzióban, amely kitevő megegyezik a kvantumgravitáció megfelelő kitevőjével eggyel alacsonyabb (négy) dimenzióban ([10.1103/PhysRevD.94.065025](https://arxiv.org/abs/10.1103/PhysRevD.94.065025)).

Az eredmények részben alapkutatási jellegűek, amelyek az általános emberi műveltség gyarapítását szolgálják, részben alkalmazást nyerhetnek mágneses lázterápia orvosi alkalmazásában élő szervezetben megjelenő daganatos sejtek elpusztítása céljából.

b) Tudomány és társadalom

Előadásokat tartottak a CERN Nemzetközi Diákműhely Debrecenben megrendezett eseményén, valamint a magyar fizikatanárok budapesti találkozásán. Népszerű tudományos előadásokat tartottak a mai részecskefizikai, neutrínófizikai, illetve sötét anyag kutatásokról debreceni középiskolákban, az egyetemen, az Eötvös Loránd Fizikai Társulat éves közgyűlésén Budapesten, a Schwartz emlékversenyen Nagyváradon és a debreceni Fizikusnapokon az MTA Atommagkutató Intézetben (hat előadás). Tematikus interjút adtak a debreceni Campus Rádióban a gravitációs hullámok felfedezése kapcsán.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport vezetője tagja volt a Velencében megrendezésre kerülő EPSHEP 2017 konferencia nemzetközi szervező bizottságának. Kutatói szemináriumokat szerveztek Magyarországról, Törökországból hívott előadókkal (l. <http://www.phys.unideb.hu/mta-deparg/node/9>). A csoport tagjai rendszeresen oktatnak a Debreceni Egyetem Fizikai Intézetében minden szinten (BSc, MSc, PhD), közreműködtek diákköri munka, két diplomamunka és három doktori munka vezetésében. Együttműködésben vettek részt a Budapest Műszaki Egyetem, a Nápolyi Egyetem, a CERN (Genf), SISSA (Trieszt) kutatóival kölcsönös kutatói látogatásokon keresztül.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport egyik tagja, elnyerte az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Novobáczky Károly-díját, másik tagja pedig a Magyar Fejlesztési Bank Junior Prima díját a tudomány kategóriában. 1250 E Ft összegű könyvkiadási támogatást nyertek az MTA-tól.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Del Duca V, Duhr C, Kardos A, Somogyi G, Trócsányi Z: Three-Jet Production in Electron-Positron Collisions at Next-to-Next-to-Leading Order Accuracy. Physical Review Letters, 117:(15) 152004 (2016) DOI: [10.1103/PhysRevLett.117.152004](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.152004)
2. Del Duca V, Duhr C, Kardos A, Somogyi G, Ször Z, Trócsányi Z, Tulipánt Z: Jet production in the CoLoRFulNNLO method: event shapes in electron-positron collisions. Physical Review D, 94:(7) 074019 (2016) DOI: [10.1103/PhysRevD.94.074019](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.94.074019)
3. Bevilacqua G, Hartanto HB, Kraus M, Worek M: Off-shell Top Quarks with One Jet at the LHC: A comprehensive analysis at NLO QCD. Journal of High Energy Physics, 1611: 098 (2016) DOI: [10.1007/JHEP11\(2016\)098](https://doi.org/10.1007/JHEP11(2016)098)
4. Rácz J, de Chatel PF, Szabó IA, Szunyogh L, Nándori I: Improved efficiency of heat generation in nonlinear dynamics of magnetic nanoparticles. Physical Review E, 93: 012607 (2016) DOI: [10.1103/PhysRevE.93.012607](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.012607)
5. Mati P: Critical scaling in the large-N O(N) model in higher dimensions and its possible connection to quantum gravity. Physical Review D, 94:(6) 065025 (2016) DOI: [10.1103/PhysRevD.94.065025](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.94.065025)

MTA-ELTE EGERVÁRY JENŐ KOMBINATORIKUS OPTIMALIZÁLÁSI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Frank András, az MTA doktora
ELTE TTK Operációkutatási Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C.
telefon: (1) 372 2500/8132; fax: (1) 381 2158; e-mail: frank@cs.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport fő tevékenysége az elméleti strukturális és algoritmikus kérdések vizsgálata a kombinatorikus optimalizálás területén. Az 5 éves kutatási terv 8 részterületen vázolt megoldandó feladatokat, ezek közül kiemelt fontosságúak voltak a következők, zárójelben a részterület megnevezése: háromdimenziós szerkezetek merevségének jellemzése (gráfok és szerkezetek merevsége), rövid kör mentes részgráfok keresése (hálózatok összefüggősége és irányítások), Edmonds fenyő tételének kiterjesztése általánosabb információterjesztési feladatokra (diszjunkt fák és fenyők), a stabil párosítás feladat hálózati általánosításai (stabil párosítások és kiterjesztéseik), algoritmusok matroid vágás és matroid párosítás problémákra (matroidok struktúrája).

Az alapkutatási témák mellett a kutatócsoport fontos feladata hatékony optimalizálási algoritmusok kidolgozása ipari és tudományos partnerek által meghatározott feladatokra. Az év során a csoport részt vett az IBM intelligens útvonal-tervezési projektjében, mely kutatási és szoftverfejlesztési feladatokat egyaránt magába foglalt.

E témákban a kutatócsoport a korábbi években már számos részeredmény elért, ezek közül kiemelendő a súlyozott lineáris matroid párosítás feladat megoldása, az univerzálisan (minden dimenzióban) merev gráfok jellemzése, független feszítő fenyők létezésének karakterizációja, és stabil többtermékes folyam létezésének a bizonyítása.

2016-ban az alábbi fő kutatási feladatok voltak: nem-TDI optimalizálás (kombinatorikus megközelítés súlyozatlan problémákra, melyekre a súlyozott NP-nehéznek bizonyult; a Frank-Jordán-féle szupermoduláris fedési tétel alkalmazásai); közelítő algoritmusok és utazóügynök feladat (Held-Karp relaxáció által adott korlát élesítése); gráfok és szerkezetek merevsége (becslés a minimálisan pontelhagyásra redundánsan merev gráfok élszámára).

A csoport kiemelt feladatának tekinti a felsőoktatási képzésben való részvételt, tagjai 2015-ben az ELTE matematikus BSc és MSc képzésében oktattak. Év elején a kutatócsoport Mátraházán szervezett egy kutató workshopot hallgatók és fiatal kutatók részvételével, júniusban pedig részt vett az ELTE Matematikai Intézet nyári iskolájának a szervezésében.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A csoport által a kutatási eredmények publikálására létrehozott EGRES Technical Report sorozatban 2016-ban 21 új publikáció jelent meg, további 1 új publikáció jelent meg a Quick Proof sorozatban. A csoport eredményei több nemzetközi konferencián kerültek bemutatásra: SODA (Arlington, USA), Oberwolfach Workshop (Németország), Trends in Combinatorial Optimization (Shonan, Japán), ECCO (Budapest), Hausdorff Institute Combinatorial Optimization Workshop (Bonn, Németország), CTW (Gargnano, Olaszország), 100 Years of

Matching Theory (Budapest), Japanese Conf. Combinatorics and Applications (Kiotó, Japán). Az alábbiakban a csoport 2016-es kutatási eredményei szerepelnek, területekre lebontva.

Merev szerkezetek: két új publikáció készült el ebben az évben, az egyik egy japán és egy német társszerzővel, másik pedig két brit társszerzővel. Jellemzést sikerült adni olyan szerkezetek merevségére illetve infinitezimális merevségére vonatkozólag, melyek a három dimenziós térbe vannak beágyazva, de mozgásuk egy henger felületére korlátozódik, és két szögpont egybeesik. A másik publikációban sikerül igazolni Hendrikson sejtésének és Jackson és Jordán tételének megfelelőjét a síkbeli periodikus szerkezetek merevségére vonatkozólag.

Matroidok és fenyők pakolása: három publikáció született, francia és japán társszerzőkkel. Sikerült jellemezni létezését diszjunkt fenyők pakolásának egy matroidos peremfeltétel mellett. Hasonlóan, matroidos feltételek együttes általánosításával sikerült megoldani a pakolási problémát arra az esetre, ha nem létezik feszítő fenyő, de csak egy adott gyökér esetén csak az elérhető pontokat követeljük, hogy a fenyőben legyenek. Ezzel a „japán” fenyőtétel egyfajta matroidos általánosítását sikerült belátni, illetve sikerült igazolni egy irányított hipergráfos változatot is.

Szubmodularitás: Két tagja a csoportnak egy három cikkessorozatban megújítja a gráfok és szubmoduláris függvényekkel kapcsolatos átfogó képünket, többek között új eredményeket és szemléletesebb új bizonyításokat adva a párosítások, fenyők, és gráf-összefüggőségi tulajdonságok terén.

Végtelen gráfok: Négy új publikációban sikerült új eredményeket találni melyek végtelen gráfokra általánosítják (vagy cáfolják) a kombinatorikus optimalizálásból ismert egyes eredményeket, így például a Gomory-Hu fa létezését, T-kötések létezését, illetve a diszjunkt utakra vonatkozó Menger-tételt.

TDI leírások: Sikerült belátni, hogy egy bizonyos hipersíkban lévő poliéder akkor és csak akkor bázispoliéder, ha rendelkezik a linking tulajdonsággal.

Játékelmélet és stabil párosítások: Sikerült kimutatni az (erősen) népszerű stabil párosítások létezését egy a korábbinál általánosabb modellben, amikor az egyik osztály tagjainak lehet szigorú és közömbös preferencia-sorrendje is. Hálózati szolgáltatásokat modellező rendszerben egy egyensúlyi állapot létezését jellemezték, és annak konstruktív megtalálását vizsgálták, belátva a probléma PPAD-teljességét. Az eredmény a kutatócsoport korábbi munkájára épít, így összefüggésben van a több szolgáltatós hálózati játék modelljével, és általánosítja Agarwal et al. eredményeit is.

További eredmények: Az aromás vegyületek benzolgyűrűivel kapcsolatos Clar-szám meghatározására sikerült kimutatni egyes esetekben (2-összefüggő síkgráf) hogy NP-nehéz, és mégis létezik „fixed parameter tractable” azaz FPT algoritmus. A Ryser-sejtéssel, illetve a chip-firinggal kapcsolatban sikerült részeredményeket elérni.

b) Tudomány és társadalom

A csoport részt vett az ELTE Matematikai Intézet 2016 nyarán tartott nyári iskolájának a szervezésében, ahol a csoport tagjai előadásokat is tartottak. A nyári iskolán a magyarokon kívül az Egyesült Államoktól Japánig számos ország diákjai vettek részt. A csoport aktívan

részt vett az ELTE TTK-n zajló tudományos diákköri munkában is. A „Jegyzetek és példatárak a matematika egyetemi oktatásához” TAMOP pályázat keretében a csoport kutatói által készített elektronikus jegyzetek elérhetők a <http://www.interkonyv.hu/> oldalon.

Az IBM-mel való együttműködés keretében több, a társadalomban később hasznosítható projekt is indult, ezek közül kiemelendő az intelligens útvonal-tervezési projekt, mely matematikai eszközökkel keres hatékonyabb és flexibilisebb algoritmusokat a közlekedés különböző területein fellépő útvonal-tervezési problémákra.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport egy tagja 3 hónapot töltött vendégkutatóként a franciaországi Grenoble-ban a G-SCOP vendégeként, ahol több előadást is tartott, és az együttműködésből született közös cikk beküldésre került. A csoport több tagja is részt vett a németországi Oberwolfach Combinatorial Optimization Workshopon, ahova a szakterület kiemelkedő kutatói kapnak meghívást. A kutatócsoport több tagja meghívást kapott a japán kombinatorikai szimpóziumra, és az azt követő workshopra.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport egy tagja Bolyai János Kutatási Ösztöndíjat nyert három évre, 2016. szeptembertől kezdődően.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bérczi K, Király T, Kobayashi Y: Covering Intersecting Bi-set Families under Matroid Constraints. SIAM J. Discrete Math., 30(3): 1758–1774 (2016)
2. Király T, Pap J: An extension of Lehman’s theorem and ideal set functions. Discrete Applied Mathematics, 209: 251-263 (2016)
3. Nikolenko SI, Kogan K, Retvari G, Bérczi-Kovacs ER, Shalimov A: How to represent IPv6 forwarding tables on IPv4 or MPLS dataplanes. In: IEEE (szerk.)35th IEEE Conference on Computer Communications Workshops, INFOCOM WKSHPS (2016)
4. Bérczi K, Király T, Kobayashi Y: Covering intersecting bi-set families under matroid constraints. SIAM J. Discrete Math., 30:(3) 1758-1774 (2016)
5. Bernáth A, Pap G: Blocking optimal arborescences. Mathematical Programming, 161:(1-2) 583-601 (2016)
6. Bernáth A, Pap G: Blocking unions of arborescences. Discrete Optimization, 22: 277-290 (2016)
7. Bernáth A, Király T: Blocking optimal k-arborescences. SODA 2016, Proceedings of the Twenty-Seventh Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms 1682-1694 (2016)

MTA–ELTE ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Tél Tamás, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1. A.
telefon: (1) 372 2546; fax: (1) 372 2509; e-mail: tel@general.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A csoport kutatásai a 2012-től érvényes terv szerint a térelmélet, a részecskefizika, valamint a statisztikus fizika és a környezetfizika területén folytak. A öt éves kutatási terv nem tartalmazott éves bontást, és a két fő területen (Kvantumtérelmélet és Statisztikus fizika), az eredetileg meghatározott irányban haladt. Ugyanakkor a témák nemzetközi fejlődése természetessé tette, hogy a "Zajok és fluktuációk klimatológiai folyamatokban" és az "Extrém statisztikák" témakörből új irányba is induljanak (Környezet- és klímamotivált fizika). A csoport személyi összetételét illetően történtek változások. Két tagjuk is Lendület-pályázatot nyert, mely szükségessé tette a csoport lényegi fiatalítását.

A csoport alapkutatással foglalkozik, melynek társadalmi hasznossága a világ, ezen belül a fizikai rendszerek viselkedésének jobb megértése révén jelenik meg, gazdasági hasznossága részben csak közvetetten, részben pedig csak viszonylag hosszú idő múlva nyilvánul meg.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A Herein et al, "The theory of parallel climate realizations as a new framework for teleconnection analysis" című eredményük elfogadásra került a Scientific Reports-ban.

Kísérletek által motivált elméleti részecskefizika, húrelmélet, kvantumtérelméletek

Fenomenológia: Folytatódtak a Standard Modellt (SM) ellenőrző és a SM-en túli fizikát kereső kísérletek 13 TeV energián a CERN Large Hadron Collider (LHC) gyorsítóján. Erősebb korlátokról számoltak be a nagy erővel zajló sötét anyag keresési kísérletek (LUX).

A csoport tagjai a SM olyan vektor-szerű fermionikus sötét anyag kiterjesztéseit vizsgálták, amelyek a közvetett és direkt kísérleti feltételeknek megfelelnek. A modellben a kétrészecske szórások amplitúdóira kirótták a perturbatív unitaritási feltételeket, ezáltal megszorításokat kaptak az elmélet, asztrofizikai mérésekkel összevethető szabad paramétereire. A vizsgált kiterjesztés is négy új paramétert tartalmaz, amely eddig csak numerikusan volt kezelhető, kivéve a már kizárt határeseteket. A csoport tagjai a releváns paraméter-tartományban későbbiekben is használható analitikus közelítést adtak a spektrumra és a csatolásokra.

Az LHC 2015-ös méréseinek szenzációja volt egy, a kísérletileg tiszta kétfotonos végállapotban megjelenő 750 GeV-es rezonancia. A csoport tagjai a mértékszimmetria megkövetelésével és a teljes kiterjesztett modell unitaritásából meghatározták, hogy az egyedi rezonanciát további jelenségek kísérik, és megadták ezek várható energiaskáláját. A 750 GeV-es rezonancia a 2016-os adatok szerint statisztikai fluktuáció lehetett, de a csoport munkája több nemzetközi cikkel együtt rávilágított, hogy egy ilyen erős rezonancia további megfigyelhető jelenségekre vezetne.

Húrelmélet: Kutatásaik másik témája a húrelmélet, azon belül a topologikus húrelmélet. A topologikus húrelmélet olyan matematikai modell, amely a téridő geometriájának alaptulajdonságait vizsgálja. Előnye, hogy rálátást nyújt a húrelmélet alapkérdéseire és az elmélet fontos, szuperszimmetriát megőrző szektoraiiban hatékony számítási módszereket biztosít. A topologikus húrelméletet olyan Calabi-Yau sokaságokon vizsgálták, ahol az két

dimenziós $U(N)$ Yang-Mills térelméletre redukálódik. Munkájuk során kidolgozták ezen két dimenziós térelméletek deformációját, nagy N szerinti Gross-Taylor sorfejtését és a sorfejtés geometriai jelentését, valamint kapcsolatot találtak a beta-deformált mátrix modellekkel.

Vizsgálták továbbá az M2-bránok elméletét fluxussal rendelkező, ún. nem-geometrikus háttereken, és ezen objektumok szigma-modell leírását.

Mikro- és nanomintázatok, komplexitás, rendezetlen rendszerek

Kritikus fluktuációk: Kritikus fluktuációk valószínűségi eloszlása sokat vizsgált mennyiség, skálázása a rendszer univerzalitási osztályát jellemzi. A két-dimenziós XY model rendparaméter eloszlását széles körben, de sokszor megalapozás nélkül használják a nemegyensúlyi univerzalitási osztályok azonosítására. Az eloszlás véges-méret korrekcióinak meghatározása módszert adott arra, hogy a véges rendszerekre ismert eredmények alapján lényegesen pontosabb döntést lehessen hozni az XY univerzalitási osztályhoz tartozásról.

Összefonódottság: Soktestrendszerek kevert állapotaiban egy elterjedt összefonódási mérték a logaritmikus negativitás. A legegyszerűbb eset a bozonikus Gauss-állapotok osztálya, ahol a negativitás közvetlenül számolható a kovarianciamátrixon keresztül. Az analóg fermionikus Gauss-állapotok esetén a helyzet bonyolultabb, itt csak a parciális transzponált sűrűségmátrix magasabb momentumai számolhatóak. Egy dimenziós rendszereknél az így kapott eredmények tökéletes összhangban vannak a konform térelmélet jóslataival: az alapállapotban mind a negativitás, mind a momentumok logaritmikusan skáláznak a részrendszer méretével két egymás melletti intervallum esetén. Az elmúlt évben ezeket a vizsgálatokat kiterjesztették kétdimenziós rácsokra. Eredményeik azt mutatják, hogy a bozonikus esetben a felületi törvény érvényes a negativitásra, míg a fermionikus esetben a momentumok skálázása logaritmikus korrekciókat mutat.

A kvantumszimulációk tanulmányozása új kutatási téma csoportjukban. Első eredményük is megszületett: bebizonyították, hogy Dirac-egyenletet magasabb dimenzióban közvetlenül, sztochasztikusan nem lehet szimulálni.

Spinüveg vizsgálatok: A spinüvegekkel kapcsolatos szakirodalomban nincs teljes konszenzus abban, hogy az Almeida-Thouless instabilitás létezik-e a felső kritikus dimenzióban ($d=6$), illetve az alatt. Ezért újra megvizsgálták a problémát a $d=6$ dimenziós, az Ising spinüveget reprezentáló, köbös térelméletben. A felső kritikus dimenzió alatti vizsgálataikat kiterjesztették az átalakulási hőmérséklet feletti tartományra is, a teljes T_c körüli asszimptotikus viselkedéssel kapcsolatos publikáció jelenleg elbírálás alatt van. A replikaszimmetria-sértő, azaz a spinüveg-fázis szerkezete rendkívül komplex a külső mágneses tér jelenlétében: ezért nem meglepő, hogy szinte semmilyen vizsgálat nem történt e problémával kapcsolatban a spinüvegek elméletének tanulmányozása során. Első lépésként a szabad propagátorok meghatározásával és tulajdonságaik diszkussziójával foglalkoztak.

Környezet- és klímamotivált fizika

Szennyezések terjedése: A légköri szennyeződésterjedés kaotikusságából adódóan kis numerikus eltérések sebesen nőnek időben. Ezért a szennyezőanyagok forrásazonosítására is alkalmazott ún. backward- szimulációk pontossága korlátozott. Azt tapasztalták, hogy a reverzibilitás pontossága általánosságban exponenciálisan csökken a tekintett időintervallum hosszának a függvényében. A numerikus szimulációk tehát óhatatlanul irreverzibilisek, és a szennyeződések forrásának visszakövetéssel való azonosításakor földrajzi helytől függően átlagosan 3-6 nap után már nem számíthatunk megbízható eredményre.

Klímadinamika: Egy közepes komplexitású klímamodell, a Planet Simulator segítségével kimutatták, hogy az egyedi trajektóriák mentén kiértékelt, széleskörűen alkalmazott (pl. 30 éves) időátlagok értelmüket veszíthetik klímaváltozás esetén, helyettük a pillanatnyi sokaságátlag használandó, amennyiben a jellemző t_c konvergenciaidő letelte után vizsgálják a klímarendszert. Eredményeik arra is rávilágítanak, hogy a CO₂-szint változásaira a klíma valamely jellemző mennyisége hiszterézissel reagál, vagyis hiába állítunk vissza egy csökkentett CO₂-tartalmat, a klíma még jóval melegebb lehet, mint a felmelegedés szakaszában volt ugyanennél a koncentrációnál. Ezt a jelenséget regionális skálán (pl. Kárpát medence) az egyedi trajektóriák, szemben a sokaságképpel, nem képesek kimutatni: kisebb térbeli skálákon egyre nő a trajektóriák fluktuációja. Ugyanakkor a klíma belső változékonyságát jellemző telekonnekciók (pl: Észak-Atlanti Oszcilláció) sem érthetők meg az előzőekben említett snapshot-kép nélkül.

Az egyedi idősorok vizsgálata azért nem elegendő, mert a *probléma nem ergodikus*. Az ergodikus viselkedéstől való eltérés jellemzésére mérőszámokat vezettek be. Az egyik nullától való eltérése „rendparaméterként” éppen a klímaváltozás erősségét méri. A másik azt mutatja meg, hogy várhatóan mekkorát hibázunk, ha időátlagot számolunk sokaságátlag helyett. Belátták, hogy ezt nem tehetjük tetszőlegesen kicsivé, ha a rendszer nem ergodikus. Ez a klimatikus idősorokból levonható következtetésekre nézve alapvető korlátot jelent. Kimutatták, hogy a klímaváltozás kapcsán hatékonyan bizonyult sokaságkép jól alkalmazható *fizikai problémák* megértésére is: a dinamikai rendszerek bizonyos jelenségei, melyeket a hagyományos káoszelmélet nem tud kezelni, így értelmezhetővé válnak. Ide tartoznak olyan esetek, melyekben a gerjesztés folyamatosan gyengül, s a káosz végül kihál.

Kísérletek: Nemzetközi együttműködés keretében folytatódtak a globális klímaváltozást vizsgáló sokaság-megközelítésű kísérletek a mérsékelt égövi légköri konvekció laboratóriumi modelljében, feltárva az egyes kísérleti realizációk időbeli- és a sokaság statisztikáinak közötti eltéréseket. A grenoble-i "Corilis" forgó kísérleti platformon folytatott sikeres mérőkampányban az óceánfelszín fölötti periodikus és sztochasztikus szellőkések hatásait vizsgálták a felszín alatti, mélységi áramlásokra. Kvázi-kétrétegű folyadékban megvizsgálták továbbá az árapály és az aljzati domborzati akadályok összjátéka által keltett nemlineáris belső hullámokat és diszkutálták jellemzőiket.

b) Tudomány és társadalom

A csoport tagjai évek óta előadásokat tartanak az ELTE Fizikai Intézetének népszerűsítő rendezvényein. A csoport egy tagja az ERC PE3 Bírálóbizottságában, az MTA Jelölőbizottságában, a MAB Felülvizsgálati Bizottságában és a Bolyai Kuratóriumban dolgozott, másik tagja pedig az MTA Rézecskefizikai Bizottság titkára. A csoport vezetője a Fizika tanítása doktori programot is vezeti az ELTE Fizika Doktori Iskolájában. A Kutatócsoport <http://elmfiz.elte.hu/Kutcsop/> honlapjáról letölthetőek híreik és tagjaik utóbbi időben született ismeretterjesztő írásai.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport tagjai együttműködnek egy sor hazai kutatóhellyel (pl. BME Nukleáris Intézet, TTK Elméleti Fizikai Tanszék). Az ELTE-n folyó oktatásban is mindenki részt vesz különböző elméleti fizikai tantárgyak oktatásával. A csoport tagjai széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek (pl. Ben-Gurion University, Izrael, az Aix-Marseille Egyetem, a University College, London, a CERN és a Genfi Egyetem, a Freie Universität Berlin, az Oldenburgi, Cottbusi és Hamburgi Egyetemek, valamint a drezdai Max Planck Intézet).

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoportvezető Széchenyi-díjban részesült, OTKA témavezető. Egy kutató EuHIT pályázatot nyert, ezen túl résztvevőként sok tag szerepel különböző OTKA pályázatokban.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Cynolter G, Kovács J, Lendvai E: Diphoton excess and VV-scattering, Mod. Phys. Lett. A, 31: 1650133 (2016)
2. Palma G, Niedermayer F, Rácz Z, Riveros A, Zambrano D: Finite-size corrections to scaling of the magnetization distribution in the two-dimensional XY model at zero temperature. Phys. Rev. E, 94: 022145 (2016)

MTA-ELTE FEHÉRJEMODELLEZŐ KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Perczel András, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A
telefon:(1) 372 2500; fax:(1) 372 2592; e-mail: perczel@chem.elte.hu; honlap:prot.chem.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport célkitűzése fehérjék és polipeptidek szerkezeti-dinamikai jellemzése, és kölcsönhatásainak vizsgálata, korszerű nagyműszeres (NMR-, ECD spektroszkópia, röntgenkrisztallográfia), valamint elméleti (*ab initio*, MM, MD számítások) módszerekkel. A vizsgálatokhoz kapcsolódó módszerfejlesztést is végeznek. Számos figyelemreméltó eredményük született egyes nagy biológiai jelentőséggel bíró fehérjék atomi szintű vizsgálata során. 1) Az exendin-4 (II. típusú cukorbetegség) és belőle származtatott minifehérjék (pl. Tc5b) fel- és letekeredésének tanulmányozása, a közti termékek és állapotok jellemezése. 2) Az amiloidképződés megértésére alkalmas modellrendszer kidolgozása, egyes lépések jellemzése. 3) α - és β -aminosavak β -redő képző hajlamának tanulmányozása, β -peptid foldamerek tervezése és szintézise. β -aminosavak α -hélix és β -redő-képzési hajlamának jóslása. 4) Az immunválaszban és a fehérjelebontásban szerepet játszó enzimek (MASP; oligopeptidázok), és egyes sejtmagi fehérjék (dUTPáz, diszkerin) vizsgálata. 5) Rendezetlen fehérjék (penetratin, ERD14, TPPP/p25) dinamikájának NMR jellemzése, és kapcsolódó módszerfejlesztések. 6) Fehérjék és peptidek kémiai érzékenységének függése az aminosavsorrendtől (kémiai öregedés, spontán dezamidáció, izopeptidkötés kialakulása, foszforiláció és amiloidképződés).

2016-ban tovább folytatták a kutatócsoport 3 fő irányába eső kutatásokat: a fehérje térszerkezet, a belső dinamika és kölcsönhatások vizsgálatát. Az előzőleg a kutatócsoportban optimalizált módszerrel fehérje építőköveket szintetizáltak, és azokat nagyobb, foldamer egységekbe építették be.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Fehérje és peptid építőkövek szintézise és térszerkezet-vizsgálata: Cukor-aminosavat is tartalmazó foldamerek vagy α/β -kiméra peptidek létrehozásához szükséges a cukor-aminosav építőelem gazdaságos, nagy mennyiségben való előállítás. A kutatócsoportban kidolgozták két cukor-aminosav, a 3-amino-3-dezoxi-ribofuranuronsav (H-tX-OH) és C-3 epimerjének, a 3-amino-3-dezoxi-xilofuranuronsavnak (H-cX-OH) költséghatékony szintézisét és tisztítását D-glükózból kiindulva. Elkészítették a foldamer szintézis során kapcsolásra alkalmazható származékokat (-X-OMe, -X-OiPr, -X-NHMe, Fmoc-X-OH), valamint -Aaa-tX-Aaa- és -Aaa-tX-tX-Aaa- típusú foldamer építőelemeket ([1]; REAL azonosító: 47554). Előállították a H-Gly-Gly-X-Gly-Gly-OH α/β pentapeptid szintéziséhez alkalmazott furanózgyűrűs cukor-aminosavakat, Fmoc védőcsoportot tartalmazó és azido-származékaikat. Az azido-származékok alkalmazása esetén a redukciós lépést a Staudinger reakcióval végezték, amelynek során a cisz sztereoizomerből egy meglepően stabil intermedier keletkezett – a stabilitás szerkezeti alapjait röntgendiffrakciós és NMR mérésekkel, valamint molekuladinamikai szimulációkkal derítették fel ([2]; REAL 47573). NMR mérésekkel és molekuladinamikai számításokkal igazolták és feltérképezték a cukor-arilhidrazonok gyűrűs formájának a stabilitásért felelős hidrogénhid hálózatot. A vizsgálatokat elvégezték különböző konfigurációjú D-hexóz arilhidrazonokon (D-glüko-, D-galakto-, D-manno- és D-talo-származék), hexózamin-fenilhidrazonok és -4-nitro-fenilhidrazonok családján is (REAL 47583). Cukor-aminosav származékok kvantumkémiai, krisztallográfiai, NMR és elektronmikroszkópos módszerek kombinációjával végzett szerkezetvizsgálata során egyes cukor

molekulák és aromás védőcsoportok között CH- π típusú diszperziós erők által stabilizált kölcsönhatásokat mutattak ki, amely – a létrejött kompakt szerkezetek miatt – befolyással lehet a cukor-aminosavak reaktivására is. *In silico* módszerekkel vizsgálták a gyenge O-H és szupergyenge C-H savak komplexképző tulajdonságait, a kölcsönhatások stabilitását és geometriai sajátságát. Kimutatták, hogy szemben az O-H savakkal, amelyek Brønsted savként alkotnak komplexet, a szupergyenge C-H savak Lewis savként vesznek részt komplexeikben (REAL 47569). A elemezték víz szerepét a fehérjék 'coiled-coil' szerkezeti elemeinek a stabilitásában: a víz elősegítheti a coiled-coil régió feltekeredését, stabilizálhatja azt, de bizonyos esetekben a motívum lebomlását propagálja, vagy az amiloidképződéshez vezető fatális konformáció-átalakulási és oligomerizációs folyamatokhoz járul hozzá (REAL 47621).

Fehérje szerkezet-dinamika és kölcsönhatások vizsgálata: Az idegrendszeret érintő Parkinson betegségben kimutatható, hogy az alfa-synuclein és a TPPP/p25 rendezetlen fehérjék patológiás kölcsönhatása eredményez végeredményben aggregációt és a betegség kialakulását. Ez a kölcsönhatás eltérő a fiziológias tubulin és TPPP/p25 közötti kölcsönhatástól, így a gyógyszertervezés stratégiája a patológiás kölcsönhatás megszüntetésére összpontosít. Nemcsak a fő 147-156-os TPPP/p25 kötőregió, hanem másodlagos kötőregiók is (pl. 59-62) hozzájárulnak ehhez a kölcsönhatáshoz, melyben az ún. kaméleon fehérjék - így a TPPP/p25 - konformációs plaszticitása tükröződik (REAL 47568). A DJ-1 proteáz aktivitással rendelkező redoxi-chaperon fehérje, a Parkinson kórban védő szerepe van. Röntgendiffrakciós módszer alkalmazásával vettek részt a DJ-1 ligandumokkal alkotott komplexeinek szerkezetvizsgálatában, valamint a DJ-1 oxidációs állapotainak szerkezeti jellemzésében. Elvégezték különböző G-fehérje kapcsolt receptorral kölcsönható peptidek szintézisét szilárd fázisú peptidszintézissel és bakteriális expresszióval, majd összehasonlító elemzésben értékelték ezeket a tisztítás, az $^{15}\text{N}/^{13}\text{C}$ izotópjelölés gazdaságossága és a környezet terhelése szempontjából (REAL 47549). Részt vettek a penetratinból származtatott új, jelentős antimikrobiális hatást mutató peptidek kifejlesztésében és szerkezeti-dinamikai jellemzésében (REAL 47589). A veleszületett immunitásban fontos szerepet játszó enzimkaskád rendszer, a *komplement* aktiválódásának egyik korai enzimének, a MASP-2-nek a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálata során az egyláncú proenzim egy új konformációját fedezték fel, ami segíthet a flexibilitás proenzim aktiválódásban játszott szerepének részletesebb megértésében. Az uridin pszeudouridinná történő átalakítását vezérlő komplex fehérje/RNS enzim szerkezetét és működési mechanizmusát *in silico* módszerekkel tanulmányozzák: létrehozták és optimalták az emberi enzim és betegséget okozó mutánsai homológiamodelljét. A fehérje-fehérje határfelületre eső mutációról megmutatták, hogy az enzim aktív helyén is jelentős szerkezeti változásokat indukál, így valószínűleg megakadályozza a pseudo-uridinációs reakció lejátszódását. Az enzimreakció QM/MM vizsgálata során kimutatták, hogy a mutáció hatására átrendeződő Asp-Arg aminosav-pár a katalitikus reakcióban kritikus szereppel bír.

Módszerfejlesztés: Elkészült a folyamatosan bővülő, fehérjék szerkezeti paramétereit feldolgozó programkönyvtár mellé egy hexopiranózok konformációs paramétereit meghatározó JAVA API könyvtár. Ennek segítségével elemezték a monoszacharidok vizes oldatban modellezett konformációs viszonyait. A vizsgálat eredményeit további modellszámítások paraméterezésére is felhasználják. Kimutatták, hogy az ECD vizsgálati módszerben az aromás aminosavak (Tyr, Trp) L_b sávja a fehérje feltekeredtségét jelző szenzorként alkalmazható. Az ezen alapuló új módszert ismert NMR szerkezetű triptofán-kalicka minifehérjék segítségével kalibrálták ([3]; REAL 47622).

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport vezetője és tagjai 7 tudományt népszerűsítő előadást tartottak. Ezek közül kiemelendők a Miskolcon rendezett „Summer Scool 2016” keretében a Torontói Egyetemről érkezett diákok számára tartott előadások. Megtörtént a kutatócsoport több tagjának közremű-

ködésével készülő fehérjetudományi szakkönyv lektorálása. A könyv átfogó, de közérthető betekintést kíván adni a fehérjetudományban alkalmazott korszerű módszerekbe, és példákon keresztül mutat be jellegzetes tudományos probléma-felvetési és kutatási stratégiákat.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport együttműködései: az ELTE Biológiai (MASP, aggregáció) és Kémiai Intézetei (cukor-aminosavak, foldamerek); MTA TTK (MASP, uridin izomerizáció, fehérje kölcsönhatások és Parkinson kór); MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport (MASP); SZTE (oligopeptid előállítás módszerek összehasonlítása, fehérje-feltekeredés ECD vizsgálata); SE (cukor-aminosavak, uridin izomerizáció, podocin); San Luis-i Nemzeti Egyetem, San Juan-i Nemzeti Egyetem és Cartagena Műszaki Egyetem BioMac (penetratin); torontói Egyetem (C-H és O-H savak). Gyógyszerfejlesztésre irányuló együttműködések: RASopátia konzorcium; ipari partnerek: Sanofi, Novo Nordisk. Röntgendiffrakciós méréseket végeztek a DESY (Hamburg) sugárforrásnál (a szinkrotron-hozzáférés elősegítésére magyarországi konzorcium koordinálása). Az MTA SzBK Röntgen-kristallográfiai Laboratóriumával együttműködésben a szinkrotron-mérések során a mintákban kialakuló sugárkárosodás vizsgálatára létrehozott nemzetközi konzorciumban vettek részt, és méréseket végeztek az ESRF (Grenoble) szinkrotronnál.

Részt vesznek az ELTE biológia és kémia BSc, MSc, és PhD képzésben. Vezetésükkel 10 diákkörös és 10 PhD hallgató dolgozik, és 2016-ban 6 BSc 1 MSc szakdolgozatot és 1 PhD disszertációt védtek meg.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban induló pályázatok:

RASopátia diagnosztikájának és terápiájának fejlesztésére irányuló konzorciális NVKP pályázat;

Az ELTE NMR spektroszkópiai infrastruktúrájának fejlesztésére elnyert VEKOP pályázat; OTKA K119386 (komplement); az EMBL-Hamburg szinkrotron hozzáférésre kiírt pályázata; az MTA MedInProt programjának gépidő pályázata.

További pályázati források:

OTKA NK101072 (fehérje szerkezet és dinamika), K116305 (uridin izomerizáció); Sanofi/Frankfurt kutatási támogatás (aggregáció vizsgálatok); az EU Horizon 2020 program iNEXT pályázata.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Nagy A, Zsoldos-Mády V, Csordás B, Pintér I, Farkas V, Perczel A: C-3 epimers of sugar amino acids as foldameric building blocks: improved synthesis, useful derivatives, coupling strategies. *Amino Acids*, 49: 223-230 (2016) REAL:47554
2. Csordás B, Nagy A, Harmat V, Zsoldos-Mády V, Leveles I, Pintér I, Farkas V, Perczel A: Origin of problems related to Staudinger reduction in carbopeptoid syntheses. *Amino Acids*, 48: 2619-2633 (2016) REAL:47573
3. Farkas V, Jákli I, Tóth GK, Perczel A: Aromatic cluster sensor of protein folding: near-UV ECD bands assigned to fold compactness. *Chemistry A European Journal*, 22: 13871-13883 (2016) REAL:47622

MTA–ELTE GEOLÓGIAI, GEOFIZIKAI ÉS ŰRTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Haas János, az MTA levelező tagja
1117 Budapest, Pázmány sétány 1/C.
telefon: (1) 381 2127; fax (1) 381 2128; e-mail: haas@caesar.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport 5 éves kutatási tervének megfelelően folytatta a Pannon-régió kainozoos medencéinek és az azok aljzatának megismerését célzó geológiai és geofizikai kutatásokat, továbbá a geológiai kapcsolatok vizsgálatát a Pannon-régió egészére nézve. Tárgyévben összefoglaló tanulmányt tettek közzé a dunántúli-középhegységi dolomitokról. Kiemelkedő eredményeket értek el a műon-tomográf fejlesztésében. Folytatták a geo-hazard jelenség-körhöz köthető e.m. hullámjelenségek elemzését, a földi plazma környezet monitorozását.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport több tagja részt vesz Magyarország Nemzeti Atlaszának a MTA CSFK Földrajztudományi Intézet által koordinált szerkesztésében, a „Földtan” c. fejezet szöveges részének szerkesztője és jelentős részének szerzője a kutatócsoport vezetője.

A „Dunántúli-középhegységi felső-perm és triász dolomitok összehasonlító vizsgálata és genetikai értelmezésük” című OTKA projekt (K 81296) munkálatainak lezárása után, tárgyévben az International Journal of Earth Sciences folyóiratban publikálták a kutatások legfontosabb eredményeit. A tanulmány következtetései messze túlmutatnak a régió határain és gyakorlati (elsősorban szénhidrogénkutatási és hidrogeológiai) szempontból is jelentősek.

Folytatták a 113013 számú OTKA kutatást. E munka keretében a Dunántúli-középhegységben, a Nyugati-Bükkben és a rudabányai területen dolgoztak. Szakdolgozat és doktori kutatás keretében elemezték a dunántúli-középhegységi kréta szerkezeteket terepen, valamint szeizmikus adattömbökön. Az első eredményeket több nemzetközi konferencián, valamint magyar nyelvű szakcikkben is bemutatták. Nemzetközi együttműködés keretében megkezdtek a Szilicei-takaró talpi breccsájának vizsgálatát mágneses anizotrópián alapuló módszerrel (AMS), valamint egy szakdolgozó bevonásával a breccsa ásványtani, kőzettani és fluidumzárvány vizsgálatát. A takarómozgáshoz kapcsolódó kréta szerkezetalakulást szakdolgozó bevonásával kezdték elemezni. A Rudabányai–Aggteleki-hegység triász korú lejtő- és pelágikus medence fáciesű képződményeinek kutatása egy doktorandusz közreműködésével folytatódott, és ehhez kapcsolódóan új biosztratigráfiai adatokat publikáltak. A szőlősardói-egységből ismert dolomitosodott triász képződmények elemzéséhez szén és oxigén stabil izotópokat mértek. A petrográfiai eredményekkel összhangban, ezek az értékek beilleszthetőek egy szín-szediment törési rendszerhez kapcsolt dolomitosodási modellbe. Az új eredmények bemutatásra kerültek egy észak-magyarországi nemzetközi terepbejárás során. A Nyugati-Bükkben folytatták a jura lejtő- és medenceüledékek szedimentológiai feldolgozását, a recski mélyfúrások (Rm-25, -34, -58, -61, -62, -63) mikrofácies vizsgálatát. A bükkzsérci mészkő korai deformációjáról diákköri dolgozat született. A 2015-ben gyűjtött bükki mintákból megtörtént a fission track mérésekre a minták előkészítése.

Terepbejárást tettek a dinári rokon felépítésű területeken, melynek során szerkezeti és paleomágneses adatokat gyűjtöttek összehasonlítás céljából. A Drina-Ivanjica mezoos szerkezetalakulását szakdolgozat és diákköri dolgozat keretében elemezték, nemzetközi

konferenciákon mutatták be. Terepbejárást tettek a Keleti-Alpokba, a szerkezeti és fácies hasonlóságok tanulmányozására.

Doktori dolgozatban tovább elemezték a pannóniai szerkezeti mintázatot és feszültségmezőt, új szakdolgozati munka kezdődött a Zagyva-árokban. A deformációs szalagok vizsgálatát is tovább folytatták, amelyekről egy doktori dolgozat készült el, nemzetközi együttműködés kezdődött, és publikációkat készítettek elő. Doktori kutatás keretében a Makói-árok mintáin folytatódott a pannóniai képződmények diagenézis szempontú petrográfiai és geokémiai elemzések.

Részt vettek a Pannon-medence átfogó, nemzetközi interdiszciplináris geodinamikai vizsgálatában. Ezzel kapcsolatban nemzetközi konferenciát rendeztek. Elemezték a Pannon-medence és peremei kainozoos üledékeinek paleomágneses adatait. Szlovéniai adatok alapján elemezték a Pannon-medence délnyugati peremének szerkezetét, amelyből nemzetközi konferencián poszttert és angol nyelvű publikációt készítettek. A Pannon-medence nyugati peremét alkotó szerkezeti elemek vizsgálatával kapcsolatban új szakdolgozói munka kezdődött.

Részt vettek a Magyar Földtani és Geofizikai Intézet által vezetett gerescei földtani térképezésben, a 2017-ben megjelenő térképlapok szerkesztésében, részben a szöveges magyarázó megírásában.

Neotektonikai-morfotektonikai témakörben publikációt készítettek a Dunántúli-középhegység északi részében a travertinók geomorfológiai és szerkezeti vizsgálatáról.

A Radiometriai Laboratóriumban urán-soros kormeghatározásokat végeztek az MTA Geokémiai Intézetével közös kutatásokhoz, valamint doktori témához tartozó kutatáshoz. Gamma-spektroszkópiás vizsgálatokat végeztek összesen 61 mintán az ELTE Lumineszcens Kormeghatározási Laboratóriuma számára.

Fertő-tavi szeizmikus mérések alapján - osztrák egyetemi és ipari kutatóintézetekkel közösen - a Kelet-alpi régió és a Pannon-medence határterületének negyedidőszaki fejlődéstörténetét kutatták.

Tovább folytatták a kutatási együttműködést a Wigner FK-val a közösen fejlesztett műon-tomográf geofizikai alkalmazásai terén. Lezárták az első nagy kísérleti mérésorozatot a Királylaki-táróban. Itt elsőként sikerült ismeretlen üreget kimutatni kozmikus sugárzás mérése alapján. Elkezdték a tomográfus méréseket a KFKI csillebérci atomreaktoránál. A Tokiói Egyetemmel közös vulkanológiai mérések megkezdéséhez kiszállították Japánba és beüzemelték az első kísérleti detektort, amely egyelőre laboratóriumi körülmények között, majd várhatóan 2017 elejétől valós terepi mérőhelyen üzemel.

Műhold fedélzeti és földi regisztrátumok együttes vizsgálatával elemezték a Nap aktivitáshoz, geomágneses viharokhoz és sugárzási övek relativisztikus részecskéihez köthető VLF hullámjelenségek terjedési tulajdonságait. Ehhez fedélzeti adatként az orosz Relek/Vernon mikroműhold magyar (ELTE és BLE) SAS3 hullámkísérletének jelformáit, a NASA VAP és az ESA Cluster műholdak felvételeit használták. Földi referencia adatot az AWDANet globális mérőhálózat (koordinátor az ELTE) szolgáltatott. A beszámolási évben részt vettek az AWDANet hálózat bővítésében, az új mérési pont az antarktisi Princess Elisabeth belga állomáson működik.

b) Tudomány és a társadalom

A természettudományok, szűkebben a földi környezet kutatásának népszerűsítése (kiemelten középiskolásoknak) a Kutatók éjszakáján (szept. 30.). Hazai helyszíneken népszerűsítő előadásokat tartottak a műon-tomográfiával kapcsolatos kutatásokról (2016.11.19. Eger,

2016.11.26. Dorog). Kínában a China Science Festival nevű rendezvényen egy hetes előadássorozat keretében tartottak ismeretterjesztő előadásokat a kutatócsoportban zajló geofizikai kutatásokról. Tornabarakonyban ismeretterjesztő előadást tartottak az Aggtelek-Rudabányai-hegység északi részének földtani felépítéséről.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatás, az oktatás és a továbbképzés területén sokoldalú együttműködés folyt a MOL Nyrt-vel. Szoros volt a munkakapcsolat a Magyar Földtani és Geofizikai Intézettel, a regionális geológiai kutatásokat, valamint az obszervatóriumi méréseket illetően, továbbá az MTA CSFK Geokémiai Kutatóintézetével és a Debreceni Atomki-val. A kutatócsoport – a Wigner FK-tal kötött kutatási együttműködési megállapodáson keresztül – aktív kapcsolatban van a drezdai HZDR intézet valamint a Tokiói Egyetem fizikus és geofizikus kollégáival. Szoros együttműködés a hazai VLF mérőrendszer üzemeltetése és tudományos értelmezése területén az MTA CSFK GGI-vel (Sopron). - A futó és előkészítés alatt álló orosz tudományos űrprogramok okán (pl Chibis AI, ISS Trabant) – ezekben a magyar (ELTE és BL-Electronics) fejlesztésű SAS3 hullámkísérletet és tudományos részvételt az orosz partner kérte – *IKI* és *IZMIRAN* (Moszkva, Oroszország). Az Alpi-Kárpáti-Pannon-Mediterrán térség lemeztektonikai, geodinamikai folyamatait megvitató nemzetközi konferenciát szerveztek, közös nemzetközi terepbejáráson vettek részt Lengyelországban, Ausztriában, Szerbiában, és a Pireneusokban. Az Innsbrucki Egyetemen együttműködve AMS méréseket végeztek.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

K115836 sz. OTKA (2016-2019), Globális, regionális és lokális elektromágneses környezetünk tanulmányozása ELF tranziensek felhasználásával, aktuális összeg: 19,864 M Ft, 1 fő (SP) TKI résztvevő.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Haas J, Hips K, Budai T, Győri O, Lukoczki G, Kele S, DeményA, Poros Zs: Processes and controlling factors of polygenetic dolomite formation in the Transdanubian Range, Hungary – a synopsis. Int. J. of Earth Sciences, 1-31. DOI: 10.1007/s00531-016-1347-7
2. Bór J, Ludván B, Novák A, Steinbach P: Systematic deviations in source direction estimates of Q-bursts recorded at Nagycenk. Hungary. J. Geophys. Res. Atmos., 121: 5601-5619 (2016) doi:10.1002/2015JD024712., <http://real.mtak.hu/40464/>
3. Oláh L, Surányi G, Barnaföldi GG, D. Bemmerer, Hamar G, Melegh H, Varga D: Cosmic Background Measurements at a Proposed Underground Laboratory by the REGARD Muontomograph. Journal of Physics-Conference, 665:(1) Paper 012032. 4p. (2016)
4. Ruszkiczay-Rüdiger Zs, Braucher R, Novothny Á, Csillag G, Fodor L, Molnár G, Madarász B, Arnold M, Aumaître G, Bourlès D, Keddadouche K: Tectonic and climatic forcing on terrace formation: coupling in situ produced ¹⁰Be depth profiles and luminescence approach, Danube River, Central Europe, Hungary. Quaternary Science Reviews, 131: 127–147 (2016) <http://dx.doi.org/10.1016/j.quascirev.2015.10.041>
5. Petrik A, Beke B, Fodor L, Lukács R: Cenozoic structural evolution of the southwestern Bükk Mts. and the southern part of the Darnó Deformation Belt (NE Hungary). Geologica Carpathica, 67:(1) 83–104 (2016)

MTA-ELTE GEOMETRIAI ÉS ALGEBRAI KOMBINATORIKA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Szőnyi Tamás, az MTA doktora
ELTE TTK Számítógéptudományi Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C.
telefon: (1) 381 2202; fax: (1) 381 2174; e-mail: szonyi@cs.elte.hu; honlap: <http://www.cs.elte.hu/gac>
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2013. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport elsődleges feladata a geometriai és algebrai kombinatorika – különösen a véges geometriából származó, annak eszköztárával, ill. más algebrai módszerekkel támadható problémák – területén végzett alapkutatás, kiemelve az extremális kombinatorikai/ gráfelméleti és stabilitási kérdéseket, q -analógokat, színezéseket, az irányproblémát, véges síkok kombinatorikusan definiált struktúráit (pl. lefogó ponthalmazok), a polinommodszert és a nem feltétlenül desarguesi síkokat. Az eddigiekben a kizártrészposzet-probléma, keresési problémák, lefogó ponthalmazok, affin síkok egész automorfizmusai, síkba ágyazott, csoporttal koordinátázható 3-hálózatok, extremális kombinatorikai struktúrák és $PG(2, q)$ kombinatorikusan definiált struktúrái, valamint pszeudovéletlen sorozatok és bizonyos gráfszínezési kérdések területén értek el eredményeket. A beszámolóévben Rédei típusú lefogóhalmazok, MRD kódok, Hall-síkok örökölt ívei, projektív és affin terek színezései, többszörös domináló és megoldó (rezolváló) halmazai, bőségreguláris gráfok, extremális gráfelméleti kérdések, általánosított latin négyzetek transzverzálisai, 2-planar gráfok és a metsző hipergráfokra vonatkozó Ryser-sejtés vizsgálata volt céljuk.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport munkatársai véges geometriákra vonatkozó, kombinatorikus jellegű kérdéseket vizsgáltak. Belátták, hogy egy q -adrendű projektív sík G illeszkedési gráfjának partíciódimenziója nagyságrendben $(2+o(1)) \log(q)$ és $(4+o(1)) \log(q)$ köze esik. Egy ponthalmazt a véges projektív síkban sűrűnek nevezünk, ha az általuk meghatározott egyenesek lefogják az összes pontot. A kicsi sűrű halmazok legalább $(2q)^{1/2}$ méretűek, és ez az alsó becslés nagyságrendben éles is a négyzetrendű Galois-síkokon. Sűrű halmazokra nézve két lényegesen eltérő bizonyítást is adtak arra, hogy $(3 \log(q)q)^{1/2}$ méretűt minden véges síkon találunk, megjavítva az eddigi legjobb korlátot. A kutatócsoport munkatársai az ún. véges biaffin síkok incidenciagráfjának metrikus dimenzióját is vizsgálták. Megmutatták, hogy a q -elemű testre épített biaffin síkok metrikus dimenziója nagyságrendileg $8q/3$ és $3q$ között van, sok esetben $3q$ -hoz közel, és hogy a pontos érték várhatóan eltér a desargues-i és a nem desargues-i síkok esetén. Új részeredmények születtek a $PG(2, p)$ (p prím) projektív síkok $3p$ -nél kisebb kétszeres lefogó ponthalmazainak vizsgálatában. Egyrészt a $p=13$ esetben kimutatták, hogy lényegében egy olyan példa van, melynek van két $(p-1)$ -szelője; másrészt a $p=19$ esetben új példát is találtak. Akbari és Alipour definiálta $l(n)$ -t mint a legkevesebb szimbólum számát egy $n \times n$ -es általánosított Latin négyzetben, ami garantálja transzverzális létezését, és megsejtették, hogy $l(n) \leq n^2/2$. A kutatócsoport munkatársai megmutatták, hogy $l(n) \leq 0.75n^2$, továbbá igazolták, hogy nem lehet egyidejűleg az összes szimbólum száma kicsi ($n^2/2$ körül) és az egyszeres szimbólumok száma is kicsi (0 körül). Így világosnak tűnik, hogy más módszerekkel az $n^2/2$ -es korlátot is át fogják törni. Rámutattak továbbá egy érdekes kapcsolatra, ami összeköti a jelen problémát teljes gráfok 2-faktorainak színezéseivel. Ez kapcsolódik Woolbrigh és Fu azon eredményéhez, mely szerint a $2n$ csúcsú teljes gráf éleinek minden jólszínezése esetén lesz olyan 1-faktor, melynek élei mind különböző szint kapnak. A kutatócsoport által felállított sejtés szerint bármely n csúcsú teljes gráf éleinek jólszínezése esetén lesz n vagy $n-1$ csúcsú

2-faktor, melynek élei különböző szint kapnak. Konstruáltak továbbá egy olyan hipergráfcsaládot, melynek elemei teljesítik a Ryser-korlátot. A módszer projektív síkokra épít, de eltér a klasszikus példától. Így azt kapjuk, hogy ha létezik r rendű projektív sík, akkor $r+2$ -re létezik éles példa. A konstrukció flexibilitásából következik, hogy exponenciálisan sok különböző hipergráfot kapunk rögzített r -re; tartalmazásra nézve minimális és maximális példából is sok van. Ez mutatja, hogy ha a sejtés igaz, akkor a bizonyítása nagyon bonyolult kell legyen. A kutatócsoport egy munkatársa társszerzőivel az általuk bevezetett bőségregularis gráfokat tanulmányozta. Ezek a gráfok a sokak által vizsgált élregularis gráfok olyan természetes általánosításai, melyek kapcsolódnak a Moore-gráfokhoz, a foksám/átmérő problémakörhöz, és némileg meglepő módon gráfok irányítható felületekbe való regularis beágyazásaihoz is. Leírták ezen gráfok alapvető kombinatorikus tulajdonságait, részletesen vizsgálták a harmad- és negyedfokú bőségregularis gráfokat, valamint több olyan végtelen bőségregularis gráfcsaládot konstruáltak, melyek nem éltranzitívak. A kutatócsoport egy munkatársa több különböző társszerzővel regularis gráfokra vonatkozó extrémális gráfelméleti problémákkal, valamint a Sidorenko-sejtéssel foglalkozott. Megmutatták, hogy a Sidorenko-sejtés teljesül bizonyos célgráfok esetén, így például a sejtés igaz q -színezések, független halmazok és Widom-Rowlinson konfigurációk számára. Ezen esetekben a sejtésnek statisztikus fizikai jelentése van. Ezen kívül új bizonyítást és általánosítást adták annak a ténynek, hogy regularis gráfok között a teljes gráfok maximalizálják a Widom-Rowlinson konfigurációk normalizált számát. Extrémális regularis gráfokra vonatkozó más problémákat is vizsgáltak, melyekben a végtelen d -regularis fa játssza az extrémális gráf szerepét, valamint olyan gráfokat is, melyek párosítási polinomjának minden gyöke egész szám. Meghatározták az összes regularis és karommentes gráfot, melyre az előbbi tulajdonság teljesül. A kutatócsoport munkatársai az MTA és a FWO együttműködésében projektív sík egyenesei által generált kódok duálisának minimális súlyát is vizsgálták. Ez a projektív síkon egy olyan multihalmaz, amelyet minden egyenes multipllicitással számolva 0 modulo p pontban metsz. Sikerült a korábbinál jobb alsó becslést adniuk, nagyságrendje kb. $2q-2q/p$ (igazából Sachar korábbi eredményei nem is a duális kód, hanem a duális és az eredeti kód metszetének minimális súlyára adtak becslést). Külön vizsgálták a $p=3$ esetet, amikor geometriai érveléssel (a Segre-lemma alkalmazásával) belátták, hogy a becslésükből adódó minimális súly nem érhető el, azaz a korábbi becslésüket eggyel megjavították. Diszjunkt Baer részsíkok lefogó ponthalmazaival kapcsolatos problémán is dolgoztak. Négyzetrendű síkon vegyünk diszjunkt Baer részsíkokat. Ezt az egyenesek kétféle méretű ponthalmazban metszik, az egyik a részsíkok száma, a másik ennél a részsík rendjével nagyobb. Céljuk az volt, hogy a hosszú egyeneseket lefogó ponthalmazt keressenek. A probléma kétféle egyszerű megoldás is adható: vegyünk egy-egy Baer részegyenest a részsíkokban (ezek maguk lefogó ponthalmazok az őket tartalmazó részsíkra vonatkozóan), illetve vegyük az egész sík egy olyan lefogó ponthalmazát, amely benne van a Baer részsíkok egyesítésében. A 2016-ban megjelent, nem desarguesi síkok lefogó ponthalmazairól szóló dolgozatuk témájához lazán kapcsolódóan vizsgálták különféle nevezetes ponthalmazok megfelelőjét Hall- (vagy általánosabban Moulton-) síkokon, és az oválisok, valamint az unitálok vizsgálatában értek el előrelépéseket. Sikeresen karakterizálták továbbá tetszőleges affin terekre is a korábban csak síkokra ismert egész automorfizmusokat. Továbbfejlesztették a GAP komputeralgebra rendszerhez készített LOOPS programcsomagot, és további véges osztályokkal bővítették a kvázicsoport-könyvtárat. Ehhez új algoritmusokat fejlesztettek ki, melyek alkalmasak adott osztályba tartozó kvázicsoportokat megalkotni és kezelni az izomorfizmus-problémát. Ez utóbbinál is nehezebb a kvázicsoportok izotópiájának algoritmikus vizsgálata. Ezen a területen is előrelépéseket értek el azzal, hogy a problémát ekvivalens gráfizomorfizmus probléma-vá fogalmazták át. A 8-adrendű kvaterniócsoport projektív realizálásával kapcsolatban is adtak pontos algebrai jellegű leírást, és azonosítottak egy hibát G. Urzua idevágó 2010-es cikkében. Legyen W egy $GF(qn)$ -feletti r -dimenziós

vektortér. Blokhuis és Lavrauw bizonyították, hogy ha rn páros, akkor az ún. „scattered” alterek $GF(q)$ -rangja legfeljebb $rn/2$. Az r páros esetben például is adnak $rn/2$ dimenziós scattered alterre. Az r páratlan és n páros esetben eddig csak bizonyos n és q esetén voltak konstrukciók, illetve létezését igazoló eredmények. A kutatócsoport egy munkatársa és társszerzői például adtak $rn/2$ dimenziós (maximum) scattered alterekre az összes fennmaradó esetben. $GF(q)$ -feletti $s \times t$ mátrixok egy H halmazát lineáris MRD kódnak nevezzük d minimális távolsággal, ha H elemei $GF(q)$ -alteret alkotnak, H minden nem nulla eleme legalább d rangú és $|H|=q \max\{s,t\}(\min\{s,t\}-d+1)$. Nemrég Sheekey bizonyította, hogy $r=2$ esetén a maximum scattered alterekből $n \times n$ -es lineáris MRD kódokat lehet készíteni $(n-1)$ -es minimális távolsággal. Ezt az eredményt sikerült tetszőleges r -re kiterjeszteniük: W maximum scattered altereiből $rn/2 \times n$ -es lineáris MRD-kódokat lehet készíteni $(n-1)$ -es minimális távolsággal. 20 évvel ezelőtt Mauduit és Sárközy új kvantitatív mértékeket vezetett be véges bináris sorozatok pszeudovéletlenségének vizsgálatára. Ezek a mértékek valóban jó képet adtak a teljes sorozat véletlen jellegéről, ugyanakkor a gyakorlati alkalmazások során előfordulhat, hogy a teljes generált sorozatnak ténylegesen csak egy jóval rövidebb része kerül felhasználásra. A kutatócsoport egy munkatársa bevezette az ún. súlyozott eloszlás mértéket. Ez a mérték egyszerre méri a teljes és a rövid részsorozat pszeudovéletlenségét. Sikerült több olyan bináris sorozatot sorozatot megadniuk, amelyre a súlyozott eloszlás mérték értéke optimális. Sikerült Roth híres (sorozatok irregularitására vonatkozó, 1964-es) eredményét általánosítaniuk, erős alsó becslést adva a súlyozott eloszlás mértékek minimumára.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport munkatársai a Kutatók Éjszakáján „A SET játék matematikája”, a Zeneszüret Fesztiválon (Pécs) a Budapesti Vonósokkal közösen „A szimmetriák matematikájáról, szimmetriák a zenében” címmel tartottak előadást, szerkesztői munkát végeztek a Középiszkolai Matematikai és Fizikai Lapokban. Egy kutató tagja a Matematika OKTV Bizottságának.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport tagjai az ELTE, SZTE és a koperi egyetemeken a 2016-os évben is folytatták oktatási tevékenységüket, többen oktatnak doktori iskolában. Többek között Aart Blokhuis (Eindhoven) és Jan De Beule (Brüsszel) tartott előadást a kutatócsoport heti szemináriumán. A kutatócsoport öt vendégkutatót fogadott rövidebb időre, és két munkatárs dolgozott külföldön hosszabb ideig (Szlovénia, Olaszország).

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai az MTA-FWO együttműködés keretében mobilitási pályázatot nyertek, évente 4 hazai kutató Belgiumba utazását és 4 belga kutató itthoni fogadását lehetővé téve (1-1 hét). Egy kutató Bolyai ösztöndíjat nyert.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. De Beule J, Héger T, Szőnyi T, Van de Voorde G: Blocking and Double Blocking Sets in Finite Planes. The Electronic Journal of Combinatorics, 23(2): P2.5 (2016)
<http://www.combinatorics.org>
2. Korchmáros G, Nagy GP: 3-Nets realizing a diassociative loop in a projective plane. Designs, Codes and Cryptography, 79(3): 442-448 (2016)
<http://arxiv.org/abs/1603.00242>

MTA-ELTE KOMPLEX KÉMIAI RENDSZEREK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Császár Attila, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: (1) 372 2929; fax: (1) 372-2592; e-mail: csaszar@chem.elte.hu
honlap: <http://kkrk.chem.elte.hu/kkrk/>
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2013. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport (KKRK) ötéves kutatási terve meghatározza, hogy a Kutatócsoport az elméleti és számítógépes kémia (kiemelten a kvantumkémia), a (nagyfelbontású) molekulaspektroszkópia, a termokémia, valamint a reakciókinetika területén, egyes határterületekre (matematikai statisztika, informatika és információtechnológia) történő átnyúlással, illetve az ismeretek új szinten történő összekapcsolásával új, a szélesebb természeti környezet megismerését (pl. csillagképződés, exobolygó-kutatás, égések), valamint az életminőség védelmét (pl. földi üvegházhatás tudományos megértése, környezet- és klímavédelmi kutatás és fejlesztés) és javítását szolgáló, a gyakorlatban általánosan felhasználható módszereket, a hozzájuk kapcsolódó számítógépes programokat, valamint modern, aktív adatbázisokat fejleszt és tesz elérhetővé a szélesebb közönség (kutatók és mérnökök) számára.

Ahogy az eddigiekben is, úgy 2016-ban is a Kutatócsoport alap- és alkalmazott kutatási tevékenysége fontos értékeket teremtett. A legfontosabb alapkutatási eredményeket 12 angol nyelvű tudományos közlemény tartalmazza (lásd lentebb, a nem alapkutatási közleményeket, valamint a konferencia *Proceedings* kiadványokat ide nem számoljuk be). Ezek a közlemények a Kutatócsoport minden egyes vállalt kutatási területén fontos eredményekről számolnak be. A kutatásokban aktívan vettek részt a hazai PhD hallgatók, akiknek képzése továbbra is a Kutatócsoport egyik kiemelt feladata. Amint a KKRK <http://kkrk.chem.elte.hu/kkrk/> dedikált honlapján is megtalálható, a Kutatócsoport már közel 100 tudományos közleményt és konferencia részvételt jegyez, a cikkekre jelentős számban érkeztek független hivatkozások. Folytatódott a ReSpecTh információs rendszer (Re = *reaction kinetics*, Spec = *spectroscopy*, valamint Th = *thermochemistry*) és a csatlakozó dedikált weboldal (www.respecth.hu) kiépítése is, az itt közöltek jelentik a Kutatócsoport eredményeinek egyik legfőbb megjelenítését.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

2015-ben dolgozta fel a kutatócsoport az alagúthatást mutató NH₃ molekulára vonatkozó nagyfelbontású spektroszkópiai eredményeket. 2016-ban a kísérleti eredmények alapján a Kutatócsoportnak sikerült először megmutatnia, hogy a kvantumkémiai alagúthatás jelentősen függ a rezgési és forgási gerjesztéstől. Ezzel egyben kvalitatív magyarázat is született a kvantitatív kísérleti eredmények egy jelentős részére.

Az asztrofizika és az asztrokémia egyik vezető folyóiratában (*Astrophys. J. Suppl.*) megjelent cikkben a kutatócsoport által kifejlesztett MARVEL eljárással került feldolgozásra a C₂ molekula kísérleti rovibronikus átmeneteinek teljes halmaza, s ennek alapján nagyszámú rovibronikus energiaszintet sikerült meghatározni. Ez a MARVEL eljárás első alkalmazása különböző elektron-állapotokra, a kutatócsoport elvárása szerint az eredmények jelentősen segíthetnek egyes asztrofizikai alkalmazásokat.

A kutatócsoport folytatta az elmúlt évben a spektroszkópiai hálózatok jellemzőinek tanulmányozását. Ennek kapcsán jelent meg közlemény a molekulaszínképek spektrumáról, azaz a csoport megvizsgálta a nagyfelbontású molekulaszínképek kapcsán felírható különböző mátrixok sajátértékeinek tulajdonságait és az ezekből levonható következtetéseket. Ehhez a kutatási területhez kapcsolódik az a review jellegű *J. Phys. Chem. A* közlemény (sokat mondó címe *Small Molecules – Big Data*), melyben először került összefoglalásra a spektroszkópiai hálózatok kapcsán eddig felhalmozott tudás. A cikket a szakterület vezető folyóirata a borítólapján reklámozta, ami külön megtiszteltetést jelent mind a témának, mind a csoportnak.

Francia együttműködés keretében a kutatócsoport megállapította, hogy egyes nagy energiájú és magas gerjesztésű molekuláris kvantumállapotok emlékeznek arra, hogy milyen potenciális energia völgyhöz tartoznak. Ezt a jelenséget a szerzők rezgési memóriának nevezték el.

Rendkívül érdekes eredményeket kapott a kutatócsoport a szerkezetnélküli molekulák kapcsán (ezt a fogalmat a Kutatócsoport tagjai vezették be az irodalomba 2015-ben). A H_5^+ molekulaion vizsgálata után sor került a deuterált származékok vizsgálatára és több érdekes, többek érdeklődését felkeltő eredményt is sikerült meghatározni a rezgési és forgási mozgások szétválasztása és a szimmetria kapcsán.

A közepesen erősen kötött $F^-(H_2O)$ és $F^-(D_2O)$ komplexekre érdekes dinamikai eredményeket közölt a Kutatócsoport. Az elvégzett vizsgálatok egy új potenciális energia hiperfelület kiépítésén alapultak, a számítások segítségével sikerült értelmezni a komplexek kötött állapotait és részben a nem-kötött állapotait is.

A kutatócsoportban végzett számítások segítségével sikerült megfejteni egy mintegy 20 éves talányt: 1995-ben vették fel a $CH_4 \cdot H_2O$ van der Waals dimer nagyfelbontású színképét a távoli infravörös tartományban. A kísérleti eredmények előállítására nagy kihívást jelentett, de a sikeres kísérleteket követően komoly erőfeszítések ellenére sem sikerült a felvett színképeket értelmezése. A kutatócsoportban elért egyes módszerfejlesztési eredmények döntő mértékben járultak hozzá ahhoz, hogy a felvett színképek legtöbb vonalát sikerült értelmezni, s egyben kiderült, hogy ez a dimer is szerkezetnélküli molekulának tekinthető.

Nemzetközi együttműködés eredménye az a közlemény, melyben a kutatócsoport kísérletet tett az atomi és molekuláris rendszerek számítása kapcsán a számítási eredmények bizonytalanságának becslésére. A szélesebb nemzetközi közösségnek szól az az ajánlás, hogy pontos számítási eredmények esetén kötelező legyen a bizonytalanságok becslése, s az ajánlás mellett erre számos eljárást vázoltak fel a közlemény szerzői.

Egy új eljárás kidolgozásával minden eddiginél pontosabb állapotfüggvényt fejlesztett ki a kutatócsoport a $H_2^{16}O$ molekulára, s ebből a 0 – 6000 K intervallumra nagyszámú termokémiai függvényt sikerült származtatni. A számítások során figyelembe lett véve a magspin izoméria és a nem-kötött állapotok hatása, eddig mindkét tényezőt elhanyagolta az irodalom. Az eredmények felkeltették az IAPWS (*International Association for the Properties of Water and Steam*) nemzetközi szervezet érdeklődését, a nehézvízre készülő új ajánlásuk a Kutatócsoport által származtatott eredményeket is tartalmazza.

Új, minden eddiginél teljesebb és pontosabb mechanizmust javasolt a Kutatócsoport az etanol égése kapcsán. Ugyancsak javaslatot tett a Kutatócsoport a szintézisgáz és a hidrogén égési mechanizmusának további javítására. Az elért eredmények megjelennek a Kutatócsoport által gondozott ReSpecTh információs rendszerben.

b) Tudomány és társadalom

A ReSpecTh információs rendszer továbbfejlesztése jelentős segítség a légköri és égésmodellezéssel foglalkozó szakemberek számára. A Kutatócsoport által kifejlesztett programrendszert használták fel Londonban középiskolás diákok oktatására az ORBYTS

(*Original Research By Young Twinkle Students*) program keretében. A Kutatócsoport tervezi a program magyarországi bevezetését is a londoni kedvező tapasztalatok alapján.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A múlt évben indult meg a kutatási tevékenység egy COST pályázat (MOLIM: Molecules in Motion, <http://cost-molim.eu>) keretein belül, melyet a kutatócsoport vezetője koordinál chair-ként és 31 ország kutatóit fogja össze komplex kémiai rendszerek molekulamozgásainak vizsgálata kapcsán.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban a kutatócsoport vezetője elnyert egy 4 éves NKFIH pályázatot. Az MTA támogatását nyerték el egy vendégprofesszor foglalkoztatására.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Császár AG, Furtenbacher T: Promoting and Inhibiting Tunneling via Nuclear Motions. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 18: 1092-1104 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1039/c5cp04270d>)
2. Árendás P, Furtenbacher T, Császár AG: On Spectra of Spectra, *J. Math. Chem.*, 54: 806-822 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1007/s10910-016-0591-1>)
3. Sarka J, Császár AG: Interpretation of the Vibrational Energy Level Structure of the Astructural Molecular Ion H_5^+ and All of Its Deuterated Isotopomers. *J. Chem. Phys.*, 144: 154309 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1063/1.4946808>)
4. Ajali Y, Trabelsi T, Denis-Alpiraz O, Stoecklin T, Császár AG, Mogren M Al-Mogren, Francisco JS, Hochlaf M: Vibrational Memory in Quantum Localized States. *Phys. Rev. A*, 93: 052514 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.93.052514>)
5. Furtenbacher T, Szabó I, Császár AG, Bernath PF, Yurchenko SN, Tennyson J: Experimental Energy Levels and the Related High-Temperature Partition Function of the $^{12}C_2$ Molecule. *Astrophys. J. Suppl.*, 224: 44 (2016) (<http://dx.doi.org/10.3847/0067-0049/224/2/44>)
6. Sarka J, Lauvergnat D, Brites V, Császár AG, Léonard C: Rovibrational Energy Levels of the $F(H_2O)$ and $F(D_2O)$ Complexes. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 18: 17678-17690 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1039/C6CP02874H>)
7. Chung H, Braams BJ, Bartschat K, Császár AG, Drake GWF, Kirchner T, Kokoouline V, Tennyson J: Uncertainty Estimates for Theoretical Atomic and Molecular Data. *J. Phys. D*, 49: 363002 (2016) (<http://stacks.iop.org/0022-3727/49/i=36/a=363002>)
8. Sarka J, Császár AG, Althorpe SC, Wales DJ, Mátyus E: Rovibrational Transitions of the Methane-Water Dimer from Intermolecular Quantum Dynamical Computations. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 18: 22816-22826 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1039/c6cp03062a>)
9. Császár AG, Furtenbacher T, Árendás P: Small Molecules – Big Data. *J. Phys. Chem. A*, 120: 8949–8969 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.6b02293>)
10. Furtenbacher T, Szidarovszky T, Hruby J, Kyuberis AA, Zobov NF, Polyansky OL, Tennyson J, Császár AG: Definitive Ideal-Gas Thermochemical Functions of the $H_2^{16}O$ Molecule. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 45: 043104 (2016) (<http://dx.doi.org/10.1063/1.4967723>)

MTA-ELTE NUMERIKUS ANALÍZIS ÉS NAGY HÁLÓZATOK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Faragó István, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C.
telefon: (1) 372 2500; fax: (1) 381 2158; e-mail: faragois@cs.elte.hu
honlap: http://www.cs.elte.hu/applanal/numnet/numnet_hu.html
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport 5 éves kutatási terve tömören. Transzport típusú modelleket leíró parciális differenciálegyenletek (PDE-k) és -rendszerek numerikus megoldása: operátorszeletelési módszerek vizsgálata; hatékony operátor-prekondicionálási módszerek alkalmazása végeelem-módszerrel kombinálva; kvalitatívan megbízható módszerek megadása; a numerikus eljárások alapvető tulajdonságainak (konzisztencia, stabilitás, konvergencia, hibanagyság) elemzése; alkalmazások valós feladatokra, elsősorban környezeti modellekben. Komplex hálózaton zajló folyamatok modellezése differenciálegyenletekkel: a hálózat struktúrája és a differenciálegyenlet közötti kapcsolat felderítése. Kombinatorika és funkcionálanalízis kapcsolatának feltérképezése.

Az eddigi eredmények tömören: Környezeti nagyskálájú modellek hatékony kezelésének áttekintése, numerikus módszerek légszennyezés-terjedési modellt tartalmazó feladatosztályra. A sekélyfolyadék-egyenletek adatasszimilációjának megalapozása. Az N-stabilitás elemzése. Diszkrét maximum-elvek kidolgozása. Prekondicionált iterációk elliptikus PDE-kre. Komplex hálózatok: betegségterjedési modellek új összefüggéseinek felderítése és PDE-vel való közelítés vizsgálata. Véletlen modell alapján szerveződő, fa típusú hálózat lokális struktúrájának jellemzése.

A beszámolóév feladatai: Operátorszeletelési eljárások, alkalmazásuk linearizált sekélyfolyadék-egyenletekre. Szabályozhatóság, stabilitásvizsgálat. PDE-k numerikus vizsgálata, meteorológiai modellek elemzése, összetett algoritmus légszennyezés-terjedési modell- feladatokra. Elliptikus feladatok esetén prekondicionált iterációk komplex Helmholtz-egyenletekre, hibabecslések; törtrendű diffúziós modellek alkalmazása. Kvalitatív tulajdonságok, a folytonos és diszkrét maximum-elv összefüggéseinek vizsgálata elliptikus és időfüggő (parabolikus) esetben. Komplex hálózatok differenciálegyenletei: a Kolmogorov-egyenletek approximációja különféle hálózattípusokon, járványterjedési modellek kvalitatív vizsgálata.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Szerkesztői voltak a Springer „Mathematics in Industry” sorozatában megjelent kötetének, amely meteorológiai problémák matematikai kezelését tekinti át [1]. Ebben többek között ismertetik a légszennyeződés-terjedési modellek különféle fajtáit, kitérve az operátorszeletelés alkalmazásának kérdéseire; párhuzamosítható összetett numerikus módszert írnak le ezek általános típusaira; elemzik az éghajlatváltozás jövőbeli hatását az európai légszennyezettségi szintek alakulására a Dániai Euleri Modell (DEM) felhasználásával. A DEM-mel végzett numerikus kísérletek segítségével a Richardson-extrapoláció és az operátorszeletelés együttes alkalmazását is megvizsgálták.

A sekélyfolyadék-egyenletekre alkalmazott numerikus módszerek konvergenciájának vizsgálatakor az egyenletrendszer linearizált változata fontos szerepet játszik. Nemviszkózus, térben konstans egyensúlyi helyzet körül linearizált sekélyfolyadék-egyenletekre operátorfélcsoportokkal mutatták meg, hogy a problémának egyetlen stabil megoldása van. Megmutatták, hogy a tavak és folyószegmensek árvizeinek modellezése által motivált

szabályozási egyenlet hatékonyan oldható meg operátorszeletelési eljárás segítségével. Numerikus példákkal illusztrálták a Fourier-módszerrel együtt alkalmazott szekvenciális szeletelés előnyeit. Általános szabályozási egyenleteknél optimális helyzet-meghatározásra alkalmazott ún. innovatív integrátorok konvergenciáját demonstrálták több feladatosztályra. Elliptikus (stacionárius) feladatok osztályán belül komplex Helmholtz-egyenletek prekondicionált iterációs megoldására folytatták a kutatást, a szuperlineáris gyorsaságú konvergenciára kapott elméleti eredményeket gépjármű belső terében fellépő akusztikai feladaton demonstrálták. Általános hibabecsléseket igazoltak monoton mátrixszal való prekondicionálás esetén, és demonstrálták ezt Helmholtz-egyenleten [2].

Kísérleti megfigyelések motiválják törtrendű diffúzió használatát a Navier-Stokes-egyenletekben örvények mozgásának szimulációjára. E modellre vonatkozó végesdifferenciálmódszert elemezték térbeli konzisztencia és stabilitás szempontjából és illusztrálták numerikus példákkal [3].

A kvalitatív megbízhatóságot jellemző folytonos és diszkrét maximum-elv feltételeit vizsgálták többféle nemlineáris parciális differenciálegyenlet-típus és végesesleges megoldásuk esetén: időfüggő (parabolikus) esetben a folytonos modell kvalitatív tulajdonságait jellemezték, elliptikus esetben a felületi végesesleges módszerrel dolgozták ki a diszkrét maximum-elvet, végül PDE-rendszerek esetén kooperativitás mellett igazolták a folytonos maximum-elvet. Parciális differenciálegyenlet-rendszerekkel megadott járványterjedési modellek használata lehetővé teszi a fertőző és fertőzhető egyedek térbeli helyének modellezését is. Kétféle rendszer esetén (Jones-Sleeman-modell, amely a fertőzés lokalitását integrálegyenlettel írja le - $lsSIR$ -modell-, valamint reakció-diffúziós egyenlet - $dsSIR$ -modell) a folytonos és a diszkrét feladat kvalitatív tulajdonságait elemezték, mint pl. monotonitás, nemnegativitás, utazóhullám-megoldás [4]. Az $lsSIR$ -modellben megadták a kvalitatív tulajdonságok teljesülésének elégséges feltételét az időlépésre Dirichlet-perem és az explicit Euler-módszer esetére. Ha a fogékonyak száma is egy adott korlát alatt marad, akkor nem alakulhat ki térben előrehaladó járvány. A SIRS általánosításra, valamint $dsSIR$ -modellekre is megadták az időlépésre vonatkozó korlátokat, és ezeket numerikus tesztekkel demonstrálták [5]. A Húsvét-szigeti populációmodellben megmutatták a fapopulációra bevezetett diffúziós paraméter stabilizáló hatását, és numerikusan megadták a bifurkációs görbét.

A diszkrét matematikai kutatások körében meghatározták a létrák, prizmák és Möbius-létrák optimális "rubbling" számát. Hipergáfok esetére kiterjesztették az Erdős-Gallai-tételt [6] és a fa fogalmát, valamint korlátokat adtak az ilyen hiperfák éleinek számára különböző esetekben.

Komplex hálózatok differenciálegyenleteinek témájában sikerült levezetni egy 4 egyenletre redukált differenciálegyenlet-rendszert, amellyel heterogén fokszámeloszlású hálózatokon is már jól approximálhatók az SIS típusú járványterjedés Kolmogorov-egyenletei [7]. Ehhez a fokszámeloszlás második és harmadik momentumát is tartalmazó lezárást vezettek be. A modell által adott megoldások jó egyezést mutatnak az eddigi, sok egyenletet tartalmazó modellekkel. Az egyenletek nagy száma miatt a közelítő differenciálegyenletek fontos szerepet töltenek be az egy lépéses folyamatokkal közelíthető hálózati folyamatnál is. Sikerült olyan, kevés egyenletet tartalmazó közelítéseket levezetniük [8], amelyek alsó/felső becslést adnak a pontos megoldásra. Ezek hatékonyságát az SIS fertőzésterjedés és szavazási modellek esetén illusztrálták.

b) Tudomány és társadalom

A környezeti modellekben felmerülő differenciálegyenletek numerikus megoldó módszereinek vizsgálata továbbra is a csoport egyik kiemelt kutatási területe. A csoport által

korábban az ECMI-vel közösen szervezett konferencia kötete meteorológiai problémák matematikai kezeléséről 2016-ban jelent meg a Springer kiadónál. További fontos kutatási területük a komplex hálózatokon zajló folyamatok vizsgálata volt. A járványok dinamikájának megértése és modellezése segít a közegészségügyi stratégiák felállításában, ill. az esetleges járványügyi katasztrófák elhárításában.

Az éghajlatváltozás szaporodó jelei közé tartoznak az egyre gyakoribb heves esőzések és a hirtelen hóolvadás a hegyekben. Mivel a hazánkhoz hasonlóan alacsonyan fekvő területeken mindkét folyamat súlyos árvízhez vezethet, kiemelt fontosságú az árvízvédelem különböző módjainak kutatása és fejlesztése. Kutatásai során a csoport az árvíz jelenségét megfelelően modellező linearizált sekélyfolyadék-egyenlek témájában a szabályozási feladatok megoldására alkalmazott numerikus módszerek elméleti és számítógépes vizsgálatával foglalkozott.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

További intenzív kapcsolatokat folytattak rangos nemzetközi kutatóhelyekkel, pl. Z. Zlatev (Aarhus Univ.), G. Söderlind (Lund) látogatása, ill. kiutazás S. Korotovhoz (Bergen), L. Vulkovhoz (Rousse). Ketten Tübingenben töltöttek egy-egy hetet. Egy fő (Otago Univ.) 2016. május 31-ig volt itt vendégprofesszorként. Tagjaik számos nemzetközi konferencián vettek részt, többnyire meghívott előadóként (pl. Moszkva, Jakutsk, Lozenetz, London). Egy fő júniusban a párizsi Supélec-be látogatott F. Magoules vendégkutatói meghívására.

Kibővített együttműködésben folytatták szemináriumukat: <http://math.bme.hu/AlkAnalSzemi> Doktori órákat tartottak a BME-n és az ELTE Matematika doktori iskola keretében: Numerikus modellezés, Nemlineáris és numerikus funkcionálanalízis, Dinamikai rendszerek. Három, a csoport tagjai által témavezetett PhD zárult 2016-ban sikeres védéssel.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hároméves posztdoktori alkalmazást nyertek el az NKTH-nál.

Két kutatójuk posztdoktori ösztöndíját meghosszabbították (Tübingen; KAUST).

Egy fő elnyerte az Ifjúsági Nemzetközi Konferencia Pályázat 2016 tavaszi fordulójának támogatását (fiatal magyar kutatók külföldi tudományos rendezvényen való részvételére).

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bátkai A, Csomós P, Faragó I, Horányi A, Szépszó G. (Eds.): Mathematical Problems in Meteorological Modelling. Mathematics in Industry, 24: Springer, 2016
<http://real.mtak.hu/id/eprint/45173>
2. Axelsson O, Karátson J: Discretization error estimates in maximum norm for convergent splittings of matrices with a monotone preconditioning part. J Comp Appl Math, 310: 155-164 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/37871>
3. Szekeres B: Turbulence Modeling Using Fractional Derivatives, In: Mathematical Problems in Meteorological Modelling. Mathematics in Industry, 24: 47-55 Springer, (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/46238>
4. Sebestyén G, Faragó I, Horváth R, Kersner R, Klincsik M: Stability of patterns and of constant steady states for a cross-diffusion system. Journal Of Computational And Applied Mathematics, 293: 208-216 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/29426>

5. Faragó I, Horváth R: Qualitatively adequate numerical modelling of spatial SIRS-type disease propagation. *Electr. J. Qualitative Theory of Differential Equations* 2016: Paper 12. 14 p. (2016) <http://www.math.u-szeged.hu/ejqtde/p4208.pdf>
6. Györi E, Katona GY, Lemons N: Hypergraph extensions of the Erdős-Gallai Theorem., *European J Combinatorics* 58: pp. 238-246 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/39360>
7. Simon PL, Kiss IZ: Super compact pairwise model for SIS epidemic on heterogeneous networks. *J Complex Networks*, 4(2): 187-200 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/45538>

MTA-ELTE PEPTIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Hudecz Ferenc, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/A.; 1518 Budapest, Pf.32.
telefon: (1) 372 2828; fax: (1) 372 2620; e-mail: fhudecz@elte.hu
honlap: <http://peptid.chem.elte.hu>
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Biológiailag aktív peptidek, peptid-kimérák és peptid konjugátumok tervezése, szintézise, új szerkezet-funkció/hatás összefüggések feltárása, terápiás alkalmazás és diagnosztikumok kifejlesztése céljából. Szintetikus peptid-antigének, illetve gyógyszerható-anyagok kutatása sokakat érintő betegségek (pl. tumor, TBC, autoimmun betegségek) korai diagnózisa és/vagy gyógyítása céljából. A kutatási tevékenységre három témakör jellemző:

Immunkémiai kutatások: A fenti betegségekhez kapcsolódó fehérjék antigénszerkezetének (B- és T-sejt epitópok), feltérképezése, immunválaszért felelős régióinak azonosítása, autoimmun betegségekben (pl. filaggrin, fibrin), fertőzéssel szembeni (pl. *M. tuberculosis*), illetve tumorelles immunválaszban szerepet játszó fehérjékben. Az epitóp peptidek szerkezetének módosítása, "szuperantigének" szintézise diagnosztika és/vagy szintetikus vakcina céljából.

Kemoterápiai kutatások: Antimikrobiális vegyületek (pl. antituberkulotikumok) és Leishmania parazitafertőzés ellenes szerek, daganatgátlók konjugátumainak előállítása célba-juttató peptidek felhasználásával. A célsejteken (tumorsejtek, fertőzött sejtek) előforduló struktúrák és ligandumaik elemzése. Klinikai használatban levő (pl. izoniazid), illetve új, részben általunk azonosított kemoterápiás vegyületek (pl. ferrocén származékok) és azok szelektivitását/sejtbejutását elősegítő célfelismerő struktúrák (pl. hormon, CPP) és biokonjugátumaik tervezése, szintézise. A konjugátumok *in vitro* és *in vivo* hatásának és hatásmechanizmusának feltérképezése.

Neuropeptidok kutatása: Opiát-, illetve nociceptin heteromer receptor-komplexen ható bivalens peptid ligandok és származékok szintézise és funkcionális jellemzése.

Részvétel a felsőoktatásban (BSc, MSc, PhD) előadóként, gyakorlatvezetőként és téma-vezetőként, a tehetséggondozásban (TDK), a természettudományos ismeretterjesztésben.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Az irodalomban leírt TB7.7 fehérje (Rv2654c antigén) jellegzetes limfocita választ indukál *M. tuberculosis* fertőzöttség, valamint a BCG vakcináció esetén. A fehérje antigén-szerkezetének peptidekkel történő feltérképezése során T-sejt epitópként azonosították a fehérje 51-65 szakaszát. Megállapították, hogy az e szakaszt reprezentáló szintetikus peptid növeli a vizsgált donor populációk szenzitizáltságának nagyobb érzékenységgel történő megkülönböztetését.

Előállítottak olyan új három-komponensű biokonjugátumot, amely képes elpusztítani autoreaktív ellenanyagokat produkáló B-sejteket *in vitro*. E konstrukcióban PLGA (tejsav /glikolsav kopolimer) nanorészecskéhez kétféle peptidet kapcsoltak kovalens kötéssel, azonos orientációban: az egyik a célsejt felismerő citrullinált fibrin b lánc egyik lineáris B-sejt epitópja (β 60-74Cit 60,72,74), míg a másik egy olyan komplement aktiváló peptid, amely citotoxicitást indukál. Megállapították, hogy e bifunkciós nanorészecske alapú konjugátum képes azoknak a B-sejteknek a specifikus lízisére, ezáltal eltávolítására, amelyek felelősek az autoimmun válasz kiváltására rheumatoid arthritisben szenvedő betegekben.

A korábban szintetizált, 4-es pozícióban rövid zsírsavval szubsztituált Lys(Ac) aminosavszármazékot tartalmazó GnRH-III hormonhoz oximkötéssel daunomicint konjugáltak, az új konstrukció biztató *in vitro* aktivitást mutatott. A butánsavval acilezett származék *in vivo* HT-29 humán vastagbél tumoros egereken a szabad daunomicinnel kezeltnél magasabb tumorsejt osztódásgátló hatást mutatott, míg az acetilezett változat hatástalannak bizonyult.

Olyan új biokonjugátum családot állítottak elő, amelyben pentaglutaminsav részlettel kiegészített metotrexát (MTX-Glu₅) kapcsolódik sejtpenetráló oligopeptidhez. Megállapították, hogy e vegyületek *in vitro* tumorelles hatása függ a sejtpenetráló peptid milyenségéről, a két komponens szekvenciális távolságától. Ezen új tudományos koncepció alapján tervezett –MTX helyett MTX-Glu₅ részletet tartalmazó – egyik vegyület hatékonynak bizonyult az MTX-rezisztens emlőtumor sejteken, új távlatokat nyitva rezisztens tumorok kezelésében.

b) Tudomány és társadalom

Hárman vettek részt a 48. Nemzetközi Kémiai Diákolimpia (Tbiliszi, Grúzia), az országos VI. Szerves kémiai problémamegoldó verseny (ELTE) szervezésében, illetve adtak elő tehetségábrában (Eötvös Collegium) és közreműködnek középiskolás mentor programban. A csoportból négyen bíráltak nemzetközi (pl. FP8 INFRA, H2020-Marie Curie program, Cseh Tudományos Akadémia) és hazai (pl. OTKA, MTA Lendület, MTA Kutatócsoport) tudományos/kutatási pályázatokat, valamint nemzetközi tudományos folyóiratba (pl. Royal Society of Chemistry-SPR, Molecules, J. Peptide Science) beküldött kéziratokat.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált hazai kapcsolatok

ELTE Szerves Kémiai Tsz., Szeretlen Kémiai Tsz., Biokémia Tsz., Immunológiai Tsz., Határfelületi- és Nanoszerkezetek Laboratórium; SE, Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Int., Biofizikai és Radiológiai Int., Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Int.; BME Szerves Kémiai és Technológiai Tsz.; Debreceni Egyetem, Biokémiai és Molekuláris Biológiai Int.; Országos Onkológiai Int.; Országos Korányi TBC és Pulmonológiai Int.; OEK, Parazitológiai Osztály; MTA TTK Enzimológiai Int., Műszercentrum, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Int.; MTA SZBK Biokémiai Int.; Richter G. NyRT (kutatási tanács).

Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált nemzetközi kapcsolatok

Dept. Chemistry, Konstanz University, Germany; Dept. Chemistry, University of Bielefeld, Germany; Dept. Inorganic and Organic Chemistry, Charles University, Prague, The Czech Republic; Eukaryotic Antibiotic Peptides Lab., CSIC, Madrid, Spain; Inst. of Biosciences and Bioresources, CNR, Napoli, Italy; Inst. Chemical Research, Kyoto University, Japan; Inst. Infectious Disease and Molecular Medicine, University of Cape Town, South Africa.

Tudományos célú konferencia kiutazások, valamint a kétoldalú közös kutatások folytatását célzó rövid tanulmányutak (5 nap – 1 hónap). A csoport öt tagja és hét PhD hallgató összesen 21 alkalommal utazott külföldre (11 ország). Vendégkutatóként a csoportban 2 kutatót (2 nap – 5 hét) és 4 PhD hallgatót (3 – 12 hónap) fogadtak. A csoport 7 tagja és 5 PhD hallgató mutatta be eredményeit tizenöt nemzetközi konferencián, pl. 34nd European Peptide Symposium, Leipzig, Germany; 53rd Japanese Peptide Symposium, Kyoto, Japan; IBRO Workshop, Budapest; Pharmaceutics-2016, World Congress on Pharmaceutics & Drug Delivery Systems, Dubai, UAE; 14th Chinese International Peptide Symposium/5th Asia-Pacific International Peptide Symposium, Nanjing, China; 10th Central and Eastern European Proteomic Conference, Budapest; 15th Naples Workshop on Bioactive Peptides, Italy; 36th European Workshop for Rheumatology Research, York, England; COST meeting, Chioggia, Italy.

Oktatás: PhD témavezetés (10 fő), BSc/MSc/TDK témavezetés (10 fő). Fő-, speciális- és PhD előadások, gyakorlatvezetés (biológia BSc, kémia BSc, környezettudomány BSc, vegyész MSc), TDK/szakedolgozat/PhD dolgozat bírálata (24), szigorlat, vizsgáztatás.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Egy OTKA (NKFIH) kutatói kezdeményezésű és egy PD pályázat nyert (mindkettő témavezetői, 2016-20, 57 M Ft). Egy további OTKA pályázatban közreműködőként vesz részt a csoport (45,8 M Ft). Az MTA MedInProt program támogatásával hárman lehetőséget kaptak műszerhasználatra (1,76 M Ft). Folytatódott az EU „Horizon 2020” Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Network PhD program (résztevő, a Tét magyar-japán projekt (témavezető), korábban indult OTKA program (4 témavezető, 2 közreműködő) végrehajtása.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bősze Sz., Hudecz F.: Proteins and peptides for the immunodiagnosis and therapy of Mycobacterium tuberculosis infections. In: Ryadnov, M., Hudecz, F. (Eds.) Amino Acids, Peptides And Proteins, Specialist Periodical Reports, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 41: 146-198 (2016) (<http://real.mtak.hu/id/eprint/48611>)
2. Horváti K., Bősze Sz., Gideon HP, Bacsá B, Szabó TG, Goliath R, Rangaka MX, Hudecz F., Wilkinson RJ, Wilkinson KA: Population tailored modification of tuberculosis specific interferon-gamma release assay. Journal of Infection, 72: 179-88 (2016) (<http://real.mtak.hu/id/eprint/30931>)
3. Kapuvári B., Hegedüs R., Schulcz Á, Manea M, Tóvári J, Gács A, Vincze B, Mező G.: Improved in vivo antitumor effect of a daunorubicin - GnRH-III bioconjugate modified by apoptosis inducing agent butyric acid on colorectal carcinoma bearing mice. Investigational New Drugs., 34: 416-23 (2016) (<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs10637-016-0354-7>)
4. Kocsis L., Szabó I., Bősze Sz., Jernei T, Hudecz F., Csámpai A: Synthesis, structure and in vitro cytostatic activity of ferrocene-Cinchona hybrids. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 26: 946-49 (2016) (<http://real.mtak.hu/id/eprint/48007>)
5. Sebestyén M., Kóczán Gy., Csámpai A, Hudecz F.: NaBH₄ - a novel modest method for the deprotection of N⁰-nitro-arginine. Tetrahedron Letters, 57: 546-548 (2016) (<http://real.mtak.hu/id/eprint/46519>)
6. Szabó I., Orbán E., Schlosser G., Hudecz F., Bánóczy Z.: Cell-penetrating conjugates of pentaglutamylated methotrexate as potential anticancer drugs against resistant tumor cells. European Journal Medicinal Chemistry, 115: 361-368 (2016) (<http://real.mtak.hu/id/eprint/46159>)
7. Knapp K, Majer Zs, Schlosser G.: The advantage of 7-diethylamino-3-(4-maleimidophenyl)-4-methylcoumarin fluorogenic tagging of sulfhydryl groups in oligopeptides for tandem mass spectrometry. Journal of Mass Spectrometry, 51: 476-478 (2016) (<http://real.mtak.hu/id/eprint/46156>)
8. Pozsgay J, Babos F., Uray K., Magyar A., Gyulai G, Kiss É, Nagy Gy, Rojkovich B, Hudecz F., Sármy G: *In vitro* eradication of citrullinated protein specific B-lymphocytes of rheumatoid arthritis patients by targeted bifunctional nanoparticles. Arthritis Research & Therapy, 18: 15-27 (2016) (<https://www.springermedizin.de/in-vitro-eradication-of-citrullinated-protein-specific-b-lymphoc/9784270>)

MTA–ELTE STATISZTIKUS ÉS BIOLÓGIAI FIZIKA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Vicsek Tamás, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: (1) 372 2795; fax: (1) 372 2757; e-mail: vicsek@hal.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

5 éves kutatási terv rövid összefoglalása: A kutatócsoport fő profiljai: i) a nagy hálózatok, ii) kollektív mozgás és a iii) részecskefizika egye területeinek kutatása. Ezen belül két eddig kevésbé vizsgált, azonban a komplex hálózatokra jellemző tulajdonság átfogó vizsgálatát tervezték kutatni. Ennek keretében a kutatás kiterjedt az i) hálózatok hierarchikus, valamint ii) címkézett alhálózatainak szerkezetét jellemző tulajdonságaira. További terveik a kollektív viselkedés különféle modellezési és kísérleti kutatására irányultak, például a kapcsolatrendszer dinamikájára patkány-kolóniákban és repülő robotok (drónok) csoportjában. Ezenkívül a kutatócsoport térelmélettel foglalkozó része a Funkcionális Renormalizációs Csoport egyenleteinek megoldásai segítségével tett lépéseket az anyag legalapvetőbb formáit leíró tulajdonságok feltárásában.

Amit eddig teljesítettek – rövid összefoglalás: Az eddig teljesített főbb célkitűzések felsorolás-szerűen: A) *Hálózatok, kísérletek:* i) Nagy komplex hálózatok hierarchikusságának jellemzésére bevezettek két, új elveken alapuló mértéket. ii) kidolgozták a címkézett hálózatok szerkezetének meghatározását. iii) beindítottak egy nagy adatbázishoz vezető, a patkánykolóniák belső szerveződésének megismerésére irányuló kísérletet. iv) létrehozták a világ első, lebegésre és csoportos, önszerveződő mozgásra is képes autonóm drónraját. v) meghatározták a folyóiratokban megjelent cikkek hivatkozási hálójából a folyóiratok hierarchiáját. stb. B) *Részecskefizika:* A részecskefizika terén i) Az $O(N=4)$ szimmetrikus önkölcsönható skalártérelmélet véges hőmérsékletű fázisátalakulásának tanulmányozására alkalmazták a diszkrét Fourier transzformáción alapuló nagy pontosságú numerikus algoritmust. *Összefoglalva: az itt nem említett eredményekkel együtt, az összes vállalást teljesítették.*

A beszámolóév feladata: 2016 volt a kutatócsoporti pályázatban elnyert támogatási periódus utolsó teljes éve. Ennek megfelelően két fő iránya volt a tevékenységüknek: a korábbi időszakban elért eredmények rendszerezése, egyes, még folyamatban levő projektek lezárása, az eredményekre alapozott jelentősebb dokumentumok, változtatások megvalósítása. Ennek keretében született két beadott, egy már sikeresen megvédett, és egy már elbírálás alatt álló (habitusvizsgálaton sikeresen túljutott) MTA doktori fokozat elnyerésére irányuló pályázat. A kutatócsoport tagjai aktív részt vállaltak az ELTE Fizika szakoktatási tevékenységében, amelyet sikerrel teljesítettek (témavezetés, előadások).

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A hierarchikus szerveződés gyakori jelenség a természet és a társadalom különböző alrendszereit reprezentáló hálózatok körében. Egy fontos példát mutatnak erre azon címkehierarchiák, melyek olyan nagyméretű online adatforrásokból nyerhetők ki mint a tudománycikk-archívumok, a hírportálok, különböző tartalommosztó portálok, egyes blogok, stb. Az általuk korábban kidolgozott hierarchia-kinyerő algoritmus segítségével négy népszerű hírportál (a Guardian, a New York Times, a Spiegel és a The Australian) cikkeihez társított címkék hierarchiáját építették fel és hasonlították össze. A kifejlesztett hierarchia-

összehasonlító és hierarchiaértékelő módszerek jövőbeli alkalmazásának nagy potenciálja van egyéb területeken is, mint pl. a tudományoscikk-archívumok esetén. A tudományos publikációk egymásra hivatkozásait tartalmazó (a Web of Science-től korábban megvásárolt, 1975-2010 közötti) adatsort felhasználva feltérképezték a WoS adatbázisban megtalálható publikációk tudományterületeit és a tudományterületek (publikáció csoportok) időbeli fejlődését. Az elemzés során számszerűen kimutatták, hogy a tudományos publikációk szerepe a megjelenésük után évről-évre folyamatosan változik a tudományterületek hálózatában. Például gyakori, hogy egy cikket a megjelenése után 10 illetve 20 évvel az aktuális tudományos élvonal más tudományterülethez sorol.

Tanulmányozták egy autoimmun betegség kezelése során kialakuló beteg-útvonalak hálózatát. Kimutatták, hogy a vizsgált komplex betegség különböző stádiumaiban a betegútvonalak eltérő stabilitást mutatnak. A stádiumokat egy retrospektív elemzéssel állapították meg: a betegség súlyossági fokát a társbetegségek és a gyógyszeres kezelés hatóanyagai alapján kategorizálták. A kapott kategóriák és a kezelési idő között pozitív korrelációt mutattak ki. Statisztikai elemzéseket végeztek gerinc-tumorban szenvedő betegek műtéti ellátásával kapcsolatos eredményekről. Olyan faktorok azonosítását végezték, amelyek szignifikáns eltéréshez vezetnek a túlélési, vérzés-kialakulási és intenzív osztályra kerülési esélyekben. Az eredményekből TDK dolgozat készült, és nemzetközi publikáció előkészítése is folyamatban van.

A robotikai laborban kifejlesztettek egy új kvadrokopter platformot, mely a korábbinál jobban támogatott hardver és szoftver alapelemekből áll, jóval stabilabb repülési tulajdonságokat mutat és modulárisabban építhető bele az autonóm és csoportos repüléshez szükséges saját fejlesztések. A repülési teljesítményt jelentősen befolyásoló alkatrészek (robotpilóta, hajtómű, akkumulátor) alapos teszteléssel kerültek kiválasztásra a mai technikai szinten elérhető legjobb megoldások közül. A gépet alkotó többi elemet fa, alumínium, szénszál, egyedileg nyomtatott műanyag idomok felhasználásával fejlesztették ki, gazdaságosan és egyszerűen gyártható formában. Az új rendszer segítségével többféle kísérletsorozat indult el az optimális önszerveződő csoportos repülés, az általános drónforgalom és az önszerveződő formációrepülés témaköreiben, biztató első próbálkozásokkal. Az eddigi legnagyobb kísérletet 30 drónnal végezték, mely sok hasznos tapasztalattal szolgált a kommunikációs hálózat és a fejlesztett csoportos vezérlő algoritmusok korlátairól. A kísérleteket minden esetben realisztikus szimulációs futtatások előzték meg, melyekhez az ELTE atlasz szuperszámítógép klaszterét és evolúciós optimalizáló keretrendszert használtak. Ugyanezen a szoftver rendszeren fejlesztették ki a biológiailag inspirált csoportos üldözés-menekülés algoritmust, mely a korábbiaknál jóval összetettebb és realisztikusabb kölcsönhatásokat tartalmaz és ezáltal valóságosabb viselkedési formákat mutat.

Hogyan teljesít egy galambcsapat a hazarepülés során, ha a vezető pontatlan információval rendelkezik? Az oxfordi egyetem kutatóival közös tanulmányukban mesterségesen befolyásolták a vezető galambok időérzékelését, mely megjósolható mértékű hibához vezet a hazatalálás során. A legtöbb esetben a téves információval rendelkező vezető elvesztette a csapat feletti befolyását, és a pontatlan információt a hierarchikus pozícióinak átrendezésével szűrte ki a csoport.

Az axiálvektor- és vektor-mezon szabadsági fokokat is tartalmazó, Polyakov hurokkal kiegészített három ízű kvark-mezon modell királis fázisátalakulását és termodinamikáját vizsgálták véges hőmérsékleten és μ barionkémiai potenciállal. A fermion determináns járulékát tartalmazó mezon görbületes tömegek alapján beparaméterezett modell nyomásból származtatott mennyiségei jó egyezést mutatnak a rácseredményekkel. Az $O(2)$ szimmetrikus skalármodell tanulmányozásával megmutatták, hogy az irodalomban javasolt javított szimmetriájú 2PI formalizmus (Symmetry improved 2PI), amely Lagrange multiplikátor segítségével kényszeríti rá zérus tömeget a királis limeszbeli Goldstone-bozonokra, nem

rendelkezik végtelen térfogatú megoldással a két-hurok szintű csonkítás esetén, a közelítésben fellépő infravörös (IR) divergenciák miatt.

b) Tudomány és társadalom

A csoport számos ismeretterjesztő, tudománynépszerűsítő programon is részt vett 2016-ban. Minden jel szerint a drónokkal kapcsolatos kutatásaik iránt jelentős társadalmi igény alakult ki. A megkeresések egyfelől a mezőgazdasági felhasználhatóság oldaláról érkeztek, de két megkeresésük is volt a modern művészet terén való alkalmazhatósággal kapcsolatban. Hálózatkutatói módszereik iránt pedig a terrorcselekmények megelőzése céljából létrejött nemzetközi konzorciumok jelezték érdeklődésüket.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel.

Hazai együttműködések: Különböző kutatócsoportokkal, az alábbi intézményekből: MTA RMKI, ELTE Biológiai Intézet, ÖMKI, drónok alkalmazása az ökológiai gazdálkodásban, MTA EK kültéri sugárzásmérés drónokkal

Nemzetközi együttműködések: Huazhong University of Science and Technology, kollektív mozgás, Oxford University, Department of Zoology, University of Konstanz, kollektív döntéshozatal

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016 sikeres pályázati évük volt. 1 hazai (K_16, drónok, 48 M Ft) és két nemzetközi (egy EU-s konzorciumi tagság, hálózatok, 300 000 Euro és egy USA, drónok, 200 000 USD) pályázatuk támogatásáról született döntés.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tibély G, Sousa-Rodrigues D, Pollner P, Palla G: Comparing the Hierarchy of Keywords in On-Line News Portals. PLoS ONE, 11: e0165728 (2016)
2. Virágh C, Nagy M, Gershenson C, Vásárhelyi G: Self-organized UAV Traffic in Realistic Environments. In Intelligent Robots and Systems (IROS 2016), 2016 IEEE/RSJ International Conference on (pp. 1645–1652) (2016).
3. Horváth A, Páll N, Molnár K, Kováts T, Surján G, Vicsek T, Pollner P: A nationwide study of the epidemiology of relapsing polychondritis. Clinical Epidemiology, 8: 211-230 (2016)
4. Markó G, Reinosza U, Szép Zs: Loss of solution in the symmetry improved Φ -derivable expansion scheme, Nucl. Phys. B, 913: 405-424 (2016)
5. Orosz K, Farkas I J, Pollner P: Quantifying the changing role of past publications. Scientometrics, 108: 829 (2016)
6. Cheng Z, Chen Z, Vicsek T, Chen Duxin Zhang Hai-Tao: Pattern phase transitions of self-propelled particles: gases, crystals, liquids, and mills. New Journal of Physics, 18: 103005 (2016)

MTA–ELTE VULKANOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Harangi Szabolcs, az MTA doktora

1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C.

telefon: (1) 372 2500 / 8355; fax: (1) 381 2108

e-mail: szabolcs.harangi@geology.elte.hu

a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2013. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

5 éves kutatási terv rövid összefoglalása: Az MTA-ELTE Vulkanológiai Kutatócsoport elsődleges célja hogy magas szintű vulkanológiai tudományos kutatásokat végezzen, kiemelten a Kárpát-Pannon térségben, hozzájáruljon a vulkáni működés jobb megismeréséhez a magmaképződéstől a vulkáni kitörés folyamatáig, elősegítse nemzetközi szinten is térségünk vulkanológiai kulcsterületté válását, segítse a vulkáni működés szakmai megalapozottságú, széles körű ismertetését, a vulkáni természeti értékek feltárását, továbbá elemezze és közvetítse a vulkáni kitörések társadalomra gyakorolt hatását. Nyolc célterület került kijelölésre, amelyen a kutatócsoport tagjai tudományos munkát végeznek.

Eddigi teljesítés: Az elmúlt három és fél év alatt 24 peer-reviewed szakfolyóirat tanulmányban publikálták tudományos eredményeiket, ezek közül több felkerült az mta.hu honlapjára és széles médiaérdeklődést kapott.

A beszámolóév feladata: A székelyföldi Csomád kutatása során a beszámolóév kiemelt feladata volt az az új terepi magnetotellurikus méréssorozat előkészítése és végzése, amivel pontosítható a vulkán alatti magmás test állapota és kiterjedése. A rendszeres gáz mintavételezés és gáz összetétel meghatározás mellett több területen is terveztek szén-dioxid fluxus mérést, ami alapján a talajon keresztül kiáramló gáz mennyisége számszerűsíthető. Fontos cél volt a Csomád körüli idősebb vulkáni központok kitörési korának megállapítása. A petrogenetikai vizsgálatokon belül az amfibolok, plagioklászok és egyéb ásványos komponensek nagy felbontású szöveti és geokémiai jellemzése alapján igyekeztek pontosítani a vulkánkitörések előtti magmás eseményeket. A bazaltos területek kutatásában kiemelt cél volt a kőzetekben lévő klinopiroxének in-situ nyomelem összetételének meghatározása és az adatok petrogenetikai értékelése, továbbá egy új, kvantitatív olvadási oszlop modell kidolgozása bazaltos magmák keletkezésére. A szilíciumgazdag vulkáni rendszerek természetének megértéséhez a beszámoló évben további előfordulásokra terjesztették ki a cirkon vizsgálatokat, Hf-izotóp méréseket terveztek, továbbá a neogén vulkáni képződmények mellett vizsgálták a Mecsek környéki permri riolitokat is. A Ditrói-masszívum heterogén kőzetsorozatának kialakulását a különböző kőzetekben lévő klinopiroxének fő- és nyomelem összetétele alapján igyekeznek megérteni. A kutatócsoport fontos feladatának tekinti a vulkánturisztikai területen új eredmények elérését, a nemzeti parkokkal és geoparkokkal való szoros együttműködést. Kiemelt feladat továbbra is a korábbi évek hagyományaira épülő tudomány népszerűsítés (ismeretterjesztő programok, előadások, cikkek, blog, stb.).

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A beszámolóévben számos területen sikerült a kutatócsoportnak figyelemre méltó új kutatási eredményt elérni. Ezek publikálása részben megtörtént (3 szakfolyóirat cikk, 2 könyvfejezet), a megjelent tanulmányok mellett két további cikk beszerkesztett változatban online már elérhető, 2 kézirat pedig bírálat alatt van. Szakmai rendezvényeken 13 tudományos előadást tartottak. Nem tervezték, de jelentős munkát adott, hogy a kutatócsoport szakemberei bekapcsolódhattak a paksi komplex földtani kutatásba, ami a hazai geológusok és geofizikusok jelentős részét megmozgatta. Ez egy időigényes, de nagy szakmai kihívás volt,

mivel közel 2000 méter folyamatos fúrásanyag vulkáni képződményeit kellett értékelniük, meghatározni a vulkáni működés korát, mechanizmusát, közettani és geokémiai jellegét és geodinamikai kapcsolatát. A vizsgálati eredményeik új megvilágításba helyezték a térség korai miocén vulkáni eseménytörténetét és ezzel nagy érdeklődést kaptak. Kimutatták, hogy 19 millió éve a Pannon-medence belsejében egy több mint 1000 méter magas, lávadóm kitüremkedéssel és azok összeomlásával keletkezett, lávaközet és vulkanoklasztos törmelékanyagból felépülő andezites-dácitos tűzhányó alakult ki, amelynek képződményei a Mecsekben előforduló andezitekkel rokon. Keletkezésükben lényeges szerepet játszott különböző magmák keveredése. E vulkáni működés jelezheti e területen a riftesedés megindulását. Fontos tudományos eredmény annak kimutatása is, hogy lemezen belüli területen, extenziós környezetben is keletkezhetnek a többnyire szubdukciós zónákra jellemző andezites-dácitos vulkánok. Eredményeik beépültek a paksi telephely engedélyezési dokumentáció földtani fejezetébe.

A csomádi kutatási projekt keretében az MTA CSFK soproni geofizikus munkatársakkal 7 további kijelölt ponton végeztek nagy felbontású magnetotellurikus méréssorozatot, hogy a vulkán alatti magmás test jellegét és méretét jobban megismerjék, annak olvadáktartalmát számszerűsítsék. A mérési eredmények első eredményei megerősítik a tűzhányó alatti kis elektromos ellenállású magmás test jelenlétét, sőt azt jelzik, hogy ez az anomália tovább folytatódhat a földkéreg alsó részén is. A geofizikai anomália jobb értelmezéséhez francia kutatókkal együttműködve a Csomád legutolsó kitörésének közetmintáját felhasználva elektromos vezetőképességi kísérleteket végeztek. Az eredmények azt jelzik, hogy e közet vezetőképessége jobb, mint más dácitos képződményeké (pl. Uturuncu, Mt. St Helens) és ez arra utal, hogy a magmás testben a korábbi vizsgálatok során feltételezettnél nagyobb mennyiségű olvadék is lehet. Ennek pontosítására megkezdődött a közetben megjelenő ásványfázisok részletes szöveti és geokémiai jellemzése és termobarometriai modellezése. Az előzetes eredmények az idősebb, lávadóm-építő fázisra kidolgozott petrogenetikai modellhez képest forróbb kitörés előtti magmakamra állapotot jeleznek. E munka keretében értékelték a vas-titán oxidokra kifejlesztett különböző termobarometriai kalibrációk alkalmazhatóságát. Az eredmények kéziratba foglalása az év végén kezdődött meg.

A bazaltos magmák keletkezésében fontos eredmény a különböző hazai bazaltokban található klinopiroxén kristályok integrált szöveti, főelem- és nyomelem geokémiai jellemzése. A nemzetközi szinten is újszerű vizsgálat alapján kimutatták, hogy e kristályok különböző eredetűek. A xenokristályok, antekristályok és fenokristályok a magmafejlődés különböző fázisaiban kerültek a magmába, így végül a kitörő magma egy meglehetősen vegyes származású kristályegyüttest hozott a felszínre. Figyelemre méltó új eredmény, hogy a több helyről is leírt zöld klinopiroxének többsége nem magmás, hanem metamorf eredetű, alsókéregben lévő mafikus granulitokból jutottak be a bazaltos magmába. A klinopiroxének egy része a bazaltos magmával rokon, de eltérő összetételű olvadékból kristályosodott. Az antekristályok jelenléte alátámasztja azt a kutatócsoport által már korábban is hangsúlyozott magma fejlődési modellt, miszerint a monogenetikus vulkáni területek alatt a bazaltos magmák hosszabb időn keresztül is stagnálhatnak a földkéreg-földköpeny határon, a felszínre törő magmák pedig több földköpeny-eredetű közetolvadék keveredése során alakul ki. Ezek az eredmények hozzájárulnak a monogenetikus vulkáni területeken zajló jövőbeli vulkáni működés jobb előrejelzését elősegítő munka szakmai megalapozásához.

A térség szilíciumgazdag vulkanitjainak cirkon in-situ U-Pb kormeghatározási eredményei fontos hozzájárulást jelentettek a Bükk térségének tektonikai történetének jobb megértéséhez. A kapott koradatok segítségével pontosítani tudták a feszültségtér változások és blokkforgások idejét.

A kutatócsoport földtani természeti értékekre elsőként végzett modern eszközökkel kvantitatív felmérést, ami segíti e különleges lelőhelyek védelmét és turisztikai kínálatba való bekerülésüket. A Pannon Vulkán Út tervezete új lehetőséget adhat a tematikus turizmus, ezen belül a nemzetközi szinten is erősödő vulkánturizmus térségbeli pozíciójának erősödésére.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport kiemelt figyelmet szentel a szakmai hitelességű tudománynépszerűsítésre, az új tudományos eredmények minél szélesebb körben való megismertetésére. Az új kutatási eredményeik bekerültek számos hazai média híradásába. A kutatócsoport tagjaival több riport készült, kutatási tevékenységükről dokumentumfilmet vetítettek az MTV5 csatornán. A kutatócsoport tagjai számos ismeretterjesztő előadást tartottak, részt vettek jelentős tudománynépszerűsítő rendezvényeken (pl. Felfedező Napja, Kutatók éjszakája, European Volcanoes' Night, Geopark hét stb.), az egyenként is több száz főt vonzó programjaik hatékonyan keltették fel az érdeklődést a tudományos munka iránt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport továbbra is nagy hangsúlyt fektet új hazai és nemzetközi partnerségi kapcsolatok kialakítására. A korábbi együttműködések mellett 2016-ban francia kutatókkal kezdtek el közös tudományos munkát a csomádi dácitok elektromos vezetőképességének kísérleti meghatározására, ami segíti a vulkánok alatti magmatározók kimutatásának hatékonyságát. Olasz kutatókkal vulkáni területek térképezési módszertanának fejlesztésére indítottak egy 3 éves együttműködési programot. A tenerifei La Laguna egyetemmel kötött K+F szerződés keretében közös kutatást kezdtek a Kanári-szigetek magmás kőzeteire.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban a kutatócsoport két tagja is elnyert NKFIH posztdoktori támogatást, amelynek keretében nemzetközi szinten is élvonalba tartozó kutatásokat végezhetnek. A kutatócsoport is tagja annak a sikeres GINOP pályázatnak, ami 2016 végén indult a debreceni MTA Atomki vezetésével, és ami számos új műszer beszerzésével jár. A kutatócsoport tagjai is részt vevők egy sikeres, 2017-ben induló spanyol kutatási pályázatnak, ami a Kanári-szigetek kezdeti magmás folyamatainak megértésére koncentrál. A kutatócsoport sikeresen pályázott és indított el egy 3 éves magyar-olasz kutatási együttműködési projektet vulkáni területek térképezési módszertanának fejlesztésére. A tudományos pályázatok mellett több kutatási szerződéses munkát nyert el a kutatócsoport, ami közül kiemelkedik a paksi telephely földtani térképezéséhez kapcsolódó vizsgálat. A vulkáni képződmények sokrétű tudományos elemzése számos figyelemre méltó új eredményt hozott, ami a földtani zárójelentésbe is beépült.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Jankovics MÉ, Taracsák Z, Dobosi G, Embey-Isztin A, Batki A, Harangi Sz, Hauzenberger CA: Clinopyroxene with diverse origins in alkaline basalts from the western Pannonian Basin: Implications from trace element characteristics. *Lithos*, 262: 120-134 (2016) REAL link: 40233
2. Petrik A, Beke B, Fodor L, Lukács R: Cenozoic structural evolution of the southwestern Bükk Mts. and the southern part of the Darnó Deformation Belt (NE Hungary). *Geologica Carpathica*, 67:(1) 83-104 (2016) REAL link: 40102

MTA–ME ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Roósz András, az MTA rendes tagja
3515 Miskolc-Egyetemváros, Miskolci Egyetem, Anyagtudományi Intézet
telefon: (46) 565 111/1543; fax: (46) 565 201
e-mail: femroosz@uni-miskolc.hu; honlap: www.matsci.uni-miskolc.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

5 éves kutatási terv: - Új, kedvezőbb mechanikai tulajdonságokkal rendelkező Zr-, Zr-Cu alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása öntéssel, ill. ugyanolyan alapú amorf porok készítése örléssel és utóbbiak feldolgozása porkohászati úton. - Ötvözetek átalakulásainak szimulációja sejtautomata módszerrel. A véletlen rácsú sejt automata alkalmazásának lehetőségének megvizsgálása, valamint a hosszútávú diffúziós folyamatok modellezése, szimulációja ötvözetlen acélokban. - Az ESTPHAD (Estimation of Phase Diagrams) termodinamikai alapegyenletekből levezetett egyensúlyi fázisdiagram számítási módszer fejlesztése.

Eredmények: A pályázatban szereplő kutatások

Tömbi amorf anyagok fejlesztése

A kutatócsoport vállalta, hogy olyan új kompozitokat hoz létre öntéssel, melyekben az amorf mátrixban különböző alakú kristályos fázisok (dendritek, vagy cseppek) vannak jelen különböző térfogatszázalékban. A Cu-Zr-alapú ötvözetekhez adtak Ni-t, Y-ot és Ni-Y-ot együttesen különböző mennyiségben. Megállapították, hogy a mechanikai tulajdonságok nagyobb mértékben változnak, ha a kristályos fázis gömb alakú, mintha dendrites. Ennek az összetétel mellett a másik magyarázata, hogy a gömb alakú kiválásoknál a méretnek is igen nagy szerepe van. A csoport több különböző összetételű Ti-alapú amorf port állított elő nagyenergiájú örléssel, majd az amorf porok felhasználásával kompozitokat állított elő, ahol a mátrix réz volt. A réz folyáshatárát 150 MPa-ról 400-420 MPa-ra sikerült növelni a kompozitokban. A beszámolóév feladatait teljesítették.

Anyagtudományi szimulációk

(i) Hosszútávú diffúziós folyamatok modellezése, szimulációja ötvözetlen acélokban.

Számítógépes szimulációkkal vizsgálták különféle öntöttvasokban az ausztenitesedés folyamatát. Ehhez szürke-, gömbszürke- és fehér öntöttvas kiinduló modellszerkezeteket hoztak létre. Továbbfejlesztették a korábbi csíráképződési és csíranövekedési modelleket öntöttvasok átalakulására is. A kapott eredményekkel igazolhatóak az átalakulási folyamat törvényszerűségei. A beszámolóév feladatait teljesítették.

(ii) Olvadék áramlás szimulációja

2016-ban kristályosodás szimulációk folytak forgó mágneses térrel kevert Al-Si ötvözet kristályosodási tulajdonságainak vizsgálatára. A kapott háromdimenziós eredmények részletesebb betekintésre adnak lehetőséget a kialakuló dúsulások kialakulásának okaira, továbbá kiváló tesztüzemi környezetet nyújt későbbi haladó mágneses teres szimulációk futtatására. A beszámolóév feladatait teljesítették.

(iii) Az ESTPHAD módszer alkalmazása és fejlesztése

Kifejlesztették a gyakorlati fontosságú, sokalkotós öntészeti alumínium ötvözet likvidusz hőmérsékletének számítására alkalmas ESTPHAD egyenletrendszer. A beszámolóév feladatait teljesítették.

A pályázaton kívüli munkák

Mágneses keverés hatása a kristályosodó szerkezetre (finanszírozó: ESA)

A forgó (RMF) - és haladó mágneses (TMF) térben kristályosított Sn-Cd ötvözetek szövetszerkezete a kristályosítás során alkalmazott mágneses tér indukciójának nagyságától és frekvenciájától nagymértékben függ. Tovább folytatták a haladó mágneses mező hatását az Sn-Cd peritektikus ötvözet kristályosodására. Összefüggéseket állapítottak meg a forgó és haladó mágneses tér hatásáról, a különféle terek által indukált olvadék áramlás hatásáról a peritektikus Sn-Cd ötvözet kristályosodására.

A német partner a próbák darabolását a számított paraméterek alapján végezte el. A MICAST „Batch 2” űrkísérlet-sorozat paramétereivel földi tükörkísérleteket hajtottak végre forgó mágneses térben. A CETSOL projektben egyirányú hőelvonással földi kristályosításokat végeztek az oszlopos/ekviaxiális átmenet (CET) tanulmányozására. A kísérleteket többféle növekvő próba-mozgató sebességgel is végrehajtották. Megállapították, hogy a forgó mágneses tér nélküli kísérletekben is megtörtént az oszlopos / ekviaxiális átmenet. Forgó mágneses tér alkalmazása esetén jóval kisebb frontmozgási sebességnél bekövetkezett a CET.

TWIP acél fejlesztése

TWIP acélokban termomechanikus kezelés hatására kialakuló fázisátalakulások monitorozását elvégezték röntgendiffrakciós és EBSD módszerrel. A kristályanizotrópia vizsgálatokat mikro és makro skálán történtek.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A Nemzetközi Űrállomáson a MICAST és a CETSOL programokban a német partnerek vezetésével végzett egyirányú kristályosítások hőmérséklet-idő adataiból egy saját fejlesztésű szoftverrel kiszámították a kristályosodási paramétereket (fronthelyzet, frontsebesség, hőmérséklet gradiens).

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport részt vesz valamennyi Kari, egyetemi rendezvényen, ahol bemutatja tevékenységét és közelebb hozza a hétköznapi embereket az elméleti kutatás szférájához: a) „Kutatók éjszakája” rendezvény sorozat, b) a Miskolci Egyetem Nyílt Napja, c) Lányok napja, d) a különböző szakmai napok (Bányász-kohász Fazola napok az Őskohónál, Fémkohász Szakmai Nap), ahol a szakma jeles képviselőivel találkozhatnak az érdeklődők. A kutatócsoport tagjai a Miskolci Egyetemet segítve részt vesznek a középiskolásoknak meghirdetett Anyagtudományi verseny szervezésében. Aktívan részt vesznek a Miskolci Akadémiai Bizottság munkájában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A MICAST projektben a kutatócsoport egy PhD hallgatója vendégkutatóként a francia grenoble-i SIMaP/EPM Laboratóriumban tevékenykedett. Ehhez kapcsolódóan további három fő kutatócsoport tag látogatta meg a laboratóriumot, valamint két fő kutató látogatott el a kutatócsoporthoz a fent említett laboratóriumból.

Az Arconic-Köfém Kft-vel k+F intézmények együttműködésében nyert pályázaton belül különböző vizsgálatokat végeztek el.

A kutatócsoport tagjai változatlanul együttműködnek a Miskolci Egyetemen az oktatási (mind egyetemi, mind doktori képzés) és szakmai tevékenységekben.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport MICAST pályázatot nyert (ESA pályázat) 170 000 Euro összeggel 2015 és 2018 között különféle ötvözetek forgó, illetve haladó mágneses térben történő kristályosításakor kialakult mikroszerkezetek vizsgálatára az áramlás hatásainak megállapítása céljából.

Különböző intenzitású mágneses tér ternér Al-Si-Cu ötvözet kristályosodására kifejtett hatásának vizsgálatára nyertek pályázatot a Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés (Francia Nemzeti Kutatási Központ (CNRS) közreműködésével. A támogatott időszak: 2016-01-01 – 2016-12-31. A támogatási összeg: 650 E Ft.

OTKA 112623 Új kompozit anyagok tervezése amorf és kristályos szerkezet társításával. A támogatott időszak 2014-10-01 - 2017-09-30. A támogatási összeg 20,952 M Ft.

OTKA 119566 Kristályorientált szilárdfázisú folyamatok modellezése és komplex kísérleti jellemzése fémes rendszerekben. A támogatott időszak 2016-10-01 - 2020-09-30. A támogatási összeg 44,299 M Ft.

GINOP-2.2.1-15-2016-00018 Új, piacképes termékek technológiájának fejlesztése, az anyagtudomány legújabb eredményei alapján a piacvezető hazai iparvállalat, az ALCOA-Kőfém Kft. és kiemelkedő hazai felsőoktatási – k+F intézmények együttműködésében, A támogatott időszak: 2016-10-01 – 2019-11-30. A támogatási összeg: 265,15 M Ft.

713514- Innovative Coarsening-resistant Alloys with enhanced Radiation tolerance and Ultra-fine grained Structure for aerospace application –ICARUS-. A támogatott időszak 2016-09-01 - 2019-08-31. A támogatási összeg 233 750 Euro.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tomolya K: Ti-Cu based amorphous powder produced by milling. Materials Science Forum, (ISSN: 0255-5476) (eISSN: 1662-9752) 879: 1974-1979 (2016)
2. Tomolya K, Janovszky D, Sycheva A, Sveda M, Ferenczi T, Roósz A: Studying amorphization progress in Cu-Zr-Al-based powders during ball milling. Resolution and Discovery, 1:(1) 1-6 (2016) Open Access [REAL](#)
3. Cora I, Pekker P, Dódony I, Janovszky D: Single crystal structure determination and refinement of Ag₂ZrCu₄ and Ag-containing Cu₁₀Zr₇ by precession electron diffraction and tomography techniques. Journal of Alloys and Compounds (ISSN: 0925-8388), 658: 678-683 (2016) [REAL](#)
4. Németh T, Máthé Z, Pekker P, Dódony I, Kovácsné Kis V, Sipos P, et al.(2): Clay mineralogy of the Boda Claystone Formation (Mecsek Mts., SW Hungary). Open Geosciences (eISSN: 2391-5447), 8: (1) 259-274 (2016) [REAL](#)

MTA–ME MŰSZAKI FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Szűcs Péter, az MTA doktora
3515 Miskolc-Egyetemváros, Miskolci Egyetem, Környezetgazdálkodási Intézet
telefon: (46) 565 111/1061; fax: (46) 365 072; e-mail: hgszucs@uni-miskolc.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA-ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport elsődleges feladata az 5 éves támogatási időszak alatt olyan kutatási, feltérési módszerek fejlesztése, és a termeléshez kapcsolódó műszaki eljárások elméleti megalapozása, amelyek lehetővé teszik a felszín alatti fluidum jellegű természeti erőforrásokkal történő hatékony és környezetbarát gazdálkodást, ill. az ellátottság nemzetgazdaság szintű javítását. A kutatócsoport K+F tevékenységének súlypontját a következő tématerületek képezik: a) Hidrogeológiai modellezési eljárások fejlesztése a fenntartható hazai ivóvízellátás, az ásvány- és gyógyvíztermelés, továbbá a hévízhasznosítás biztosítása érdekében. b) Konvencionális és nem konvencionális szénhidrogének hatékony kitermelését biztosító eljárások fejlesztését megalapozó kutatások. c) Természeti erőforrások feltérását, rezevoargeológiai adatok pontosítását célzó geofizikai kutatások. d) Geotechnikai módszerek és integrált technológiák fejlesztése és környezeti hatásainak komplex értékelése.

A kutatómunka első három és fél éves (2012. július 1. – 2015. december 31.) időszakában a hidrogeológiai modellezés területén kiemelkedő új eredmények születtek a több szinten szűrőzött kutak hidraulikai viszonyainak, a víznél nehezebb sűrűségű szennyező anyagok transzport folyamatainak modellezési szimulációja tekintetében, valamint a Tokaji-hegység területén végzett regionális léptékű átfogó hidrogeológia vizsgálatok során. A mélyfúrás geofizikai adatok hatékony inverziós feldolgozására az intervallum inverziós eljárás faktor analízissel történt kombinációja és a Fourier transzformációs eljárás robusztifikálása révén új módszerek kerültek bevezetésre. A szénhidrogének hatékony kitermelésére irányuló kutatások keretében az olaj- és gáztermelő kutak környezetében az áramlási profilok javítását és a szelektív fluidumkizárást biztosító, mikroemulziók és nanoanyagok alkalmazásán alapuló, új réteg- és kútkezelési eljárások laboratóriumi kidolgozása és a mezőbeli technológiák fejlesztése valósult meg. 2016-ban is a kutatómunka súlypontja döntően a porózus és repedezett felszín alatti vízáradókban a fenntartható víztermelés megvalósításához, valamint a geotermikus energia hasznosítás innovatív hasznosításához kötődött az Alföldön, a Tokaji-hegységben és a Bükkben. Emellett további jelentős terepi vízkémiai mintázási vizsgálatokra került sor a Bükkben.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Több térség (a Tokaji-hegység, a Bükk, a Duna-Tisza köz, a Nyírség) regionális felszín alatti áramlási rendszereinek vizsgálatára került sor a fenntartható ivóvíz és hévíztermelés kritériumainak meghatározása érdekében. Környezeti izotópos mérések adatai alapján pontosíthatóak voltak a felszín alatti áramlási rendszerek különböző rendű zónái jelentősen segítve ezzel a hévíz feltérás és a geotermikus energia hasznosítás lehetőségeinek körvonalazását a vizsgált területeken. Nemzetközi érdeklődésre számot tartó kutatási eredményeket publikáltunk a porózus és repedezett felszín alatti vízáradók fenntartható víztermeléséhez kapcsolódó feltételrendszer kialakításával kapcsolatban. A pontosított beszivárgási érték meghatározások kiemelt fontosságúak a hasznosítható vízkészlet megadása szempontjából.

A Bükkben 2016 tavasz-nyár során a Szinva forrásban vízkémiai sorozatmintázást végeztünk. A mintázás 3-14 napos mintavételi gyakorisággal történt, az alábbi céllal: A forrásvíz csapadék hatására történő vízkémiai és vízminőségi változásainak vizsgálata; A karsztvíz beszivárgási folyamatainak vizsgálata a vízkémiai változásokban tetten érhető hatások vizsgálatával; A karsztrendszer kiürülési folyamatában és az áramlási rendszerben bekövetkező változások vizsgálata. A korábbi vizsgálatok alapján megállapítottuk, hogy az aszályos időszakok során az áramlási rendszer méretarányában és a kiürülés mechanizmusában jelentős változás tapasztalható. Ezt a szerzők hidraulikai alapon, a forrás és kúthidrogramok vizsgálata útján mutatták ki. A vízkémiai idősorok (kemogramok) elemzésének célja többek között ezeknek a hidraulikai változásoknak a kémiai és izotópos nyomon követése. A csapadék események során a Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ koncentráció változásai mellett a vezetőképesség, hőmérséklet, trícium, deutérium, radon, illetve $\delta^{18}\text{O}$ értékek tendenciózus változásai figyelhetők meg. Ez a karszt hidrodinamikájával összefüggő, a diffúz és koncentrált beszivárgás illetve megcsapolódás időbeli váltakozásával függ össze.

Figyelemre méltó a kiürülés során a hőmérséklet folyamatos növekedése, illetve a trícium aktivitás folyamatos csökkenése, ami a mélyebb áramlási pályán érkező vizek arányának a folyamatos növekedését jelzi.

A mélyfúrési geofizikai adatok értelmezésének új módszerét, az intervallum inverziót fejlesztettük ki, amellyel a petrofizikai jellemzők meghatározásának pontossága és a meghatározható ismeretlenek száma jelentősen növelhető. Az akusztikus hiszterézis laboratóriumi és modellvizsgálatának új eredményeit két nemzetközi konferencián mutattuk be (EAGE Vienna, EAGE Saint-Petersburg). Mérnökszondázási adatok feldolgozására robusztus faktoranalízis módszert fejlesztettünk, mely hatékonyabb zajelnyomást tesz lehetővé a tradicionális módszerekkel szemben.

b) Tudomány és a társadalom

A kutatócsoport tagjai 2016-ban is számos átfogó jellegű előadást tartottak, illetve összefoglaló anyagokat készítettek az ország víz és energiastratégiájával foglalkozó szakmai és ismeretterjesztő fórumai részére (MTA Földtani Tudományos Bizottság, MTA Energia Stratégiai Bizottság, MTA Hidrogeológiai Albizottság, MTA-DAB Hidrológiai Munkabizottság, MHT Hidrogeológiai Szakosztály, Energia Klub, MOL Szabadegyetem, MTA-MAB, stb.). A kutatás-fejlesztés akkumulált új eredményei szervesen beépülnek az ME Műszaki Földtudományi Karán folyó graduális és posztgraduális képzésbe, és hatékonyan támogatják a Mikoviny Sámuel Földtudományi Doktori Iskola keretében folyó PhD képzést. A kutatócsoport tagjai tevékenyen részt vesznek a hazai Vízyűjtő Gazdálkodási Terv, a Nemzeti Vízstratégia, a Nemzeti Energiastratégia 2030 és az Erőműfejlesztési Cselekvési Terv által megfogalmazott feladatok megvalósításában. A kutatócsoport vezetője tagja az Országos Vízgazdálkodási Tanácsnak, illetve meghívott tagja az OVF Vízügyi Tudományos Tanácsnak, továbbá részt vesz abban az elnöki ad hoc bizottságban, amelynek a feladata a Nemzeti Víz tudományi Kutatási Program kidolgozása és előkészítése.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Igen szoros a kutatás fejlesztési együttműködés a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar valamennyi tanszékével. A kutatócsoport hidrogeológus tagjai tevékenyen vesznek részt az EFG (European Federation of Geologists) szervezet Hidrogeológiai Munkacsoportjának munkájában, amelynek egyik legfőbb célkitűzése az, hogy a vízföldtani kutatások legújabb eredményei gyorsan elérhetővé és használhatóvá váljanak vízellátási és vízgazdálkodási feladatok megoldásában. Bányászati szakmai kérdésekben több évtizedes kapcsolat alapján a

Bányász Professzorok Társasága (Society of Mining Professors) ülésein, a Bányászati Világkongresszusok Szervező Bizottságában (WMC-IOC), a Leobeni Montanuniversität-en, a Kassai Műszaki Egyetemen és a Technical University of Freiberg bányászati egyetemen történtek szakmai konzultációk.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

- OTKA pályázat (K 109441): A geofizikai mérési adatok inverziós feldolgozásának sorfejtéses diszkretizációra alapozott új módszerei. Futamidő: 2012. szept. 1- 2017. aug. 31. Támogatási összeg: 24,638 M Ft
- Ifjúsági OTKA pályázat (PD 109408): Fúrési geofizikai módszerfejlesztés felszínközeli szerkezetek közetfizikai paramétereinek megbízhatóbb meghatározása érdekében. Futamidő: 2013. szept. 1- 2016. aug. 31. Támogatási összeg: 10,2 M Ft.
- KINDRA HORIZON 2020 Nemzetközi Konzorciumi Kutatási Pályázat: Knowledge Inventory for Hydrogeology Research. Projekt partner: Miskolci Egyetem. Futamidő: 2015. jan. 1. - 2017. dec. 31. Támogatási összeg: 80 000 Euro.
- GINOP-2.3.2-15-2016-00010 pályázat: Földi energiaforrások hasznosításához kapcsolódó hatékonyság növelő mérnöki eljárások fejlesztése. ". Futamidő: 2016. szeptember 1. - 2020. aug. 31. Támogatási összeg: 1653 M Ft.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Ilyés Cs, Turai E, Szűcs P: 110 éves hosszúságú hidrometeorológiai adatsorok ciklikus paramétereinek vizsgálata. Hidrológiai Közlöny, 96(1): 61-70 (2016)
<http://193.6.1.94:9080/?docId=25493>
2. Szűcs P, Mikita V: Felszín alatti vízkészleteink és a hidrogeológiai kutatások helyzete hazánkban. Hidrológiai Közlöny, 96(1): 7-20 (2016) <http://193.6.1.94:9080/?docId=25494>
3. Zákányi B, Fejes Z, Szűcs P, Osváth K, Zsuga J: A Tokaji-hegység regionális áramlási modelljének felépítése és kalibrálása. Műszaki tudomány az Észak-Kelet Magyarországi régióban, Miskolc, 2016.05.25: 714-719 (2016)
http://www.dropbox.com/s/3q7mnd30qultaw8/MT%C3%89KMR_kiadv%C3%A1ny_2016.pdf?dl=0
4. Szűcs P, Ilyés Cs, Turai E: Hidrológiai ciklusok változásának hatása a felszín alatti vízforgalomra. XII. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásványvizeiről, Mohács, 2016. 08.31.-2016.09.01: 1-7 (2016)
<http://midra.uni-miskolc.hu:80/?docId=25416>
5. Balogh G P, Szabó NP: Penetrációs szondaadatok feldolgozása kétdimenziós súlyozott faktoranalízis alkalmazásával. Műszaki tudomány az Észak-Kelet Magyarországi régióban, Miskolc, 2016.05.25: 27-34 (2016) <http://193.6.1.94:9080/?docId=25263>
6. Dobróka M, Szabó NP, Tóth J, Vass P: Interval inversion approach for an improved interpretation of well logs. Geophys, 81(2): D163-D175 (2016)
<http://193.6.1.94:9080/?docId=25261>
7. Szabó NP, Balogh GP: Most frequent value based factor analysis of engineering geophysical sounding logs. 78th EAGE Conference and Exhibition, Wien, Austria, 2016.05.30-2016.06.02: 1-5 (2016) <http://193.6.1.94:9080/?docId=25262>
8. Kiss A, Somogyiné MJ: Rugalmassági paraméterek nyomásfüggésének vizsgálata kőszén mintákon. Bányászati és Kohászati Lapok-Bányászat, 149(1): 16-21 (2016)
<http://193.6.1.94:9080/?docId=25325>

MTA–MTM–ELTE PALEONTOLOGIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Pálfy József, az MTA levelező tagja
1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/C.
telefon: (1) 381 2129; fax: (1) 381 2130; e-mail: palfy@nhmus.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport a bioszféra múltbeli fejlődéstörténetének megismeréséhez járul hozzá nemzetközi hatású őslénytani kutatómunkával és publikációs tevékenységgel. A kutatások zöme az alábbi témákban folyik: 1) a középső triász adaptív radiáció jellemzése, 2) a triász végi és kora jura kihalási események kiváltó okainak feltárása, 3) a jura-kréta határ és a kora kréta biotikus és környezeti eseményei, 4) az eocén végi lehűlés hatása a Középső-Paratethys tengeri és a környező területek szárazföldi élővilágára, 5) a Pannon-tó késő miocén endemikus puhatestű faunájának vizsgálata az öskörnyezeti és ősföldrajzi fejlődéstörténet feltárása céljából, 6) a Villányi-hegység pleisztocén gerinces faunáinak vizsgálata, valamint a Kárpát-medencéből és tágabb környezetéből ismert emlősfaunák kapcsolata a jégkorszaki klímaváltozásokkal, 7) késő pleisztocén és holocén éghajlatváltozások nyomozása a Kárpát-medencében, hegyvidéki és síkvidéki tavi üledékek pollenvizsgálata alapján, és 8) globális biodiverzitás-történeti, makroevolúciós és makroökológiai elemzések.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Radiolária-alapú kvantitatív biokronológiai vizsgálatok alapján pontosították a tethysi középső és késő triász radiolária zonációt, a korábbi 4 biozónát 8 zónára és 11 radiolária szubzónára bontották. A késő triász radioláriák taxonómiai vizsgálata alapján 7 új genust és 27 új fajt írtak le, ami új adatokkal járult hozzá a Mediterrán-térség mezozoós geodinamikai fejlődéstörténetének megértéséhez.

A Dunántúli-középhegység triász-jura határszelvényeinek stabilizotóp-geokémiai és karbonátos mikrofácies vizsgálatával az elsőrendű kihalási eseményként ismert határ tengeri környezetet érintő klimatikus, savasodási és biotikus kríziséhez kötötték a Dachsteini Platform karbonát-képződésének megszűnését, melyet a korábbi modellek főleg tektonikus okokkal magyaráztak. Igazolták a triász legvégén jelentkező, de a dunántúli szelvényekből a hézag miatt kimaradó ún. kezdeti szénizotóp-anomália globális jellegét.

Elemezték az európai szárazföldi növényvilág triász-jura határon észlelt változásait. Rávilágították a szárazföldi növényvilág és tengeri állatvilág eltérő evolúciós hatótényezői közötti különbségre a triász-jura kihalás tükrében. Alátámasztották azt a hipotézist, mely szerint a szárazföldi növényvilág megemelkedett kihalási ráta nélkül vészelt át a tengeri faunát érintő súlyos kihalási eseményt okozó környezeti változásokat.

Újraértékeltek a Tethys nyugati részének kora-jura brachiopoda biogeográfiáját. Hasonlósági koefficienseken alapuló kvantitatív módszerek segítségével újradefiniálták az Euro-Boreális, Intra-Mediterrán, és Peri-Mediterrán provinciákat. Kijelölték az egyes provinciákra jellemző morfológiai típusokat, és megállapították az endemizmus mértékét.

A gerecei Bersek-hegy alsó kréta szelvényében kimutatták a valangini Weissert-esemény pozitív szénizotóp-anomáliáját, és ciklussztratigráfiai elemzésből levezetett asztro-kronológiával megadták a legpozitívabb $\delta^{13}\text{C}$ értékek platójának időtartamát.

Az iharkúti késő kréta gerinces lelőhelyről iszapolással feltárt gazdag leletanyag tojáshejtöredékeinek több szempontú vizsgálata során tisztázták, hogy hány faj használhatta

fészkelő helyként a folyóparti és ártéri területeket. Iharkúthoz hasonlóan elvégezték az erdélyi Hátszegi-medence világhírű dinoszaurusz-lelőhelyének tafonómiai szempontú vizsgálatát is.

Megkezdték egy új biokronozatigráfiai rendszer kidolgozását a pannóniai üledékes képződményekre dél-dunántúli rétegsorok és fossziliák vizsgálata alapján. A paksi atomerőmű bővítését előkészítő földtani kutatási program keretében öt fúrásban vettek folyamatosan magot a teljes pannóniai összletből, egy fúrásban pedig az összlet alsó részéből. Hat magból történt őslénytani célú mintavétel, négyből mágnésrétegtani célú mintázás, kettőből geokronológiai ($^{10}\text{Be}/^9\text{Be}$ izotópos korhatározás) célú mintázás, és három mag szedimentológiai leírása készült el és az előzetes őslénytani, mágnésrétegtani és Be-geokronológiai eredmények is megszülettek.

Elvégezték a negyedidőszaki klímaváltozások nyomon követésére jól felhasználható, döntően Villányi-hegységi (Csarnóta 3, Beremend 14, Somssich-hegy 2, Villány 5, 6, 8), részben más (Betfia 9, Kövesvárad) lelőhelyekről származó fosszilis gerinces faunák őslénytani feldolgozását és kvantitatív paleoökológiai és rétegtani értékelését. Ezek közül három lelőhelyről ESR kor meghatározást is végeztek. A Beremend 14-es lelőhely emlősfaunájának feldolgozása és rétegtani értékelése alapján a lelőhely kora-pleisztocén (MN17) korú. A Somssich-hegyi gyökeresfogú pockok geometriai morfometriai vizsgálata alapján kimutatták, hogy a lelőhelyen megtalálható *Microtus nivaloides* mind alakját, mind pedig rétegtani elterjedését tekintve közel állhatott a modern *Microtus (Microtus)* pockok közös őséhez. A Somssich-hegyi késői gazdag kisgerinces-leletanyag tafonómiai értékelésével igazolták, hogy a fauna legnagyobb része a lelőhely közeléből származik, elsősorban a csapadék általi behordás következtében, jelentősebb áthalmozódás nélkül csapdázódott.

A Déli-Kárpátokra vonatkozó erdőtűz-történeti adatsor alapján megerősítették, hogy Közép-Kelet Európában az erdőtüzek gyakorisága 7500-11700 BP évek közt volt a legnagyobb a holocénben, továbbá rámutattak arra, hogy a magas hegyvidéki régióban az erdőtüzek gyakorisága az éghető biomassza mennyiségétől is függött. Az erdőhatár 3000 évvel ezelőtt bekövetkezett csökkenésében erdőtüzek nem játszottak szerepet, ugyanakkor a legeltetésre használt hegyi réteken a vaskorban (kb. 2600-2200 BC évek közt) indult meg a törpefenyő égetéses irtása.

A genetikai kutatásaik szerint a pollen és növényi makrofosszília alapon kapott flóralisták csak részben fednek át a genetikai vizsgálatok alapján kapott flóralistákkal. Ugyanakkor az időbeli változások többváltozós értelmezése ugyanazt a mintázatot adja, azaz a genetikai jel változása valós ökológiai mintázatot hordoz, kiváltója pedig vagy a makroklima változása vagy az emberi hatás. Mivel a közösségi DNS vizsgálatok gyorsak, ezért a kutatás arra a következtésre jut, hogy a közeljövőben a klímaváltozás ökoszisztémára gyakorolt hatásainak vizsgálatában fontos új eszközként használhatók, különösen a biodiverzitás-becslések esetén.

Elemezték a recens gerinctelen fajok kihalási kockázatát az ősmaradvány-rekordjukban mutatott földrajzi elterjedésük változásainak tükrében. Rámutattak arra, hogy az egyes fajoknak nemcsak az aktuális földrajzi elterjedése, hanem azok korábbi nagyságához képest mutatott változása is szerepet játszik a kihalási mintázatok változásában. Ezzel megalapozták annak a lehetőséget, hogy a recens fajok várható kihalási kockázata is legalább kis részben előre jelezhető legyen a múltbeli földrajzi elterjedésük alapján.

b) Tudomány és társadalom

Az éghajlat és a biodiverzitás múltbeli változásait feltáró kutatási eredményeiket két nagy látogatottságú, egész napos hétfégi tudományos ismeretterjesztő rendezvényen tartott előadásokon mutatták be (Földtudományos Forratag, Budapest; Klímaváltozás a múltban és a jelenben, Veszprém).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport vezetőjén kívül több tag is részt vesz az ELTE-n folyó oktatásban BSc, MSc és PhD kurzusok tartásával, TDK, BSc, MSc és PhD témavezetéssel. A hazai társintézmények közül aktív együttműködés folyt az MTA CSFK Földtani és Geokémiai Intézetével. A kutatómunka során nemzetközi együttműködés folyt amerikai, angol, francia, német, cseh, kanadai, lengyel és romániai kutatókkal. Kiemelendő a Román Tudományos Akadémia kolozsvári Barlangkutató Intézetével, a Bonni Egyetemmel, az erlangeni Friedrich-Alexander Egyetemmel, a prágai Károly Egyetemmel, valamint az angliai Plymouth-i Egyetemmel folytatott szoros munkakapcsolat.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A 2016-ban indult „A pannóniai emelet rétegtana a Dél-Dunántúlon” OTKA 116618 projekt fő célkitűzésének megfelelően megkezdtek egy új biokronosztratigráfiai rendszer kidolgozását a pannóniai üledékes képződményekre dél-dunántúli rétegsorok és fossziliák vizsgálata alapján.

Az MTA Atomki által elnyert GINOP-2.3.3-15-2016-00029 pályázatban két alprojekt vezetésével és kidolgozásával vesznek részt: „Gyors klímaváltozási események és kapcsolódó környezet- és élővilágbeli változások a mezozoikumban” és „A jégkorszaki nagyemlős-fauna tagjainak kihalási időpontjai a Kárpát-medencében az őskörnyezet és paleoklíma változásainak tükrében”.

Az MTA Ökológiai Kutatóközpont által elnyert GINOP-2.3.2-15-2016-00019 pályázatban a „Klíma és tájhasználat múltbéli változásai és hatásuk a közösségekre” alprojekt vezetésével és kidolgozásával vesznek részt.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kiessling W, Kocsis ÁT: Adding fossil occupancy trajectories to the assessment of modern extinction risk. *Biology Letters*, 12 (10): 20150813 (2016)
<http://real.mtak.hu/47267>
2. Price GD, Főzy I, Pálfy J: Carbon cycle history across the Jurassic-Cretaceous boundary: New data from Hungary and a new global $\delta^{13}\text{C}$ stack. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, 451: 46–51 (2016) <http://real.mtak.hu/34459>
3. Vörös A, Kocsis ÁT, Pálfy J: Demise of the last two spire-bearing brachiopod orders (Spiriferinida and Athyridida) at the Toarcian (Early Jurassic) extinction event. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, 457: 233-241 (2016)
<http://real.mtak.hu/47158>

MTA–PE LEVEGŐKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Gelencsér András, az MTA doktora
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.
telefon: (88) 626 055; e-mail: gelencs@almos.uni-pannon.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport tagjai 2016-ban a PM10 koncentráció mérésére szolgáló módszer vizsgálatát, illetve olyan mintavételi és mérőrendszer kialakítását végzik, amely lehetővé teszi az aeroszol tömegkoncentrációjának a jelenleginél pontosabb online mérését a légköri víz(gőz) zavaró hatásának kiküszöbölésével. Meghatározzák, hogy mekkora hibát okoz az aeroszol víztartalma a szabványos gravimetriás módszerrel történő tömegkoncentráció meghatározásában egy-egy speciális légköri helyzet (köd, szmog) esetén. Az eredmények ismeretében optimális mérési körülményekre tesznek javaslatot, amelyekkel a légköri víz hatásának mérséklését lehet elérni. Korábbi kutatásaik során megállapították, hogy a légköri aeroszol széntartalmú hányadának 40–70%-a vízben oldódik, s ennek a frakciónak mintegy 60%-át a jelenlegi módszerekkel egyedi komponensekre nem bontható komplex szerves keverék, az ún. humuszszerű vegyületek alkotják. A kutatási terület egyik nemzetközi szinten is tisztázatlan kérdése, hogy a biomassza égetéséből közvetlenül származó, de légköri kémiai folyamatokban is képződő és módosuló, a természetes humuszanyagoktól több fontos tulajdonságában is különböző légköri humuszszerű anyag az élő szervezetekre milyen hatással lehet. Kutatásaik során aeroszol mintákból izolált humuszszerű vegyületek ökotoxicitása és kémiai jellemzői közti összefüggéseket kívánták tanulmányozni.

A kutatócsoport tagjai a K-pusztán DMPS készülékkel mért napi aeroszol méreteloszlási adatok alapján a 2008-tól napjainkig vizsgálják az új részecske képződésben a keveredési réteg és éjszakai maradékréteg dinamikájának, a légköri transzport és fotokémiai folyamatok hatását, amit az Országos Meteorológiai Szolgálat kékestetői obszervatóriumában a keveredési réteg felett végzett folyamatos részecskeszám koncentrációmérésekkel támasztanak alá. A kutatócsoport munkatársainak korábbi kutatási eredményei szerint reszuszpendálható városi porban található többlet foszfor részben a madarak és emlősök kiszáradt ürülékéből származhat, ami komoly fertőzésveszélyt és egészségkárosító kockázatot jelent. A kutatócsoport tagjai markervegyületek meghatározásával vizsgálják az ürülék felporzásának hozzájárulását városi reszuszpendálható PM10 aeroszol tömegkoncentrációjához és feltárják annak egészségügyi kockázatait. A korábbi évek tapasztalatait felhasználva laboratóriumi körülmények között kátránygömböket állítanak elő különböző fafajták száraz lepárlásával nyert kátrányból. Vizsgálják, hogy a termikus-optikai módszerrel történő mérések során a kátránygömbök milyen mérési hibát okozhatnak a korom mennyiségi meghatározásában. Vizsgálják a kátránygömböket felépítő vegyületek kémiai szerkezetét.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport tagjai 2016-ban vizsgálták, hogy az új részecskekeletkezés mennyire tekinthető helyi, vagy regionális folyamatok eredményének. A mérésekre K-pusztán (tengerszint feletti magasság 129 m) és a kékestetői meteorológiai obszervatóriumban (1000 m) került sor. Megállapították, hogy a két helyszín tengerszint feletti magasság-különbsége és vízszintes távolsága ellenére a mérési időszakban észlelt részecskekeletkezési események jelentős mértékben ugyanazon a napon következtek be. Mindkét helyszínen az epizódok a reggeli, délelőtti órákban kezdődtek, hosszuk átlagosan 8 óra volt. A kezdési időpontok közötti idő (kevesebb, mint 120 perc) arra utal, hogy légtömeg-áthelyeződés nem magyarázza az

események bekövetkeztét, a jelenség legtöbbször regionális hatások eredménye. Légpálya elemzés segítségével megállapították, hogy a vizsgált időszakban a részecskekeletkezési események forrásterületei É-D-i tengely mentén helyezkedtek el, és azokban a regionális kén-dioxid emisszió meghatározó szerepet játszik.

Vizsgálták a laboratóriumi körülmények között előállított kátránygömbök kémiai összetételét. Az infravörös spektroszkópiával végzett mérések alapján megállapították, hogy a különböző fafajtákból előállított kátránygömbök összetétele egymáshoz nagyon hasonló, az oxigén elsősorban keto- és hidroxilcsoportokban található, a karboxilcsoportokra jellemző rezgések azonban hiányoznak a spektrumból. A pirolízis-gázkromatográfia-tömegspektrometria és Raman spektroszkópiai vizsgálatokkal megerősítették, hogy a kátránygömbök kondenzált aromás gyűrűket tartalmazó szerkezet a koroméhoz hasonló. A korom meghatározásához is széleskörűen használt termikus-optikai szénelemzéssel végzett vizsgálatok azt mutatták, hogy a kátránygömbök széntartalmának 10–20%-a koromként kerül meghatározásra, így a korom termikus módszerrel történő mérését a kátránygömbök jelenléte a mintákban is jelentősen befolyásolhatja.

A reszuszpendálható por belélegezhető frakciójában kimutatták a kizárólag ürülékből származó epesav vegyületeket gázkromatográfia tömegspektrometria módszerével. A madarakra jellemző epesav komponens mellett a mintákban az emlősök ürülékében is megtalálható epesavakat is azonosítottak. A madarak ürülékében jellemzően megtalálható epesav mért tömegkoncentrációja, illetve az epesavak ürülékben mért irodalmi értékei alapján a Budapesten gyűjtött reszuszpendálható por PM_{10-1} frakciójának akár 0,01%-a is származhat madarak ürülékéből. Ez azt jelenti, hogy a belélegezhető porban lévő ürüléknek potenciális egészségügyi kockázata lehet.

2016-ban folytatták a jelenleg szabványos PM_{10} tömegkoncentráció mérésére szolgáló módszer légköri víztartalom miatt fellépő mérési hibájának meghatározását. Nagytérfogatú mintavevővel gyűjtött minták vizsgálatával megállapították, hogy a jelenleg szabványos gravimetriás módszerrel történő tömegkoncentráció meghatározása során a részecskék víztartalma a májusi és novemberi időszakban a száraz tömegkoncentrációra vonatkoztatva akár 4,3%-os, illetve 8%-os hibát is okozhat. Megállapították, hogy a szűrőket 50% relatív nedvesség (RH) helyett 25%-nál kisebb RH-n kondicionálva az aeroszol tömegkoncentrációjának (PM_{10}) gravimetriás módszerrel történő mérése során a részecskék víztartalmának hatása minimálisra csökkenthető, illetve kiküszöbölhető. A különböző RH-n végzett kondicionálás és a kétféle mérési módszerrel kapott eredmények összevetéséből megállapították, hogy a pormonitor adataiból számított 24 órás tömegkoncentráció májusban átlagosan mintegy 22%-kal, novemberben pedig 14%-kal haladta meg a vízmentes PM_{10} tömegkoncentrációt.

A kutatócsoport vizsgálta a légköri aeroszol vízben oldódó széntartalmú hányadának mintegy 60%-át kitevő, ún. humuszszerű vegyületek ökototoxicitása és kémiai jellemzői közti összefüggéseket. UV-VIS és fluoreszcenciás spektrometriás vizsgálatok alapján megállapították, hogy a téli mintákból izolált humuszszerű vegyületek aromaticitása nagyobb volt, mint a nyári minták esetében. Az ökotoxikológiai tesztek során a téli mintákból izolált anyag az alkalmazott tesztszervezet számára toxikusabbnak bizonyult a nyári mintákhoz képest. A nyári mintákból izolált HULIS átlagos ökototoxicitása a reszuszpendált utcai por és a nyári városi aeroszol ökototoxicitása között alakult. Ezzel szemben a téli minták ökototoxicitása a téli városi aeroszol és a biomassza égetéséből származó füst között volt. A téli mintákban HPLC-MS vizsgálatokkal a biomassza égetéséből képződő nyomjelző vegyületeket sikerült azonosítani. Ezek alapján valószínűsíthető, hogy a téli minták jelentősebb ökototoxicitása összefüggésben van az izolált humuszszerű anyag erősebb aromás jellegével, ami a fatüzelés domináns hatásának tulajdonítható.

b) Tudomány és társadalom

Középiskolások számára meteorológiai és levegőkémiai tárgyú ismeretterjesztő előadásokat tartottak középiskolákban, a Kutatók éjszakája valamint a Pannon Egyetem által rendezett Környezettudományi Diáktábor programjain. A kutatócsoport vezetője az éghajlatváltozás, ill. a szmog témakörében a sajtóban, rádióban és televízióban több alkalommal interjút adott.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kátránygömbök kémiai összetételét a Szegedi Tudományegyetemmel illetve az MTA Természettudományi Kutatóközponttal együttműködésben vizsgálják. A kutatócsoport tagjai részt vettek a Kémiai környezetvizsgáló módszerek című tárgy oktatásában, BSc és MSC szakdolgozatok témavezetésében, a „Kémiai és Környezettudományok Doktori Iskola” munkájában. Nemzeti Agrárkutatási és Innovációs Központ (NAIK) felkérésére a mezőgazdasági tevékenységek kisméretű részecske kibocsátása témában működtek közre.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

„Bionanotechnológiai kutatások betegségek hatékony kimutatása, újfajta hatóanyagok kifejlesztése és bioinspirált intelligens nanoanyagok előállítása” című GINOP-2.3.2-15-2016-00017 projekt 1.4. Nanotoxicitás alprojektjében 40,5 M Ft támogatás a 2016–2020. időszakra.

„Légszennyeztség előrejelző rendszer kifejlesztése légköri víz-aeroszol kölcsönhatások figyelembevételével” című GINOP-2.3.2-15-2016-00055 projektben konzorciumvezető. A projekt összes költségvetése 819,12 M Ft, konzorciumi partnerek Országos Meteorológiai Szolgálat, Pécsi Tudományegyetem; megvalósítási időszak: 2017. március 1.–2021. február 28.; saját támogatás 241,953 M Ft.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Hoffer A, Tóth A, Nyirő-Kósa I, Pósfai M, Gelencsér A: Light absorption properties of laboratory-generated tar ball particles. Atmospheric Chemistry and Physics, 16: 239–246 (2016) doi:10.5194/acp-16-239-2016 <http://real.mtak.hu/id/eprint/32931>
2. Molnár A, Bécsi Zs, Imre K, Gácsér V, Ferenczi Z: Characterization of background aerosol properties during a wintertime smog episode. Aerosol and Air Quality Research, 16:(8): 1793-1804 (2016) doi:10.4209/aaqr.2015.04.0205 <http://real.mtak.hu/id/eprint/39919>
3. Alastuey A, Querol X, Aas W, Lucarelli F, Perez N, Moreno T et al. (23, Imre K): Geochemistry of PM10 over Europe during the EMEP intensive measurement periods in summer 2012 and winter 2013. Atmospheric Chemistry and Physics, 16: 6107-6129 (2016) doi: 10.5194/acp-16-6107-2016 <http://real.mtak.hu/id/eprint/39880>
4. Molnár A, Párkányi D, Imre K, Gácsér V, Czagler E: A closure study on aerosol extinction in urban air in Hungary. Időjárás, 120 (2): 163-181 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/39913>
5. Salma I, Németh Z, Kerminen V M, Aalto P, Nieminen T, Weidinger T et al. (3, Molnár A Imre K): Regional effect on urban atmospheric nucleation. Atmospheric Chemistry and Physics, 16: 8715-8728 (2016) doi:10.5194/acp-16-8715-2016 <http://real.mtak.hu/id/eprint/39879>

MTA-PTE MOLEKULÁRIS KÖLCSÖNHATÁSOK AZ ELVÁLASZTÁS- TUDOMÁNYBAN KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Felinger Attila, az MTA levelező tagja
7624 Pécs, Ifjúság útja 6.
telefon: (72) 501 500/24582; fax: (72) 501 518; e-mail: felinger@ttk.pte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2013. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az ötéves kutatási tervben célul tűzték ki a folyadékkromatográfias elválasztási folyamatok részleteinek feltárását, illetve elektroforézis esetén a kapillárisban lejátszódó fizikai-kémiai folyamatok megértését, hiszen azok alapvető befolyásolják a retenciót, a szelektivitást, illetve a csúcsok alakját és szélesedését, ennél fogva az elválasztás hatékonyságát. Kutatásuk célja, hogy a nemlineáris és a lineáris kromatográfia módszereivel is jellemezzék a molekuláris kölcsönhatásokat, apoláris és poláris állófázisok alkalmazásakor egyaránt.

A környezeti, biológiai, és egyéb eredetű analitikai minták rendkívül összetettek, nagyszámú komponenst tartalmaznak. Ezen minták analitikai vizsgálata során olyan elválasztási rendszerekre van szükség, amelyek nagy hatékonyságot, nagy csúcskapacitást biztosítanak. A modern folyadékkromatográfia gyakorlatában számos fázisrendszer, számos állófázis érhető el.

2016-ban elsősorban azt tanulmányozták, hogy az elválasztás hatékonysága a nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiában milyen mértékben függ a töltetanyag heterogenitásától. Tanulmányozták makrociklusos vegyületek megkötődési mechanizmusát, az enantiomerizáció elválasztásra gyakorolt hatását, illetve új adatfeldolgozási, kiértékelési módszereket vezettek be.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Különböző típusú UHPLC oszlopok kinetikai hatékonyságának összehasonlítása, az axiális töltetheterogenitás vizsgálata

A folyadékkromatográfias mérések hatékonyságát döntően a kromatográfias oszlopban történő mintasáv-szélesedés határozza meg. A kromatogramon megjelenő csúcshélesség a készülék hozzájárulásán túl egy sor, az oszloptölteten illetve a mozgófázisban lejátszódó hatás – úgymint az axiális diszperzió, a külső anyagátadási gátlás az állófázis határfelületén, a molekulák pórusbeli diffúziója vagy az adszorpció-deszorpció folyamata – összeadódásából ered. Töltetes oszlopokban a töltetanyag sűrűségének heterogenitása az oszlop végeinél, illetve a minta keveredése az oszlop hardverben további csúcshélesség forrása lehet. Különböző típusú (teljesen porózus illetve tömör-magvú szemcsékkel töltött, valamint monolit típusú) gyorskromatográfias alkalmazott oszlopot hasonlítottak össze. Mivel a monolit oszlop hatékonysága kiemelkedőnek bizonyult kis retenciójú komponensek esetén, vizsgálták a töltetes oszlopokban a záró frit hatásának, illetve a frit közelében a töltetsűrűség heterogenitásának hatását a csúcshélességre. Kutatásaik eredményeként kijelenthető, hogy míg a töltetes oszlopok két végének hatékonysága szignifikáns különbséget mutat egymástól (20-25%), a monolit oszlop igen hasonló hatékonyságot mutat mindkét végén.

Enantiomerizáció sebességi állandójának meghatározása kromatogramokból

A gyógyszeripar által előállított gyógyszerek hatóanyaga a legtöbb esetben királis vegyület, amelyek megjelenhetnek racém vagy enantiomertiszta formában, a szintézis módjától függően. „Batman csúcsról” akkor beszélhetünk, amikor az enantiomerek a kromatográfiás elválasztás alatt alakulnak át egymásba és egy platót tapasztalunk az enantiomereknek megfelelő csúcsok között. Az átalakulás sebessége és így a csúcs alakja is nagyban függ a folyamat sebességi állandójától.

Célul tüzték ki enantiomer-elválasztások vizsgálatát a molekuláris folyamatok értelmezéséhez. Ennek érdekében kiterjesztették a kromatográfia sztochasztikus elméletét az elválasztás közben lezajló átalakulás kinetikájával, majd az új modell segítségével meghatároztak egy egymásba átalakuló enantiomerpár reakciósebességi állandóját. Eredményeik jó egyezést mutatnak a függetlenül, optikai forgatóképességi adatokból meghatározott sebességi állandókkal és ezen felül az elválasztás szempontjából is hasznos következtetéseket vonhattak le.

Kavitandok retenciójának nyomásfüggése

A kavitandok üreggel rendelkező makrociklusos vegyületek, amelyek alkalmasak úgynevezett gazda-vendég (host-guest) kölcsönhatások kialakítására. A kavitandokat számos területen alkalmazzák, mint például kémiai szenzorként, biológiai fontosságú molekulák felismerési folyamataiban, kromatográfiás elválasztások során állófázishoz kötve, illetve adalékanyagként. Célul tüzték ki a kavitandok, mint mintavegyületek kromatográfiás viselkedésének tanulmányozását. Általánosságban a nyomás növekedésével nő a retenció idő, ami nagy molekulaméretű minták (pl. fehérjék, peptidok) esetén kifejezettebb, mint kis méretű molekulák esetén. E hatás elsősorban a molekulák moláris térfogatváltozásával hozható összefüggésbe, amit a szolvátburok méretének, a molekula konformációjának változása befolyásol. Ha lecsökken a molekula szolvátburka, nő a hidrofóbicitás, a retenció tényező növekszik fordított fázisú tölteten. A kísérleteket metanol/víz mozgó fázist alkalmazva, BDS Hypersil, XTerra C₈ és C₁₈ állófázisokon végezték, a nyomás növelését különböző hosszúságú szűkítő kapillárisok oszlop utáni elhelyezésével érték el.

Kromatográfiás hatékonyság vizsgálata alterációs analízissel

A kromatográfiás oszlopok hatékonyságának vizsgálatát célzó mérésorozat adatait vetették alá kemometria vizsgálatoknak. Az adatok kiértékelése során öt kromatográfiás oszlop – teljesen porózus, tömörmagvú és monolit – hatékonyságát hasonlították össze hagyományos módszerekkel, amelyek magukba foglalták a többi között a tányérmagasság-áramlási sebesség ($H-u$) görbe, a tányérmagasság-retenció tényező ($H-k$) görbe és a kinetikus görbe felvételét. Vizsgálatukban a hagyományos kromatográfiás kiértékelés helyett a mérési eredményeket egy háromdimenziós adathalmazba rendezték, amelyen kétdimenziós és háromdimenziós alterációs analízist végeztek, valamint korrelációs koefficiens térképeket vettek fel. A kromatogramok összehasonlításához elengedhetetlen volt az adatok előkezelése. A változó áramlási sebesség miatt a csúcsok retenció ideje és a kromatogramok hossza jelentősen változik, azonban a lényegi információt a csúcsok alakjának változása szolgáltatja. Ahhoz, hogy ezt érdemben tudják összehasonlítani, az időskálát normalizálták. Munkájuk célja a hatékonysági mérések során felvett kromatogramok közvetlen – nem görbeillesztéses, paraméteres – vizsgálata volt, valamint eredményeik összehasonlítása az eredeti kiértékelésekkel. A kapott információk jól illeszkednek a hagyományos kiértékelés konklúziójába, valamint kiegészítik azt az alterációs térképek szolgáltatta mélyebb rálátással és vizuális információval a kromatográfiás csúcsok változásáról.

b) Tudomány és társadalom

Kutatómunkájuk jellegéről, az elválasztástudomány alapjairól a Pécsi Tudományegyetem és az UnivTV szervezésében folyó *Nyitott egyetem* sorozatban „Az elválasztás művészete” címmel tartott tudománynépszerűsítő előadást a kutatócsoport vezetője 2015. november 10-én. Az előadást 2016-ban több helyi tv-csatorna programjára tűzte.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A folyadékkromatográfias állófázisok jellemzése témakörben szoros együttműködést folytattak a Ferrarai Egyetem (Olaszország) egyik professzorával, illetve a Kiotói Műszaki Egyetem (Japán) professzorával. Az együttműködésekben 2016-ban két közös közlemény jelent meg.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA 106044: A folyadékkromatográfia molekuláris kölcsönhatásainak vizsgálata, 2013-2016, 41 M Ft.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Pasti L, Marchetti N, Guzzinati R, Catani M, Bosi V, Dondi F, Felinger A, Sepsey A, Cavazzini A: Microscopic models of liquid chromatography – from ensemble-averaged information to resolution of fundamental viewpoint at single molecule level. *Trends in Analytical Chemistry*, 81: 63–68 (2016)
2. Bartó E, Prauda I, Kilár F, Kiss I, Felinger A: Investigation of retention mechanism of resorcinarene based cavitands by linear and nonlinear chromatography. *Journal of Chromatography A*, 1456: 152–161 (2016)
3. Lambert N, Miyazaki S, Ohira M, Tanaka N, Felinger A: Comparison of the kinetic performance of different columns for fast liquid chromatography, emphasizing the contributions of column end structure. *Journal of Chromatography A*, 1473: 99–108 (2016)
4. Simon J, Felinger A: Correlation analysis on 3D data – Introducing the alteration analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 158: 54–60 (2016)

MTA–PTE NAGYINTENZITÁSÚ TERAHERTZES KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Hebling János, az MTA doktora
7623 Pécs, Ifjúság útja 6.

telefon: (72) 501 528; fax: (72) 501 571; e-mail: hebling@fizika.ttk.pte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az 5 éves kutatási terv a következő témákat tartalmazza:

1. THz-es impulzusok előállítása hullámvezető struktúrában.
2. Extrém nagy térerősségű THz-es impulzusok előállítása.
3. Terahertzes spektroszkópia alkalmazása kulturális örökségvédelemben, illetve biológiai anyagok vizsgálatában.
4. THz-es pumpa – próba vizsgálatok.
5. Nagy térerősségű THz-es impulzusok előállítása és felhasználása attoszekundumos impulzusok hatékonyabb keltésére.
6. Töltött részecskék gyorsítása extrém nagy térerősségű THz-es impulzusokkal.

A terv szerint az első téma 2014-ben, a második és ötödik pedig 2015-ben fejeződik be, a többi az ötödik évig tart. 2016-ban tehát a 3., a 4., és a 6. téma volt aktuális.

Emellett, a kutatócsoport általános feladatának tekintette, hogy a nagyintenzitású THz-es impulzusok előállításában meglévő vezető szerepét megőrizze, azaz a nagyenergiájú THz-es impulzusforrásokat továbbfejlessze, és keresse az ilyen impulzusok alkalmazási lehetőségeit.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

2016-ban a kutatócsoportnak a 3. téma, a terahertzes spektroszkópia területén kifejtett tevékenysége volt egy méréskiértékelő szoftver kifejlesztése. A kutatócsoport tudományos közleményt jelentetett meg a terahertzes optika potenciális anyagát jelentő TeO_2 terahertzes abszorpciós és emissziós spektrumának mérési eredményeiről. Az L-Asp és L-Asn fehérjék terahertzes spektroszkópiái vizsgálatainak sűrűségfüggő alapon alapuló számításokat alkalmazó kiértékeléseiről készített kézirat a Biophysical Chemistry folyóiratba lett beküldve.

A 4. témában a lézerrendszer többszöri meghibásodása miatt sikeres, publikációig eljutó méréseket nem lehetett végezni. Ugyanakkor a kutatócsoport tagjai jelentős szerepet vállaltak az ELI-HU Kft. számára épülő Terahertzes pumpa – próba mérőberendezés kifejlesztésében. E fejlesztés és készüléképítés megfelelő ütemben halad.

Noha az ötéves tervben 2016-ra már nem volt előirányozva az „Extrém nagy térerősségű THz-es impulzusok előállítása” témakörében végzett vizsgálat, a tavaly készített 2016-os kutatási tervben szerepelt ez a téma. Ennek oka egyrészt az, hogy a kutatócsoport tagjainak OTKA pályázatában szerepel ez a téma, másrészt a 6. kutatási téma („Töltött részecskék gyorsítása extrém nagy térerősségű THz-es impulzusokkal.”) sikeres megvalósítása érdekében szükség van jó hatásfokú és nagy térerősségű terahertzes impulzusforrásokra. Ezen a területen nagyon sikeresek voltak a félvezető kontakt-rácsos elrendezést alkalmazó terahertzes forrásra vonatkozó, már korábban megkezdett kutatások. A 2015-ben elvégzett kísérletek azt mutatták, hogy a pumpálás háromfotonos abszorpciójának elkerülése érdekében elegendően hosszú

hullámhosszú pumpálást alkalmazva a korábban megfigyeltnél százszor nagyobb hatásfokkal lehet terahertzes impulzusokat előállítani ZnTe félvezetőben. Egyúttal azt is sikerült demonstrálni, hogy a korábban javasolt ún. kontaktrácsos elrendezés, – amely skálázható, vagyis nagyobb pumpáló energia esetén a megvilágított felület arányos növelésével az előállított THz-es impulzusok energiája tetszés szerint növelhető–, hatásosan megvalósítható. Ezekről az eredményekből 2016-ban kettő publikáció jelent meg. Az egyik a jó nevű Optica folyóirat címlapjára került. Félvezető terahertzes forrásokra vonatkozó 2016-ban elvégzett modellszámítások azt mutatják, hogy a hatásfok háromszorosan tovább növelhető optimalizált vastagságú félvezető kristályok alkalmazásával. Ezekről a számításokról beszámoló kézirat benyújtásra került az IEEE J. Sel. Top. in Quant. Elect. folyóiratba.

Az „Extrém nagy térerősségű THz-es impulzusok előállítása” témakörében végzett további vizsgálatok megmutatták, hogy az ún. hibrid elrendezés, – amely egy leképezést alkalmazó, és egy kontaktrácsos elrendezés kombinációja–, előnyösebb mind a leképezéses, mind a kontaktrácsos elrendezésnél. A technikai megvalósítása a kontaktrácsosénál egyszerűbb, ugyanakkor a leképezési hibája jelentősen kisebb a tisztán leképezést alkalmazó elrendezés hibájánál. Ezekből a vizsgálatokból 2016-ban két folyóiratcikk, valamint egy szabadalmi bejelentés született.

Szintén az „Extrém nagy térerősségű THz-es impulzusok előállítása” kutatási témában született fontos eredmény annak megmutatása, hogy szögdiszperzióval rendelkező impulzusok optikai parametrikus erősítésével 200 mJ-t meghaladó energiájú, 1.7 mm hullámhosszú, 17 fs időtartamú impulzusok állíthatóak elő.

A 6., A „Töltött részecskék gyorsítása extrém nagy térerősségű THz-es impulzusokkal” című témában egyrészt protonoknak terahertzes impulzusokkal lézerplazmában történő gyorsításának numerikus szimulációk segítségével történő vizsgálatára került sor. E vizsgálatok azt mutatják, hogy realisztikus terahertzes impulzusparaméterek esetén protonok 0,5 MeV energiára történő gyorsítása várható. A protonok előnyösen keskeny energia eloszlással rendelkeznek. Ezekről az eredményekről egy Physics of Plasmas cikk számol be. A kutatócsoport elektronok gyorsításával kapcsolatos vizsgálatai szerint terahertzes impulzusok segítségével álló elektronokat három fokozatban relativisztikus sebességre lehet felgyorsítani. E kutatásokból a kutatócsoport tagjai egy szabadalmi bejelentést kezdeményeztek.

2016-ban a kutatócsoport tagjai által korábban beadott egy magyar, kettő USA, és egy EU szabadalmi kezdeményezésre adott ki a megfelelő szabadalmi hatóság megadási szándéknyilatkozatot.

b) Tudomány és társadalom

2016-ban a kutatócsoport egy tagja részt vett a kutatók éjszakája rendezvényen, illetve többen középiskolai rendezvényeken előadásokat tartottak. A kutatócsoport vezetője tagja az NKFIH Fizika szakértői csoportjának. A dél-dunántúli régió médiumaiban többször jelent meg újságcikk, riport a kutatócsoport által elért eredményekről.

A kutatócsoport vezetője kiemelkedő szabadalmi tevékenységéért Jedlik Ányos díjban részesült.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A terahertzes tudomány legnagyobb európai rendezvénye a kutatócsoport több tagja segítségével megrendezett „5th EOS Topical Meeting on Terahertz Science & Technology” konferencia volt Pécsen, amelynek elnöke, és a szervező bizottsági elnöke is a kutatócsoport tagja.

A Technische Universität Wien Institut für Photonik laboratóriumában az ottani kutatókkal több közös kísérletet végeztek félvezető kontaktrácsos THz-es forrás megvalósítása érdekében. Az együttműködésben három rangos folyóirat közlemény született.

A kutatócsoport mindegyik tagja jelentős oktatási tevékenységet is végzett a PTE Fizikai- illetve Biofizikai Intézetében. A PTE Fizika Doktori Iskolában a kutatócsoport tagjainak témavezetésével három hallgató PhD fokozatot szerzett.

A kutatócsoport tagjainak vezetésével eredményesen zajlik a PTE Fizikai Intézete és az ELI-ALPS Kft.-vel a korábban létrejött K+F megállapodásának teljesítése.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A PTE a kutatócsoport három tagjának meghatározó részvételével támogatást nyert a GINOP 2.3.3-15 kiírás keretében, ahol a THz-es projekt mintegy 520 MFt támogatást nyert.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Pálfalvi L, Ollmann Z, Tokodi L, Hebling J: Hybrid tilted-pulse-front excitation scheme for efficient generation of high-energy terahertz pulses. *Optics Express*, 24: 8156-8169 (2016) <http://real.mtak.hu/48633/>
2. Polónyi Gy, Monoszlai B, Gäumann G, Rohwer EJ, Andriukaitis G, Balciunas T, Pugžlys A, Baltuška A, Feurer T, Hebling J, Fülöp JA: High-energy THz pulses from semiconductors pumped beyond the three-photon absorption edge. *Optics Express*, 24: 23872 (2016) <http://real.mtak.hu/41804/>
3. Fülöp JA, Polónyi Gy, Monoszlai B, Andriukaitis G, Balciunas T, Pugžlys A, Arthur G, Baltuška A, Hebling J: Highly efficient scalable monolithic semiconductor terahertz pulse source: *Optica*, 3: 1075 (2016) <http://real.mtak.hu/41805/>
4. Tóth Gy, Pálfalvi L, Tokodi L, Hebling J, Fülöp JA: Scalable broadband OPCPA in lithium niobate with signal angular dispersion: *Optics Communications*, 370: 250 (2016) <http://real.mtak.hu/48640/>
5. Sharma A, Tibai Z, Hebling J: Intense tera-hertz laser driven proton acceleration in plasmas. *Physics of Plasmas*, 23: 053103 (2016) <http://real.mtak.hu/48641/>

MTA-PTE SZELEKTÍV KÉMIAI SZINTÉZISEK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Kollár László, az MTA doktora
7624 Pécs, Ifjúság u. 6.

telefon: (72) 503 600 / 24153; fax: (72) 501 518; e-mail: kollar@gamma.ttk.pte.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport 2012 júliusában alakult meg. A benyújtott pályázatban a kutatócsoport tagjai legfontosabb feladatként olyan új típusú homogénkatalitikus reakciók kifejlesztését jelölték meg, amelyek elsősorban kismolekulák (CO, CO₂, H₂) aktiválásával járnak, továbbá alkalmasak arra, hogy többlépéses, esetenként gyakorlati fontosságú kémiai szintézisek kulcsreakcióiként szolgáljanak. Hagyományos nagyszelektivitású és modern (homogénkatalitikus) reakciók egymást követő alkalmazásával a zöldkémia néhány fontos alaptételét is kielégítő szintézisek valósíthatók meg. A csoport munkájának célkeresztjében nem egy konkrét vegyületcsalád tagjainak szintézise áll, hanem olyan *nagy szelektivitású, széles körben alkalmazható, környezetbarát új reakciók kifejlesztése*, amelyek számos vegyületcsalád szintézisében juthatnak fontos szerephez. A katalitikus reakciók tanulmányozásának alapvető lépése a reakció mechanizmusának, az aktív katalizátor-intermedierek kialakulásának analitikai és számításhoz köthető vizsgálata.

Az eddig eltelt időszakban elért legfontosabb eredmények: a) a szén-dioxid nikkkel-komplexek segítségével történő aktiválásának, kobalt-difoszfín (monofoszfín)₂ komplexek szerkezetének elméleti kémiai vizsgálata, b) *P*-, *N*- és *O*-donoratomokat egyaránt tartalmazó ligandumok Pt(II)-komplexeinek vizsgálata és katalitikus alkalmazása hidrofornilezési reakcióban, c) a Hammett-konstans–enantioszelektivitás/regioszelektivitás összefüggések feltárása sztírol enantioszelektív hidrofornilezési reakciója során, 4-szubsztituált sztírol platínakomplexeinek elektronszerkezeti vizsgálata a számításhoz köthető vizsgálata, d) jódarkének és jódaromások (különösen *N*-heteroaril-jodidok) palládium(0) komplexek jelenlétében végzett, α,β -telítetlen amidokat, ill. nikotinamidokat eredményező aminokarbonilezése, e) modell-szubsztrátumok és gyakorlati fontosságú bonyolultabb alapvázak (potenciális 5 α -reduktáz inhibitor hatású szteroidok, nem-lineáris optikai sajátságú kavitandok) új funkciók csoportjainak kiépítése pikolilaminok, funkcionális piperidinek (homoprolinok) és axiális kiralitásalemet tartalmazó aminok mint *N*-nukleofilek kitüntetett alkalmazásával.

A 2016-ös kutatási év fontosabb feladatai: a) platina- és ródiumpalatalizált hidrofornilezés vizsgálata környezetbarát oldószerekben b) az aszimmetrikus aminokarbonilezési és hidrofornilezési reakciók szubsztrátum-szerkezet–diasztereoselektivitás/enantioszelektivitás összefüggéseinek vizsgálata, c) kapcsolási reakciók szintetikus alkalmazása új nukleofilek és szubsztrátumok esetében.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport a *szén-monoxid felhasználásával, egyszerű modellvegyületekkel* végzett homogénkatalitikus karbonilezési reakciók két típusát vizsgálta.

A *hidrofornilezési reakciókban* új α -aminophosphine és *N,N*-bisz(foszfinoilmetil)amin (PNP-típusú) ligandumok tesztelésére került sor platina-tartalmú katalizátor-prekursorok jelenlétében. Sztírol szubsztrátum alkalmazásával a fenti ligandumok 50% feletti

regioszelektivitással adják az elágazó formil-regioizomert, a 2-fenil-propanalt [1]. 2- és 4-szubsztituált sztirolok sorozata esetén értelmezhető platina–BINAP–ón(II)-klorid rendszerrel végzett enantioszelektív hidroformilezési reakció erőteljes hőmérséklet-függése, azaz a domináns enantiomer abszolút konfigurációjának megváltozása a reakció-hőmérséklet függvényében [2].

Jódaromás *modell-szubsztrátumok* (5- és 7-jód-indol, amino-jód-piridin származékok) *aminokarbonilezési reakciójában* vizsgálták a csoport munkatársai a szerkezet-reaktivitás és szerkezet-szelektivitás összefüggéseket. Megvalósították indol-ketoamidok, valamint 'dimer' indol-amidok jó hozamú szintézisét monoaminok, illetve diaminok jelenlétében [3]. Amino-jód-piridin szubsztrátum alkalmazásával olyan piridin-ketoamidok állíthatók elő, amelyek szabad amino-csoportot hordoznak, ily módon további szintézisek értékes intermedierei [4]. A 2-Jód-bornén két enantiomerének (mint szubsztrátumnak), valamint a BINAM (2,2'-diamino-1,1'-binaftil) két enantiomerének (mint N-nukleofilnak) felhasználásával diasztereoszelektív aminokarbonilezési reakciókat hajtottak végre. Megvalósították valamennyi lehetséges bornén-BINAM diasztereomer konjugátum szintézisét [5].

A kutatócsoport évek óta nagy figyelmet fordít a környezetbarát szintézisek kidolgozására, elsősorban alternatív oldószerek homogénkatalitikus reakciókban történő felhasználására. Egy biomassza-alapú oldószer, a γ -valerolakton alkalmazását vizsgálták a katalizátor és a reakciókörülmények változtatásával platina-katalizált enantioszelektív hidroformilezési [6] és palládium-katalizált aminokarbonilezési [7] reakcióban.

Hagyományos és nagy szelektivitást biztosító újszerű homogénkatalitikus reakciók ötvözésével olyan befogadó molekulákat (kavitandokat) állítottak elő, amelyek alkalmasak szerves vendég-molekulák (kávészav) [8] és átmenetifém-ionok (réz(II)) [9] komplexálására.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport által művelt terület szorosan kapcsolódik olyan, a társadalmat foglalkoztató kérdésekhez, mint pl. a környezetvédelem, új, biológiai fontosságú vegyületek előállítása. A szakterület népszerűsítéséhez a kutatócsoport tagjai a széles közvélemény számára is érthető előadások formájában járultak hozzá. Részben a magyar szaknyelv művelését, részben a más területeken dolgozó vegyészek és a kémia iránt érdeklődők igényét szem előtt tartva a kutatócsoport tagjai rendszeresen (3-5 évente) beszámolnak kutatásaikról a Magyar Kémiai Folyóiratban és a Magyar Kémikusok Lapjában, a PTE valamennyi katódjára nyilvános szemináriumokat tartanak a Szentágotthai János Kutatóközpontban.

A kutatócsoport tagjai aktívan részt vesznek a PTE TTK szakmai közéletében, valamint a kémia alapszakos (BSc) és vegyész mesterszakos (MSc) hallgatók tehetséggondozásában (tudományos diákköri munka vezetése), 'diploma-közeli' hallgatók munkájának irányításában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A beszámolási időszakban a MTA-PTE SzK Sz Kutatócsoport intenzív kutatási kapcsolatot tartott fenn a Pannon Egyetem kutatóival (szteroidok funkcionálizálása), a Szegedi Tudományegyetem kutatóival (axiális kiralitáselemet tartalmazó karbonsavamidok enantiomer-összetételének királis nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás meghatározása), a University of Coimbra kutatóival (aminokarbonilezési reakciók) és a University of Athens kutatóival (PNP típusú, háromfogú ligandumok átmenetifém-komplexei és azok alkalmazása hidroalkoxikarbonilezési és kapcsolási reakciókban).

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A beszámolási időszakban a kutatócsoport tagjai egy ez évben elnyert pályázat (GINOP-2.3.2-15-2016-00049) kutatási céljainak (farmakológiai fontosságú 'kismolekulák' szintézise és biokémiai, biológiai vizsgálata) megvalósításában vettek részt.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bálint E, Tripolszky A, Jablonkai E, Karaghiosoff K, Czugler M, Mucsi Z Kollár L, Pongrácz P, Keglevich G: Synthesis and use of α -aminophosphine oxides and N,N-bis(phosphinoylmethyl)amines – A study on the related ring platinum complexes. *J. Organomet. Chem.*, 801: 111-121 (2016)
2. Pongrácz P, Kollár L: Enantioselective Hydroformylation of 2- and 4-Substituted Styrenes with $\text{PtCl}_2[(R)\text{-BINAP}] + \text{SnCl}_2$ 'in situ' Catalyst: a Substituent Effect on the Reversal of Enantioselectivity. *J. Organomet. Chem.*, 824: 118-123 (2016)
3. Takács A, Marosvölgyi-Haskó D, Kabak-Solt Z, Damas L, Rodrigues MSF, Carrilho RMB, Pineiro M, Pereira MM, Kollár L: Functionalization of Indole at C-5 or C-7 via Palladium-Catalysed Double Carbonylation. A Facile Synthesis of Indole Ketocarboxamides and Carboxamide Dimers. *Tetrahedron*, 72: 247-256 (2016)
4. Szóke G, Takács A, Berente Z, Petz A, Kollár L: Synthesis of Amino-substituted Pyridylglyoxylamides via Palladium-Catalysed Aminocarbonylation. *Tetrahedron*, 72: 3063-3067 (2016)
5. Mikle G, Boros B, Kollár L: Synthesis of Bornene – 2,2'-Diamino-1,1'-binaphthalene Conjugates in Palladium-Catalysed Aminocarbonylation. *Tetrahedron: Asymm.*, 27: 377-383 (2016)
6. Pongrácz P, Kollár L, Mika L: A step towards hydroformylation under green conditions: platinum-catalysed enantioselective hydroformylation of styrene in gamma-valerolactone. *Green Chem.*, 18: 842-847 (2016)
7. Marosvölgyi-Haskó D, Lengyel B, Tukacs JM, Kollár L, Mika L: Application of γ -valerolactone as an alternative biomass-based medium for aminocarbonylation reactions. *ChemPlusChem*, 81: 1224–1229 (2016)
8. Czibulya Z, Horváth É, Nagymihály Z, Kollár L, Kunsági-Máté S: Competitive processes associated to the interaction of a cavitand derivative with caffeic acid. *Supramol. Chem.*, 28: 582-588 (2016)
9. Secenji G, Matisz G, Csók Z, Kollár L, Kunsági-Máté S: Temperature-dependent quenching of fluorescence of a cavitand derivative with copper ions. *Chem. Phys. Lett.*, 657: 60-64 (2016)

MTA-SZTE ANALÍZIS ÉS SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Totik Vilmos, az MTA rendes tagja
6725 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.
telefon: (62) 544 089; fax: (62) 544 548; e-mail: totik@math.u-szeged.hu
honlap: www.math.u-szeged.hu/MTA
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport a 2012–2016. közötti időszakra alap kutatások végzését tűzte ki célul az alábbi területeken: klasszikus analízis, ortogonális polinomok elmélete, approximációelmélet, valószínűségelmélet és matematikai statisztika, funkcionál-differenciálegyenletek és járványtani alkalmazásokkal bíró differenciálegyenletek. A csoport az elmúlt 5 évben 84 tudományos és 5 tudományt népszerűsítő publikációt jelentetett meg. Kiemelkedő eredményeket ért el többek közt a többváltozós polinom-approximáció problémájának teljes feloldásában, az ortogonális polinomok elméletében, új típusú polinom-egyenlőtlenségek igazolásában, Widom egy sejtésének tisztázásában és a vele kapcsolatos Csebisev-polinomok viselkedésének leírásában. A valószínűségelmélet területén a Breiman-féle önnormalizált összegek és az ahhoz kapcsolódó önnormalizált Lévy-folyamatok elméletében, különböző sztochasztikus folyamatok vizsgálatában és paramétereik becslésében, valamint a sztochasztikus geometria területén születtek fontos eredmények. Kidolgozásra került egy olyan, a fertőző betegségek térbeli terjedését vizsgáló modellcsalád, ahol a kapcsolódó differenciálegyenlet-rendszer késleltetést tartalmazó függvénye egy másik rendszer megoldásaként van definiálva. Az eredetileg kitűzött célok megvalósultak.

A kutatóhely 2016. évi főbb kutatási célkitűzései a következők voltak.

Klasszikus analízis: polinomok kritikus pontjainak lokalizálása, Christoffel-függvények aszimptotikája és az univerzalitási hipotézis igazolása Jacobi-típusú függvényekre, Bernstein-típusú egyenlőtlenségek bizonyítása racionális törtfüggvényekre, metrikus terek izometriáinak leírása ill. azok kapcsolata olyan (bijektív) transzformációkkal, amelyek egy adott távolságot mindkét irányban megőriznek.

Differenciálegyenletek: Funkcionál-differenciálegyenletek megoldásai periodikus pályáinak vizsgálata, a populációdinamikai hidrahatás megértése, késleltetett differenciálegyenletes modellek, pl. a Brunovský–Erdélyi–Walther-féle árfolyam-modell megoldásai aszimptotikus viselkedésének leírása.

Valószínűségszámítás: Paraméterbecslések folytonos idejű, egytípusos elágazó folyamatok esetén, INAR folyamatok vizsgálata.

Játékelmélet alkalmazása a viselkedéskológiában.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Valószínűségszámítás és statisztika

- Egy több mint 20 éve megfogalmazott, véletlen, egymásba skatulyázott konvex testek határértékéről szóló problémában érték el kutatócsoport tagok áttörő eredményeket.

- A valószínűségszámítás egyik legtöbbet vizsgált fejezetéhez sikerült új dolgot hozzátenni, amikor is a klasszikus, szentpétervári problémával kapcsolatos szentpétervári összegek határértékét sikerült meghatározni a maximum érték függvényében. Alkalmazásként bizonyos szemistabilis határeloszlások előállítása adódott végtelen összegként.

- Az [1] dolgozatban egytípusos, kritikus CBI-folyamatok esetében az utódeloszlás és a bevándorlás várható értékének legkisebb négyzetes becslése és a becslés határeloszlása szerepel. A becslés az utódeloszlás várható értéke esetén gyengén konzisztens.

Differenciálegyenletek

- Egy árfolyamváltozási modellként értelmezett késleltetett differenciálegyenlet megoldásának globális stabilitását tanulmányozza a [2] dolgozat. A fő eredmény elegendő feltételt ad az egyensúlyi helyzet globális aszimptotikus stabilitására.
- Lényeges előrehaladás történt olyan parciális differenciálegyenletek klasszikus megoldásaival kapcsolatban, amelyekben diszkrét, állapotfüggő késleltetés szerepel.
- A [3] publikáció leírja egy késleltetett differenciálegyenlet periodikus pályája instabil halmazának geometriai tulajdonságait, és ezáltal jellemez egy új típusú globális attraktort.

Klasszikus analízis

- A [4] dolgozat éles becslést ad meromorf függvény holomorf részének normájára a komplex sík végesen összefüggő tartományain kiterjesztve Gonchar és Grigorjan korábbi eredményeit. Azóta kiderült, hogy az eredmény fontos szerepet játszik racionális törtfüggvények deriváltjainak becslésénél.
- Polinomok kritikus pontjainak elhelyezkedése a [5] munka tárgya. Igazolásra került, hogy ha egy polinomsorozat tagjaira igaz, hogy majdnem minden zérushely egy adott konvex halmazban van, akkor a derivált sorozatban majdnem minden zérushely az adott konvex halmaz tetszőleges környezetébe tartozik. Ez a több mint 150 éves Gauss-Lucas tétel pontos aszimptotikus megfelelője.
- Az ún. univerzalitási hipotézist igazoltuk ortogonális polinomok Christoffel-Darboux magfüggvényeire majdnem mindenütt, feltéve, hogy a súlyfüggvény logaritmusuk lokálisan integrálható. Mint később kiderült, a fő eredmény lehetőséget ad arra, hogy gyenge feltétel mellett ortogonális polinomok oszcillációját és annak pontos nagyságát igazoljuk.
- Salem és Zygmund 1946-ban megmutatták, hogy egy bizonyos, Fourier-sorok konvergenciájával kapcsolatos integrál csak 0 kapacitású halmazon lehet végtelen. A [6] dolgozat pontosan leírja azon halmazokat, amelyeken az adott típusú integrálok végtelenek lehetnek (ezek a 0 kapacitású G_α típusú halmazok), ezáltal befejezve Salem és Zygmund kutatásait.
- A [7] dolgozat harmonikus mértékek (véletlen bolyongások találati valószínűségeinek) egy szubharmonikus tulajdonságát igazolja akárhány dimenzióban. Ez egy kétdimenziós korábbról ismert konvexitási tulajdonság megfelelője magasabb dimenzióban.
- [8] a szabályos (akárhány dimenziós) rácson végzett bolyongásról igazol egy konvexitási tulajdonságot. Az is megmutatásra kerül, hogy a diszkrét eredmény erősebb, mint ami a folytonos esetben ismert volt (ld. az előző pontban említett konvexitást), abból ez utóbbi levezethető.

A fentiekben vázoltak alap kutatások, de néhány részük – mint pl. a statisztikára, ill. a CBI folyamatra vonatkozóak – közel állnak az alkalmazásokhoz.

b) Tudomány és társadalom

A matematikatudományt népszerűsítendő, a kutatócsoport tagjai három előadást tartottak és két ismeretterjesztő cikket írtak (egyét lánctörtekről és egyet a transzfinit átmérőről), amelyek magasabb szintű matematikát ismertetnek középiskolások és tanáraik által is megérthető szinten. További információk: <http://www.math.u-szeged.hu/MTA/tudomanytars.html>

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport tagjai 4 konferencia szervezésében vettek részt (*Functional analysis meets linear algebra, Recent developments in non-linear preservers, 11th joint conference on mathematics and computer science, VII. Jaen meeting on approximation theory, computer aided geometric designs, numerical methods and applications*). A tagok 33-szor adtak elő szemináriumokon és konferenciákon. Az alábbi konferenciákon plenáris vagy meghívott előadást tartottak:

- *South East Analysis Meeting*, Tampa, USA (plenáris előadás)

- *Int. Workshop on Applied Analysis and Optimization 2016*, Taichung, Tajvan (meghívott előadás)
- *Operator Theory Workshop, Reading*, Egyesült Királyság (meghívott előadás)
- *Dynamics of Evolution Equations*, Marseille, Franciaország (meghívott előadás)
- *Dynamics of Delay Equations, Theory and Applications*, Berlin, Németország (meghívott előadás)
- *4th Dolomites Workshop on Constructive Approximation and Applications*, Alba di Canazei, Olaszország (meghívott előadás)
- *The 11th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications*, Orlando, USA (meghívott előadás)
- *Szeged School on Computational Tools for Delay Differential Equations*, Szeged (meghívott előadás)

Az előadások teljes listája itt található: <http://www.math.u-szeged.hu/MTA/eloadasok.html>

OTKA Műszaki és Természettudományi Kollégium elnöke, *NKFI Hivatal (OTKA) Matematikai, Fizikai, Kémiai és Mérnöki Tudományok Kollégiumának* titkára, Szele Tibor Emlékérem, TTIK Pro Facultate Díj és Moore Díj, a Magyar Érdemrend középkeresztje, Bolyai János Kutatási Ösztöndíj.

Az év során a csoport tagjai 3 külföldi kutatót láttak vendégül (<http://www.math.u-szeged.hu/MTA/nemzetkozikapcs.html>).

A csoport tagjai a Bolyai Intézettel való együttműködés keretében 12 elméleti és 17 gyakorlati kurzust tartottak. Vezetésükkel 1-1 BSc, illetve MSc diplomamunka született.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport nem pályázott más támogatásra. Korábban indult OTKA, NKFIH és ERC pályázatokban folyamatosan részt vettek kutatócsoporti tagok.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Barczy M, Körmendi K, Pap Gy: Statistical inference for critical continuous state and continuous time branching processes with immigration. *Metrika*, 79: 789-816 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/10140/>
2. Garab Á, Kovács V, Krisztin T: Global stability of a price model with multiple delays. *Discrete And Continuous Dynamical Systems*, 36 : 6855-6871 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/10139/>
3. Krisztin T, Vas G: The unstable set of a periodic orbit for delayed positive feedback. *J. Dynamics And Differential Equations*, 28:(3-4) 805-855 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/10166/>
4. Kalmykov S, Nagy B: Estimating the norm of the holomorphic component of a meromorphic function in a finitely connected domain. *J. Math. Sci.*, 217:(1) 81-90 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/10223/>
5. Totik V: The Gauss-Lucas theorem in an asymptotic sense. *Bull. London Math. Soc.*, 48: 848-854 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/10169/>
6. Danielyan A, Totik V: A converse to a theorem of Salem and Zygmund. *Bull. Sci. Math.*, 140 : 260-272 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/6317/>
7. Totik V: A subharmonicity property of harmonic measures. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 144: 2073-2079 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/6539/>
8. Nagy V G, Totik V: A convexity property of discrete random walks. *Comb., Probab. And Computing*, 25: 928-940 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/10242/>

MTA-SZTE BIOSZERVETLEN KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Kiss Tamás, a kémiai tudomány doktora
6720 Szeged, Dóm tér 7.

telefon: (62) 544 337; fax: (62) 544 340; e-mail: tkiss@chem.u-szeged.hu

honlap: <http://www2.sci.u-szeged.hu/bioinorg>

a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatások célja, hogy a biológiai rendszerek metalloenzim alkotó fémionjai, illetve terápiás célból hasznos fémkomplexek biológiai nedvekben és szövetekben szérumalkotókkal, DNS, RNS, membrán-fehérjék való kölcsönhatásainak vizsgálata révén tisztázzák azok transzport sajátosságait, biohosszúférhetőségüket, fiziológiailag aktív formájukat. Továbbá, a vizsgált hidrolázok szerkezeti és funkcionális modellezése végcélként lehetőséget teremthet mesterséges nukleázok előállítására is.

A neurodegeneratív betegségekben, a rák kezelésében és a Duchenne-féle izomdisztrofiában potenciálisan felhasználható fémionokra alapozott terápiás szereket állítottak elő és azok kölcsönhatásait vizsgálták a biológiai rendszerekben, az aktuális előfordulásuk a szervezetben való lehetséges átalakulásai és biológiai hatásuk megismerése céljából.

Ezzel a 2016. évre tervezett feladatok jó eredményességgel teljesültek.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Gyógyászati bioszervetlen kémia

A neurodegeneratív betegségekben potenciálisan felhasználható fémionokra alapozott terápiás szerek kifejlesztése

Az irodalomban meglehetősen szélsőséges értékek találhatóak a β -amiloid-Cu(II) komplex stabilitási állandójára. Hogy pontosabb állandóhoz jussanak, több különböző ligandummal, kiszorítós módszerrel, az egyensúlyt ESR módszerrel követve meghatározták a β -amiloid₁₋₁₆-Cu(II) komplex látszólagos stabilitási állandóját pH = 7,4-en. Ez $\log \beta = 9,77 \pm 0,22$ -nek adódott, ami jó egyezésben van a pH-metriás és ITC mérésekkel. (A mások által publikált direkt fluorimetriás mérések szolgáltatnak hibás eredményeket.)

Hasonló kiszorítós módszerrel, cinkon ligandumot, és fotometriás követést használva, a β -amiloid₁₋₁₆-Zn(II) látszólagos stabilitási állandóját is meghatározták, ez $\log \beta = 4,0 \pm 0,1$ -nek adódott, ami 0,5 log értékkel kisebb az irodalomban közölt adatoknál.

Két új, amidcsoportjának köszönhetően potenciálisan Cu(II) szelektív ligandumot terveztek, ebből a tridentát koordinációra képes vegyületet (L₁) előállították, és tanulmányozták Cu(II) és Zn(II) komplexeinek speciációját.

Rákellenes hatású fémkomplexek

A munkatervnek megfelelően részletes oldategyensúlyi méréseket végeztek különböző rákellenes fémkomplexek esetén, meghatározták a képződő komplexek oldatbeli stabilitását, összetételét és jellemezték kölcsönhatásukat humán szérum albuminnal, azzal a céllal, hogy összefüggéseket keressenek ezen tulajdonságok és a biológiai aktivitás között.

A klinikai fázis I-ben lévő két Ru(III) komplex (NKP1339/1019) humán szérum albuminnal való kölcsönhatásának vizsgálatának folytatásaként részletesen tanulmányozták néhány cisz/transz-[RuCl₄(1H-indazol)(NO)] típusú komplex és azok ozmium analógiájának kölcsönhatását szérumfehérjékkel. Az albumint találták a vér fő szállítófehérjének, a kötés helye és erőssége hasonló az NKP-1339/1019 komplexeknél találtakhoz.

Kétfogú (N,N) donoratomokat tartalmazó ligandumok [Ru(II)(2-fenoxi-etanol)(L)] típusú komplexeinek oldatstabilitását is jellemezték részletesen. A kapott nagy stabilitás ellenére azonban semleges/bázikus pH-tartományban elindul az arén-gyűrű leszakadása és a Ru(II) oxidálódása, mely viselkedés nagyban eltér a korábban vizsgált analóg Rh(III)(C₅Me₅) komplexeknél tapasztaltaktól.

A [Rh(III)(C₅Me₅)(H₂O)₃]²⁺ kation (S,O) donoratomokat tartalmazó tiomaltol ligandummal képzett félszendvics komplexeinek vizes oldatbeli egyensúlyi folyamatait tanulmányozták kloridionok jelenlétében és távollétében. Kiemelkedő stabilitású mono komplexek képződtek mind a kétféle közegben, de pH > 6 felett vegyes hidroxó oligomer részecskék jelentek meg. A biológiai hatásban fontos szerepe van a komplexek kloridion-affinitásának, ezért jellemezték a koordinált H₂O/klorido ligandum-cserefolyamat sebességét és mértékét is. A meghatározott egyensúlyi állandó alapján a tiomaltol komplexnek a kloridion-affinitása közepes, hasonló az analóg hidroxí-pironokhoz, ami kedvező a biológiai hatás szempontjából.

Fémionok és fémkomplexek katalitikus hatásán alapuló gyógmód genetikai hibák korrekciója révén

Megállapították, hogy a ColE7 nukleáz domén mutánsainak szerkezetét jelentősen befolyásolja azok kölcsönhatása az immunitásfehérjével, illetve a szubsztrát DNS-sel. A funkcionális szerkezet indukcióját CD spektroszkópiával tanulmányozták részletesen. E mutánsok indukált szerkezetének részletesebb tanulmányozásán keresztül az aktív központ finomszabályozása ismerhető meg. E célból fehérjekristályosítási kísérleteket kezdtek meg, melyekhez nagymennyiségű fehérjét tisztítottak. A cink-ujj fehérjékbe beépített szekvenciák Ni²⁺ ionok jelenlétében lejátszódó specifikus hasadása révén új típusú mesterséges nukleázok hozhatók létre. A cink-ujjat helyettesítő TALE fehérjék génjeinek beépítése a mesterséges nukleázokba nehézségekbe ütközött a TALE fehérjék nagy mérete, és többszörösen ismétlődő szekvenciája miatt.

Metalloenzimek szerkezeti és funkcionális modellezése, mesterséges enzimek kifejlesztése

Biomimetikus enzim modellek kifejlesztése tripodális metallopeptidek révén

Befejezték L¹ és L² ligandumok Cu(II), Zn(II), Mn(II) és Co(II) komplexeinek vizsgálatát. A Cu₃H₄(L¹)₂(ClO₄)₂·5H₂O röntgenkristallográfiás szerkezetvizsgálatából kiderítették, hogy a két külső rezet 5 nitrogén veszi körül négyzetes piramisos geometriai környezetben, ugyanakkor a középső rézhez a 4 deprotonált pirazol nitrogén kötődik tetraédes környezetben. Kimutatták, hogy a tetraédes telítetlen koordinációs környezetű réz(II) reaktivitásának köszönhetően a Cu₃H₃(L¹)₂ komplex jelentős pirokatechin oxidáz aktivitással rendelkezik. Újra előállították az L³ és L⁴ ligandumokat. Előállították mindkét ligandum réz(II) komplexét. Mindkét oligonukleáris komplex jelentős pirokatechin oxidáz aktivitását találták. Összehasonlították a *tach* és a *tren* 2- és 3-piridinnel képzett tripodális ligandumainak komplexképző sajátságait Cu(II), Zn(II) és Mn(II) ionokkal. Azt találták, hogy habár a *trenpyr* több N donoratommal és nagyobb konformációs flexibilitással rendelkezik mint a *tachpyr*, mégis utóbbi képez stabilabb komplexeket Cu(II) és Zn(II) ionokkal. Röntgenkristallográfiás módszerrel meghatározták az új *tren3pyr* ligandum Cu(II) komplexének szerkezetét. A kristály háromdimenziós polimer szerkezetű, melyben a Cu(II)/ *tren3pyr* arány 11/6. A réz(II) centrumok 3 féle teljesen eltérő geometriai környezetét találták a kialakult összetett szerkezetben.

Fémionszabályzó fehérjék modellvegyületei, új kutatási irány

Cirkuláris dikroizmus spektroszkópiával tanulmányozták a pH, illetve Ag(I), Hg(II), Zn(II) és Cd(II) ionok hatását a CueR fehérje másodlagos szerkezetére DNS jelen- és távollétében. Megállapították, hogy a pH ~ 8-nál α-hélixekben gazdag szerkezet pH ~ 6-ra β-redős szerkezetűvé alakul, azonban Ag(I) ionok képesek az átalakulást valamelyest gátolni. A

promóter DNS fehérjéhez kötődése konzerválja a CueR fehérje funkcionális, α -hélixben gazdag szerkezetét. Hg(II)ionokkal sikerült fehérje kristályokat előállítaniuk, melyek azonban egyelőre nem voltak alkalmasak röntgen-kristallográfiás vizsgálatokra. A Dans-(X)CXXC(X)-Trp összetételű peptidek fémionok által befolyásolt fluoreszcenciája kapcsán megállapították, hogy az intenzitás növekedését elsősorban a fémionok koordinációjához köthető CHEF effektus okozhatja, melyhez jelentősen hozzájárulhat a danzilcsoport abszorpciós sávjainak eltolódása is, és a valódi FRET hatás eléréséhez a fluorofór csoportokat mind a fémion kötőhelytől, mind egymástól távolabb kell elhelyezni a láncban. A DCXXCY összetételű hexapeptidet és arzénessavat tartalmazó rendszerben négy As-S kötést tartalmazó bisz-komplex képződését sikerült kimutatni.

b) Tudomány és társadalom

Eredményeiket igyekeznek a társadalom, tudomány iránt érdeklődő rétegei számára is megismerhetővé tenni. Például a Magyar Kémikusok Lapjában rendszeresen jelentkeznek kémiai népszerűsítő cikkekkel. A kutatócsoport egyik tagja aktív és meghatározó szerepet vállal az Magyar Kémikusok Egyesülete Facebook honlapjának megalkotásában és annak működtetésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Továbbra is kiemelkedik a bécsi Egyetemmel való kapcsolatuk. A kutatócsoportnak ez évben is több kétoldalú kutatási kapcsolata volt külföldi intézményekkel, így a Universität Wien-nel, és a Lengyel Tudományos Akadémia Biofizikai és Biokémiai Intézetével, valamint a University of Copenhagen-nel. A kölcsönös kutatócsere (2-2-1 ki- és beutazó kutatóhónap) jelentősen hozzájárult a kutatási eredményeik megvalósulásához.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A bécsi Egyetemmel az Osztrák-Magyar Ösztöndíj Alap, a varsói Biofizikai és Biokémiai Kutatóintézzel való együttműködést az MTA-PAN szerződés biztosította. A biomimetikus enzim modellek kifejlesztését célzó kutatásokat segíti és terjeszti ki az év folyamán megszervezett és elindult COST Akció program.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szorcsik A, Matyuska F, Benyei A, Nagy NV, Szilagyi RK, Gajda T: A novel 1,3,5-triaminocyclohexane-based tripodal ligand forms a unique tetra(pyrazolate)-bridged tricopper(II) core: solution equilibrium, structure and catecholase activity. Dalton Transactions, 45: 14998-15012 (2016) <http://real.mtak.hu/45590/>
2. Hackl CM, Legina MS, Pichler V, Schmidlehner M, Roller A, Dömötör O, Enyedy EA, Jakupec MA, Kandioller W, Keppler BK: Thiomaltol-based organometallic complexes with 1-methylimidazole as leaving group: synthesis, stability and biological behavior. Chemistry-A European Journal, 22: 17269-17281 (2016) <http://real.mtak.hu/43160/>
3. Nemeth E, Balogh RK, Borsos K, Czene A, Thulstrup PW, Gyurcsik B: Intrinsic protein disorder could be overlooked in cocrystallization conditions: An SRCD case study. Protein Science, 25: 1977-1988 (2016)

MTA–SZTE FOTOAKUSZTIKUS KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Szabó Gábor, az MTA rendes tagja
6720 Szeged, Dóm tér 9.
telefon: (62) 544 273; fax: (62) 544 658
e-mail: gszabo@physx.u-szeged.hu; honlap: www.fotoakusztika.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2013. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport 5 éves kutatási tervében a fotoakusztikus spektroszkópia felhasználásának alapvetően 3 részterületére koncentrál, melyek az aeroszolmérés, az atmoszféra/magasléggör vízgőz és teljes víztartalmának mérése és a kilélegzett gázok vizsgálatán alapuló diagnosztika.

A 2016-os év fő feladatai az alábbiak voltak:

- A korom részecske felületére kondenzálódó szerves burok fotoakusztikus jelre gyakorolt hatásának vizsgálata laboratóriumi és terepi körülmények között,
- Allergén pollen részecskék fotoakusztikus vizsgálata,
- Együttműködés az SZTE orvosi kutatócsoportjaival a klinikai célra fejlesztett fotoakusztikus mérőműszerekkel végzett vizsgálatok mérési protokolljainak kidolgozása, a mérések elvégzése és kiértékelése kapcsán,
- A fotoakusztikus vízgőz és teljes víztartalom mérő rendszer új változatának komplettírozása.

A kutatócsoport munkája az előzetes ütemtervnek megfelelően halad.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoport munkatársai két alkalommal folytattak mérési kampányt a MOL százhalmobattai motor-tesztpadján, ahol elvégezték öt különböző típusú üzemanyag-keverék kipufogó füst részecskéinek mennyiségi-, összetétel- és élettani hatás szempontú karakterizálását. Kimutatták, hogy a részecskék felületére kondenzálódó és potenciálisan egészségkárosító szerves anyag mennyisége a biodízel bekeverés hatására változik és ezek a változások fotoakusztikus módszerrel valós időben nyomon követhetők. A feltárt összefüggések újabb MOL együttműködés alapjául szolgálhatnak. A Szeged belvárosában végzett fotoakusztikus mérés során megállapították, hogy a légköri részecskék a rákondenzálódott szerves burok által előidézett abszorpciós növekménye napszakos ingadozást mutat. A fenti eredmény alapján a szálló por szennyezés klimatikus hatására vonatkozóan közvetlen következtetések vonhatók le, míg az egészségügyi hatásokkal kapcsolatban közvetett információhoz jutunk. A 2016-ra kitűzött kutatási célokon túlmenően a kutatócsoport az ásványi por részecskék vonatkozásában is tanulmányozta a szerves burok spektrális tulajdonságokra gyakorolt hatását. A fotoakusztikus abszorpcióméréseket több-hullámhosszú szórás mérésekkel egészítették ki, így lehetőség nyílt a komplett spektrális válasz meghatározására. Az így elért eredményeket bemutató cikk 2017-ben fog megjelenni. A két-hullámhosszú mérőműszert és annak termodenuder egységét a fent bemutatott mérések tapasztalatai alapján folyamatosan továbbfejlesztették. Ennek keretében kidolgoztak egy modellezési eljárást, mely lehetőséget biztosít a két-hullámhosszú rendszer optimális, azaz legnagyobb szelektivitást biztosító hullámhosszainak kiválasztására. A kidolgozott eljárás publikálása szintén 2017-ben fog megtörténni.

A kutatócsoport megállapította, hogy az ürömlévelű parlagfű pollenje megkülönböztethető egyéb, az ürömlévelű parlagfűvel azonos időben virágzó pázsitfűfélék pollenjétől szilárdtest fotoakusztikus spektroszkópiai mérésekkel. A mérések alapjául szolgálhatnak egy olyan fotoakusztikus elvű mérőrendszernek, amely hazánk egyik legelterjedtebb és veszélyesebb allergénje, az ürömlévelű parlagfű valós idejű, automatikus mérését tenné lehetővé.

Az SZTE Sebészeti Műtéttani Intézete számára olyan eszközt készítettek, amely különböző oldatok (pl. szervtartósító oldat) metánnal történő dúsítására alkalmas, ezáltal új kísérletes modellekben vizsgálható a metán protektív hatása iszkémia-reperfúziós károsodás esetén.

A vízgőz és teljes víztartalom mérő rendszert a korábbi mérések során szerzett tapasztalatok alapján újratervezték. A változtatásoknak két célja volt: több alkatrész esetén is kiderült, hogy kismértékű geometriai módosítással praktikusabb elrendezést lehet elérni, valamint több alkatrész, funkció (kamrafűtés, nyomásmérők, áramlásszabályozók stb.) esetén kisebb, könnyebb elemek kerültek beépítésre.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport munkatársai részt vettek a közreműködésükkel fejlesztett két-hullámhosszú aeroszol-mérő műszer bemutatásán a 2016 szeptemberében rendezett Európai Aeroszol Konferencián, amit jelentős nemzetközi érdeklődés övezett. A burokhátás in-situ mérésére optimalizált fotoakusztikus műszer a levegőminőség monitorozásának hasznos eszközévé válhat a jövőben, továbbá olyan információkat szolgáltat a légköri részecskék spektrális tulajdonságairól, melyek révén a klímamodellek aeroszolhoz köthető bizonytalansága csökkenthető. A fotoakusztikus vízgőzmérő fejlesztéséről szóló doktori disszertációjával a kutatócsoport egyik tagja elnyerte az SZTE Innovációs Díját, Leginnovatívabb PhD munka kategóriában. A kutatócsoport másik tagja elnyerte az Új Nemzeti Kiválóság Program ösztöndíját posztdoktori kategóriában.

A 2016-os évben a kutatócsoport kitüntetett figyelmet fordított a középiskolás diákok fizika iránti érdeklődésének felkeltésére, ápolására. Lehetőséget biztosítottak számukra, hogy valós projektekbe bekapcsolódva betekintést nyerjenek a fotoakusztikus laborokban zajló kutatásokba. Az SZTE TTIK Kutatóiskolája program keretében ismeretterjesztő előadást tartottak „*Lehallgatható*” közlekedési szennyezés, kémkedés a „*botrányos*” dízel-kibocsátás után címmel.

A *Fizika napja*, *Föld napja*, *Víz világnapja* rendezvényeken „élő könyvtárként” álltak rendelkezésre, bárki kérdezhetette őket kutatási területükről vagy egyéb, érdekes témákról.

A Kutatócsoport vezetője kilenc alkalommal, számos fórumon népszerűsítette kutatási területét. A kutatócsoport légköri vízgőz és aeroszol kutatásainak kapcsán két alkalommal adott interjút az MTV Kék Bolygó műsorában. Az M5TV Mindenki Akadémiája című műsorában a fotoakusztikus kutatások társadalmi relevanciájának bemutatását célzó előadást tartott *Emitto ergo sum? -Kibocsátunk tehát vagyunk* címmel.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Az emisszió bázisú üzemanyag fejlesztés kapcsán új kutatási területtel bővült a jelentős múltira visszatekintő együttműködés a *MOL Nyrt.*-vel. A kutatócsoport a *PICK Szeged Zrt.*-vel közösen megkezdte a fotoakusztikus műszer alkalmazhatóságának vizsgálatát a szalámi füstölési eljárás optimalizálására. Stratégiai megállapodás született a *Hobré Laser Technology Kft.*-vel, amely fotoakusztikus műszereket gyárt és fejleszt. Az *SCL Instrumentation Inc.* kanadai cég ultrafinom-PM készülék közös fejlesztése céljából kezdeményezett tárgyalásokat a kutatócsoporttal.

Már a két-hullámhosszú aeroszolmérő fejlesztésének kezdeti fázisában szakmai tanácsokkal látta el a kutatócsoportot az Európai Bizottság *JRC-Ispra Atmospheric Research Station* mérőállomása és a *Jülich Forschungszentrum* Energia- és Klímakutató Intézete, mely nemzetközi kutatóhelyek mérési kampányaiba a 2017-es évben a kutatócsoport maga is bekapcsolódik az általa fejlesztett mérőműszerrel.

A pollenek szilárdtest fotoakusztikus spektroszkópiai vizsgálatát a Nyugat-magyarországi Egyetem Mezőgazdaság- és Élelmiszertudományi Karának munkatársaival együttműködésben végezték el.

A kutatócsoport tagja a Magyar- és Európai Aeroszol Társaságnak, továbbá az *ACTRIS* (*European Research Infrastructure for the observation of Aerosol, Clouds, and Trace gases*) nemzetközi mérőhálózatnak.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai közreműködnek kettő, 2016-ban nyertes *Multimodális optikai nanoszkópia*, továbbá *Funkcionális felületeken alapuló intelligens anyagok-előállításától az alkalmazásokig* című GINOP pályázatok megvalósításában.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Ajtai T, Pintér M, Utry N, Kiss-Albert G, Gulyás G, Pusztai P, et al. (6, Szabó G, Bozóki Z): Characterisation of diesel particulate emission from engines using commercial diesel and biofuels. *Atmospheric Environment*, 134: 109-120 (2016)
2. Szabó A, Unterkofler K, Mochalski P, Jandacka M, Ruzsanyi V, Szabó G, et al. (4, Mohácsi Á): Modeling of breath methane concentration profiles during exercise on an ergometer. *Journal of Breath Research*, 10 (1): 1-20 (2016)
3. Filep Á, Fodor H G, Kun-Szabó F, Tiszlavicz L, Razga Z, Bozso G, et al. (3, Bozóki Z, Szabó G): Exposure to urban PM1 in rats: development of bronchial inflammation and airway hyperresponsiveness. *Respiratory Research*, 17 (1): 11 (2016)
4. Sun X, Ehrhardt M, Lotnyk M, Lorenz P, Thelander E W., Gerlach J, et al. (3, Smausz T): Crystallization of Ge₂Sb₂Te₅ thin films by nano- and femtosecond single laser pulse irradiation. *Scientific Reports*, 6: 1-8 (2016)
5. Smausz T, Csizmadia T, Tápai Cs, Kopniczky J, Oszkó A, Ehrhardt M, et al. (4): Study on the effect of ambient gas on nanostructure formation on metal surfaces during femtosecond laser ablation for fabrication of low-reflective surfaces. *Applied Surface Science*, 389: 1113–1119 (2016)
6. Metzinger A, Palásti D. J, Kovács-Széles É, Ajtai T, Bozóki Z, Kónya Z, et al. (1): Qualitative discrimination analysis of coals based on their laser-induced breakdown spectroscopy. *Energy and Fuels*, 30 (12): 10306-10313 (2016)

MTA-SZTE MESTERSÉGES INTELLIGENCIA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Csirik János, az MTA doktora
6720 Szeged, Tisza Lajos krt. 103.
telefon: (62) 544 126; fax: (62) 546 737; e-mail: csirik@inf.u-szeged.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A csoport ötéves kutatási tervében a gépi tanulás elméleti problémáinak vizsgálatát, illetve a gépi tanulási algoritmusok különböző gyakorlati területeken való alkalmazhatóságának vizsgálatát tűzte ki célul. Fő alkalmazási területeket a nyelv- és beszédtechnológia, az önszervező rendszerek és a szoftverfejlesztés képezik. A kutatási ciklus első négy évében a csoport több mint 130 cikket publikált a fenti kutatási témakörökben, ami 2016-ban további 35 publikációval, valamint hat nemzetközi szabadalommal bővült.

Az aktuális beszámolási évben a csoport új algoritmusok kifejlesztését és publikálását tűzte ki célul az alábbi területeken: magyar nyelvű morfológiai és szintaktikai elemzők, mély neuronhálós beszédfelismerés, online gépi tanulás, decentralizált adatfeldolgozás, szoftverminőség-metrikák.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Természetes nyelvi feldolgozás. 2016-ban a csoport munkatársai folytatták eddigi kutatásaikat a magyar nyelvi elemzők létrehozása és továbbfejlesztése terén, emellett különféle információkinyerési feladatokra nyújtott gyakorlatorientált megoldásokat fejlesztettek ki. A nyelvtechnológiai csoport 2016-ban végzett kutatásai egyfelől a magyar nyelvű morfológiai és szintaktikai elemzők továbbfejlesztését és nem sztenderd nyelvezetű szövegek feldolgozását tűzték ki célul. A magasabb szintű nyelvtechnológiai kutatás-fejlesztéshez elengedhetetlen a magyar nyelvű szövegek morfológiai és szintaktikai elemzése. A csoport által korábban létrehozott és folyamatosan fejlesztett magyarlanc nevű nyelvi elemző továbbfejlesztett változata képes arra, hogy a nemzetközi trendeket követő, úgynevezett univerzális morfológiai kódkészlet alapján elemezzen szövegeket. A többszavas kifejezések olyan lexikai egységek, melyek több szövegszóból állnak, azonban nyelvészeti szempontból sajátos viselkedést mutatnak. 2016-ban a csoport oroszlánrészt vállalt egy egységesített annotációs séma kidolgozásában az igei többszavas kifejezések annotálására, melynek segítségével folyamatban van egy többnyelvű, kézzel annotált korpusz építése nemzetközi együttműködésben. A bizonytalan szövegrészek megkülönböztetése a tényeket tartalmazó szövegrészekről elengedhetetlen az információkinyerésben és -visszakeresésben, a bizonytalanságot jelző nyelvi elemkészlet azonban tématerületenként változó lehet. A csoport kifejlesztett egy módszert a bizonytalanságot jelölő nyelvi elemek azonosítására közösségi médiából származó szövegeken. A nyelvtechnológiai csoport emellett szerepet vállalt a korai Alzheimer-kór felismerését célzó kutatásokban, annak nyelvtechnológiai hátterének kidolgozásával. 2016-ban a korábbi munkákat folytatva a páciensek beszédátíratáira, illetve az azokból kinyert morfológiai, szintaktikai és szemantikai jellemzőkre építve gépi tanulási módszereket adtak a páciens státuszának automatikus meghatározására.

Beszédfelismerés. A csoport kutatói 2016-ban egyrészt a mély neuronhálókra alapuló akusztikus modellek továbbfejlesztési lehetőségeit vizsgálták. Ehhez kapcsolódóan kifejlesztettek egy új beszélőadaptációs módszert, mely a mély neuronhálók többfeladatos (ún. multi-task) tanításán alapszik, és a modellek jóval gyorsabb adaptációját teszi lehetővé,

mint a korábbi megoldások. A neuronhálós beszédfelismerők újfajta tanítómódszereinek fejlesztése témakörében pedig új megoldást adtak az ún. szekvencia-diszkriminatív tanításra. Másik kutatási irányként a csoport dolgozói folytatták kutatásaikat a paralingvisztikai jelenségek automatikus felismerése terén is, új eredményeket publikálva a nevetések és az őszinteség beszédben való felismerése témakörében. Az előző években futó, Alzheimer-kór, illetve enyhe kognitív zavar felismerését célzó projekt több eredménye is ebben az évben ért be, több új publikációt is eredményezve e témakörben.

Mintafelismerés és gépi tanulás. A csoport kutatói a 2016-os év során kidolgozták a bandita problémák elosztott rendszerekre való adaptálását kontextusfüggő környezetben. A kidolgozott módszer egyúttal megoldja a hasonló preferenciát mutató egyedek (online) klaszterezésének problémáját is. Az új eredmény jelentősége, hogy személyre szabott ajánlásokat is lehetővé tesz, és így reális eszközt szolgáltat ajánlórendszerek számára elosztott rendszerekben, limitált kommunikációs környezetben (pl. mobilalkalmazás formájában). Folytatódott emellett a "belief revision" témában 2015-ben elkezdett kutatás a revíziós operátorok osztályainak karakterizálhatóságával kapcsolatban. A csoport kutatói a korábban kidolgozott véges modelleméleti alapú megközelítést alkalmazták egy Horn-formulák revíziójával kapcsolatos problémára. Delgrande és Peppas 2015-os eredményére támaszkodva a csoport kutatói megmutatták, hogy a Delgrande és Peppas tételében szereplő osztály nem karakterizálható véges sok posztulátummal, ami az általános és a Horn-revízió közti lényeges különbséget tár fel. 2016-ban emellett nagy hálózatok tulajdonságainak vizsgálatával is foglalkozott a csoport. A "betweenness centrality" egy csúcs központiságát abból a szempontból méri, hogy a csúcs hány legrövidebb úton van rajta. A csoport a csúcsok betweenness centrality profilját vizsgálta fák esetében, legrosszabb esetben és skálafüggetlen véletlen fák esetében. Végül pedig a 2016-os év során további előrelépéseket ért el a csoport az AUC (Area Under the ROC Curve) online optimalizálása terén is.

Önszervező rendszerek. A csoport kutatói 2016-ban az ún. "differential privacy" témakörében vizsgáloódtak. A differential privacy (differenciál adatvédelem) lényege, hogy a biztonságosan tárolt adatbázison kiszámolt lekérdezés végeredményéhez speciálisan megtervezett zajt adunk, és az így zajosított eredményt adjuk vissza. Ez a zaj olyan tulajdonságú, hogy bármely adatbázisrekord kicserélése esetén a visszatérési érték nagy valószínűséggel megegyezik a kicserélés előtti értékkel, így az egyedi rekordok hatását mossuk el. E témakörben a csoport javasolt egy új módszert, amely a sztochasztikus gradiens egy olyan "differentially private" verziója, amely nem a gradienshez ad zajt, hanem magához a példához. Ennek segítségével nagyobb pontosság érhető el hasonló védelem mellett. A csoport emellett jellemzőkinyerő algoritmusokat valósított meg elosztott módon, az eredmények a PDP 2016 konferencián kerültek bemutatásra. A csoport kutatói továbbá kifejlesztettek egy algoritmust, amely robosztus módon tud egyetlen véletlen sétát menedzselni, ami nehéz probléma, ha a hálózat megbízhatatlan. Erre azért van szükség, hogy a differentially private módszereket a gyakorlatban is alkalmazni lehessen, hiszen ott kritikus, hogy minden példát csak egyszer érintsünk meg.

Mesterséges intelligencia a szoftvermérnökségben. A csoport kutatóinak célja 2016-ban a tesztelés minőségének kutatása, illetve a forráskódban található refactoring átalakítások karbantarthatósággal való összefüggésének vizsgálata volt. A nagyméretű tesztrendszer minőségének metrikákkal való jellemzésére új irányvonalként a csoport mutációs tesztelési módszereket alkalmazott, azaz valós projektek kódjába injektált mutáns részeket, ezzel minősítve a tesztrendszert. A kutatás újdonsága, hogy sikerült összefüggéseket kimutatni a tesztlefedettség, tesztmutációk, tesztek felbonthatósága és a hibák előfordulása között. A csoport emellett vizsgálta az akadémiai és ipari jellegű tesztelés témájú konferenciák és

workshopok összetételét, összefüggéseket kimutatva az ipari és akadémiai jellegű események résztvevőivel kapcsolatban. A korábban kidolgozott tesztrendszer-minősítő módszer alkalmazását mélyebb elemzésekkel kiegészítve, a csoport elkészítette a WebKit böngészőmotor felmérését tesztgyediség és hatékonyság szempontjából. Az alapvető teszteléshez kapcsolódó mérési módszerek terén részletesen elemzés készült a bytekód és forráskód alapú módszerek hatásainak mértékéről. A refactoring átalakítások vizsgálatához a csoport először egy nagy adathalmazt gyűjtött össze különböző nyílt forrású rendszerek kódjaiból. Az adathalmazt különböző statisztikai és gépi tanulási módszerekkel vizsgálva a csoport kutatói megállapították, hogy a kevésbé karbantartható elemeket nagyobb valószínűséggel refaktorálják. Az eredményekből az is kiderült, hogy a kód mérete, komplexitása és csatlakozása a leginkább fontos a fejlesztők számára, amikor kód-refaktorálást hajtanak végre.

b) Tudomány és társadalom

A csoport kutatóinak az Alzheimer-kór automatikus felismerését célzó kutatásairól beszámolt az MTI, illetve számos napilap is. A Medical Tribune (medicalonline.hu) lapban "Beszédelemzés a kognitív zavar felismerésére" címmel az orvosi közösség számára jelent meg egy népszerűsítő írás a projektről. A csoport egy munkatársa a "Magyar Idők" című lap számára adott interjút "A sakk után a go is veszített" címmel, melyben a mesterséges intelligencia legújabb vívmányait népszerűsítette.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport egy kutatója közös kutatási projektet indított a klagenfurti Alpok-Adria Egyetem (Ausztria) egyik professzorával teszt és kód együttes evolúciója témában. A csoport egy másik kutatója új együttműködési kapcsolatot alakított ki az Oxford University és a Cambridge University kutatóival a kontextusfüggő elosztott banditák témakörében. A csoport kutatói szervezték a 2016-os Magyar Számítógépes Nyelvészeti Konferenciát. A csoport három kutatója vesz részt az SZTE TTIK Informatika Doktori Iskolájának tevékenységében témavezetőként, illetve előadóként.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport egy kutatója "Forráskód és tesztadatok bányászata a szoftverevolúció támogatására" címmel az Osztrák-Magyar Akció Alapítványnál 4160 eurós támogatást nyert el az osztrák partnerrel való közös kutatásra.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Hegedűs I, Berta Á, Kocsis L, Benczúr A, Jelasy M: Robust Decentralized Low-Rank Matrix Decomposition. *Acm Transactions on Intelligent Systems and Technology*, (7):4, paper 62, 24 (2016) <http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/5773/>
2. Gosztolya G, Beke A, Neuberger T, Tóth L: Laughter Classification Using Deep Rectifier Neural Networks with a Minimal Feature Subset. *Archives of Acoustics*, 41:(4) 669-682 (2016) <http://dx.doi.org/10.1515/aoa-2016-0064>
3. Bánréti Z, Hoffmann I, Vincze V: Recursive Subsystems in Aphasia and Alzheimer's Disease: Case Studies in Syntax and Theory of Mind. *Frontiers In Psychology*, 7: paper 405, 21 (2016) <http://http://publicatio.bibl.u-szeged.hu/7565/>

MTA-SZTE REAKCIÓKINETIKAI ÉS FELÜLETKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Kónya Zoltán, az MTA doktora

6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

telefon: (62) 544 620; fax: (62) 544 619; e-mail: konya@chem.u-szeged.hu

a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 07. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport célja az alacsony dimenziójú (0D, 1D és 2D) anyagok tömbi tartományban nem tapasztalható tulajdonságainak a felderítése és kiaknázása. Tanulmányozzák olyan felületi folyamatok/reakciók elemi lépéseit, melyeknek a gyakorlatban alkalmazható nanotechnológiai eljárásokban, valamint az energetika és a környezetvédelem terén lehet jelentős szerepük. A 2016. év fő célja az összetett nanoszerkezetek – mint fém/titanát, fém/TiO₂, fém/grafén, fém/fém, fém/grafén/fém, fém/bórnitrid, fém/bórnitrid/fém – felületi tulajdonságainak tanulmányozása volt.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Mínthogy a drága platinafém katalizátorok számos reakcióban nem helyettesíthetők más fémekkel, kiemelkedő fontosságú a maximális, atomi diszperzitású rétegeiknek a tanulmányozása. A Mo(110) felületen egyatomos rétegvastagságú, Nishiyama-Wassermann (NW) struktúrájú Rh-réteg geometriai és elektromos jellemzését sűrűségfüggő elméleti (DFT) számításokkal végezték el. Azt találták, hogy a NW rétegben a Rh atomok a [001] irányban hullámos struktúrát mutatnak, amit a Mo(110) szubsztrát [110] irányában 0,26 Å, a [110] irányában pedig 0,10 Å periodicitás ír le. Megkülönböztették a Rh-filmben működő "strain" és "ligand" hatásokat, melyeket a teljes d sáv állapotsűrűsége (DOS) átlagos értékének (d-band center) rendre 0,11 eV-al, ill. 0,18 eV-al az alacsonyabb energiák felé való eltolódása kísér. Ez a lefelé tolódás előrevetítette a felület CO molekula iránti reaktivitásának a csökkenését, amit a CO "on-top", "bridge" és "hollow" adszorpciós centrumokra vonatkozó, részletes számításokkal nyert kötésienergia értékekkel igazoltak.

Cérium-dioxid és alumíniumoxid hordozókon vizsgálták a katalízisben fontos Co nanorészecskék morfológiáját és felületkémiai sajátosságait elektron- és ionspektroszkópiai módszerekkel. Az oxidhordozók természetét és kis mennyiségű Rh promotor szerepét vizsgálták a Co-tartalmú katalizátorok hatásában az etanolnak vízzel való reakciójában. Hőkezelés hatására jelentős mértékű Rh részecskeméret növekedést tapasztaltak. Megállapították, hogy a cérium-dioxid mobilis oxigénje jelentősen befolyásolja a hordozott fém oxidációs állapotát. A Co beoldódását a cérium-dioxidba a Rh jelentősen inhibálta. A fém állapotban a felületen lévő Co és Rh centrumok felelősek a nagy katalitikus aktivitásért.

A titanát nanocsőbe beépített kisméretű Au és Rh nanorészecskék jelentős fotokatalitikus hatást fejtettek ki a metán átalakulásában. A részecskeméret és a fém elektronszerkezete határozza meg az aktivitást. Átfogó összefoglalóban adtak számot a fémmel módosított titanátok előállításáról, szerkezetéről valamint katalitikus és fotokatalitikus felhasználásukról.

Ultranagy-vákuum tartományban jól definiált egykristály felületeken létrehozott 2D filmek (h-BN) felületén kialakított fém nanoklaszterek morfológiai és katalitikus tulajdonságait vizsgálták. A nanoszerkezet és annak termikus stabilitása vonatkozásában részletes pásztázó alagútmikroszkópiai (STM), röntgen fotoelektron spektroszkópiai (XPS) és kis energiájú

ionszórásos spektroszkópiai (LEIS) méréseket végeztek. A kísérleteket azon távlati cél vezérelte, hogy szabályozott méretű és elrendezésű arany nanoklasztereket hozzanak létre a Rh(111) egykristályon kialakított bór-nitrid nanoháló pórusaiban. A továbbiakban az így jellemzett anyagi rendszereken vizsgáltak katalitikus reakciókat elektronspektroszkópiai (HREELS, AES) és hőmérséklet-programozott deszorpció (TPD) módszerekkel.

Morfológiai szempontból a h-BN filmmel teljesen borított Rh(111) felületen az Au nukleációját szobahőmérsékleten vizsgálva megállapították, hogy a kb. 3 nm periódusú és hexagonális nanopórusos h-BN háló templát-hatást fejt ki, de az nem érhető el, hogy minden pórus egyenletesen legyen betöltve Au részecskékkel. Az Au borítottság növelésével már 10-20 % monoréteg borítottság esetén megindul a részecskék erőteljes 3D növekedése, s ez nem egyenletesen megy végbe, azaz a részecskeméret-eloszlás jelentősen kiszélesedik. Ennek ellenére sikerült meghatározniuk az átlagos részecskeméret és a borítottság összefüggését:

Részletes vizsgálatokat végeztek az Au részecskék termikus stabilitására vonatkozólag, amelynek során három párhuzamos folyamatot figyeltek: a részecskék szinterelődése, a hőkezelés hatására bekövetkező deszorpció (Au), valamint a h-BN réteg alá történő interkaláció (amelyet még felületi ötvöződés is kísérhet). Azt tapasztalták, hogy bár a kombinált XPS-LEIS-STM módszerek elvileg választ adhatnának a részfolyamatok arányaira, az eddigi eredmények nem egyértelműek. Vizsgálataik egyik kiemelkedő eredményének mondható, hogy az Au Rh-mal történő ötvöződését, ill. az egyes komponensek eloszlását a h-BN fedő film pórus szerkezete érzékenyen mutatja. Kiemelendő, hogy ezen munkájukkal az elsők között vizsgálták a h-BN réteget kétfémes felületi ötvözeten, illetve a pórus szerkezet befolyásolhatóságát felületi ötvözéssel.

Katalitikus vizsgálataik során a h-BN/Rh(111) felületen létrehozott Au nanorészecskék hatását vizsgálták az etanol adszorpciójára. A bór-nitrid réteg templátként való alkalmazásával eredményesen hoztak létre kontrollált méretű (~2,1 nm átmérőjű) arany nanorészecskéket. A kialakított nanoklaszterek méret- és borítottság-függését tanulmányozták az etanol adszorpciójára és reakcióira a vizsgált felületi rétegben. Megfigyelték, hogy az inert bór-nitrid felülethez képest az arany borítottság növelésével kezdetben az etanol stabilizációja történik, ellenben ez a hatás az arany borítottság jelentős növelésével (a teljes BN réteg befedésével) már nem meghatározó. Míg a tömbi arany kevésbé reaktív, az Au nanorészecskék katalitikus aktivitást mutatnak. Ez az aktivitás nem csak az etanol stabilizálásában, de annak katalitikus átalakításában is szerepet játszott. HREELS, illetve TPD vizsgálatokkal kimutatták, hogy a felületen adszorbeálódott etanoltól az arany borítottság függvényében acetaldehid és hidrogén keletkezik. Az etanol disszociációja csak egy jól meghatározott mérettartományban (<MR) volt detektálható. Egyéb termék kialakulása az Au/h-BN/Rh(111) rendszerben nem volt kimutatható; ez alapján elmondható, hogy a kialakított nanoszerkezet kiemelkedő szelektivitást mutat a CO-mentes hidrogén előállításának irányában.

Az Erlangen-Nürnbergi Egyetemmel együttműködésben nagynyomású XPS módszer segítségével kimutatták, hogy a szénmonoxid oxidációjában a Pt(111) felület fémes, és nem oxidált állapotban a legaktívabb ~1 mbar nyomásig.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai részt vettek számos kari és egyetemi rendezvényen, ahol bemutatták a tevékenységüket, közelebb hozva azt az embereket érintő mindennapi problémákhoz.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport tagjai számos hazai és külföldi egyetemmel állnak szoros munkakapcsolatban, melyekből 2016-ban is közös publikációk születtek.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai számos projektben vesznek részt, melyekben a Szegedi Tudományegyetem a fő pályázó (pl. GINOP, EFOP pályázatok), erősítve ezzel betagozódásukat az egyetem oktatási és szakmai munkájába. A csoport tagjai OTKA-pályázatok témavezetői/résztvevői (NK106234, K120115) és részt vesznek a CM1301, CM1104 és CA 15107 COST programokban.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kukovecz Á, Kordás K, Kiss J, Kónya Z: Atomic Scale Characterization and Surface Chemistry of Metal Modified Titanate Nanotubes and Nanowires. Surface Science Reports, 71:(3) 473-546 (2016)
2. Asres GA, Dombovari A, Sipola T, Puskas R, Kukovecz A, Kónya Z, Popov A, Lin J-F, Lorite GS, Mohl M, Toth G, Spetz AL, Kordas K: A novel WS₂ nanowire-nanoflake hybrid material synthesized from WO₃ nanowires in sulfur vapor. Scientific Reports, 6: 25610 (2016)
3. Kovács D, Igaz N, Keskeny C, Bélteky P, Tóth T, Gáspár R, Madarász D, Rázga Z, Kónya Z, Boros IM, Kiricsi M: Silver nanoparticles defeat p53-positive and p53-negative osteosarcoma cells by triggering mitochondrial stress and apoptosis. Scientific Reports, 6: Paper 27902 (2016)
4. Krick Calderón S, Grabau M, Óvári L, Kress B, Steinrück HP, Papp C: CO oxidation on Pt(111) at near ambient pressures. Journal of Chemical Physics, 144: Paper 044706. 9 p. (2016)
5. László B, Baán K, Varga E, Oszkó A, Erdőhelyi A, Kónya Z, Kiss J: Photo-induced reactions in the CO₂-methane system on titanate nanotubes modified with Au and Rh nanoparticles. Applied Catalysis B-Env., 199:(15) 473-484 (2016)
6. Mutombo P, Gubó R, Berkó A: Interaction of Gold with a Pinwheel TiO similar to 1.2 Film Formed on Rh(111) Facet: STM and DFT Studies. Journal of Physical Chemistry C, 120:(23) 12917-12923 (2016)
7. Óvári L, Berkó A, Vári G, Gubó R, Farkas AP, Kónya Z: The growth and thermal properties of Au deposited on Rh(111): formation of ordered surface alloy. Physical Chemistry Chemical Physics, 18: 25230-25240 (2016)
8. Varga E, Pusztai P, Oszkó A, Baán K, Erdőhelyi A, Kónya Z, Kiss J: Stability and Temperature-Induced Agglomeration of Rh Nanoparticles Supported by CeO₂. Langmuir, 32:(11) 2761-2770 (2016)
9. Palotás K, Bakó I, Bugyi L: Structural, electronic and adsorption properties of Rh(111)/Mo(110) bimetallic catalyst: A DFT study. Applied Surface Science, 389: 1094-1103 (2016)

MTA-SZTE SZTEREOKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Fülöp Ferenc, az MTA rendes tagja
6720 Szeged, Eötvös u. 6.
telefon: (62) 545 564; fax: (62) 545 705; e-mail: fulop@pharm.u-szeged.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Kutatócsoport öt évre megfogalmazott feladatai közé tartoznak: (i) változatosan szubsztituált ciklusos β -aminosav származékok sztereoselektív szintézise, (ii) bioaktív anyagok és prekursoraik enzim-katalizált szintézisei, (iii) heterogén katalitikus enantioszelektív hidrogénezések, továbbá (iv) új szén–szén és szén–heteroatom kötések kialakítása organokatalitikus és átmenetifém-katalizált reakciók által szakaszos és folyamatos áramú üzemmódban. Munkájuk során összetett aszimmetrikus szintézisek kidolgozását, a részlépések optimalizációját és a jelenlegi módszerek fenntarthatóságának és környezettudatosságának növelését tűzték ki célul. A 2016-os évben telítetlen biciklusos β -laktámokból szelektív és sztereokontrollált technikákkal funkcionizált fluortartalmú építőelemeket szintetizáltak. Deutérium jelzett antidiabetikus hatású vegyületeket állítottak elő különböző kapcsolási reakciók és áramlásos deuterálás segítségével. Új enzim-katalitikus stratégiát dolgoztak ki értékes királis anyagok szintézisére és folytattak az aszimmetrikus aldol reakciók tanulmányozást a reakciók sztereokémiájának és szelektivitásának finomhangolása céljából. Munkájuk során különös hangsúlyt fektettek áramlásos kémiai módszerek fejlesztésre a kibővült kémiai paraméterter (magas nyomás és hőmérséklet) és a precíz reakciókontroll kiaknázásával.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A 2016-os év során a kutatócsoport a klasszikus gyógyszerkémia, a heterogén katalízis, az enzim katalízis és az áramlásos kémia területén ért el kiemelkedő eredményeket.

Bioaktív kalkon származékok hármas kötésű analógjait állították elő Sonogashira reakcióval, majd a hármas kötés szelektív deuterálásával az antidiabetikus hatású vegyületek deutérium jelzett analógjait nyerték. A kísérleteket áramlásos hidrogénező reaktorban hajtottuk végre, és a reakció körülmények finomhangolásával érték el magas kemoszelektivitást. In line NMR mérések útján vizsgáltuk a deutérium jelzett kalkonok és a jelöletlen vegyületek kinetikai profilját. Továbbá, vizsgálták az előállított anyagok biológiai aktivitását is. Korábban a kalkonok kettős kötésének deuterálásával dideuterokalkonok kemoszelektív szintézisét hajtották végre áramlásos hidrogénező reaktorban. Az előállított kalkon származékok nemzetközi szabadalmi bejelentés alapját képezik.

Királis információkban gazdag functionalizált cikloalkánok szubsztrátfüggő fluorozásait hajtották végre. A szintézis kulcslépései a telítetlen biciklusos β -laktám szelektív epoxidálást, oxirányítását követő hidroxifluor cserével történő fluorozások voltak. Új, szelektív szintézismódszert dolgoztak ki a fluoratomnak szerves molekulákba történő bevitelére. A szintézis kulcslépései a ciklusos β -aminosavak szelektív epoxidálását követő fluoriddal történő szelektív oxirányítása voltak Deoxofluor illetve XtalFluor reagensekkel. Kemoszelektív fluorozásokkal diformil-szubsztituált cikloalkánok átalakításaival fluorozott aliciklusok illetve heterociklusok szintéziseit valósították meg. Trifluorometilcsoportot tartalmazó piperidin- illetve azepánvázis β -aminosavszármazékok sztereokontrollált szintéziseit hajtották végre. A szintézisút kulcslépései a telítetlen ciklusos β -

aminosavszármazékok oxidatív gyűrűnyitását követő redukív gyűrűzárás voltak. Az eljárást sikeresen kiterjesztették mono- illetve difluorozott származékok előállítására is.

Új enzimes-katalitikus stratégiát dolgoztak ki tetrahydro- β -karbolin vázas vegyületek rezolválására. Az optimalizáció során a legjobb eredményeket szilárd hordozós *Candida antarctica* B lipázzal (CAL-B) érték el áramlásos reaktorban. A lépték-növelt kísérleteket szakaszos üzemben hajtották végre. Új enzimes szintézis módszereket fejlesztettek különböző gyógyszer-perkurzorok (pl. Taxol oldallánc) szintézisére szilárd hordozós CAL-B alkalmazásával.

Grafitoxid illetve grafénoxid hordozón l-prolint immobilizáltak, és a szilárd hordozós organokatalizátor alkalmazhatóságát aszimmetrikus aldol reakciók során vizsgálták. Noha az aminosav részleges lemosódása volt megfigyelhető, az elért eredmények biztató kiindulási pontot jelentenek különleges tulajdonságú szén-alapú anyagok alkalmazásában heterogén organokatalizátorok fejlesztése során. Kifejlesztettek egy újfajta kaszkád reakcióit Pd/Al₂O₃ katalizátor alkalmazásával, amely során allilalkohol fém-katalizált izomerizációját aldol kondenzáció követte. Az alkalmazott katalizátor bifunkciónak bizonyult, ugyanis az aldol reakció lejátszódását a hordozó bázikus tulajdonsága segítette elő. Részletesen tanulmányozták vizes közegű aldol reakciók enantiszелеktivitásának befolyásolhatóságát a közeg pH-jának függvényében.

Összefoglaló tanulmányokat közöltek az áramlásos kémia modern szintetikus alkalmazási lehetőségeivel kapcsolatban, illetve összeállítottak egy átfogó ismertetőt gyűrűs β -aminosav származékok színézismódszereivel és alkalmazási lehetőségeivel kapcsolatban.

b) Tudomány és társadalom

Az előállított új vegyületek a szintetikus szerves vegyiparban fontos multifunkciós királis anyagok előállításában játszhatnak szerepet, továbbá a kidolgozott áramlásos és klasszikus szintetikus módszerek a gyógyszeripar érdeklődését is felkelthetik.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Sikeres együttműködés folyik a tajvani Kaohsiung Orvosi Egyetemen kutatócsoportjával, a spanyol Valenciai Egyetemen kutatócsoportjával, a finn Turku Egyetemen kutatócsoportjával. A közös munkákból idén is számos publikáció született. A kutatócsoport aktívan részt vett az SZTE Gyógyszerkémiai és a Szerves Kémiai Tanszékeken folyó oktató munkában, projektmunkák irányításában, valamint a doktori képzésben.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A GINOP-2.3.2-15-2016-00012 és a GINOP-2.3.2-15-2016-00012 nyertes pályázatok koordinátora a kutatócsoport vezetője. Az MTA Prémium Posztdoktori Ösztöndíjat nyert a csoport egyik munkatársa. A csoport kutatásait az Országos Tudományos Kutatási Alap támogatta (K 119282).

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Chang F-R, Wu Y-C, Hsieh T-J, Hsieh C-T, Fülöp F, Ötvös S B: Composition for treating metabolic syndrome and a preparation method thereof. US 20160214918 A1 (2016)

2. Ötvös SB, Hsieh C-T, Wu Y-C, Li J-H, Chang F-R, Fülöp F: Continuous-flow synthesis of deuterium-labeled antidiabetic chalcones: Studies towards the selective deuteration of the alkynone core. *Molecules*, 21: 318 (2016)
3. Mándity I M, Ötvös S B, Szöllösi G, Fülöp F: Harnessing the versatility of continuous-flow processes: Selective and efficient reactions. *Chem. Rec.*, 16: 1018–1033 (2016)
4. Kiss L, Nonn M, Sillanpaa R, Haukka M, Fustero S, Fülöp F: Chemoselective, substrate-directed fluorination of functionalized cyclopentane beta-amino acids. *Chem. Asian J.*, 11:3376–3381 (2016)
5. Kiss L, Remete AM, Nonn M, Fustero S, Sillanpaa R, Fülöp F: Substrate-dependent fluorinations of highly functionalized cycloalkanes. *Tetrahedron*, 72: 781–787 (2016)
6. Remete AM, Nonn M, Fustero S, Fülöp F, Kiss L: A Stereocontrolled Protocol to Highly Functionalized Fluorinated Scaffolds through a Fluoride Opening of Oxiranes. *Molecules*, 21: 1943 (2016)
7. Ábrahám R A, Kiss L, Barrio P, Fülöp F: Synthesis of fluorinated piperidine and azepane β -amino acid derivatives. *Tetrahedron*, 72: 7526–7535 (2016)
8. Megyesi R, Forró E, Fülöp F: Enzymatic Strategy for the Resolution of New 1-Hydroxymethyl Tetrahydro- β -carboline Derivatives in Batch and Continuous-Flow Systems. *ChemistryOpen*, 5: 254–260 (2016)
9. Forró E, Galla Z, Fülöp F: The *N*-hydroxymethyl group as a traceless activating group for the Cal-B-catalysed ring cleavage of β -lactams: A type of two-step cascade reaction. *Eur. J. Org. Chem.*, 2647–2652 (2016)
10. Galla Z, Beke F, Forró E, Fülöp F: Enantioselective hydrolysis of 3,4-disubstituted β -lactams. An efficient enzymatic method for the preparation of a key Taxol side-chain intermediate. *J. Mol. Catal. B: Enzymatic*, 123: 107–112 (2016)
11. Galla Z, Forró E, Fülöp F: Enhanced enzymatic synthesis of the enantiopure intermediate for the blockbuster drug intermediate abacavir through a two-step enzymatic cascade reaction. *Tetrahedron: Asymmetry*, 27: 729–731 (2016)
12. Forró E, Fülöp F: Cispentacin - Enzymatic Highlights of its 25-Year History Mini-Rev. *Org. Chem.*, 13: 219–226 (2016)
13. Szóri K, Réti B, Szöllösi G, Hernádi K, Bartók M: Comparative study of graphite-oxide and graphene-oxide supported proline organocatalysts in asymmetric aldol addition. *Top. Catal.*, 59: 1227–1236 (2016)
14. Gurka AA, Szóri K, Bartók M, London G: Dual stereocontrol in aldol reactions catalysed by hydroxyproline derivatives in the presence of large amount of water. *Tetrahedron: Asymmetry*, 27: 936–942 (2016)
15. Zsolnai D, Mayer P, Szóri K, London G: Pd/Al₂O₃-catalysed redox isomerisation of allyl alcohol: Application in aldol condensation and oxidative heterocyclization reactions. *Catal. Sci. Technol.*, 6: 3814–3820 (2016)

MTA-SZTE SZUPRAMOLEKULÁRIS ÉS NANOSZERKEZETŰ ANYAGOK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Dékány Imre, az MTA rendes tagja; 2016. dec.1-től Tóth Gábor, az MTA doktora
6720 Szeged, Dóm tér 8.

telefon: (62) 545 139; fax: (62) 545 971; e-mail: toth.gabor@med.u-szeged.hu

a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2012. 01. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport 5 éves kutatási tervének legfőbb koncepciója az Alzheimer-kór kialakulásában feltehetően döntő szerepet játszó béta-amiloid 1-42 peptid konformáció változásának és aggregációjának tanulmányozása fizikai-kémia mérési módszerekkel. Fehérjék konformációjának és aggregációjának nyomon követése plazmonikus (Au, Ag) tulajdonságú nanorészecskék felhasználásával. Biológiai membránok modellezése (2D), a membrán proteinek gyógyszerhatóanyagokkal való kölcsönhatásának vizsgálata. Gyógyszerhatóanyagok nanokapszulázása.

Eddig sikeresen megvalósult: a β -amiloid (A β) peptid konfiguráció változásainak és az aggregáció összefüggésének vizsgálata. Proteom változások vizsgálata az Alzheimer-kór egyik egérmódeljén. Nanokompozitok előállítás, azok *in vivo* tesztelése modell BBB membránon. Több nanokompozit sikeres szintézise, a BSA/KYNA mag-héj kompozit munkából szabadalom bejegyzése. Plazmonikus és fluoreszcens nanohibrid rendszerek vizsgálata, azok lehetséges alkalmazása fluoreszcens jelölésre. Fehérje-ligandum kölcsönhatások jellemzése SPR spektroszkópiás vizsgálatokkal.

A beszámolóév legfontosabb feladatai: Neuroprotektív peptidmimetikum hatásának vizsgálata az intracelluláris A β toxikus hatásainak kivédésére. Kolloid gyógyszerhordozók (fehérje, liposzóma, nioszóma, polimer *stb.* alapú) fejlesztése, azok fluoreszcens jelölése arany/biomlekula nanohibrid rendszerek alkalmazásával.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Neuroprotektív peptidmimetikum hatása az intracelluláris A β toxikus hatásainak kivédésére
Szilárd fázisú szintézissel, illetve natív kémiai ligációval hét sejt penetráló (CPP) ciklo-penetratint állítottunk elő arra a célra, hogy a csupa D-aminosavból álló, neuroprotektív gyógyszerjelölt vegyületünket bevigye a sejtbe. A nyolc aminosavból felépülő ciklopeptidek szabad oldallánc funkciói lehetővé teszik, hogy a CPP-hez egyidejűleg hozzákapsoljuk a gyógyszerjelölt molekulát és fluoreszcens jelzéssel lássuk el. Így nyomon követhető a CPP-gyógyszer konjugátum belépése a sejtbe, illetve felhalmozódása a sejten belül.

Amiloid- β 1-42 peptid monomer és dimer rendszerének számítógépes modellezése

REMD számítást végeztek az A β 1-42 monomer és dimer rendszerére. A konformációs terek vizsgálata a peptid rendezetlen karakterét erősítette meg. A két rendszer összehasonlításakor azt tapasztalták, hogy a monomer esetben a lánc kezdőrégiójánál (5-ös pozícióban levő Arg) kialakuló kölcsönhatások gyakorisága csökkent a dimer esetben. A szimulációs számítások azt is kimutatták, hogy a dimer rendszer két láncát elsősorban a hidrofób régiók összetapadása tartja össze, továbbá csökken az egyes szálak kompaktsága is.

Önszerveződő rendszerek elméleti vizsgálata

Halogén kötést tartalmazó lineáris és zárt, gyűrűszerű struktúrák elméleti vizsgálata során azt tapasztalták, hogy a korábban vizsgált hidrogén hidas rendszerekhez hasonlóan, egy extra stabilizáló hatás jelenik meg a halogén kötések speciális elrendeződése esetén. Az extra hatás mértéke erősen függött a kötésben részt vevő halogén elemektől. Bizonyos esetekben (főként

jód jelenlétében) kimutatták, hogy az extra hatás nagysága jelentősen meg tudja haladni a hidrogén kötött rendszerekben talált értéket.

Receptor modell fehérjék szintézise

A GLP1-R 28-131 doménjének natív kémiai ligációval történő szintézisével kapcsolatos, korábban elkezdett munkájukat sikeresen befejezték. Jelenleg az elkészült lineáris fehérje megfelelő diszulfidhid mintázatának kiépítésén dolgoznak.

Az AMPA receptor domén szintézisét kissé rövidített formában szintén sikeresen végrehajtották. Ez a ligáció miatt egy Ala-Cys cserét tartalmaz. Jelenleg ennek a ciszteinnek a deszulfurizációján dolgoznak.

Receptor-ligandum valamint fehérje-gyógyszer molekula kölcsönhatások kvantitatív, kinetikai és termodinamikai jellemzése kétdimenziós mérés technikák felhasználásával

A korábban, 2015-ben már vizsgált AMPA receptort modellező peptidfragmens (GluR1₂₇₀₋₃₀₀) és kinurénsav (KYNA) közötti kölcsönhatás részletes és kvantitatív jellemzésére irányuló vizsgálatok során a regisztrált SPR szenzorgramok kinetikai modellekkel történő illesztésére alkalmazható eljárást dolgoztak ki a kutatócsoport munkatársai. Az eljárás során a bimolekulás reakcióban létrejövő kötési komplex koncentrációjának változását leíró pszeudo elsőrendű integrált sebességi egyenlet kísérleti szenzorgramokra történő illesztése révén határozható meg sebességi állandó. Diszkrét illesztés esetében a kalkulált látszólagos sebességi állandó koncentrációfüggése alapján, míg globális illesztés esetén közvetlenül illesztési paraméterként határozható meg a valós sebességi állandók. Mindezen számítási eljárás elterjedt és széles körben alkalmazott táblázatkezelő program segítségével került kivitelezésre, ezáltal a konvencionálisnak tekinthető, ámde költséges kiértékelő szoftver beszerzése elkerülhető volt. Sikeresen meghatározásra és publikálásra kerültek a KYNA receptor modellhez való kötődését jellemző asszociációs- és disszociációs sebességi állandók, majd ezek hőmérsékletfüggésének ismeretében a kötési folyamathoz rendelhető entalpia-, entrópia- és fajhő változások. A fentiekben említett mérési módszer és a vázolt kiértékelési metodika felhasználásával 2016 végén szérum albumin fehérjék alkalmazásával, összehasonlító jellegű kísérletsorozat végrehajtására került sor, melynek eredményei hozzájárulnak az AMPA receptort modellező peptidfragmensek és kinurénsav közötti kölcsönhatás részletesebb megismeréséhez és 2017 évben újabb szakcikk formájában kerülnek bemutatásra.

Mag-héj szerkezetű, gyógyszer hatóanyagot tartalmazó nanokompozitok előállítása

Célzott és szabályozott gyógyszer hatóanyag leadást biztosító nanokompozitok előállítását végezték el. A fehérje alapú kompozitok esetében a biológiailag lebomló és biokompatibilis fehérje, a HSA szolgált a hatóanyagok megkötésére. A gyulladásgátló és a központi idegrendszert érintő betegségek kezelésében gyakran használt kinurénsav (KYNA) és szintetikus analógja az SZR72, valamint a szintén gyulladásgátló hatású ketoprofen (KP) kapszulázását valósították meg. A szintézisek kísérleti körülményeit optimalizálva elektrosztatikus kölcsönhatások kialakítása révén sikerült fehérje alapú, egy- illetve kétrétegű mag-héj kompozitokat előállítaniuk. A szintén biokompatibilis és biológiailag lebomló poliszacharidot, a hialuronsavat is alkalmazták a nanokompozitok hordozójaként. A hialuronsav térhálósításával, illetve kémiai kötések révén kialakult egyrétegű mag-héj kompozit előállításával sikerült nyújtott hatóanyag leadást elérni. Az eredmények 2017-ben kerülnek publikálásra.

Plazmonikus és fluoreszcens arany nanostruktúrák előállítása és vizsgálata

Új ligandumként sikeresen alkalmazták a Kutatócsoportban előállított ciszteinil-triptofán (Cys-Trp) kispeptidet, a glutationt (GSH) és a ciszteint (Cys) arany tartalmú hibrid rendszerek szintéziséhez. A szintézisek során megvizsgálták a pH, valamint a prekursor fémsóként

alkalmazott tetrakloroaurát és a ligandumok moláris arányainak hatását. Az eredmények értelmezéséhez meghatározták a redukáló- és stabilizálószerként alkalmazott molekulák orientációját, felületigényét különböző 2D technikákkal (SPR, QCM). A tavalyi évben indított együttműködés keretében (az ELTE Kémia Intézetével) elkészült a szakirodalomban eddig még újszerűnek számító Mössbauer spektroszkópiás mérések tiol-tartalmú molekulával stabilizált kisméretű (1-4 nm) Au nanorészecskék finomszerkezetének elemzése. A fenti munkák mellett megvalósították továbbá plazmonikus (AMP-Au NPs) és néhánatomos, kéken emittáló fluoreszcens nanoklaszterek (AMP-Au NCs) szintézisét adenzin-monofoszfát nukleotid molekula segítségével. Az AMP-Au NCs rendszer alkalmasnak bizonyult Fe^{3+} ionok kimutatására az általuk okozott fluoreszcencia kioltás révén. A mérési eredményekből meghatározták a kioltásra jellemző analitikai és termodinamikai paramétereket is.

b) Tudomány és társadalom

„Nanomedicina” címmel egyszemeszteres előadást és ahhoz kapcsolódó laboratóriumi gyakorlatot tartottak orvos, gyógyszerész és természettudományos hallgatóknak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

SZTE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékkal közös kutatási téma: ICP/MS technológia fejlesztése gömb és rúd alakú arany kolloidok méret és eloszlás jellemzésére.

SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszékkal közös kutatási téma: Au/Sn és Au/Cu ötvözet nanorészecskék szintézise katalizátor fejlesztés célból.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

GINOP-2.3.2-15-2016-00013: Funkcionális felületeken alapuló intelligens anyagok – az előállításától az alkalmazásokig 2016-2020

GINOP-2.3.2-15-2016-00060: Új gyógyszer hatóanyagok és célba juttatásuk új hordozórendszerekkel 2017-2020

GINOP-2.3.2-15-2016-00034: Neurodegeneratív és immunológiai kórképek molekuláris biológiai alapjai: terápiás kísérletek kinureninokkal 2017-2020

GINOP-2.3.2-15-2016-00038: Intelligens fémkomplexek 2017-2020

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Juhász Á, Csapó E, Ungor D, Tóth GK, Vécsei L, Dékány I: Kinetic and thermodynamic characterization of kynurenic acid binding to GluR1₂₇₀₋₃₀₀ polypeptide by surface plasmon resonance experiments. *J. Phys. Chem. B*, 120: 7844-7850 (2016)
2. Násztor Z, Bogár F, Dér A: The interfacial tension concept, as revealed by fluctuations. *Current Opinion in Colloid & Interface Sci*, 23: 29-40 (2016)
3. Zhou J, Roembke BT, Paragi G, Laguerre A, Sintim HO, Guerra Fonseca C, et al: Computational understanding and experimental characterization of twice-as-smart quadruplex ligands as chemical sensors of bacterial nucleotide second messengers. *Scientific Reports*, 6: 33888 (2016)

**A MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI TÁMOGATOTT
KUTATÓCSOPORTOK FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A KUTATÓHELY FŐBB MUTATÓI 2016-BAN

A kutatócsoport neve: MTA-BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4,5	Ebből kutató ² :	4,5
PhD, kandidátus:	3,5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			3
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			12
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			12
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			6
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	14,503	Összes független hivatkozás száma (2015):	99
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			132
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			9
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	14	Diplomamunka (BSc):	16
Diplomamunka (MSc):	11	PhD:	2
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		20 375	E Ft
Teljes saját bevétel:		10 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	9000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	7	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			5
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			22
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			22
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			7
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			7
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	3
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	9,528	Összes független hivatkozás száma (2015):	39
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			63
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			15
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			6
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	13
Diplomamunka (MSc):	6	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		22 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		0	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Irányítástechnikai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	2,66	Ebből kutató ² :	2,16
PhD, kandidátus:	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			3
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1,16
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			29
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			29
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			4
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	11,517	Összes független hivatkozás száma (2015):	145
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			171
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			26
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 5		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			2
Témavezetések száma: TDK munka: 3		Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc): 5		PhD:	12
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		19 139	E Ft
Teljes saját bevétel:		0	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:</i>		0	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó bevétel:</i>		0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó bevétel:</i>		0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó bevétel:</i>		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Kompozittechnológiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	7	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora: 1,2	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			46
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			46
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			9
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			4
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			23
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			27
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	72,22	Összes független hivatkozás száma (2015):	183
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			205
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			9
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	14	Diplomamunka (BSc):	45
Diplomamunka (MSc):	27	PhD:	9
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		30 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		233 243	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			5
		A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	38 421 E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	194 822 E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	7,71	Ebből kutató ² :	6,02
PhD, kandidátus:	3,5	MTA doktora:	0,25
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	3
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			3,77
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			16
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			16
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			15
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			14
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	63,817	Összes független hivatkozás száma (2015):	511
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			643
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			13
		poszterek száma:	13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	18
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		40 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		60 838	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:		6000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		51 838	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		3000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3,95	Ebből kutató ² :	3,95
PhD, kandidátus:	2,25	MTA doktora:	0,37
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			30
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			30
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			19
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			22
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	72,628	Összes független hivatkozás száma (2015):	651
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			835
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			21
		poszterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3,9
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	9	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		26 155	E Ft
Teljes saját bevétel:		18 137	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	6588	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1800	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4 999	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		4 750	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	5,12	Ebből kutató ² :	5,16
PhD, kandidátus:	4,75	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			2,37
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			27
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			27
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			16
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			14
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	3
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	26,444	Összes független hivatkozás száma (2015):	299
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			527
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	3	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	2
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			2
		poszterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	7
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		23 469	E Ft
Teljes saját bevétel:		25 860	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
		A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	11500 E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1260 E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		13 100	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Sztochasztika Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4,91	Ebből kutató ² :	4,66
PhD, kandidátus:	4,66	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,83
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	9,952	Összes független hivatkozás száma (2015):	132
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			144
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			8
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka: 3		Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc): 0		PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		24 619	E Ft
Teljes saját bevétel:		0	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	1
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			7
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			7
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			6
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	18,48	Összes független hivatkozás száma (2015):	79
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			114
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			5
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			6
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		30 795	E Ft
Teljes saját bevétel:		60 600	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	9600	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			5
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	24 000	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	12 000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		15 000	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-DE Egyenletek, függvények, görbék Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	0,5	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			1
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			1
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			1
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	0,664	Összes független hivatkozás száma (2015):	13
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			26
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0,5	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			4
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	20 000	E Ft	
Teljes saját bevétel:	10 000	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	10 000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-DE Homogén Katalízis Reakciómechanizmusok
Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	7,57	Ebből kutató ² :	7,57
PhD, kandidátus:	5,91	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			3,57
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			12
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			11
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			11
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			11
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	39,195	Összes független hivatkozás száma (2015):	297
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			351
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			5
		poszterek száma:	14
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		27 150	E Ft
Teljes saját bevétel:		18 900	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	9500 E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	9400 E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-DE Részecskefizikai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3,5	Ebből kutató ² :	3,5
PhD, kandidátus:	3,5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			9
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			9
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			6
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	30,955	Összes független hivatkozás száma (2015):	84
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			122
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			12
		poszterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		25 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		13 815	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	8015	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	5800	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3,13	Ebből kutató ² :	3,13
PhD, kandidátus:	3,13	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			1,53
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			15
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			15
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			14
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			14
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	12,032	Összes független hivatkozás száma (2015):	137
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			163
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			11
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	20 042	E Ft	
Teljes saját bevétel:	22 000	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	22 000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	9,35	Ebből kutató ² :	8,35
PhD, kandidátus:	8,35	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			3,35
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			21
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			21
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			18
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			15
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	2
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	37,355	Összes független hivatkozás száma (2015):	435
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			528
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			6
		poszterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			4
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			8
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	7
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		45 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		102 679	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	38 732 E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	15 500 E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	48 447 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4,95	Ebből kutató ² :	4,95
PhD, kandidátus:	4,95	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			7
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	22,29	Összes független hivatkozás száma (2015):	192
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			267
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			7
		poszterek száma:	4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			10
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		26 199	E Ft
Teljes saját bevétel:		31 769	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	5569	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2000	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6200	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	18 000	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	7	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			11
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			11
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			9
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			9
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	22,463	Összes független hivatkozás száma (2015):	255
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			338

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			28
		poszterek száma:	12
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	10	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	35 000	E Ft
Teljes saját bevétel:	11 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	11 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Geometriai és Algebrai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			10
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			10
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			10
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	5,496	Összes független hivatkozás száma (2015):	13
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			16
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			19
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	14
Diplomamunka (MSc):	10	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		28 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		4 427	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:		2869	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		678	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		880	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	7	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			11
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			11
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			11
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			10
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	29,707	Összes független hivatkozás száma (2015):	47
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			100
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			8
		posztterek száma:	15
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		31 280	E Ft
Teljes saját bevétel:		3 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	3 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Numerikus Analízis és Nagy Hálózatok Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	2,5	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			26
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			26
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			14
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			16
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	5
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	16,358	Összes független hivatkozás száma (2015):	12
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			21
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			19
		posztterek száma:	1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	18
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		25 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		4 600	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	4000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	600	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	7,7	Ebből kutató ² :	7,7
PhD, kandidátus:	7,45	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			21
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			20
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			16
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			17
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	58,005	Összes független hivatkozás száma (2015):	327
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			496
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			9
		poszterek száma:	18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			7
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	11
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		34 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		171 202	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			9
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	41 050	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			4
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3562	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	124 590	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	7	Ebből kutató ² :	6,5
PhD, kandidátus:	6,5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			13
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			13
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			10
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	21,384	Összes független hivatkozás száma (2015):	882
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			921
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	1
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			9
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka: 4		Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc): 2		PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		40 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		27 958	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			5
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	22 658	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1200	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4100	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Vulkanológiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			0,2
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			7
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			7
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			2
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			2
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	5,246	Összes független hivatkozás száma (2015):	21
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			47
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			9
		posztterek száma:	6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		28 300	E Ft
Teljes saját bevétel:		25 404	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	17 111	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		7293	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ME Anyagtudományi Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	10	Ebből kutató ² :	10
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			9
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			9
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			6
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			2
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	5,308	Összes független hivatkozás száma (2015):	56
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			70
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			1
		posztterek száma:	8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			9
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		38 500	E Ft
Teljes saját bevétel:		65 500	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	13 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	52 500	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			2
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			20
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			20
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			3
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			1
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	2,017	Összes független hivatkozás száma (2015):	10
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			15
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		poszterek száma:	4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	2
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	20 000	E Ft	
Teljes saját bevétel:	23 000	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	5000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	10 000	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	8000	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-MTM-ELTE Paleontológiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	8	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			4
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			19
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			16
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			16
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			16
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	37,57	Összes független hivatkozás száma (2015):	416
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			549
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	1
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		poszterek száma:	13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	5
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		22 335	E Ft
Teljes saját bevétel:		11 969	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
		A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	11 969 E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-PE Levegőkémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			7
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			6
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			2
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			4
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	19,355	Összes független hivatkozás száma (2015):	615
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			724
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			0
		posztterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	0
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		33 865	E Ft
Teljes saját bevétel:		10 810	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	6400	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		1410	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-PTE Molekuláris Kölcsönhatások az Elválasztás-tudományban
Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	5	Ebből kutató ² :	5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	
		Rendes tag és levelező tag:	0,25
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			3
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			6
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			6
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			6
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			6
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	22,638	Összes független hivatkozás száma (2015):	12
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			14
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			7
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		25 550	E Ft
Teljes saját bevétel:		10 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	10 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-PTE Nagyintenzitású Terahertzes Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			3
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			16
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			16
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			12
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			12
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	31,248	Összes független hivatkozás száma (2015):	53
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			76
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	3	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	2
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			4
		posztterek száma:	11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		30 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		7 300	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	7300	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3	Ebből kutató ² :	2
PhD, kandidátus:	0,5	MTA doktora: 0,25	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			2
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			15
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			15
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			14
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			13
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	32,873	Összes független hivatkozás száma (2015):	17
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			35
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			2
		poszterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	5
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	23 000	E Ft	
Teljes saját bevétel:	5 000	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	5 000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora: 1	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			5
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			15
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			12
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			9
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	6,69	Összes független hivatkozás száma (2015):	72
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			105
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			21
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			6
Témavezetések száma: TDK munka: 0		Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc): 1		PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		21 725	E Ft
Teljes saját bevétel:		33 320	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	8320	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	25 000	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3,5	Ebből kutató ² :	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			2
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			5
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			5
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			5
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	18,528	Összes független hivatkozás száma (2015):	239
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			320
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			5
		poszterek száma:	9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		19 305	E Ft
Teljes saját bevétel:		24 123	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	18 173	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	5950	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Fotoakusztikus Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	0,25
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			2

2. PUBLIKÁCIÓK

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

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor ⁷ :	19,765	Összes független hivatkozás száma (2015):	34
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			58

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN

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

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

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

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		3
	posztterek száma:	8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :		6

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :		5
Témavezetések száma: TDK munka: 2	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc): 1	PhD:	6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	32 000	E Ft
Teljes saját bevétel:	9 726	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	5926	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:		3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3800	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	8	Ebből kutató ² :	7
PhD, kandidátus:	4,3	MTA doktora: 1	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			3
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			35
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			33
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	5,945	Összes független hivatkozás száma (2015):	440
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			523
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	6
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			12
		posztterek száma:	6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	5
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		31 737	E Ft
Teljes saját bevétel:		0	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:</i>		0	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó bevétel:</i>		0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó bevétel:</i>		0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
<i>A tárgyévre vonatkozó bevétel:</i>		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémi Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	1
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			41
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			40
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			40
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			40
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	154,209	Összes független hivatkozás száma (2015):	348
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			441
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			8
		posztterek száma:	12
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	6
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		30 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		28 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	4000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			4
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	24 000	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlaglétszám ¹ :	4	Ebből kutató ² :	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			2
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			23
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			23
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			2
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			21
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			21
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	59,565	Összes független hivatkozás száma (2015):	430
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			634
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	1
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			2
		posztterek száma:	8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka: 8		Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc): 1		PhD:	9
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		25 915	E Ft
Teljes saját bevétel:		13 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:		13 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	7	Ebből kutató ² :	6
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			2
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			3
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			15
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			15
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			15
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			15
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	49,156	Összes független hivatkozás száma (2015):	752
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			815
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			6
		poszterek száma:	10
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			5
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	28 564	E Ft	
Teljes saját bevétel:	12 300	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	12 300	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

**MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI EGYETEMI LENDÜLET
KUTATÓCSOPORTOK**

MTA–BME LENDÜLET EGZOTIKUS KVANTUMFÁZIS KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Zaránd Gergely Attila, az MTA doktora
1111 Budapest, Budafoki út 8.
telefon: (1) 463 4107; fax: (1) 463 3567; e-mail: zarand@eik.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2011

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport feladata az erősen korrelált kvantumrendszerekben lejátszódó dinamikai folyamatok leírása, illetve az ezekben a rendszerekben megvalósuló (nem egyensúlyi) állapotok mind pontosabb megértése volt. A kutatócsoport működése hivatalosan 2016 szeptemberében lezárult, azóta MTA támogatás nélkül folytatják munkájukat, bízva a Minisztérium által ígért továbbfinanszírozásban. Az elmúlt években két, egymáshoz szorosan kapcsolódó területen folytattak kutatásokat: (1) Nanoméretű struktúrák és ultrahideg atomi rendszerek nem egyensúlyi transzport és dinamikai tulajdonságait tanulmányozták térelméleti módszerekkel. (2) Új, egzotikus korrelált fázisokat és állapotokat kerestek ilyen rendszerekben, és ezek tulajdonságait vizsgálták.

A 2011-2015 közötti időszakban amellet, hogy létrehozták a kutatócsoportot, 65 rangos közleményük jelent meg. Többek között megvizsgálták, hogyan nyerhető információ egy kölcsönható ultrahideg atomi rendszerről (Luttinger-folyadék) egy hozzá csatolt szupravezető kvantum bit segítségével [1]. Megmutatták, hogyan lehet periodikus modulációk segítségével dinamikus topológiai fázisokat létrehozni optikai úton [2] Jólataikat utóbb kísérletileg is megfigyelték. Valamint tanulmányozták két, kapacitíven csatolt kvantum-pötty viselkedését alacsony hőmérsékleten a *Stanford* kutatóival közösen, és bizonyították egy ún. $SU(4)$ állapot kialakulását [3], valamint egy másik rendszerben egy kvantum-kritikus állapot létrejöttét figyelték meg [4].

Az előző évekhez hasonlóan 2016-ban is az eredeti célkitűzéseknek megfelelően elsődleges kutatási céljuk a nanoszerkezetek (kvantum pöttyök, nanocső, grafén), illetve ultrahideg atomi rendszerek egzotikus kvantumállapotainak, dinamikai, nemegyensúlyi viselkedésének megértésére irányuló, korábban megkezdett vizsgálataik folytatása, kiterjesztése volt.

- [1] Dora B, Pollmann F, Fortagh J, Zarand G, Physical Review Letters 111: 046402 (2013)
- [2] Dora B, Cayssol J, Simon F, Moessner R, Physical Review Letters 108: 056602 (2012)
- [3] Keller AJ, Amasha S, Weymann I, Moca CP, Rau IG, Katine JA, Shtrikman H, Zarand G, Goldhaber-Gordon D, Nature Physics, 10 (2): 145-150. 6 (2014)
- [4] Keller D, Peeters L, Moca CP, Weymann I, Mahalu D, Umansky V, Zarand G, Goldhaber-Gordon D, Nature 526: 237-240 (2015)

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Az elmúlt töredék projektévben 9 Physical Review B, egy Physical Review Letters, egy Physica E közleményük jelent meg, illetve 10 a projekthez kapcsolódó kéziratuk született, melyeket a Physical Review, Physical Review X, ill. a Physical Review Letters folyóiratokhoz nyújtottak be közlésre.

Az összefonódás egyfajta kvantummechanikai erőforrás, mely a kvantum-számításokban alapvető fontosságú szerepet játszik. Egyik legfontosabb munkájukban megvizsgáltuk, hogy az impulzustérbeli összefonódás milyen kapcsolatban van a rendszer külső perturbációkra

adott egyfajta válaszával, az ún. Loschmidt-echoval. Meghatározták egy Luttinger-folyadék hullámszám térbeli összefonódási spektrumát és entropiáját, és megmutatták, hogy a redukált sűrűségmátrix legnagyobb sajátértéke megegyezik Loschmidt-echo-val. Analitikus számolásait (nem-)integrálható modelleken numerikusan tesztelték, és tökéletes egyezést kaptak [Dóra2016a].

Egy másik fontos eredményük az ún. kvantum kvencsekre vonatkozik. Kvantum kvencsek nevezik azt a folyamatot, amikor egy preparált kvantummechanikai rendszer, például egy csapdázott ultrahideg gáz paramétereit hirtelen megváltoztatjuk. Az ilyen kvantum kvencsek tulajdonságait generikus kölcsönható esetekben rendkívül nehéz tanulmányozni. Szemiklasszikus módszert dolgoztak ki a sine-Gordon modell kvantum kvench dinamikájának leírására, mely más egy dimenziós kvantum rendszerekre is sikerrel alkalmazható. Az úgynevezett univerzális limeszben számos – kísérletileg is mérhető – korrelációs függvényt sikerült analitikusan kiértékelniük, és meghatározták, hogy hogyan fejlődnek időben a rendszerben a korrelációk [Kormos2016]. Ezt az elméletet továbbfejlesztve numerikus „time-evolving block decimation” módszerrel sikerült az univerzális limeszen kívül is hatékony módszert találniuk, melynek segítségével leírható az összefonódási entrópia generálása [Moca2016]. Az új módszerrel, melyet csapdázott Bose-rendszerek dinamikájának analizésére használtak elsőként más módszereknél sokkal nagyobb időskálákig tudják követni a rendszer fejlődését, és lehetővé válik nem egyensúlyi stacionárius állapotok, illetve az ahhoz való relaxáció részletes analizése is.

Eredményeik közül kiemelik továbbá a hideg atomi rendszerek Time of Flight (ToF, repülési idő) spektrumának teljes eloszlás spektrumáról szóló tanulmányukat [Lovas2016], valamint egy Baeriswyl-hullámfüggvényen alapuló variációs módszer kifejlesztését magasabb dimenziós rendszerek dinamikájának leírására [Dóra2016b]. Előbbi munkájukban megmutatják, hogy a ToF spektrumok statisztikai elemzésével közvetlenül megfigyelhetők egy Bose-kondenzátum, azaz egy kölcsönható szuperfolyadék kvantum-fluktuációi. Utóbbi variációs módszerükkel pedig megbízhatóan le tudták írni a két dimenziós négyzetláncos élő spintelen fermionok egyensúlyi és kvantum quench fázisdiagramját. Variációs eredményeiket 2D DMRG és egzakt diagonalizációs módszerekkel ellenőrizték, és jó egyezést találtak.

b) Tudomány és társadalom

2016-ban tovább folytatták szemináriumsorozatukat, melyeket országos szakmai fórumokon is hirdetnek, remélve, hogy azok a szűkebb egyetemi szakmai közönségen túl is elérhetővé válnak a kollégáik számára. 2016-ban 23 szemináriumot illetve egy kb. 20 fős miniworkshopot szerveztek a Ljubianai Egyetemen működő kutatócsoporttal közösen. Csoportjuk honlapján (<http://exotic.phy.bme.hu/>) megtalálhatók ezek részletes adatai, mely a csoport célkitűzéseinek bemutatása mellett annak tevékenységét, eredményeit hivatott nyomon követni. Ennek megfelelően a honlapról elérhetők a csoporthoz köthető publikációk, szemináriumaik témája, rövid kivonata, vagy akár a teljes anyaga, és az oldalakat folyamatosan frissítik aktuális információkkal. Legjelentősebb kutatási eredményeik rendszeresen vezető hírként jelentek meg az Akadémia honlapján, a Műegyetem weblapján. Mindemellett a Lendület kutatócsoportoknak szervezett sajtónyilvános Lendület konferencián is rendszeresen bemutatják a csoport tevékenységét.

A csoport aktívan részt vesz a kutatóképzésben, munkájukba folyamatosan vonnak be hallgatókat minden képzési szinten.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport szerteágazó nemzetközi kapcsolatrendszerrel rendelkezik. Ennek köszönhetően az elmúlt év során mintegy 15 külföldi együttműködő partner látogatta meg a csoportot, publikációik jelentős része nemzetközi együttműködés keretében született. 2016-ban közös kutatási projektet indítottak egy szlovén kutatóval (Ljubiana) és egy Lendület csoporttal.

Továbbra is aktívan együttműködnek a befogadó intézménnyel, jelenleg egy két Msc, egy BSc és négy PhD hallgató vesz részt a csoport munkájában. Mindemellett a csoport vezetője a BME Fizika Intézetének igazgatói posztját is betölti, fontos szerepet vállalva a kutatóképzés szervezésében, fejlesztésében.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban két pályázatuk nyert OTKA támogatást:

„Kölcsönhatás, topológia és dinamika egzotikus kvantumrendszerekben” címmel K119442 OTKA projekt; 48 M Ft

„Termalizáció nem egyensúlyi kvantumrendszerekben” címmel a szlovén kutatóval közösen egy bilaterális nemzetközi projekthez kaptak támogatást SNN 118028 OTKA projekt: 31 M Ft.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Dóra B, Lundgren R, Selover M, Pollmann F: Momentum-space entanglement and Loschmidt echo in Luttinger liquids after a quantum quench. *Physical Review Letters*, 117: 010603 (2016)
2. Dóra B, Haque M, Pollmann P, Hetényi B: Quantum quench in two dimensions using the variational Baeriswyl wave function. *Physical Review B*, 93: 115124 (2016)
3. Kormos M, Zaránd G: Quantum quenches in the sine-Gordon model: A semiclassical approach. *Physical Review E*, 93: 062101 (2016)
4. Lovas I, Dóra B, Demler E, Zaránd G: Full counting statistics of time of flight images. submitted to *Physical Review X*, arXiv:1612.02837.
5. Pascu Moca C, Kormos M, Zaránd G: Semi-semiclassical theory of quantum quenches in one dimensional systems. submitted to *Physical Review Letters*, arXiv:1609.00974.

MTA-BME LENDÜLET EMBERI EGYENSÚLYOZÁS KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Insperger Tamás, az MTA doktora
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 5.
telefon: (1) 463-1227; e-mail: insperger@mm.bme.hu
honlap: <http://hbrg.mm.bme.hu>
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2016. 07. 01

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA-BME Lendület Emberi Egyensúlyozás Kutatócsoport 2016 júliusában alakult. A kutatás célja az emberi egyensúlyozás folyamatának megértése, határainak kiterjesztése a reflexkésés és az érzékelési bizonytalanságok figyelembevételével. A kutatócsoport feladatai 2016 második felében a kutatási tervhez szükséges mérőeszközök beszerzése, a kísérleti berendezések megépítése, az emberi egyensúlyozás egyszerűbb modelljeinek vizsgálata valamint a 2017-es konferencia-részvételek megtervezése volt.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

2016-ban elsősorban a kutatási program megalapozása, a kutatócsoport felállítása illetve hallgatók kutatómunkába való bevonása volt a cél. Kiemelkedő tudományos eredmény a projekt első félévében még nem született. Az elindított kutatási területek: egyensúlyozó deszkán történő egyensúlyozás elméleti és kísérleti vizsgálata; rúdegyensúlyozás mért időjelének analízise; több holtidőt tartalmazó dinamikai rendszerek stabilizálhatósága; rúdegyensúlyozás vizsgálata különböző alakú rúdvégek esetén; virtuális rúdegyensúlyozás megvalósítása; futás során történő egyensúlyozás, emberi egyensúlyozás kaotikus dinamikai modelljének vizsgálata.

b) Tudomány és társadalom

A kutatásba több egyetemi hallgató is be lett vonva TDK dolgozat, szakdolgozat, MSc diplomamunka illetve projektmunka keretében. A kutatócsoport vezetője több helyen adott interjút (M1: Minden Tudás, M5: Magyar Krónika, Kossuth Rádió: Tér-idő, NKFIH, BME, Szabad Föld) a kutatási téma népszerűsítése érdekében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport vezetője heti rendszerességgel konzultál John Milton neurológusával a (The Claremont Colleges, USA) informális jelleggel.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Nem volt 2016-ban benyújtott pályázat.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Molnár TG, Insperger T, Stépán G: Analytical estimations of limit cycle amplitude for delay-differential equations. *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations*, 2016: 77 (2016)

MTA-BME LENDÜLET JÖVŐ INTERNET KUTATÓCSOPORT

Tapolcai János, az MTA doktora
1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.
telefon: (1) 463 1498; fax: (1) 5323107; e-mail: tapolcai@tmit.bme.hu
honlap: <http://lendulet.tmit.bme.hu/>
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA-BME Lendület Jövő Internet Kutatócsoport öt éves kutatási célja az Internet megbízható működésének kutatása. Főként az Internet világhálózat és a gerinchálózatok megbízható és hatékony működtetéséhez szükséges mechanizmusokat kutatják. Az elmúlt évben a távközlés valamennyi rangos konferenciáján előadott, mint *ACM SIGCOMM* [1], *ICNP* [2] és *CoNext* [3]. Kutatási eredményeik a hibavédelem, az Internet és adatközpont architektúrákhoz kapcsolódtak.

A csoportnak lehetősége nyílt a legkiválóbb európai és amerikai egyetemek ismert kutatóival való együttműködésre (Princeton, Stanford). A csoportból ketten is tagjai az *IEEE INFOCOM 2016* programbizottságának, a belső kiértékelések alapján mindkettőjüket a konferencia legjobb 100 bírálójának ismerték el.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Új eljárást dolgoztak ki katasztrófák által okozott hálózati hibák védelmére [8]. A katasztrófa hibák jellemzője, hogy egy nem túl nagy földrajzi területen több hálózati eszköz hirtelen kiesik. Sajnos az ilyen hibákra még nincsenek felkészülve a szolgáltatók. Erre friss példa, hogy 2016 decemberében a Vardah ciklon komoly Internet kieséseket okozott Indiában. Az ilyen hibák ellen azért nehéz felkészülni, mert a hálózat működését biztosító protokollok teljesen logikai struktúráként tekintenek a hálózatra, így például nem ismerik a csomópontok koordinátáit. A hálózat üzemeltetője nem tud olyan működési feltételeket definiálni, hogy az üzemi és védelmi erőforrások ne legyenek fizikailag túl közel. Javasolt módszerük alapja, hogy a kapcsolódó geometriai problémát teljesen kombinatorikus problémává transzformálják, amely így már kezelhető a hagyományos hálózat tervező eszközökkel. Egy elfogadott INFOCOM cikkben erre adtak megoldási javaslatot, amihez további cikkek kapcsolódnak [8].

További elfogadott INFOCOM cikkükben egy IoT alkalmazás felhőből való irányíthatóságát tanulmányozták, valamint egy megjelent ICNP cikkükben vizsgálták, hogyan lehet részben független utakat számolni gráfokban [2]. Kutatták még a hálózat forgalom menedzsment funkcióit is, aminek eredményeit a ConNext cikkben [3] publikálták.

Kutatták a hálózati csomagtovábbítók címfeldolgozó algoritmusait. Az *IEEE/ACM Transactions on Networking (ToN)* [4] cikkükben a forgalomtovábbítási táblák veszteséges tömöríthetőségét vizsgálták. A veszteséges tömörítésnél nem engednek meg hibás választ, hanem lehetőség van „nem tudom” választ adni egyes pozíciókban.

Optikai ponthiba lokalizációhoz kapcsolódó eredményeikből egy *IEEE/ACM Transactions on Communications* folyóirat cikk került elfogadásra [6]. A témához szorosan kapcsolódik az

elfogadott *IEEE/ACM ToN* folyóiratcikkük [5], mely SDN hálózatok hibalokalizációját tanulmányozza.

Az elmúlt években jelentős kompetenciát sikerült kiépíteniük a programozható hálózatok területén. A témában 2016-ban az ACM SIGCOMM [1] konferencián jelent meg munkájuk. Kutatásukat részben az Ericsson Magyarország kutatóival közösen végezték, egy közös szabadalom is benyújtásra került.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai rendszeresen tartanak szakmai és szeminárium előadásokat az ország különböző egyetemein, adnak ismeretterjesztő interjúkat hetilapoknak. Létrehozták a kutatócsoport saját honlapját is.

Az új ipari trendek és kutatási eredményeik alapján kidolgoztak két új BSc és MSc szakirányt a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen, amely már két éve elindult, pozitív hallgatói visszajelzésekkel.

A kutatói gondolkodás és életpálya népszerűsítésére folyamatosan hívnak meg külföldi előadókat az MTA-BME Lendület Jövő Internet Kutatócsoport szemináriumára.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

2018-ra megkapták a nagyhírű ACM SIGCOMM konferencia szervezését Budapestre. A konferencia híres az alacsony elfogadási rátájáról (~10%), és hogy a hálózatok és a kommunikáció szakterületének legmeghatározóbb publikációi közül sok itt jelent meg.

Szélesítették a magyar és nemzetközi együttműködéseiket: több dolgozat született együttműködésből SZTAKI-val, valamint ELTE-vel közösen.

Továbbá elkészült közel tíz új kézirat külföldi egyetemek kutatóival, mint Princeton (USA): Ori Rottenstreich [2,4], HUJI (Izrael): Michael Schapira [3], University of Waterloo (Kanada): Pin-Han Ho [6].

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban főként a korábbi évben nyert projektjeiken dolgoztak, amikben közel 20 MSc és BSc hallgató vett részt.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

A cikkek a http://lendulet.tmit.bme.hu/lendulet_website/?page_id=21 oldalról letölthetők.

1. Molnár L, Pongrácz G, Enyedi G, Kis Z, Csikor L, Juhász F, Kőrösi A, Rétvári G: Dataplane Specialization for High-performance OpenFlow Software Switching. in ACM SIGCOMM, (2016)

2. Yallouz J, Rottenstreich O, Babarczy P, Mendelson A, Orda A: Optimal Link-Disjoint Node-“Somewhat Disjoint” Paths. in IEEE ICNP, 1-10 (2016)
3. Chiesa M, Rétvári G, Schapira M: Lying Your Way to Better Traffic Engineering. in Proc. ACM CoNEXT, Short paper, (2016)
4. Rottenstreich O, Tapolcai J: Optimal Rule Caching and Lossy Compression for Longest Prefix Matching. IEEE/ACM Transactions on Networking, PP(99) 1-1 (2016)
5. Kozat U, Liang G, Kokten K, Tapolcai J: On Optimal Topology Verification and Failure Localization for Software Defined Networks. IEEE/ACM Transactions on Networking, 24 (5): 2899-2912 (2016)
6. Tapolcai J, Rónyai L, Hosszu É, Gyimóthi L, Ho P-H, Subramaniam S: Signaling Free Localization of Node Failures in All-Optical Networks. IEEE Transactions on Communications, 64 (6): 2527-2538 (2016)
7. Rétvári G, Tapolcai J, Kőrösi A, Majdán A, Heszberger Z: Compressing IP Forwarding Tables: Towards Entropy Bounds and Beyond. IEEE/ACM Transactions on Networking, 24(1) 149-162 (2016)
8. Vass B, Bérczi-Kovács E, Tapolcai J: Shared Risk Link Group Enumeration of Node Excluding Disaster Failures. in Int. Conference on Networking and Network Applications (NaNA), winner of Best Paper Award (2016)
9. Pasic A, Babarczy P: Switching Link Group Failure Localization via Monitoring Trails in All-Optical Networks. in Proc. 8th International Workshop on Reliable Networks Design and Modeling (RNDM), 1-8 (2016)

MTA-BME LENDÜLET KÉMIAI NANOÉRZÉKELŐK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Gyurcsányi Ervin Róbert, PhD
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.
telefon: (1) 463 1592; fax: (1) 463 3408; e-mail: robertgy@mail.bme.hu
honlap: <http://biochemsens.bme.hu/>
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2013

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A Lendület kutatócsoport elsődleges feladata orvosdiagnosztikai szempontból fontos vírusok, fehérjék, nukleinsavak, és ionok költséghatékony meghatározását lehetővé tevő új kémiai nanoérzékelők és érzékelési elvek felfedezése, elméleti leírása és alkalmazása. Minden fontos célkitűzés esetében az alapelvek bizonyítása megtörtént. Ez kiterjed (i) az egyedi vírusok szelektív detektálására, (ii) új, vér elektrolit analízisre alkalmas elektródok kifejlesztésére, (iii) eredeti aptamerek jellemzésére és analitikai alkalmazására, (iv) új típusú nukleinsav érzékelési elvek felfedezésére, illetve (v) fehérjék meghatározására alkalmas molekuláris lenyomatú nanofilmek kialakítására.

Jelenleg az említett érzékelési elvek részletes kidolgozása és a kutatás során felfedezett új lehetőségek megvalósítása van folyamatban, pl. a több karú szintetikus receptorok szintézise és alkalmazása.

A Lendület pályázat második felébe érkezve a felfedező kutatás kiegészült az alapkutatási eredmények ipari alkalmazásokban való felhasználásával. Így a K+F Versenyképességi és Kiválósági Szerződések keretében a 77 Elektronika cég által koordinált konzorciumban a kutatócsoport multiparaméteres point of care *in vitro* diagnosztikai rendszerek fejlesztéséhez szükséges kémiai funkcionalitású nanoszerkezetek és szintetikus receptorok fejlesztését és jellemzését végzi. Ebben a fejlesztésben a korábban felfedezett receptorok (pl. szívbetegségek biomarkereinek meghatározására) és ezek nagy áteresztőképességű jellemzésére kifejlesztett módszerek, illetve (bio)kémiai funkcionalizálási eljárások kerültek alkalmazásra. Emellett a kutatócsoport a Volkswagen AG megbízásából több témában is végez alkalmazott kutatást, pl. szigetelő nanofilmek vizsgálatára fejlesztett ki módszereket. Hasonló együttműködés körvonalazódik a Horiba céggel is, amely a képalkotó felületi plazmon rezonanciában elért eredményekre alapoz.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Új, nanopórusokon alapuló érzékelési elvet dolgoztak ki, amely lehetőséget ad pontosabban és költséghatékonyabban gyártható, viszonylag nagy átmérőjű nanopórusok ($\varnothing \sim 60$ nm) alkalmazására akár kis molekulatömegű nukleinsavak például mikroRNS-ek meghatározásához. Ennek érdekében a mikroRNS szállal komplementer peptid-nukleinsav (PNS) szálakkal módosított nanopórusokban előzetesen DNS-el borított, 13 nm átmérőjű arany nanorészecskéket kötöttek. A mérés során a PNS-hez 18 bázison keresztül kötődő mikroRNS leszorította az arany nanorészecskéket, ezáltal koncentrációfüggő mértékben csökkent a nanopórus ellenállása. Az eljárás során jelentős jelerősítést eredményezett, hogy a mikroRNS szál bekötődése egy nálánál sokkal nagyobb nanorészecskét szorít le. A rendkívül kis mikroRNS koncentrációk meghatározásához a detektálási módszert az ún. NASBA izotermikus amplifikációval kombinálták. Eredményeiket az *Electrochemistry Communications* folyóiratban közölték.

Egy eredeti elvet dolgoztak ki nukleinsavak szelektív potenciometriás meghatározására nanopórusokban történő hibridizáció által okozott töltésinverzió detektálásán keresztül. Ennek érdekében pozitív töltésű PNS szálakkal módosították a nanopórusokat. A negatív töltésű komplementer nukleinsav (mikroRNS) bekötődésekor töltésinverzió történt a pórus környezetében, amelyet potenciometriás úton sikerült detektálni. A gyakorlati alkalmazás során, egy adott ionerősségnél az RNS bekötődése a membrán potenciált pozitív irányba változtatja. Ennek a komplex folyamatnak a megértéséhez a Nernst-Planck/Poisson modellt alkalmazták figyelembe véve a PNS réteg vastagságát, felületi sűrűségét és kiterjedését a pórusban, a bekötődő RNS szálak által okozott töltésváltozást, valamint a PNS-RNS komplex kialakulásának kinetikáját. A szimulációkkal sikerült leírni a kísérleti potenciálváltozások időbeni változását, amely lehetőséget adott a nanopórusban történő PNS-mikroRNS hibridizáció kinetikai paramétereinek meghatározására. A feszültségmérés minden más műszeres módszernél költséghatékonyabb, ezért várhatóan a kifejlesztett érzékelők gyakorlati jelentőséggel bírnak. A közlemény a Nanoscale folyóiratban jelent meg.

A szelektív RSV vírus számláláshoz szükséges aptamerek szelektivitását és jellemzését a Semmelweis Egyetemmel együttműködve végezték el. Lumineszcenciás detektálással bizonyították, hogy az aptamer alkalmas az RSV vírus kimutatására garatkenetből klinikailag releváns koncentráció-tartományban. Az eredményeket a Scientific Reports (Nature Publishing Group) folyóiratban elfogadták. Fluoreszcens jelölésű aptamerek alkalmazásával optikai nyomkövetésen alapuló nanorészecske analízissel sikeresen megvalósították az RSV szelektív számlálását. A kutatás során viszont megállapították, hogy komplex biológiai mintákban egyes komponensek kompetitív módon leszoríthatják az aptamereket az RSV vírusról és ezáltal zavarhatják a meghatározást. A valós mintákban történő diagnosztikai alkalmazás céljából az említett RSV aptamerek többkarú változatait is előállították. Ezekkel az ún. szuperaptamerekkel amelyek egyszerre több vírusfehérjéhez is kooperatívan tudnak kötődni, az eredeti aptamer K_D értékét több nagyságrenddel sikerült javítani. Ez jelentős felfedezés, amely nem csak a vírus-szelektív aptamerek diagnosztikai alkalmazásában jelent előrelépést, hanem a hatékonyabb vírus inhibíció megvalósításának szempontjából is. Az eredményekről beszámoló kézirat előkészítése folyamatban van a Nature Communications folyóirathoz való beküldéshez.

A viselhető (wearable) kémiai érzékelők egyik legfontosabb eszközei a potenciometriás ion szelektív elektródok. Ezen a területen a csoport új, rendkívül jó potenciál reprodukálhatóságot biztosító vezető polimer belső elvezetésekkel fejlesztett ki, amely a gyakorlati alkalmazáshoz nélkülözhetetlen. Az eredményekről beszámoló közlemények az analitikai kémia legjelentősebb folyóirataiban (Analytical Chemistry és Analyst) jelentek meg.

b) Tudomány és társadalom

A Csodák Palotájában tudománynépszerűsítő előadás keretében mutatták be a nanotechnológia újdonságait a diagnosztika és a gyógyászat területén.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A vírusszerű részecskék vizsgálatában az Oviedo Egyetemmel (Spanyolország) működnek együtt. Az egyedi RSV vírusok szelektív detektálásában a holland Radboud Egyetemmel alakítottak ki együttműködést, amelyben a partner intézmény az inaktivált RSV vírusokat szolgáltatja a vírusszámlálók fejlesztéséhez. Ebbe a projektbe bevonták a Semmelweis

Egyetem, Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézetét, akikkel együtt az RSV aptamer szelekcióját és jellemzését végzik. A molekuláris lenyomatú polimerek előállításában nemzetközi Era Chemistry pályázat keretében a Potsdami Egyetemmel, az ion-szelektív elektródok fejlesztésében pedig az Abo Akademi University (Finnország) kutatócsoportjával van együttműködésük. 2016-ban kb. 1,5 hónapot kutatott a csoportban egy szerb kutató szerb állami támogatással. A nanopórusos detektálás és mikrofluidikában integrált érzékelők területén az MTA EK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézettel (MTA EK MFA). működnek együtt. Emellett két Lendület kutatócsoporttal és egy NAP kutatócsoporttal is együttműködtek.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Alkalmazott kutatás a Volkswagen AG konzern megbízásában a lítium ion akkumulátorok területén.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Erdőssy J, Horváth V, Yarman A, Scheller FW, Gyurcsányi RE: Electrosynthesized molecularly imprinted polymers for protein recognition. TrAC Trends Anal. Chem., 79: 179 (2016) <http://real.mtak.hu/37636/>
2. He N, Gyurcsányi RE, Lindfors T: Electropolymerized hydrophobic polyazulene as solid-contacts in potassium-selective electrodes. Analyst, 141 (10): 2990 (2016) <http://real.mtak.hu/37638/>
3. Lautner G, Plesz M, Jággerszki G, Fürjes P, Gyurcsányi RE: Nanoparticle displacement assay with electrochemical nanopore-based sensors. Electrochem. Commun., 71: 13 (2016) <http://real.mtak.hu/38181/>
4. Menger M, Yarman A, Erdőssy J, Yildiz HB, Gyurcsányi RE, Scheller FW: MIPs and aptamers for recognition of proteins in biomimetic sensing. Biosensors, 6 (3): 35 (2016) <http://real.mtak.hu/37985/>
5. Szűcs J, Lindfors T, Bobacka J, Gyurcsányi RE: Ion-selective Electrodes with 3D Nanostructured Conducting Polymer Solid Contact. Electroanal, 28:(4) 778 (2016) <http://real.mtak.hu/33000/>

MTA-BME LENDÜLET KIBER-FIZIKAI RENDSZEREK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Varró Dániel, az MTA doktora
1117 Budapest Magyar tudósok krt. 2.
telefon: (1) 463 3586; fax: (1) 463 2667; email: varro@mit.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának időpontja: 2015. 08. 01.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az *MTA-BME Kiber-fizikai rendszerek kutatócsoport* célja olyan modellezési, ellenőrzési és felderítési módszerek és algoritmusok kidolgozása, amelyek segítik a dinamikus, adaptív és nyílt kiber-fizikai rendszerek tervezését, valamint hatékony és biztonságos működtetését. Az első teljes projektévben már ígéretes kezdeti eredményekről számolhattak be több különböző területen (ld. II. fejezet), és számos nemzetközi referált publikációjuk jelent meg. A 2016-os évre az *MTA-BME Kiber-fizikai rendszerek kutatócsoportban* a következő kutatási feladatok vizsgálatát tűzték ki:

Gráflekérdezések technológiákon átnyúló összehasonlító elemzése: Különböző tudásreprezentációs technológiák teljesítményének (futási idő, memória) összehasonlítása jólformáltsági kényszerek változó modellek feletti validációja céljából.

Nézőponti modellek kétirányú szinkronizációja: Logikai megoldókon és inkrementális transzformációkon alapuló kétirányú modell-szinkronizációs módszer kidolgozása.

Konzisztens gráfmodellek szintézise: Logikai megoldókon alapuló módszer kidolgozása jólformált és konzisztens gráfmodellek szintézisére.

Komplexesemény-feldolgozási módszerek: Komplexesemény-feldolgozási módszerek hierarchikus adaptációja kiber-fizikai rendszerek futási idejű ellenőrzésére.

Többcélű optimalizálás a tervezésiter-bejárásban: Optimalizálási módszerek alkalmazhatósági vizsgálata, prototipizálása a tervezésiter-bejárás kontextusában.

Demonstrátorok, prototípusok: Az elméleti eredmények gyakorlati alkalmazhatóságának igazolására (nyílt forráskódú) kísérleti szoftverprototípusok és demonstrátorok (pl. MoDeS³) folyamatos fejlesztése.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Automatikus logikai következtető eszközökre építve kidolgozták a konzisztens gráf alapú modellek automatikus szintézisének egy iteratív módszerét, amely lényegesen jobban skálázódik a szakirodalomban ismert technikákhoz képest. Elkészült továbbá a változó modellek felett futtatott gráflekérdezések teljesítményének technológiafüggetlen összehasonlító elemzése 10 különböző technológia összevetésével. Ígéretesek az első eredményeik a komplexesemény-feldolgozási technikák monitorozási célú felhasználása területén is, amelyet valós környezetben is kipróbáltak, alkalmaztak az általunk fejlesztett demonstrátor rendszerekben. Kritikus kiber-fizikai rendszerek ellenőrzéséhez kapcsolódóan elkészült egy konfigurálható analízis keretrendszer első verziója. Az ehhez kapcsolódó elméleti és gyakorlati eredmények publikálásra kerültek. A kutatócsoport fő kompetenciája a kritikus kiber-fizikai rendszerek modellezésének támogatása, ezen a területen új módszereket

dolgoztak ki a tervezés támogatására: több tervező egyidejű munkáját megkönnyítő automatikus modell-szinkronizáló módszerek kerültek kidolgozásra és publikálásra.

2016. június 27-29. között zajlott le Szegeden a [Conference of PhD Students in Computer Science \(CSCS\) 2016](#) konferencia, ahol kutatócsoport vezetője tartott meghívott plenáris előadást "Models and Queries for Smart and Safe Cyber-physical Systems" címmel. A konferencián előadóként két PhD hallgatójuk is részt vett, akik a [szekciójuk legjobb előadói díját nyerték](#).

Munkatársaik a BME Méréstechnika és Információs Rendszerek (MIT) Tanszéken jelentős oktatási és konzultációs tevékenységet végeztek, az egyetemi Tudományos Diákköri Konferencián a konzultált hallgatók 4 első és 1 második helyezést értek el, továbbá a rektori különdíjat is munkatársuk által konzultált dolgozat nyerte el. Munkatársaik által konzultált hallgatók közül ketten is doktori tanulmányokat kezdtek ezen idő alatt a BME MIT tanszékén.

b) Tudomány és társadalom

A kritikus kiber-fizikai rendszerek népszerűsítésére az Ericsson Hungary Zrt., az IncQuery Labs Kft. és a Quanopt Kft. munkatársaival, valamint a BME Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszékkel és Elektronikai Technológia Tanszékkel közösen egy modellvasút demonstrátort (MoDeS³, ld. [honlap](#), [tumblr](#)) készítettek. Ugyanezen demonstrátor az USA-ban megrendezett [EclipseCon North America 2016](#) rendezvény [IoT fejlesztői versenyén](#) elnyerte a [harmadik díjat](#), amely [sajtómegjelenést](#) is eredményezett. Az érdeklődő közönség a 2016-os Ericsson University Day keretében is megismerkedhetett a munkájukkal, továbbá meghívást kaptak a régió meghatározó mobiltechnológiai és startup fókuszú konferenciájára, a [SMART konferenciára](#) is, ahol bemutatták többek között a demonstrátor rendszert és a felhasznált innovatív technológiákat.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Nemzetközi kapcsolatok

A kutatócsoport meghívott előadóként látta vendégül a TU München professzorát és a fortiss (Németország) kutatási igazgatóhelyettesét, aki „Kiberfizikai rendszerek modellvezérelt tervezése” témájában tartott előadást az NJSZT Szoftvertechnológia Fórumának keretében, az ELTE és a Neumann János Számítógéptudományi Társasággal közös rendezésében 2015 decemberében.

Kutatócsoportot vendégkutatóként látogatta meg egy kínai professzor és a csoport munkatársaival együtt valóság-hű modellek generálásának lehetőségét vizsgálták. Az MPM4CPS projekthez kapcsolódóan a kutatócsoport egy hétre fogadta az Universidade Nova de Lisboa (Portugália) fiatal kutatóját.

Kutatócsoport vezetője meghívott előadóként működött közre a belgiumi Antwerpen városában megrendezett, a szakterület-specifikus modellezés tudományterületét lefedő DSM-TP nyári iskolában. Munkatársaik továbbra is aktív szerepet vállalnak a nemzetközi tudományos közéletben; összesen 11 nemzetközi tudományos konferencia programbizottságában vettek részt, és számos folyóiratcikk bírálójaként működtek közre.

Akadémiiai kapcsolatok

A kutatócsoport állandó együttműködésben áll a BME MIT tanszéken működő Hibatűrő Rendszerek Kutatócsoporttal, ahol munkatársaik többsége munkaidejének egy részében oktatóként működik közre. Doktorandusz munkatársaik ezen csoport tagjaként vesznek részt a doktori képzésen.

Munkatársaik az MTA-BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoporttal közösen hoztak létre egy ún. „rugalmasan konfigurálható sztochasztikus algoritmus-könyvtárat”, amely kiber-fizikai rendszerek kvantitatív analízisét támogatja.

Ipari kapcsolatok

Megkezdődött a Lendület kutatócsoport első eredményeinek alkalmazhatósági vizsgálata egy, az Ericssonnal közös kutatási együttműködés keretében.

Fontos ipari K+F kisvállalkozói partnerük volt az IncQuery Labs Kft. A cég által szervezett nyilvános "[IncQuery Labs Akadémia](#)" rendezvénysorozaton több alkalommal is szerepeltek előadóként a kutatócsoport munkatársai; ismeretterjesztő jelleggel beszámolva aktív kutatási területekről. A cég több munkatársa kiemelt szakmai kontribútora volt a MoDeS³ kiber-fizikai rendszerek demonstrátorának is.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2016-ban a kutatócsoport munkatársai számos futó EU projekt eredményes lezárásával (MONDO EU FP7, CONCERTO ARTEMIS projektek), valamint folytatásával (R5-COP ARTEMIS) foglalkoztak.

2015-ben indult a MPM4CPS EU COST Action kiber-fizikai rendszerek többparadigmájú modellezése témájában, amelybe a kutatócsoport vezetője 2016-ban közvetlenül bekapcsolódott Magyarország képviselőjeként.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

A projekt első évében a Lendület kutatócsoport munkatársai 2 nemzetközi lektorált folyóiratcikk, továbbá 10 nemzetközi és 2 hazai lektorált, konferencia-kiadványban megjelent publikáció szerzői (vagy társszerzői) voltak, melyek közül döntően már a projekt eredményeként került bemutatásra az alábbi két jelentős cikk:

1. [Hajdu Á](#), [Tóth T](#), [Vörös A](#), [Majzik I](#): A Configurable CEGAR Framework with Interpolation-Based Refinements. Formal Techniques for Distributed Objects, Components, and Systems (FORTE 2016), Springer, LNCS 9688, 158-174 (2016) [REAL](#)
2. [Dávid I](#), [Ráth I](#), [Varró D](#): Foundations for Streaming Model Transformations by Complex Event Processing. Software And Systems Modeling, (2016) doi:10.1007/s10270-016-0533-1. [SpringerLink](#)

MTA-BME LENDÜLET KVANTUMKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Kállay Mihály, az MTA doktora
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3-9.
telefon: (1) 463 1623; fax: (1) 463 3767; e-mail: kallay@mail.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2013

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport ötéves kutatási tervének legfőbb célkitűzései a következők: olyan kvantumkémiai módszerek fejlesztése, amelyek lehetővé teszik molekuláris tulajdonságok és kémiai folyamatok paramétereinek pontos (~1 kcal/mol-os hiba kémiai kötésenként energiakülönbségekre) számítását nagy (több száz atomos) molekulákra; új típusú bázisfüggvények fejlesztése és tesztelése molekuláris tulajdonságok számítására; lokális explicit korrelációs módszerek fejlesztése; kvantumkémiai módszerek fejlesztése nyílthéjú rendszerek (reaktív intermedierek, különböző átmeneti állapotok) tulajdonságainak pontos számítására; új elméleti módszerek fejlesztése nagy molekulák gerjesztett állapotaira, amelyekkel pontosan számíthatjuk a gerjesztett állapotok tulajdonságait és átmeneti mennyiségeket; analitikus deriváltak implementálása a kidolgozott módszerekhez, amelyek lehetővé teszik molekuláris tulajdonságok (pl. dipólusmomentum, geometria) számítását nagy molekulákra a korábbiaknál nagyobb pontossággal; kvantumkémiai módszerek alkalmazása különböző problémák megoldására a szerves kémia, a polimertudomány, a biomolekuláris kémia és a kémia egyéb területein. A kutatócsoport ötéves kutatási tervéből a fent említett első két célkitűzés lényegében megvalósult, illetve közel áll megvalósításhoz, emellett számos kémiai probléma megoldására alkalmaztak kvantumkémiai módszereket.

A kutatócsoport 2016-os kutatási tervének legfőbb célkitűzései a következők voltak: lokális korrelációs módszerek gyorsítása, lineárisan skálázódó MP2 és CC módszerek fejlesztése, a hosszú távú korreláció leírásának javítása multipólus közelítések alkalmazásával; hatékony integráldirekt algoritmusok fejlesztése; többszintű kvantumkémiai módszerek kidolgozása beágyazási technikák segítségével; csökkentett skálázódású korrelációs módszerek fejlesztése gerjesztett állapotokra természetes pályák segítségével; explicit korrelációs módszerek fejlesztése; három- és kétcentrumos integrálok számítási algoritmusának gyorsítása; fluorogén anyagok fejlesztése, a vegyületek reaktivitásának és fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata; polimerek elméleti modellezése; optikai spektrumok számítása; pontos termokémiai számítások.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Továbbfejlesztették a domének molekulapályái és integráljaik meghatározására szolgáló algoritmusokat. Részletesen elemezték, hogy milyen módszerrel lehet a párkorrelációs energiákat a leghatékonyabban számítani. Jelentős gyorsulást értek el multipólus közelítések alkalmazásával a szükséges integrálok számítására. Szisztematikusan megvizsgálták, hogy milyen magas multipólusmomentumok szükségesek a megfelelő pontosság eléréséhez. Implementálták a szükséges integrálokat és levezették a megfelelő formulákat. A teszt számítások azt mutatták, hogy elegendő mindössze oktupólus momentumig figyelembe venni a multipólusmomentumokat. A multipólus közelítések alkalmazásával a párkorrelációs energiák számításának ideje gyakorlatilag elhanyagolhatóvá vált a lokális korrelációs számítás többi lépésének idejéhez képest.

A jelentős előrelépést sikerült elérniük a sűrűségillesztéshez szükséges háromcentrumos integrálok számításában és kezelésében. Egy új algoritmust dolgoztak ki az integrálok rekurzív előállítására, melyben a különböző műveletek sorrendje eltér a korábban publikáltaktól és lehetővé teszi a háromcentrumos integrálok sokkal gyorsabb előállítását. Másrészt a különböző mellékkvantumszámú függvények integráljainak számítását végző rutinokat automatikusan generáltatták egy másik programmal, ami nagyban megnöveli a rutinok hatékonyságát. Az új integrálkód segítségével a szükséges integrálok számításának ideje szinte elhanyagolható egy lokális korrelációs számítás többi lépésének idejéhez képest, ami lehetővé teszi hatékony integrál-direkt algoritmusok fejlesztését. Programjuk integráltranszformációs rutinjait teljesen átírták integrál-direktre, a jelenlegi állapotban már nem tárolnak semmilyen atompálya integrált vagy félig transzformált MO integrált, illetve MP2 és direkt RPA esetében a transzformált MO integrálok tárolása sem szükséges, ezeket rögtön felhasználják az energijárulékok számítására. Az új program hatékonyságát eddig MP2 szinten tesztelték, és igazolták, hogy az új algoritmusok kidolgozása a doméneken belüli műveletek drasztikus gyorsulásához vezetett. Többek között sikeres számítást végeztek a 2380 atomból álló HIV integráz enzimre. Eddig ez a legnagyobb molekula, amelyre ab initio korrelációs módszert alkalmaztak parallelizálás nélkül.

Megvizsgálták, hogy a pontos korrelációs módszerek alkalmazhatósága hogyan terjeszthető ki még nagyobb rendszerekre többszintű közelítések segítségével. Kifejlesztettek egy kétszintű módszert, amelyben a molekula kémiai szempontból fontos elektronpárjait egy magasabb szinten [pl. CCSD(T)] kezelik, míg a többi elektron korrelációját egy alacsonyabb szinten (pl. MP2) írják le. Lehetővé tették iteratív és perturbatív CC, RPA és MP2 módszerek tetszőleges kombinálását. Kiterjedten tesztelték a különböző beágyazási lehetőségeket. Megállapították, hogy egy kémiai reakció esetén elegendő a reakcióban részt vevő kötésektől 4-5 kötésen belül elhelyezkedő elektronpárokat a magasabb szinten kezelni, a távolabb lévő elektronok korrelációja leírható az MP2 szinten a reakcióenergiák hibájának lényeges növelése nélkül.

Kifejlesztettek egy egzakt DFT beágyazási technikát, amellyel a hullámfüggvényen alapuló közelítések tetszőleges sűrűségfüggvényes módszerbe ágyazhatók. A technika projekciós operátorok használatán alapul, de ellentétben a korábbi hasonló módszerekkel a Huzinaga-egyenletet alkalmazza a beágyazott alrendszer és a környezet pályái ortogonalitásának biztosítására, ami garantálja az egzakt beágyazást. Lehetővé tették a kifejlesztett egy- és kétszintű lokális korrelációs módszerek kombinálását az új DFT beágyazási technikával. Megállapították, hogy a magasrendű CC módszereket csak akkor érdemes közvetlenül DFT-be ágyazni, ha nem hibrid funkcionált alkalmaznak, különben az MP2-be való beágyazás lényegesen hatékonyabb. A kétrétegű CC/MP2 lokális korrelációs módszer hatékonysága viszont tovább növelhető, ha DFT-be ágyazzák, elsősorban nem hibrid funkcionálok használatával.

Azért, hogy a vizsgálható rendszerek méretét még tovább növeljék, lehetővé tették a fenti egy-, két- és háromrétegű közelítések további beágyazását molekulamechanikai módszerekbe QM/MM (kvantummechanika/molekulamechanika) technikák segítségével. Ehhez kifejlesztettek egy interfészt az Amber programhoz, kódjukban implementálták a szükséges integrálokat és kialakították az MM ponttöltések kezeléséhez szükséges infrastruktúrát. A hagyományos QM/MM illesztési technikák (link atom) mellett kidolgoztak egy új, fagyasztott molekulapályákon alapuló illesztési módszert, amely különösen előnyös korrelált módszerek beágyazására, mert segítségével a korrelált molekulapályák száma csökkenthető. Teszt számításokat végeztek, hogy melyik QM/MM illesztési közelítés alkalmazható a leghatékonyabban lokális korrelációs módszerek, illetve a többszintű beágyazott módszerek

esetében. Megvizsgálták, hogy az így létrejövő három- vagy négyszintű QM/MM módszerek esetében milyen közelítések alkalmazhatók a leghatékonyabban az egyes szinteken.

Megtették az első lépéseket a gerjesztett állapotok leírására alkalmas lokális korrelációs módszerek kifejlesztése felé. Az alapállapotú problémához hasonlóan a pályákat itt is doménekbe sorolják be, és a korrelált módszer egyenleteit a doménekben oldják meg. Részletesen elemezték a különböző stratégiákat a domének előállítására. A doménekben belül a bázis méretét a gerjesztett állapotok esetében is természetes pályák segítségével sikerült jelentősen csökkenteni. Gerjesztett állapotokra a másodrendű korrekciót tartalmazó CIS módszer [CIS(D)] hullámfüggvényéből számított sűrűségmátrix tűnik a leghatékonyabbnak. A közelítést eddig a másodrendű CC (CC2) módszerre tesztelték.

Kísérleti kollégákkal együttműködve meghatározták királis vegyületek abszolút konfigurációját. Kiszámították a vegyületek konformereinek cirkuláris dikroizmus (CD) spektrumát és a konformerek relatív energiáit. Új modelleket dolgoztak ki a polimerláncok közötti kölcsönhatásokra szintetikus politejsav polimerekben és kompozitjaikban. Modelleket dolgoztak ki polimer kompozitok leírására. Nagy pontosságú kvantumkémiai számításokat végeztek a pentán molekula konformereire.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport által kifejlesztett kvantumkémiai programcsomag szabadon elérhető a területen dolgozó szakemberek számára. A szoftver a kémia számos területén alkalmazható, így pl. a szerves kémiában, a gyógyszerkutatásban, vagy az anyagtudományban. Segítségével pl. hatékonyabb gyógyszermolekulák, új típusú anyagok vagy költségkímélőbb vegyipari eljárások tervezhetők.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport munkatársai aktívan részt vettek a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen folyó vegyész- és biomérnök, valamint fizikus képzésben. Két alapkurzust, egy speciális kollégiumot tartottak és több számítási gyakorlatot vezettek. A csoport kutatási témáihoz kapcsolódva egy szakdolgozat készült. A csoport négy tagja vesz részt szervezett doktori képzésben.

A kutatócsoport munkatársai három nemzetközi konferencián vettek részt. Ezeken a rendezvényeken két meghívott és egy további előadást valamint több poszterprezentációt tartottak.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport tagjai 2016-ban három OTKA pályázat vezetői, illetve résztvevői voltak, a kutatócsoport egyik tagja Bolyai ösztöndíjjal rendelkezik. 2016-ban a csoport egyik tagja sikeresen pályázott az Új Nemzeti Kiválósági Program ösztöndíjára.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Nagy PR, Samu G, Kállay M: An integral-direct linear-scaling second-order Møller–Plesset approach. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 12: 4897 (2016)
<http://real.mtak.hu/39827>

MTA-BME LENDÜLET MAGNETO-OPTIKAI SPEKTROSKÓPIA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Kézsmárki István, PhD
1111 Budapest, Budafoki út 8.
telefon: (1) 463 3056; e-mail: kezsmark@mail.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2014

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport fő célkitűzése intelligens anyagok vizsgálata fotonikai és optikai bioszenzor alkalmazásokhoz. A projekt második évében ehhez kapcsolódóan a következő területeken végeztek kutatásokat:

A projekt első évében végzett kutatásaik azt mutatták, hogy a multiferro, azaz egyszerre ferromágneses és ferroelektromos, rendeződést mutató anyagok különböző mértékben nyelhetik el az egymással ellentétes irányban terjedő fénynyalábokat. Ezen vizsgálatokat terjesztették ki a multiferro rendeződést mutató anyagok széles körére, szisztematikusan feltárva az optikai egyenirányításért felelős anyagi paramétereket.

A csoport által kifejlesztett magneto-optikai elven működő maláriadiagnosztikai eszközt egérkísérletekben tesztelték. Ezt követően az első klinikai tesztet a Mahidoli Egyetem kórházában (Field Campus Hospital of Mahidol University in Thailand) gyűjtött humán vérmintákon végezték. Jelenleg az Országos Epidemiológiai Intézetben végeznek Pápua Új-Guineában gyűjtött human vérmintákat.

Összetett mágneses rendeződési formák elméleti leírását és kísérleti vizsgálatát végezték különböző szimmetriaosztályokba tartozó rendszerek esetén, beleértve a királis spinfolyadék és plakett rendeződés kialakulását frusztrált rácsokon illetve a mágneses skyrmionok megjelenését inverziós szimmetriával nem rendelkező kristályokban.

Az adott kutatási időszakban, azaz 2015. július 1-től megjelent cikkek listája itt érhető el:

http://magnetooptics.phy.bme.hu/Lendulet_publications.pdf. A beszámolóban szereplő hivatkozási számok ezen lista számozását követik.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Két alacsony hőmérsékleten multiferro rendeződést mutató anyag, a $\text{CaBaCo}_4\text{O}_7$ és a LiCoPO_4 esetén megmutatták, hogy a bennük ellentétes irányban terjedő fénynyalábok elnyelődésében fellépő különbség oly mértékű lehet, hogy ezen anyagok egyik irányból átlátszóak, míg az ellentétes irányból nézve átlátszatlanok és ezen optikai egyenirányító funkció mágneses tér segítségével kapcsolható [1]. A LiCoPO_4 további érdekessége, hogy az optikai egyenirányító funkció nem csak mágneses, hanem elektromos térrel is kapcsolható és ez az állapot memória jelleggel fennmarad az elektromos és mágneses terek kikapcsolását követően is. A jelenséget megvizsgálták a már szobahőmérsékleten multiferro rendeződéssel bíró BiFeO_3 kristályok esetén is. Azt találták, hogy alacsony hőmérsékleten ezen anyag is optikai egyenirányítóként viselkedik a gigahertz-terahertz frekvenciatartományban és a jelenség szobahőmérsékleten is jelen van [2]. Az optikai tulajdonságok mellett vizsgálták a multiferro rendeződést kísérő mágneses és kristályszerkezeti változásokat $\text{CaBaCo}_4\text{O}_7$, $\text{Ca}_2\text{CoSi}_2\text{O}_7$, $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$, $\text{Sr}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ és $\text{TbFe}_3(\text{BO}_3)_4$ kristályokban [3-7] és elméleti modelleket dolgoztak ki a dinamikus magnetoelektromos effektus leírására [8,9], mely a multiferro rendeződést mutató anyagok optikai egyenirányításáért felelős. Egy új mágneses

kristályt, a $\text{CaBaFe}_4\text{O}_7$ -ot állítottak elő, melyről azt találták, hogy szobahőmérséklet közelében multiferro rendeződést mutat [10].

Megtörtént a maláriadiagnosztikai eszköz validálása egérkísérletekben [11] és humán klinikai tesztekben. Az első vizsgálat azt mutatta, hogy a módszer érzékenysége eléri a *gold standard*-ként használt optikai mikroszkópiával végzett diagnózis érzékenységét. A diagnózis szempontjából perdöntő klinikai teszt azt mutatta, hogy módszerük képes diagnosztizálni olyan betegeket is, ahol egy millió vörösvértestből mindössze 1-2 fertőzött, vagyis a módszerük érzékenysége meghaladja az optikai mikroszkópos technikáét. Ennek megerősítésére jelenleg egy Pápua Új-Guineában gyűjtött nagyobb humán mintakészleten végeznek diagnosztikai méréseket az Országos Epidemiológiai Központban. Az egérkísérletek azt is megmutatták, hogy a hamis pozitív diagnózis mindössze a gyógyulást követő 3-5 napra korlátozott. A sejtkultúrákon végzett kutatásaik azt is bizonyítják, hogy a diagnosztikai alkalmazás mellett az eszköz kiválóan alkalmas maláriaellenes gyógyszerek tesztelésére is. Ez a téma a csoport egyik kiemelt kutatási vonala, melyhez kapcsolódó kutatásokat az MTA TTK-val közösen működtetett malária parazita laborban megkezdték. Vizsgálták más új maláriadiagnosztikai módszerek potenciálját is [12]. Ezen kívül két más biológiai irányultságú témában, spektroszkópiai fehérje szerkezet-meghatározás [13] és optikai csipeszek alkalmazása [14] terén értek el eredményeket.

Mezoskopikus periodicitású mágneses vortexrács, ún. skyrmion kristály megjelenését figyelték meg a multiferro GaV_4S_8 kristályokban [15]. Az anyag sajátja, hogy az általuk megfigyelt ún. Néel-típusú skyrmion kristály létezését eddig csak elméletileg jósolták meg, valós anyagokban nem tudták kimutatni. Ezen vizsgálatokat kiterjesztették az anyacsalád másik két tagjára, GaV_4Se_8 és GaMo_4S_8 , ahol a skyrmion rács állapot zérus hőmérséklet közelében is stabil marad. Elektron spin rezonancia spektroszkópiával meghatározták a Néel-típusú skyrmion kristály kollektív mágneses gerjesztéseit [16,17]. A mágneses tulajdonságok feltérképezésén túl azt találták, hogy ezen anyagok ferroelektromosak [18-21] és a mágneses skyrmionok lokális elektromos polarizációt hordoznak [22,23]. A mágneses és elektromos rendeződés összekapcsolódása magnetoelektromos effektust eredményez, hasonlóan az általuk neutron szórással vizsgált, skyrmion fázisú Cu_2SeO_3 kristályokhoz [24].

Összetett mágneses rendeződési formák megjelenését vizsgálták elméleti módszerekkel magas szimmetriájú $\text{SU}(N)$ Heisenberg spin rendszerekben, különböző kristályrácsokon: háromszögrács, méhsejtrács, lapcentrált köbös rács [25-28]. Méhsejtrács esetén az $\text{SU}(6)$ Heisenberg modellben plakett rendeződést [26], míg háromszögrács esetén az $\text{SU}(N)$ Heisenberg modellben királis spinfolyadék állapot megjelenését mutatták meg [27].

Általánosan elfogadott, hogy réteges szerkezetű, közel 2-dimenziós kristályoknál a hosszú távú mágneses rendeződés kialakulásáért a 2-dimenziós rétegek közötti gyenge, de véges erősségű kölcsönhatás felelős. Szerves $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$ kristályoknál megmutatták, hogy a hosszú távú mágneses rendeződés fő hajtóereje lehet a mágneses kölcsönhatás réteges szerkezetből adódó anizotrópiája is [29].

Infrastrukturális fejlesztések

Elkészítették és a portugál együttműködő félnél (Instituto de Medicina Molecular) illetve az amerikai együttműködő csoportnál (Tulane University) üzembe helyezték a magneto-optikai maláriadiagnosztikai eszköz egy-egy új példányát, melyekkel parazita kultúrákon és egérkísérletekben folytak/folynak tesztmérések. A Portugáliában használt eszközt használták a thaiföldön folyó klinikai tesztekhez.

A projekt első évében üzembe helyezett időfelbontásos terahertz spektrométert, mely által lefedett spektrális tartomány 0,1–5,5 THz, sikeresen tesztelték mágneses térben végzett mérések során. Ezen kombinált rendszer a projekt során kulcsfontosságú szereppel bír az optikai egyenirányítás

vizsgálatában multiferro rendeződést mutató anyagok mágneses gerjesztéseinél. Egy új antenna párt is beszereztek, mellyel ugyanezt az eszközt fogjuk használni szerves minták mérésére.

Kialakítottak egy új mérőrendszert, mellyel multiferroikus rendet mutató anyagokban tudják tanulmányozni a sztatikus magnetoelktromos effektust.

b) Tudomány és társadalom

Az optikai egyenirányító anyagok, a mágneses skyrmionok és a maláriakutatás terén elért eredményeik népszerűsítő formában megjelentek az MTA és a BME honlapján. A maláriakutatásban elért eredményeikért a csoport kapta a Gran Prize 2016 interdiszciplináris innovációs díjat. Kutatásaikról a *Duna televízió* (Novum az innováció, a tudomány és a technológia magazinműsora), az *Innotéka* és az *Élet és tudomány* folyóiratok számoltak be. Kutatóik az ország több gimnáziumában és hazai diákkonferenciákon tartottak népszerűsítő előadást kutatásaikról.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Megrendezték 2015. szeptember 6-11. között a *2nd Grandmaster PhD Workshop in Physics* nemzetközi diákkonferenciát, melyen a résztvevő hallgatókon kívül neves kutatók tartottak plenáris előadásokat a skyrmionok fizikájáról. <http://magnetooptics.phy.bme.hu/2nd-grandmaster/>

Új együttműködések: University of Kyoto, University of Basel, Institute for Solid State Research, Dresden.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Marie Curie Innovative Training Network pályázatot nyújtottak be *Terahertz probing of innovative nanolayers and structures* (2017).

DAAD német-magyar bilaterális pályázatot nyertek el *Static and dynamic properties of Néel-type skyrmions in multiferroic lacunar spinel compounds* témában (2016).

Elnyerték az Új Nemzeti Kiválósági Program doktorjelölti ösztöndíját 2016.

Ausztrál résztvevőkkel (University of Western Australia; Institute, Melbourne) közösen elnyerték a National Health and Medical Research Council kutatási támogatását *Field-based evaluation of a novel magneto-optical technique to diagnose malaria* témában (2016).

Egy kutató elnyerte a Pro Progressio doktorjelölti ösztöndíjat 2016 októberétől.

OTKA NNA122879 pályázatot nyertek el *Electric control of the optical magnetoelectric effect* témában (2016).

Egy posztdoktor kutatóként csatlakozott csoportjukhoz 2015 szeptemberétől, elnyerve az MTA posztdoktori program támogatását.

Elnyerték a Pro Progressio doktorjelölti ösztöndíjat 2015 októberétől.

A 2015-ös BME Tudományos Diákköri Konferencián első díjat és rektori különdíjat nyertek a Fizika-matematika szekcióban.

MTA-BME LENDÜLET SPINTRONIKAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Simon Ferenc, az MTA doktora
1111 Műegyetem rkp. 3.

telefon: (1) 463 1215; fax: (1) 463 1480; e-mail: f.simon@eik.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2015

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport 2015 novemberében indult. A beszámolási időszak legfontosabb feladatai a humán és eszköz erőforrások beszerzése és konszolidálása volt. A nagyértékű műszereiket – melyek a kísérleti munkához elengedhetetlenek – (úgy mint impulzusüzemű lézer, nagysebességű oszcilloszkóp, számítógépek) beszerezték. Ezen berendezések üzembe helyezése és beépítése a már meglévő kísérleti berendezésekbe is megtörtént. A tudományos munka a munkatervben lefektetett vállalások mentén halad lényegében 100 %-os hatékonysággal: az ODMR spektrométerük felépítését optimálták, robusztusabbá tették, ill. a munkatervben vállalt cseppfolyós kriosztát beüzemelése is megtörtént. Az alkáli atomokkal dópolt szén nanoszerkezetek területén sikerült a munkatervben vállalt anyagokat előállítani, és ezek alapvető jellemzőit (spin és töltésdinamika) vizsgálni spektroszkópiai módszerekkel. Az NMR mérésekhez szükséges mérőfej elkészült, ill. az ac impedancia mérő mérőfejet is kiterjesztették változtatható mérések elvégzésére. Az elméleti vizsgálataik során a vállalt program sikeres volt: sikerült a Dyakonov-Perel relaxációs mechanizmust általánosítaniuk a nagy spin-pálya esetére. Az erről szóló kézirat 2017 elején lett beküldve.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A legfontosabb eredményekhez tartozóan a 11 megadott cikkből 3-ra térnek ki részletesen:

1. Dóra, Simon Sci. Rep. 2015: topológikus szigetelők spin dinamikai tulajdonságait vizsgálták, megmutatták, hogy ezen anyagokban a szokásostól igen eltérő ún. nemkonvencionális spin dinamikai viselkedés figyelhető meg. A szokásos anyagokban a dinamikus spin-susceptibilitás Lorentz függvényalakot ölt, ezen anyagokban viszont igen erős eltérést tapasztaltunk ettől.
2. Kiss, Szolnoki, Simon, Sci. Rep. 2016: az ún. Elliott-Yafet spin relaxációs mechanizmust általánosították a nagy spin-pálya esetére. Megmutatták, hogy ez a relaxációs viselkedés az aranyban áll elő, ahol ezt már meg is figyelték, anélkül, hogy a hagyományos EY elmélet érvénytelenségét felismerték volna. Az elméleti eredmények tágabb kontextusban az új informatikai architektúrák memória és számítási egységeiben kaphatnak szerepet.
3. Gyüre et al. Rev. Sci Instrum 2015: egy új mérési technikát írtak le a mikrohullámú ellenállásmérési módszer pontosságának növelésére. A módszer lényege, hogy idődoménben mért adatokat dolgoznak fel Fourier transzformáció segítségével, szemben a hagyományos frekvenciadoménbeli módszerekkel. Ez a módszer potenciálisan alkalmas ipari hasznosításra is. Jelenleg egy hazai KKV (TKI Ferrit kft) telephelyén zajlik ipari körülmények között a mérőberendezés tesztelése.

b) Tudomány és társadalom

A Lendület csoport vezetője igen aktív a tudománynépszerűsítés területén. Az ő kezdeményezésére jött létre a BME-n a „BME TTK Sciencecamp” program, ami tehetséges

hazai és határon túli magyar fiatalok egyhetes benntlakásos táboroztatását szervezte meg érdekes tudományos programokon keresztül (<http://sciencecamp.ttk.bme.hu/>). Erről több híranyag is készült, köztük az MTA sajtóban is: http://mta.hu/mta_hirei/tudomanyos-tabor-teheteges-fiataloknak-106746.

A csoportvezető a Katolikus Rádióban adott egy egyórás interjút is a tudomány népszerűsítés témakörében, a hanganyag itt elérhető:

http://goliat.eik.bme.hu/~f.simon/publications/Media/Katolikus_Radio_20160925.mp3

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Hazai kapcsolatok: egy cikken dolgoztak az MTA Wigner Kutatóközpont kutatójával, aki később a Lendület csoporthoz csatlakozott is. Nemzetközi kooperációban University of Erlangen, DE csoportjával dolgoznak aktívan, a csoportból egy senior kutató meg is látogatta a laboratóriumukat. University of Vienna, AT és EPFL, Lausanne egy-egy csoportjával dolgoznak aktívan. Egy új együttműködés is elindult a Berlini Egyetem Reich kutatócsoportjával az alkálival dópolt szén nanoszerkezetek körében.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az NKFIH által kezelt K-16 programban beadott OTKA pályázatuk sikeres volt (azonosító K119442), címe: „Kölcsönhatás, topológia és dinamika egzotikus kvantumrendszerekben”. A pályázat vezető kutatója egyetemi tanár, az MTA doktora (a Lendület pályázatban részvevő kutató), a Lendület pályázat témavezetője pedig a pályázat senior kutatója. A pályázat teljes keretösszege 48 M Ft. A tudományos célok, bár tematikailag rokonságban állnak a két pályázatban, igyekeztek a komolyabb átfedéseket elkerülni azért, hogy jól behatárolható legyen a finanszírozók felé a vállalások és pénzügyi támogatás hozzárendelése.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Dóra B, Simon F: Unusual spin dynamics in topological insulators. Scientific Reports, 5: 14844. 7 p. (2015)
2. Gyüre B, Márkus BG, Bernáth B, Murányi F, Simon F: A time domain based method for the accurate measurement of Q-factor and resonance frequency of microwave resonators. Review of Scientific Instruments, 86: 094702. 5 p. (2015)
3. Márkus BG, Simon F, Chacon-Torres J, Reich S, Szirmai P, Nafradi B, Forro L, Pichler T, Vecera P, Hauke F: Transport, magnetic and vibrational properties of chemically exfoliated few-layer graphene. Physica Status Solidi B-Basic Research, Paper 10.1002/pssb.201552296. (2015)
4. Quintavalle D, Márkus BG, Jánossy A, Simon F, Klupp G, Gyori MA, Kamarás K, Magnani G, Pontiroli D, Riccò M: Electronic and ionic conductivities in superionic Li₄C₆₀. Physical Review B Condensed Matter and Materials Physics, 93:(20) Paper 205103. 8 p. (2016)
5. Okvátovity Z, Simon F, Dóra B: Anomalous hyperfine coupling and nuclear magnetic relaxation in Weyl semimetals., Physical Review B Condensed Matter and Materials Physics, 94:(24) Paper 245141. (2016)

6. Markus BG, Szolnoki L, Ivan D, Dóra B, Szirmai P, Nafradi B, Forro L, Simon F: Anisotropic Elliott-Yafet theory and application to KC8 potassium intercalated graphite. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, 253:(12) 2505-2508 (2016)
7. Márkus BG, Márkus F: Quantum particle motion in absorbing harmonic trap. *Indian Journal of Physics*, 90:(4) 441-446 (2016)
8. Kiss A, Szolnoki L, Simon F: The Elliott-Yafet theory of spin relaxation generalized for large spin-orbit coupling. *Scientific Reports*, 6: 22706 (2016)
9. Dóra B, Herbut IF: Quadratic band touching with long-range interactions in and out of equilibrium. *Physical Review B Condensed Matter and Materials Physics*, 94: 155134 (2016)
10. Chacón-Torres JC, Dzsaber S, Vega-Diaz SM, Akbarzadeh J, Peterlik H, Kotakoski J, Argentero G, Meyer JC, Pichler T, Simon F, Terrones M, Reich S: Potassium intercalated multiwalled carbon nanotubes. *Carbon*, 105: 90-95 (2016)
11. Koltai J, Mezei G, Zolyomi V, Kurti J, Kuzmany H, Pichler T, Simon F: Controlled Isotope Arrangement in C-13 Enriched Carbon Nanotubes. *Journal of Physical Chemistry C*, 120: 29520 (2016)

MTA–BME LENDÜLET STATISZTIKUS TÉRELMÉLETI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Takács Gábor, az MTA doktora
BME Elméleti Fizika Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.
telefon: (1) 463 4110; fax: (1) 463 3567; e-mail: takacsg@eik.bme.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport a 2012-ben elnyert Lendület pályázat alapján jött létre, fő feladata elméleti fizikai kutatások folytatása a statisztikus térelmélet területén. Ezen kívül a csoport részt vesz az oktatásban, valamint MSc és PhD diákok témavezetésében.

Az ötéves kutatási tervben alacsony-dimenziós térelméleti megközelítések, valamint az integrálhatóságon alapuló módszerek fejlesztését, illetve alkalmazását irányozták elő a statisztikus fizika, illetve a kondenzált anyagok fizikája időszerű problémáira.

A 2016-ra vonatkozó éves munkatervben megfogalmazott főbb célok és teljesülésük:

Nemegyensúlyi időfejlődés kvantumtérelméletekben: Sikeresen kifejlesztettek egy renormálási csoport módszerekkel javított csonkolt Hamiltoni módszert, amit az Ising térelméletre alkalmaztak [8]. Ez a kutatási irány elvezetett a kutatóév legjelentősebb eredményéhez.

Integrálható kvantumtérelméleti kvencsek vizsgálata form faktor formalizmuson alapuló módszerrel: Form faktorokon alapuló integrálegyenletrendszerrel állítottak fel, aminek alkalmazásával sikerült meghatározni sinh-Gordon elméletbeli kvencsek átfedési függvényét [2].

Form faktor spektrális összegek perturbált minimálmodellekben (Ising, Potts és azok trikritikus verziói) a Zamolodchikov-féle „roaming” trajektóriák segítségével: Az eredetileg csak az energia-impulzus tenzorra kifejlesztett módszert kiterjesztve, sikerült más fizikailag releváns operátorok formfaktorait is meghatározni a trikritikus Ising modellben [6].

A TCSA renormálási csoport továbbfejlesztése: A renormálási csoport terén tett fejlesztéseket alkalmaztuk a [3,8] cikkekben.

Egzakt eredmények kvantum kvencsekben: Egy erősen korrelált bozonikus hopping modellt sikerült az XX láncra leképezve egzakt eredményeket kapni a modellbeli kvantum kvencsek valós idejű dinamikájáról [5].

Kvencsek szemiklasszikus leírása: Sikerült egy univerzális szemiklasszikus leírást kifejleszteni kvantumtérelméletek hirtelen kvencs utáni időfejlődésének leírására [1].

Áramot fenntartó nemegyensúlyi stacionárius állapotok vizsgálata egydimenziós kvantumrendszerekben: A munka jelenleg folyamatban, az eredmények publikálását hamarosan tervezik.

Összefonódottsági entrópia vizsgálata egydimenziós kölcsönható rendszerben: Sikerült az összefonódottsági entrópia meghatározni konform térelméletekben és perturbációikban [4,7]; a konform eredményeket spin láncokon végzett DMRG számításokkal összevetve sikerült igazolni azok helyességét [7].

Eredetileg nem tervezett eredmények (részleteket ld. a II/a alfejezetben)

Az 1+1 dimenziós kvantumszindinamika részecskespektruma és fázisdiagramja

Bezárás hatása zárt kvantumrendszerek időfejlődésére

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kvantumszindinamika fázis szerkezete 1+1 dimenzióban

Sikerült meghatározniuk a kvantumszindinamika 1+1 dimenziós változatának spektrumát és fázisait zérus, illetve nemzérus sűrűség mellett is [32]. A kémiai potenciál jelenléte fermion rendszerekben komoly nehézséget jelent, amit három nemperturbatív módszer kombinálásával sikerült áthidalni. Kiderült, hogy zérus sűrűség mellett Ising osztályú kvantum kritikus átalakulás, nemzérus sűrűségen pedig egzotikus szuperfolyékonyságot, illetve töltéssűrűség hullámot mutató fázisok vannak jelen.

A bezárás hatása a nemgyensúlyi időfejlődésre

Azt tapasztalták, hogy az ún. Ising spinláncon a paraméterek egy széles tartományában ez a terjedés nem észlelhető: az információ lokalizált marad. Ezzel együtt a rendszer összefonódási entrópiája a megszokott lineáris növekedés helyett nagyon gyorsan telítődik, jóval a rendszerméretből adódó maximális érték alatt [39]. Egy másik fontos eredményük, hogy a mezonok tulajdonságait ki lehet olvasni a spinlánc mágnesezettségének időbeli. Az elméleti analízis azt mutatja, hogy ennek révén a spinlánc gerjesztéseinek jellemzői kísérletileg is sokkal hatékonyabban mérhetőek.

b) Tudomány és társadalom

Elméleti kutatás révén a fenti eredmények önmagukban nincsenek közvetlen társadalmi hatással. A csoportvezető ismeretterjesztő előadást tartott részecskefizikáról energetikai mérnök-hallgatók számára, valamint az ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnáziumában tartott előadást a részecskefizikáról. Ezen kívül a csoportvezető tartotta a BME Nyílt Napon a Fizikai Intézet ismeretterjesztő előadását „Hullámok, részecskék és a kvantumvilág csodái” címmel.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Kutatásaik során együttműködtek az MTA-BME „Lendület” Egzotikus Kvantumfázisok Kutatócsoporttal [4]. Nemzetközi téren aktív együttműködéseik: a pisai Scuola Normale Superiore, a trieszti SISSA [7], a Brookhaven National Laboratory [2], illetve az University of Durham kutatóival [1]. Zárójelben az adott kollaborációban már megjelent publikációk sorszáma szerepel.

A csoport tagjai számos nemzetközi konferencián szerepeltek meghívott előadással: Quantum Integrable Models in and out of Equilibrium (Cambridge, UK). New approaches to non-equilibrium and random systems, KPZ integrability, universality, applications and experiments (Santa Barbara, USA). Conformal Field Theories and Renormalization Group Flows in Dimensions $d > 2$ (The Galileo Galilei Institute for Theoretical Physics, Florence, Italy). ICFT 2016 - UK Meeting on Integrable and Conformal Field Theory (King's College London, UK). New Trends in Low-Dimensional Physics: Quantum Integrability and Applications (Chinese Academy of Sciences, Beijing, China). Seminar at the Department of Physics (University of Ljubljana, Slovenia).

További nemzetközi előadások: Quantum Integrable Models in and out of Equilibrium (Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences, Cambridge, UK). RAQIS'16: Recent Advances in Quantum Integrable Systems (University of Geneva, Switzerland).

A csoport tagjai számos további előadást tartottak az ELTE-n, a BME-n, és a Wigner Fizikai Kutatóközpontban.

A csoportvezető a BME-n „Elektrodinamika 1” címmel a tavaszi félévben heti 2 órás, az őszi félévben „Elektrodinamika 2” címmel heti 2 órás egyetemi kurzust tartott, valamint „Részecskefizika” címmel egyetemi előadást, amelyhez a csoport egy másik tagja tartotta a gyakorlatot. A csoport tagjai közül többen további gyakorlatok tartásával vettek részt az egyetemi oktatásban.

Az év folyamán a BME Doktori Iskola egy PhD hallgatója, valamint a BME egy, és az ELTE két MSc diákja dolgozott témavezetésük alatt. Ezen kívül egy PhD eljárás folyamatban van.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport két tagja MTA Prémium Posztdoktori Ösztöndíjat nyert el, 29 720 E Ft, illetve 29 178 E Ft összköltségvetéssel, 3 éves futamidővel. Ezen kívül a csoportvezető vezetésével elnyertek egy NKFIH K2016 kutatási pályázatot 29 851 E Ft összköltségvetéssel, 4 éves futamidővel, valamint a csoport részt vesz egy 2016-ban elnyert OTKA-SNN Magyar-szlovén kétoldalú pályázatban, amelynek összköltségvetése 31 001 E Ft, futamideje 3 év.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kormos M, Zaránd G: Quantum quenches in the sine-Gordon model: a semiclassical approach. *Phys. Rev. E*, 93: 062101 (2016)
2. Horváth DX, Sotiriadis S, Takács G: Initial states in integrable quantum field theory quenches from an integral equation hierarchy. *Nucl. Phys. B*, 902: 508-547 (2016)
3. Azaria P, Konik RM, Lecheminant Ph, Pálmai T, Takács G, Tsvetik AM: Particle Formation and Ordering in Strongly Correlated Fermionic Systems: Solving a Model of Quantum Chromodynamics. *Phys. Rev. D*, 94: 045003 (2016)
4. Pálmai T: Entanglement Entropy from the Truncated Conformal Space. *Phys. Lett. B*, 759: 439-445 (2016)
5. Pozsgay B, Eisler V: Real-time dynamics in a strongly interacting bosonic hopping model: Global quenches and mapping to the XX chain. *J. Stat. Mech.*, 1605: 053107 (2016)
6. Horváth DX, Dorey PE, Takács G: Roaming form factors for the tricritical to critical Ising flow. *JHEP*, 1607: 051 (2016)
7. Taddia L, Ortolani F, Pálmai T: Rényi entanglement entropies of descendant states in critical systems with boundaries: conformal field theory and spin chains. *J. Stat. Mech.*, 1609: 093104 (2016)
8. Rakovszky T, Mestyán M, Collura M, Kormos M, Takács G: Hamiltonian truncation approach to quenches in the Ising field theory. *Nucl. Phys. B*, 911: 805-845 (2016)
9. Kormos M, Collura M, Takács G, Calabrese P: Real time confinement following a quantum quench to a non-integrable model. *Nature Physics AOP*, (2016) doi:10.1038/nphys3934. (AOP: Advance Online Publication)

MTA-DE LENDÜLET FUNKCIONÁLISANALÍZIS KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Molnár Lajos, az MTA doktora
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.; 4002 Debrecen, Pf. 400.
telefon: (52) 544 097; fax: (52) 544 548; e-mail: molnarl@science.unideb.hu
honlap: <http://mat.unideb.hu/nagy-gergo/kutatas/a.html>
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A vizsgálatok központi területe matematikai objektumok egy adott kategóriájába tartozó struktúrák közötti, azok bizonyos jellemzőit invariánsan hagyó leképezésekre (ún. izomorfizmusokra) vonatkozik. A tervben különféle struktúrák izomorfizmusainak tanulmányozása szerepel, melyek között vannak operátorok, illetve függvények által alkotott halmazok ill. a kvantummechanika matematikai leírásában megjelenő objektumok (úgynevezett kvantumstruktúrák) is. A terv egy másik része kvantumstruktúrákon definiált műveletek algebrai szempontból való vizsgálatára és jellemzéseikre vonatkozik. További kutatási cél annak a kérdésnek a vizsgálata, hogy matematikai struktúrák transzformációi milyen módon meghatározottak lokális hatásaik által.

A csoport működésének első három évében az utóbbi problémakörhöz tartozó érdemi eredményeket nyert, továbbá komplex algebrai és geometriai jellemzőkkel rendelkező bizonyos általános struktúrák és kvantumstruktúrák izomorfizmusaira vonatkozó új tételeket igazolt.

A beszámolóévben végzett vizsgálatok folyamán pedig túlnyomórészt az alábbi területeken születtek eredmények:

- *különféle távolságmértékeket megőrző transzformációk szerkezetének leírása;*
- *operátorközepek tanulmányozása.*

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A beszámolási időszakban született eredmények közül a következők kerülnek bemutatásra

A csoport vezetője és egyik tagja az operátorok közepeivel kapcsolatos vizsgálatokat folytatott. Ezek megkonstruálásában kulcsfontosságú szerephez jutnak az ún. operátor monoton függvények. A beszámolóév folyamán elért legkiemelkedőbb eredmény egy csoporttag elbírálás alatt álló cikkének fő tétele, mely egy klasszikus, egyváltozós operátor monoton függvények jellemzéséről szóló mély eredmény messzemenő általánosítása a többváltozós esetre, nem kommutatív változók esetén. Ebben megjelenik egy tetszőleges változószámú operátor monoton függvényekre vonatkozó absztrakt integrálformula, mely az egydimenziós esetben sem volt ismert a szakirodalomban. Az említett cikkbeli eredmények felhasználásával explicit, zárt képletek adhatók pozitív operátoroknak az utóbbi évtizedekben definiált többváltozós operátorközepeire, ami igen nagy újdonság eme közepek számos alkalmazással bíró, kiterjedt elméletében. Kiemelendő, hogy a dolgozat fő tételének igazolásához igen mély apparátus kidolgozására és több új fogalom bevezetésére volt szükség.

A csoportvezető egyik cikkében operátorokkal reprezentálható elemekből álló absztrakt objektumok, ún. C^* -algebrák pozitív elemeinek halmazai (más néven pozitív kúpok) közötti, számtani, mértani és harmonikus közepeket önmagukba, ill. egymásba transzformáló

leképezéseket tanulmányozott. Ezek a legalapvetőbb operátorközepek, melyek egyben műveletek is az utóbbi halmazokon. A megjelenés alatt álló publikációjukban megfogalmazott fő tételek pontos leírását adják két pozitív kúp közötti, a szóban forgó három közép valamelyikére vonatkozó izomorfizmusoknak.

A csoportvezető az [2] közleményben a pozitív kúpok azon leképezéseit tanulmányozta, melyek megőriznek egyfajta távolságmértéket, ún. kvázi-entrópiát, ami a kvantum információelméletben fontos szerepet játszó matematikai fogalom. Az [2] cikkben a fizikai szempontból legalapvetőbb kvázi-entrópiákra vonatkozó invariancia-transzformációkat sikerült meghatározni.

b) Tudomány és társadalom

A csoport kutatási eredményeinek társadalmi aspektusaira vonatkozóan az alábbi általános érvényű kijelentés tehető: Az új elméleti matematikai eredmények haszna, ha azok nem elszigetelt vizsgálatok során születnek, nagyrészt a tudomány világán belül mutatkozik meg úgy, hogy azok az eredmények integrálódnak az adott tudományterület ismeretei közé, ezzel további kutatások majd újabb eredmények alapjául szolgálva. Az ilyen módon gyarapodó ismeretek közül a fontosabbak megjelenhetnek az oktatás különböző területein, ami már a társadalom számára is közvetlen haszonnal bírhat.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A beszámolási év során a csoport két, nemzetközi szinten vezető kutatót, a University of Ljubljana (Szlovénia) professzorait látta vendégül. Egyikük a megőrzési problémák területének kiemelkedő matematikusa, másikuk szakterülete az asszociatív algebrák és gyűrűk. További vendégkutatók voltak a kutatócsoportnál: 1-1 professzor Horvátországból (University of Zagreb), Franciaországból (University of Lille), valamint két kutató Tajvanról (National Sun Yat-sen University).

A tagok kutatói mobilitásával kapcsolatosan kiemelendők a következők: Egyikük vendégkutatóként két alkalommal tett több hetes látogatást a Sungkyunkwan University-n (Koreai Köztársaság) egy ottani kollégájánál. A csoport vezetője és két tagja mintegy két hétig folytattak vizsgálatokat a National Sun Yat-sen University-n egy helyi kutatócsoporttal. Az elért közös eredményeikből hosszú dolgozat született, ami egy vezető matematikai fizikai folyóiratnál áll elbírálás alatt. Ezen kívül a kint-tartózkodó csoporttagok előadásokat is tartottak egy, az utóbbi egyetemen szervezett mini-workshopen, valamint meghívott előadókként részt vettek egy további, Tajvanon megrendezett nemzetközi konferencián. A mobilitást illetően megjegyzendő még, hogy a csoportvezető egy hónapig volt vendégkutató a University of Calabria-n (Olaszország).

A kutatócsoport konferenciaszervezési tevékenységéhez tartozik az ILAS (International Linear Algebra Society, a lineáris algebra világszervezete) 2016-os leuveni (Belgium) találkozásának egy szimpóziuma, amelynek témája a nem-lineáris megőrzési problémák kiterjedt területe volt.

A csoport felsőoktatásban végzett munkájával kapcsolatban új elemként említendő, hogy annak vezetője tisztségbe lépett a Szegedi Tudományegyetem Matematika- és

Számítástudományok Doktori Iskolájának és ebben a minőségében jelenleg PhD témavezetője a csoport legfiatalabb tagjának.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A beszámolási évben a kutatócsoport elnyert egy NKFI-OTKA pályázatot, aminek a futamideje négy év, a támogatás összege 11 976 E Ft.

Ezen kívül egy sikeres nemzetközi konferencia pályázatot is benyújtott a csoport, a megítélt támogatás összege 500 E Ft, a pályázat kiírója az MTA volt.

A kutatócsoport egyik tagja elnyert egy, a National Research Foundation of Korea (NRF)(MSIP) által kiírt pályázatot, melynek neve Free functions and gradient flows in metric spaces, összege 37 142 E Ft.

Egy másik tag sikeresen pályázott az Emberi Erőforrások Minisztériuma - Emberi Erőforrás Támogatáskezelő által meghirdetett "A nemzet fiatal tehetségeiért" ösztöndíjra, amelynek keretében 500 E Ft-os támogatásban részesült.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Botelho F, Molnár L, Nagy G: Linear bijections on von Neumann factors commuting with λ -Aluthge transform. Bull. Lond. Math. Soc., 48: 74-84 (2016) <http://real.mtak.hu/32660>
2. Molnár L: Maps on the positive definite cone of a C*-algebra preserving certain quasi-entropies. J. Math. Anal. Appl., 447: (2017) 206-221 (2017) <http://real.mtak.hu/45569>
3. Molnár L, Pitrik J, Virosztek D: Maps on positive definite matrices preserving Bregman and Jensen divergences. Linear Algebra Appl., 495: 174-189 (2016) <http://arxiv.org/abs/1509.02316>
4. Molnár L, Virosztek D: Continuous Jordan triple endomorphisms of P_2 . J. Math. Anal. Appl., 438: 828-839 (2016) <http://arxiv.org/abs/1506.06223>
5. Pálfia M: Operator means of probability measures and generalized Karcher equations. Adv. Math., 289: 951-1007 (2016) <http://arxiv.org/abs/1601.06777>

MTA–ELTE LENDÜLET BIOFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Derényi Imre, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: (1) 372 2766; fax: (1) 372 2757; e-mail: derenyi@elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2011

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A rák kialakulásához vezető szomatikus evolúció megértése.

A horizontális géntranszfer szerepének megértése a mikrobiális evolúció során.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport legkiemelkedőbb eredménye a nagy presztízsű Nature Communications folyóiratban jelent meg (Nature Comm. 8, 14545 (2017); doi:10.1038/ncomms14545), melynek lényege, hogy analitikus eszközökkel mutattak rá a hierarchikus szöveti szerveződés szerepére a szövetek rák elleni védekezésében. Az eredmény rövid ismertetése:

Szerveink felépítéséhez, majd folyamatos működéséhez és megújulásához sejtosztódások sorozatára van szükség, ami a genetikai állomány sorozatos megkettőződésével jár. Bár a DNS másolása meglehetősen pontos folyamat, mégsem hibamentes, emberi sejtek esetén minden osztódás során átlagosan néhány mutáció várható. A mutációk felhalmozódása testi sejtjeink hibás működéséhez és rákos daganatok kialakulásához vezethet. Szervezetünk működése szempontjából tehát központi jelentősége van az olyan szövet-megújulási programoknak, amelyek képesek kordában tartani a mutációk felhalmozódását, az egyes sejtekhez vezető osztódások számának alacsonyan tartásával.

Az osztódások számának elvi minimuma a szöveti sejtek teljes számának bináris logaritmus, ami kizárólag úgy valósítható meg, ha egy sejtől kiindulva minden egyes sejtet egy tökéletes bináris fa mentén történő azonos számú osztódással hozunk létre. A bináris differenciálódás könnyen megvalósítható a nem megújuló szöveteknél (például az idegsejtek vagy a petesejtek esetén), ahol az egyedfejlődés során egyszer és egyszerre kell “legyártani” a sejteket. Más a helyzet a szervezet nagy részét adó, ún. megújuló szövetekben: itt a bináris fa mentén történő osztódás csak valószínűtlenül pontos és rendkívül törekeny ütemezés mellett lenne lehetséges. A valóságban ezekben a szövetekben ún. szöveti őssejteket találunk, melyek fokozatosan differenciálódott utódsejtek hierarchikus láncolata mentén biztosítják a szövet folyamatos megújulását.

A kutatócsoport tagjai a Nature Communications-ben megjelent cikkükben megmutatták, hogy a hierarchikus differenciálódással is az elvi minimum közelébe csökkenthető a szövetmegújítással járó sejtosztódások száma, feltéve, ha elegendő számú és a szöveti őssejt felé közeledve egyre lassabban osztódó sejtípus (vagyis a szöveti őssejt feletti hierarchikus szint) áll rendelkezésre. Az eredmények kézenfekvő magyarázatot és konkrét mechanizmust adnak a rákkutatás klasszikus Peto paradoxójára, vagyis arra a megfigyelésre, hogy a soksejtű élőlényekben a rák kialakulásának gyakorisága nem mutat korrelációt sem az élőlény méretével, sem az élettartamával. A mechanizmus lényege, hogy a nagyméretű élőlények nagyméretű szövetei a hierarchikus differenciálódás finomhangolásával válhatnak védettebbé a rák kialakulásával szemben. A szöveti differenciálódási hierarchiák jelenleg is zajló kísérleti feltárása szempontjából pedig a szerzők eredményei azt az izgalmas jóslatot nyújtják, hogy a

szöveti össejtek homogénnek gondolt populációi valójában különböző ütemben osztódó sejtekből tevődnek össze.

További eredmények

A horizontális géntranszfer a korai evolúció egy alapvető folyamata volt. Ennek feltárása egy aktív kutatási terület. Korábbi eredmények (Nelson-Sathi et al.) arra engedtek következtetni, hogy nagy mennyiségű horizontális géntranszfer történt az archea vonalak gyökereinél. A kutatócsoport azonban megfelelő filogenetikai modellek segítségével újraértelmezte az adatokat, és megmutatta, hogy az archea élőlények hosszú időn keresztül folyamatosan vettek fel idegen géneket.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Laboratoire de Biometrie et Biologie Evolutive in Lyon, France
MTA TTK
MTA EK

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

MTA-ELTE “Lendület” Evolúciós Genomika Kutatócsoport
ERC Starting Grant: Evolutionary Genomics Research Group

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Derényi I, Szöllősi GJ: Hierarchical tissue organization as a general mechanism to limit the accumulation of somatic mutations. *Nature Communications*, 8: 14545. 8 p. (2017)
2. Daubin V, Szöllősi GJ: Horizontal Gene Transfer and the History of Life. *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology*, 9:(2) Paper a018036. 12 p. (2016)
3. Groussin M, Boussau B, Szöllősi GJ, Eme L, Gouy M, Brochier-Armanet C, Daubin V: Gene acquisitions from bacteria at the origins of major archaeal clades are vastly overestimated. *Molecular Biology and Evolution*, 33:(2) 305-310 (2016)

MTA-ELTE LENDÜLET CMS RÉSZECSCKE- ÉS MAGFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Pásztor Gabriella, PhD
ELTE TTK Fizikai Intézet, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1A.
telefon: (1) 372 2760; e-mail: gpasztor@caesar.elte.hu
honlap: <http://cms.elte.hu/>
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2013

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Terveknek megfelelően több irányba is folyt a kutatás 2016-ban: eleinte az LHC 2015-ös proton-proton (p-p) ütközéseinek adatait felhasználva, majd analíziseket a 2016-os több mint tízszer nagyobb adathalmazra is kiterjesztve, amelyek felvételében a csoport is részt vett a CERN-ben:

A két-bozon hatáskeresztmetszet mérése 13 TeV tömegközépponti energián, amely hatáskeresztmetszet nagy invariáns tömegű tartománya érzékeny az új fizika esetleges jelenlétére anomális mértékbozon-csatolások megjelenésén keresztül.

Szuperszimmetrikus részecskék közvetlen keresése, amely pozitív eredmény esetén rávilágíthat a sötét anyag rejtélyére.

Azonos részecskék között fellépő korrelációk vizsgálata p-p ütközésekben hadronikus végállapotokban.

Vektor-mezon keletkezés vizsgálata p-p és Pb-Pb ütközésekben.

Centrális exkluzív pion-pion keletkezés vizsgálata p-p ütközésekben 5,02 TeV és 13 TeV tömegközépponti energián.

A csoport tagjai több vezetőpozíciót is betöltöttek a CMS kísérletben:

Az egyik résztvevő a CMS kis szögű és kis energiaátadású hadron folyamatokat vizsgáló fizika munkacsoportjának egyik vezetője kutatója, aki 2016-ban felelős volt a speciális mérési időszakok felügyeletéért és a nyalábidőre vonatkozó igények kidolgozásáért, valamint aki számos e témában végzett kutatás aktív résztvevője, belső opponense volt.

Az egyik résztvevő a CMS nehézion adatgyűjtési időszakában a kísérlet run kordinátora volt, és így felelős volt az adatgyűjtés előkészítéséért, lebonyolításáért, sikeréért.

Az egyik résztvevő az elektron - foton trigger csoport koordinátora volt, és így felelős a kísérlet elektron és foton triggerének fejlesztéséért, működtetéséért és minőségéért.

Egy résztvevő a Standard Model fizikai munkacsoport trigger koordinátora volt, és így felelős a trigger stratégia kidolgozásáért és megvalósításáért.

A csoport tagjai számos cikk belső ellenőrzésében is részt vettek.

A csoport a CMS detektor működtetéséhez is hozzájárult, különös tekintettel a nulla szögű kaloriméterre, a luminozítás mérő detektorokra, a belső nyomkövető detektorra, a trigger rendszerre és a detektor működési feltételeit rögzítő adatbázisra.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A CMS kísérlet 2016-os adatai lehetővé tették a két-bozon végállapotok tanulmányozását. A nagy érdeklődést kiváltó $m \sim 750$ GeV tömegnél észlelt két-foton eseménytöbbséget nem nyert megerősítést, így korlátokat adtak meg az Új Fizikát jósoló elméletek paramétereire.

Megmérésre került, a foton-foton kölcsönhatásból keletkező W bozon párok vizsgálatával, a négyes $\gamma\gamma WW$ mértékcsatolás.

A szuperszimmetrikus részecskék keresése egyre jobban leszűkíti az elmélet lehetséges paramétereit.

A hadronikus végállapotok tanulmányozásával az erős kölcsönhatásba pillantottak bele extrém körülmények között.

b) Tudomány és társadalom

A csoport egy tagja megosztott Akadémiai Díjat nyert.

A csoport vezető tagjai oktatói munkát végeznek az ELTE TTK-n. A kutatási témához kapcsolódó és egyéb egyetemi előadásokon kívül, számos TDK, BSc, MSc, PhD diák munkáját is irányítják. 1 PhD, 1 MSc, 1 BSc diploma került megvédésre 2016-ban. Két diák kijutott a 2017-es OTDK-ra, miután az ELTE TDK konferenciáján (1. illetve 3.) helyezést ért el.

A csoport tagjai ismeretterjesztő előadásokkal, média szereplésekkel is népszerűsítik a tudományt. Részt vesznek a CERN Hungarian Teachers Program oktatói között és a Tarján Imre középiskolai fizika verseny zsűrijében.

A csoport megrendezte a CMS Kollaboráció Trigger Csoportjának a 3-napos munkakonferenciáját az ELTE-n, és elnyerte a CMS kollaboráció 2018-as konferenciájának a rendezési jogát. Vezető szerepet játszott a QCD@LHC 2017 konferencia, a Zimányi Téli Iskola, a 24. Low-x Konferencia szervezésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport a nemzetközi CMS Együttműködés tagja. A CMS-nek nagyjából 5300 tagja van 47 ország 201 intézményéből. A kísérleten belül a technikai jellegű ZDC munkát a Kansasi Egyetem, a BRIL tevékenységeket a Princeton Egyetem munkatársának segítségével, a trigger feladatokat a német DESY és számos más intézet, a Bose-Einstein analízist a brazil UNESP, míg a $Z\gamma$ mérést a taiwani MCU kutatóival együttműködve végzik.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Két kutató Fulbright ösztöndíjjal 6-6 hónapot töltött az USA-ban.

Egy kutató elnyerte egy CERN Fellow pályázatot, amellyel 3 évet tölthet a világvezető nemzetközi kutatóközpontban.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

A csoport 44 publikált cikk szerzője a CMS Együttműködéssel 2016-ban. Ezek közül kiemelendők:

1. CMS Collaboration: Search for high-mass diphoton resonances in proton-proton collisions at 13 TeV and combination with 8 TeV search. CMS-EXO-16-027, CERN-EP-2016-216, arXiv:1609.02507, Phys. Lett. B, 767: 147-170 (2017)
2. CMS Collaboration: Searches for R-parity-violating supersymmetry in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV in final states with 0–4 leptons. Phys. Rev. D, 94: 112009 (2016)
3. CMS Collaboration: Evidence for exclusive gamma gamma to W+W- production and constraints on anomalous quartic gauge couplings in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ and 8 TeV. CMS-FSQ-13-008, CERN-EP-2016-073, JHEP, 08: 119 (2016)
4. CMS Collaboration: Studies of inclusive four-jet production with two b-tagged jets in proton-proton collisions at 7 TeV. CMS-FSQ-13-010, CERN-EP-2016-191, Phys. Rev. D, 94: 112005 (2016)
5. CMS Collaboration: Azimuthal decorrelation of jets widely separated in rapidity in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV. CMS-FSQ-12-002, CERN-PH-EP-2015-309, J. High Energy Phys., 08: 139 (2016)

MTA–ELTE LENDÜLET DINOSZAURUSZ KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Ósi Attila, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C.
telefon: (1) 372 2500 / 8722; fax: (1) 381 2130; e-mail: hungaros@gmail.com
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2011

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az 5 éves kutatási terv összefoglalása

Az öt éves kutatás részeként tervezett az iharkúti dinoszaurusz lelőhelyről előkerült, de még fel nem dolgozott, és az újonnan előkerülő gerinces maradványok összehasonlító anatómiai, taxonómiai és funkcionális morfológiai vizsgálata, a csontleletek csontszöveti elemzése, és az iharkúti fauna paleobiogeográfiai vizsgálata.

Az eddig elért eredmények

Kutatócsoport az eredeti terveknek megfelelően dokumentálta az iharkúti ősgerinces lelőhely faunájának anatómiai, csontszöveti és ősszállítási aspektusait. Vizsgálatok során számos gerinces taxon részletes csonttani, csontszöveti és funkcionális morfológiai elemzése megtörtént. Kutatócsoport publikálta az egyes csoportok taxonómiájára, evolúciójára, és paleobiológiájára vonatkozó, alapvető őslénytani és módszertani ismereteket. Az egyes fajok dokumentálása során kutatócsoport elemezte azok ősföldrajzi vonatkozásait is.

A beszámolóév feladata

Az iharkúti gerinces őslénytani lelőhely további feltárása, feltárandó területének 3D-s térképezése és értékelése, szedimentológiai vizsgálatok publikálása. A villányi triász korú ősgerinces lelőhely kutatása. A páncélos dinoszauruszok fogkopás- és rágásmechanizmusa evolúciós történetének publikálása. Az Ajkai Kőszén Formációból előkerült gerinces fossziliák dokumentálása. A medullaris csontszövet vizsgálata repülő hullőknél. Az iharkúti dinoszaurusz és krokodil tojánhéj-töredék továbbá koprolitok dokumentálása. A Hátszegi-medencében késő-kréta gerinces lelőhelyek tafonómiai és paleoökológiai vizsgálata. Testudinata taxon-karakter mátrix leírása és publikálása. Az iharkúti halfauna publikálása.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

Terepi kutatás, labormunka

Projekt ötödik éve alatt kutatócsoport elvégezte az iharkúti három hetes ásatásokat. Az ásatási munkák mellett iszapolás és 3D-s térképezés is történt. Az ásatások révén közel 1000 fog- és csontlelet, 1 részleges páncélos dinoszaurusz csontváz, az iszapolási anyag válogatása révén több mint 40 000 lelet (fogak, csontok, tojánhéjak, magok) került elő. Emellett megtörtént az összes maradvány preparálása konzerválása és leltározása. Az iharkúti ásatások mellett kutatások történtek az iharkúttal egykorú, de más környezetet jelentő Ajkai Kőszén Formáció anyagán is.

Az iharkúti lelőhely gerinces faunaelemeinek dokumentálása

Megtörtént az iharkúti halfauna részletes vizsgálata. A kajmánhalak mellett Pycnodontiformes halak maradványait írtuk le. Folytatódott az iharkúti krokodilfauna taxonómiai és paleobiogeográfiai vizsgálata. Az iharkútról előkerült teknősleletek vizsgálata rávilágított az európai késő-kréta teknős faunák paleobiogeográfiai történetére. Kutatócsoport feldolgozta más európai késő-kréta lelőhelyek krokodilfaunáit is és egy keleti illetve egy nyugati fauna provinciát sikerült elkülöníteni az egykori szigettengeren belül. Kutatócsoport megvizsgálta

az ismert páncélos dinoszauruszok (63 faj) fogazatát és koponyamorfológiáját és feltérképezte a csoport állkapocsmechanizmusának evolúcióját továbbá elvégezte az iharkúti *Ajkaceratops* és *Mochlodon* dinoszauruszok fogainak morfometriai értékelését; ez alapján statisztikai és zománcszerkezet-alapú elkülönítés nem lehetséges, azonban fogkopás alapján elkülöníthető a két növényevő faj.

Csontszövet-tani vizsgálatok

Kutatócsoport hisztológiai vizsgálatokkal olyan csontszövet-típust azonosított néhány *Bakonydraco* állkapocs-töredékben, mely a madaraknál ismert és tojáshéj-képzéshez használt medulláris csontszövet jellegét mutatja. Az Iharkútról előkerült több ezer apró tojáshéj-töredék legkülönbözőbb vizualizációs és analitikai vizsgálatával azonosították a töredékek diverz taxonómiai hovatartozását, ökológiai jelentőségét és egyedülállóságát az ismert fosszilis tojáshéj-együttesek közt.

Szedimentológiai, tafonómiai, paleoökológiai és ősszállatföldrajzi vizsgálatok

Szedimentológiai vizsgálatok révén igazolást nyert, hogy az iharkúti terület egykoron egy alacsony térszínen elhelyezkedő szövedékes folyó ártéri és meder kitöltéseit tartalmazza. A környezeti rekonstrukció lehetővé tette a leletanyag tafonómiai kiértékelését. A felfedezett 10 *Hungarosaurus* csontváz tafonómiai vizsgálata azt mutatja, hogy a páncélos dinoszauruszok nagyobb csordában élhettek és tetemeik egy tömeges halálközösséget reprezentálnak.

A kutatócsoport elvégezte az iharkútról ismert több ezer koprolit több szempontú vizsgálatát, továbbá kiemelt célja volt a felfedezett és dokumentált gerinces fauna tükrében a késő-kréta ősszállatföldrajzi viszonyok értelmezése. Eszerint az európai gerinces faunák jelentős része szigetfaunának tekinthető, melyekre jellemző volt az endemizmus, a különleges formák megjelenése, az alacsonyabb diverzitás, és egyes esetekben törpe/óriásnövés.

További lelőhelyek felfedezése és kutatása

A kutatócsoport publikálta az iharkúti lelőhellyel azonos korú Ajkai Kőszén Formáció első gerinces maradványait és az Alsóperei Bauxitból előkerült krokodilfog revízióját. Utóbbi jelentősége abban áll, hogy fontos állatföldrajzi adalékokkal szolgál a mára már eltűnt európai krokodilfauna megértéséhez. A kutatócsoport egy igen gazdag és diverz, döntően tengeri, középső- és késő-triász gerinces faunaelemekből álló leletegyüttest (koponya, állkapcsok, stb.) fedezett fel Villányban, a lelőhely mára közel 1500 leletet adott, melyek mind hazai mind európai viszonylatban meghatározóak.

b) Tudomány és társadalom

Ismeretterjesztő előadások: ELTE-TTK Geológus-Geofizikus Tehetségnap 2016, Széna Téri Általános Iskola, Székesfehérvár, Gánt; Sukoró, Raoul-Wallenberg Szakközépiskola (Budapest), Németbánya, Felfedezők Napja (Bp), Győr, Széchenyi István Egyetem, Mosonmagyaróvár, Élet és Tudomány, Földtudományos Forratag, Eplény, Pénzesgyőr, Bakonybél, Pápa, Bodajk

Egyetemi előadások: a kutatócsoport eredményeivel: ELTE: Reptilia és Aves MSc; Óslánytan Gyakorlat BSc; Gyűjtés és preparálás; Mérések és Megfigyelések a Geológiában Bsc, Paleoökológia MSc; Evolúciós biosztratigráfia MSc; Gerinces Paleontológia BSc; Eberhard Karls Egyetem, Tübingen: Paleobiology Seminars

Ismeretterjesztő cikk: Élet és Tudomány – „Első kézből” rovat (évf./szám): 2015/38, 2015/42, 2015/39, 2015/47, 2015/49, 2016/3, 2016/10, 2016/23

Élet és Tudomány – önálló témájú írások (évf./szám): Megalodon, az óriás fog (2015/28, p. 880-882), Kajmánhalak Magyarországon (2016/9, p. 265-267)

Természet Világa – rövid írások (évf./szám): 2015/10. Önálló témájú írások (évf./szám): Cápákról feketén-fehéren – régi írások még régebbi cápákról (2016/1, p. 25-28)

Médiamegjelenés: MTA hírek, Origo, Veol, Duna Tv Tudástár, Családbarát Magazin, M5 Mindenki Akadémiája, Karc FM, Magyar Idők, Kossuth Rádió Közelről, Klub Rádió

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Együttműködések

- University of Bucarest: A Tuştea (Románia, Hátszegi-medence) gerinces lelőhely tafonómiai vizsgálata
- Universitat Autònoma de Barcelona, Spanyolország: Az Ibériai-félsziget késő-kréta halfaunájának taxonómiai összegzése
- Bilbao-i Egyetem: Az európai felső-kréta páncélos dinoszauruszok ágyéki páncélzatának rekonstrukciója.
- Edinburgh Egyetem, UK.: Krokodilok testméret evolúciója.
- University Collage London, UK.: Új csontszövetani ábrázolási és kvantifikálási módszer kifejlesztése és alkalmazása a funkcionális csontszövetben.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Magyar Dinoszaurusz Alapítvány 2200 E Ft

Society of Vertebrate Paleontology ösztöndíja, a „1st International Meeting of Early-stage Researchers in Paleontology” konferencián tartott előadásért; 200 EUR

SYNTHESYS: Brüsszel, Természettudományi Múzeum, tengeri teknősök kutatása.

FWO (Fonds Wetenschappelijk Onderzoek – Vlaanderen) konferencia-részvételi pályázata (grant nr: K134316N). Elnyert összeg: ~1200 EUR

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Botfalvai G., Haas J, Bodor ER, Mindszenty A, Ósi A.: Facies architecture and palaeoenvironmental implications of the upper Cretaceous (Santonian) Csehbánya formation at the Iharkút vertebrate locality (Bakony Mountains, Northwestern Hungary). Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology, 441: 659-678 (2016) <http://real.mtak.hu/32152>
2. Ósi A., Prondvai E., Mallon J, Bodor ER: Diversity and convergences in the evolution of feeding adaptations in ankylosaurs (Dinosauria: Ornithischia). Historical Biology & Paper, 1208194: (2016) <http://real.mtak.hu/48951>
3. Prondvai E.: Medullary bone in fossils: Function, evolution and significance in growth curve reconstructions of extinct vertebrates. Journal of evolutionary Biology. in press: Paper in press, (2016) <http://real.mtak.hu/48954>
4. Foth C, Rabi M., Joyce WG: Skull shape variation in extant and extinct Testudinata and its relation to habitat and feeding ecology. Acta Zoologica, 1-14 (2016)
5. Szabó M., Gulyás P, Ósi A.: Late Cretaceous (Santonian) Atractosteus (Actinopterygii, Lepisosteidae) remains from Hungary (Iharkút, Bakony Mountains). Cretaceous Research, 60: 239-252 (2016) <http://real.mtak.hu/33498>

MTA–ELTE LENDÜLET EIRSA ASZTROFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Frei Zsolt, az MTA doktora
ELTE Fizikai Intézet, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: (1) 372 2767; fax: (1) 372 2753; e-mail: frei@alcyone.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A csoport fő célkitűzése hogy nemzetközi projektekhez kapcsolódva - mint a LIGO és Pan-STARS - alapkutatásokat végezzen az asztrofizika területén, az elméleti munkákkal pedig elősegítse a projektek sikerességét. Az elméleti kutatásokban együttműködnek a princetoni IAS és Columbia Egyetem munkatársaival. Fontos tevékenységük, hogy alap és emelt szinten tanítanak asztrofizikát az Eötvös Egyetemen, emellett doktoranduszokat készítenek fel a tudományos pályára. Rendszeresen szerveznek nyilvános előadásokat és sajtókonferenciákat, hogy bemutathassák kutatási eredményeiket.

A kutatócsoport számos területen vesz részt a LIGO Kollaboráció munkájában. A csoport aktív az adat analízisben (elsősorban a a LIGO “Burst” csoportjában), a hardver fejlesztésben (a LIGO “detector characterization” csoportján belül), valamint a mérő helyszíneken a környezeti hatások vizsgálatában. A Pan-STARRS-on belüli feladatok tartalmazzák a galaxisok struktúrájának kutatását, galaxistérképek készítését és fotometria vizsgálatokat.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Adatanalízis a LIGO együttműködés keretében

Megalkottak egy ~2 millió galaxisból álló galaxiskatalógust, hogy segítsék vele egy-egy olyan gravitációshullám-tranziens forrásgalaxisának beazonosítását, amelyet a LIGO-Virgo detektorhálózat észlel, és az égen lokalizál. Megalkottak egy ~2 millió galaxisból álló galaxiskatalógust, hogy segítsék vele egy-egy olyan gravitációshullám-tranziens forrásgalaxisának beazonosítását, amelyet a LIGO-Virgo detektorhálózat észlel, és az égen lokalizál. A galaxiskatalógusuk tulajdonságait és használhatóságát bemutató szakkikk kéziratának elkészítése jelenleg is folyamatban van.

A gravitációshullám-kitörések olyan tranziens jelek, amelyek hullámformái asztrofizikai modellekből nem, vagy csak részben ismertek. Várható forrásaik közé a szupernóva-robbanások, a gamma-felvillanások, az elnyúlt pályán keringő feketelyuk-kettősök, a neutroncsillagok rengései tartoznak. Egy kutatási projektben azt vizsgálták, hogy a gravitációshullám-kitörések észlelésekor milyen pontossággal lehet a jelek modell-független, és a források modellfüggő paramétereit meghatározni. Ennek érdekében a LIGO Scientific Collaboration egy kitörésekre specializált adatfeldolgozó algoritmusának (BayesWave) rekonstrukciós pontosságát vizsgálták mesterséges zajmintákhoz hozzáadott szimulált jelekkel.

Részletesen megvizsgálták, hogy az elnyúlt pályájú feketelyuk-kettősrendszerek kezdeti pálya-paramétereinek függvényében (excentricitás és fél-nagy tengely) hogyan változik a LIGO-Virgo-KAGRA detektorhálózat paraméterrekonstrukciós képessége. Az analízis eredményeinek segítségével konkrét példákon keresztül megadták, hogy a detektorhálózattal milyen becslési pontosság érhető el az elnyúlt pályájú feketelyuk kettősrendszerek

paramétereinek rekonstruálásában, és eredményeiket összehasonlították az ugyanolyan tömegű, de körpályás határesetbeli kettősrendszerek paraméterbecslési pontosságával. Az analízisük a Fisher-mátrix módszeren alapult, amely a gravitációs hullámok egyik keresési eljárásának, a mintafüggvény alapú keresési technikának a paraméterbecslési pontosságát jellemzi.

Arra kerestek választ, hogy az elkövetkező években hogyan lehet kvantitatíven jellemezni egyedi gravitációshullám-detektorok szerepét célzott, hálózatban történő gravitációshullám jelkeresések esetén. Megvizsgálták, hogy a Föld forgása miatt hogyan változik a potenciális gravitációshullám-források égi pozíciójához képest az, hogy az egyes detektorok milyen égi irányba mennyire érzékenyek, és hogy ez hogyan hat ki a teljes detektorhálózat érzékenységére. A vizsgálat célja az volt, hogy egy célzott gravitációshullám-forráskeresési stratégia megválasztása esetén azonosítani tudják, hogy az egyes detektorok melyik napszakban járulnak hozzá a legnagyobb mértékben az adott jelkereséshez, ezáltal optimalizációs eszközt biztosítva a detektorok összehangolt működtetéséhez.

Csillagászati adatbázisok

Tavaly tovább folytatták az asztrofizikai adatbázisokkal kapcsolatos asztro-statisztikai kutatásaikat. A galaxisokban található gömbhalmazok száma és az anya-galaxis különböző fizikai paramétereinek közötti összefüggés tanulmányozására alkalmazták az általuk erre a célra kidolgozott „Bayesian negative binomial regression model”-t.

Elméleti asztrofizikai kutatások

Kidolgoztak egy statisztikai módszert kvazárokból található szupernehéz fekete lyukak gravitációs kilöködéseinek kimutatására. Feltehető, hogy amikor egy galaxis vagy egy kvazár születik, akkor ionizált buborékot hoz létre maga körül a galaxisközi anyagban. Ha a korai univerzumban az ilyen ionizált buborékok sugara akkorára nőtt, hogy a buborékok átfedjenek, akkor ez a folyamat képes lehetett az egész univerzumot ionizálni. 2018-ban várható a James Webb Space Telescope pályára állítása, melynek segítségével várhatóan kozmológiai ionizált buborékok spektrumát is tudják majd mérni, így aktuálissá válnak ezek a kérdések.

MTA–ELTE LENDÜLET FORRÓ UNIVERZUM KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Werner Norbert, PhD
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: (1) 372 2500 / 6309; e-mail: wernernorbi@caesar.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2016

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA-ELTE Forró Univerzum Lendület kutatócsoport 2016. szeptember 1-el indult. A kutatócsoport új, nagy felbontású röntgenspektrumokat és egyéb megfigyelési adatokat használ a galaxisok közötti teret kitöltő gáz tulajdonságainak vizsgálatára. A projekt kutatói tanulmányozzák hogyan fejlődnek a galaxisok és velük együtt a bennük elhelyezkedő szupermasszív fekete lyukak.

A pályázat kutatási tervének megfelelően a csoport az első hónapokban a röntgenszállagászati *Hitomi* műhold által megfigyelt adatok elemzésére koncentrált. A *Hitomi* spektrométere lehetőséget adott, hogy a gáz turbulens mozgását, sebességeloszlását is felmérjék, egyes röntgenszínképvonalak eltolódásának megmérésével.

A csoportvezető társvezetője a *Hitomi* turbulens gáz mozgás munkacsoportnak. Ennek keretében 2016 novemberében társszervezője volt a Stanford University-n szervezett *Hitomi* workshop-nak.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A Japan Aerospace Exploration Agency-vel, (JAXA) való együttműködés keretében két tudományos cikk készült az elmúlt időszakban. A Tokyo Metropolitan University-vel való együttműködésből már elfogadásra került egy tudományos cikk (ld. V.pont). További cikkek kerültek benyújtásra a SRON Netherlands Institute for Space Research-el és a Stanford University-vel folytatott közös munka eredményeként.

b) Tudomány és társadalom

A csoportvezető számos ismeretterjesztő, tudománypopularizáló programon is részt vett az elmúlt hónapokban. A teljesség igénye nélkül, felsorolásszerűen:

Mindentudás; Mindenki akadémiaja; ELTE Ortvay előadássorozat; Élet és tudomány; Fiatal Kutatók Klubja, Kutatók éjszakája (Pozsony), Hyde Park Civilizace (Csehország); Pod Lampou (Szlovákia); Természettudományi Múzeum (Pozsony) előadás;

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel.

Hazai együttműködések:

- Különböző kutatócsoportokkal, az alábbi intézményekből: ELTE; Admatis Kft; MTA Csillagászati Intézet; C3S Kft

Nemzetközi együttműködések:

- Japan Aerospace Exploration Agency, JAXA
- Stanford University, USA
- SRON Netherlands Institute for Space Research
- Tokyo Metropolitan University

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Tekintettel arra, hogy a csoport csak néhány hónapja alakult, elnyert pályázatai még nincsenek. Ugyanakkor a csoportvezető jelentős erőfeszítéseket tesz, hogy a csoportot, és ezzel Magyarországot bevonja a legjelentősebb szakmai programokba, illetve potenciális konzorciumokba. Ennek érdekében több nemzetközi megbeszélésen is részt vett a 2016-os évben.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (An azimuthally resolved study of the cold front in Abell 3667. Ichinohe Y, Simionescu A, Werner N, Takahashi T: MNRAS, in press [arXiv: 1702.01026]). (2017)

MTA-ELTE LENDÜLET KATALÍZIS ÉS SZERVES SZINTÉZISEK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Novák Zoltán, PhD
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: (1) 372 2500/1610; fax: (1) 372 2592; email: novakz@elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

5 éves kutatási terv: A kutatócsoport elsődleges feladata a szerves kémia területén végzett kutatások kivitelezése. A kutatócsoport munkája főleg az átmenetifém-katalizált átalakítások vizsgálatára irányul. Ezen a területen a keresztkapcsolási és oxidatív kapcsolási reakciók kifejlesztése, működésük és alkalmazhatóságuk vizsgálata az elsődleges cél. Az öt éves kutatási projekt keretein belül számos C-H aktiváláson alapuló eljárást és átmenetifém-katalizált eljárást kívánnak kidolgozni, valamint a reakciók megértéséhez mechanizmus vizsgálatokat folytatni. Az átalakításokhoz hipervalens jódegyületeket állítottak elő és használtak.

A kutatás fontos eleme, hogy gyógyszeripari igényeknek megfelelően a kutatócsoport olyan eszközöket fejlesszen, amelyek közvetlenül is felhasználhatóak gyógyszermolekulák szintézisében. Ennek megfelelően a gyógyszeripari megbízások és együttműködések stratégiai fontosságúak. Kutatócsoport sikeres együttműködést folytat a Servier gyógyszerkutató intézettel és a Richter Gedeon gyógyszergyárral. Egyetemi környezetben működő kutatócsoportként a másik jelentős feladat az oktatásban való részvétel, a kutatói utánpótlás biztosítása érdekében. A kutatócsoport munkájában ez a BSc, MSc alaplaborok és speciális laborok megtartásában, tudományos diákköri, szakdolgozati és doktori kutatómunkák irányításában nyilvánul meg. A 2016-os évben 2 PhD, 5 BSc és 1 MSc védésre került sor kutatócsoportban és 3 TDK dolgozat készült, melyek közül 1 Gerecs Árpád díjas, 1 pedig II. helyezést ért el az ELTE házi TDK versenyén.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A korábbi kutatásaik során acetanilid-származékok és aldehidek között lejátszódó palládiumkatalizált kapcsolási reakciók vizsgálatát végezték el különböző körülmények között. Megállapították, hogy különböző borán alapú és szerves Lewis savak segítségével a C-H aktiválási reakció aktiválható. Az említett Lewis savak segítségével az acetanilid és urea származékok orto helyzetben történő, direkt acilezését és alkenilezését valósították meg. Triaril boránok alkalmazása esetében megállapították, hogy a Lewis savas karakterű vegyület katalitikus mennyiségben is képes a C-H aktiválási lépést elősegíteni. A tervezett NMR és in situ IR vizsgálatok segítségével bepillantást nyertek a reakció mechanizmusába is. Feltérképezték a reakcióelegyben kialakuló, lehetséges Lewis sav-bázis kölcsönhatásokat valamint on line monitorzással követték a reakció lefutását. Megállapították, hogy katalitikus mennyiségű triarilborán jelenlétében a reakció 4-5 órás indukciós periódussal rendelkezik, majd a következő 15-20 órában az átalakulás teljes konverziót ér el. A triarilboránok C-H aktiválásban mutatott kedvező hatását, és szintézisben történő alkalmazhatóságát publikáció formájában összegezték (5).

A triarilboránokon kívül bórtrifluorid-éterát jelenlétében is elvégezték a C-H aktiválási reakciót. Megállapították, hogy katalitikus mennyiségű borán jelenlétében a reakció ebben az esetben is lejátszódik. Acetanilid és 4-fluorbenzaldehyd reakciójában vizsgálták a Lewis sav, különböző palládiumkatalizátor aktivitására gyakorolt hatását. Ezek alapján megállapították, hogy a Pd(TFA)₂-BF₃Et₂O katalizátor-Lewis sav kombináció esetében érhető el a legnagyobb reakciósebesség. Kvantumkémiai számítások segítségével meghatározták az energetikailag legkedvezőbb útirányt, amely rámutatott a C-H aktiválásért felelős elektrofilebb karakterű palládium katalizátor intermedier kialakulásának szerepére, az enyhe körülmények között is megvalósítható kapcsolási reakcióban. A kutatásból összefoglalt eredményeiket a *Journal of Molecular Catalysis A* folyóiratban publikálták.

C-H aktiválási reakciók segítségével kivitelezett alkilezési reakciók általában nehezen megvalósíthatóak. Ennek következtében az ilyen típusú eljárások fejlesztése jelentős szintetikus kihívást jelent. Munkájuk során olyan egyszerű alkilezési eljárás kidolgozását valósították meg, amelynek segítségével alkil csoportok szelektív beépítésére nyílik lehetőség. Kidolgoztak egy eljárást, amelyben acetanilidek orto szelektív palládiumkatalizált alkilezési reakciója valósítható meg. Az optimált körülmények alkalmazhatóságát eddig 17 példán keresztül mutatták be.

Korábbi kutatásaik során megmutatták, hogy átmenetifém-katalizátorok jelenlétében a hipervalens jódvegyületek kiválóan alkalmasak a C-H kötés funkcionizálására és heterociklusos molekulák, dihidrooxazol és iminobenzoxazin származékok változatos szintézisére. A módszer általánosíthatóságára vonatkozóan a megkezdett kísérleteiket folytatták, és kinolinvázat tartalmazó kondenzált heterociklusok szintézisét valósították meg. Az általuk újonnan kidolgozott átalakításban 2-cianofenolból könnyen felépíthető rendszeren, optimalizált reakciókörülmények között hajtották végre a gyűrűzárást jodóniumsók segítségével, rézkatalizátor jelenlétében, és a reakció során kromenokinolin vázas vegyületeket állítottak elő. Ennek eredményeként 28 különböző, változatos szerkezetű kromenokinolin származék előállítását valósították meg. A tervezett molekulákat 32- 80%-os kitermeléssel állították elő. Eredményeiket a *Journal of Organic Chemistry* című folyóiratban tették közzé.

A további kutatásaik során a trifluoretil csoport aromás magba történő beépíthetőségét vizsgálták palládiumkatalizált C-H aktiválási reakcióban. Ebben az évben a trifluoretilezési reakció kiterjeszhetőségét és funkciós csoport toleranciáját vizsgálták. A szintézisek során 44 különböző anilidszármazék orto helyzetű trifluoretilezését valósították meg, és szinte minden esetben kiváló termeléssel sikerült izolálni a megfelelő trifluoretilezett származékokat. A témában kapott eredményeiket nemzetközi folyóiratban megjelent publikációban foglalták össze (7). A rangos folyóiratban a publikáció kiemelt „Frontispiece” cikként jelent meg.

A hipervalens jódvegyületekkel végzett vizsgálataik során a projekt előző évében nitrogén tartalmú heterociklusos molekulák direkt N-arilezését vizsgálták. Munkájuk során kidolgoztak egy eljárást, amelynek segítségével pirazolszármazékok diariljodóniumsókkal enyhe körülmények között hatékonyan arilezhetőek. A szintetikus módszert a *Chemistry A European Journal* c. folyóiratban publikálták.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport tagjai aktívan részt vettek a 2016. évi „Kutatók éjszakája” című program lebonyolításában az ELTE TTK Kémiai Intézetében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Egy PhD hallgató 6 hónap kutatási időt töltött a Loreál kozmetikai cégnél Párizsban. Egy másik PhD hallgató a Regensburgi egyetemen végzett kutatómunkát 6 hónapig. A kutatócsoport az ELTE Kémiai intézetében a következő oktatási tevékenységeket folytatja: A kutatócsoport vezetője 2016-ban 4 gyakorlati kurzust és 2 elméleti kurzust tartott (24 kredit). A kutatócsoport munkatársai (5 fő, tudományos segédmunkatársak és PhD hallgatók) szintén részt vettek a gyakorlati oktatásban. A 2016-ban 2 PhD, 5 BSc és 1 MSc dolgozat készült.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport a 2016. évben egy NKFIH kutatási pályázatot nyert el 41 706 E Ft értékben (NN118172).

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Aradi K, Bombicz P, Novák Z: Modular Copper-Catalyzed Synthesis of Chromeno[4,3-b]quinolines with the Utilization of Diaryliodonium Salts. Journal of Organic Chemistry, 81:(3) 920-931 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/37824>
2. Bihari T, Babinszki B, Gonda Z, Kovacs S, Novak Z, Stirling A: Understanding and Exploitation of Neighboring Heteroatom Effect for the Mild N-arylation of Heterocycles with Diaryliodonium Salts under Aqueous Conditions: A Theoretical and Experimental Mechanistic Study. Journal of Organic Chemistry, 81:(13) 5417-5422 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/47816>
3. Aradi K, Tóth BL, Tolnai GL, Novák Z: Diaryliodonium Salts in Organic Syntheses: A Useful Compound Class for Novel Arylation Strategies. Synlett, 10: 1456-1485 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/37821>
4. Lovei K, Bana P, Orkenyi R, Turos GI, Eles J, Novak Z, Faigl F: Continuous flow synthesis of heterocyclic scaffolds Design principles of multistep systems - A review. Chimica Oggi-Chemistry Today, 34:(4) 18-21 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/47819>
5. Tischler O, Bokányi Zs, Novák Z: Activation of C–H Activation: The Beneficial Effect of Catalytic Amount of Triaryl Boranes on Palladium-Catalyzed C–H Activation. Organometallics, 35: 741-746 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/37820>
6. Tóth BL, Tischler O, Novák Z: Recent Advances in Dual Transition Metal - Visible Light Photoredox Catalysis. Tetrahedron Letters, 57: (4505) 4513 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/47817>
7. Tóth BL, Kovács S, Sályi G, Novák Z: Mild and Efficient Palladium-Catalyzed Direct Trifluoroethylation of Aromatic Systems by C-H Activation. Angewandte Chemie-International Edition, 55:(6) 1988-1992 (2016) <http://real.mtak.hu/id/eprint/37822>

MTA-ELTE LENDÜLET KÉMIAI SZERKEZET/REAKTIVITÁS KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Szilágyi Róbert Károly, PhD
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon/fax: (1) 372 2631; telefon: (1) 372 2500 / 1064 (537-es iroda) és 1626 (617-es labor)
e-mail: szilagyirk@chem.elte.hu; honlap: www.elementologia.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2015

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport öt éves célkitűzése, hogy kémiai szerkezet és reaktivitás vizsgálatokkal hozzájáruljon a bioszervetlen kémiai folyamatok, homogén katalitikus rendszerek, és a felületeken lejátszódó folyamatok molekuláris szintű megértéséhez. Nevezetesen, a galaktóz-oxidáz metalloenzim egyedi katalitikus központot tartalmaz, amelynek biológiai kialakulása posztranszlációs lépésben történik meg, és a katalitikus központ működése még nem tisztázottak. Ezen kutatások gyakorlati felhasználása abban áll, hogy hatékonyabb szelektív szerves kémiai oxidációs folyamatokat tervezhetővé váljanak, amelyek alkoholból indulnak ki és megállnak az aldehid oxidációs szintjén. Iparilag ezen tudományos ismeretek jelentősek lehetnek mezőgazdasági hulladékok, például lignin nyersanyagként történő felhasználásához, ami a galaktóz-oxidáz enzim eredeti biológiai funkciója.

A homogén katalitikus fémorganikus rendszerek vizsgálata során irídium és palládium rendszerek, mint az egyik legfontosabb katalizátorok tanulmányozását célozzák egy új, röntgen abszorpciós mérési technikával. Ennek a kísérleti módszernek egyik nagy jelentősége, hogy ugyanabból a mérésből a katalizátor, a katalitikusan aktív fémorganikus komplex elektron- és molekulaszervezetéről nyerhetek ismereteket. A felületkémiai vizsgálatokat vas-kén ásványokra, csapadékokra, és molekuláris klaszterekre terjesztik ki, ahol plazmakísérletekkel és kémiai módosításokkal a felület reaktivitását vizsgálják különös tekintettel kisméretű, inert molekulák aktiválásában.

2016-ban a kutatócsoport szerény személyi állománya miatt elsősorban homogén katalitikus rendszerek területén értek el eredményeket. Ugyanakkor sikeresen folytatták a Japán, USA, és hazai együttműködési munkáikat bioszervetlen kémiában és heterogén felületi reaktivitás modellezés tématerületén.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A legjelentősebb eredményeket *homogén fázisú, molekuláris rendszerek leírásában* érték el. Publikált eredményekkel bizonyították a röntgen abszorpciós spektroszkópia (XAS) és az elméleti kémiai elektronszerkezeti számítások szimbiózisát Ni, Cu, Pd, Th, és Bi koordinációs kémiai rendszereken.

Ni-NO komplexek esetében sikerült demonstrálni a több-küszöbös XAS mérési eredmények komplementaritását, ahol a fém K-küszöb, ligandum K-küszöb, és fém L-küszöb mérések közösen adják meg a kísérleti elektronszerkezetet, lényegében minden elméleti számítás elvégzése nélkül.

A korábbi Pd XAS mérésekhez kalibrált elméleti kémiai módszerek lehetőséget adtak homogén katalitikus reakciók mechanizmusának feltárására. A heterogén kémiai folyamatok megértéséhez elősegítő molekuláris klaszter modelleket dolgoztak ki Fe-S ásványok reaktív felületének atomi szintű modellezésére.

A bioszervetlen kémiai és metalloenzimatikus kutatási témában, több éve elkezdett munkát fejezték be egymagvú, réztartalmú redoxi metallofehérjék szerkezetének vizsgálatára vonatkozóan. A korábbi több-küszöbös röntgen abszorpciós vizsgálatokat kiterjesztették nagy-felbontású szinkrotron-alapú krisztallográfiai és sűrűségfüggő funkcionál módszeren alapuló szerkezet- és stabilitásvizsgálatokra. Ezen munkájuk kiváló előtanulmány egymagvú, réztartalmú galaktóz-oxidáz katalitikus központjának kialakulásához, és az enzim működési mechanizmusának leírására.

A bioszervetlen kutatási témában, japán kollégákkal együttműködve megkérdőjelezték a réztartalmú redoxi fehérjék szerkezetét és működését leíró irodalmi modelleket, és egy új, alloszterikus hatásokat figyelembe vevő másodlagos fehérjeszerkezet torzulási mechanizmust dolgoztak ki.

A vas-kén rendszereken alapuló felületkémiai tanulmányok legfontosabb eredménye a kaolinit felületi modellezésében alkalmazott koordinációs kémiai megközelítés kiterjesztése pirit ásvány modellezésére. A pirit, mint demonstratív példa kiválasztására már publikált reaktivitási eredmények miatt került sor. Kidolgoztak egy általános algoritmust, ami a koordinációs szférák egymásra épülésének szabályain alapul. További vizsgálatokkal bizonyítani kívánják, hogy az algoritmus működőképes nem csak FeS_2 /pirit alapú nanorészecskékre, és a kísérleti eredmények reprodukálására, ahol a Fe-S részecske felületén egy olyan reaktív réteget hoznak létre hidrogén atommal történő bombázás során, ami képes nitrogén gázmolekulából ammóniát előállítani. Az előállított Fe-S klaszterek elektronszerkezetét kén K-küszöb spektroszkópiai módszerrel mérték meg.

b) Tudomány és társadalom

A tudományos közülethez való hozzájárulásuk a szakcikkek bírálata, nemzetközi és hazai konferenciákon való részvétel mellett egy szakmai látogatás szervezése és menedzselése volt a Montanai Állami Egyetem, hőbiológiai kutatóközpont igazgatója számára. A kutatócsoport vezető folytatta a Hungarian Journal of Industry and Chemistry folyóirat főszerkesztői feladatainak ellátását.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A kutatócsoport tudományos eredményei mellett megemlíthető számos nemzetközi és hazai együttműködés kialakítása.

Egy *USA-japán-magyar* kooperációban kísérleti, spektroszkópiai, és elméleti kémiai módszerekkel jellemezték egy biológiailag és homogén reaktivitás szempontjából is fontos nikel-nitrozil komplex családot.

A *michigani Pleotint LLC céggel* együttműködve, a japán Spring-8 szinkrotron laborban végzett mérések alapján atomi szinten sikerült leírni a hőre sötétedő ablaküveg működési mechanizmusát.

Együttműködési felkérés érkezett a *York Egyetemről, Angliából* ruténium tartalmú homogén katalitikus komplexek elektronszerkezetének leírására, és korreláltatásukra a reaktivitásukkal.

A *stanford-i és a triezsti szinkrotron laborokban* mért elektron- és molekulaszervezeti eredményeiket palládium- és irídium-tartalmú komplexekre a következő hónapokban készítik elő publikációra. Különösen ezen utóbbi eredmények alkalmasak a Lendület programhoz

hasonló méretű nemzetközi pályázati támogatás elnyeréséhez – megfelelő hazai együttműködési kör kialakítása után, ahol szintetikus kémiai, módszertanilag releváns problémák megoldásához járulhatnak hozzá.

Magyarországról is felkérést kaptak réz komplexek, ruténium fotokatalizátorok kísérleti és elméleti vizsgálatára.

IV. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Ishitsuka T, Okuda Y, Szilágyi RK, Mori S, Nishihara Y: Molecular Mechanism of Palladium-Catalysed Cyanoesterification of Methyl Cyanofornate onto Norbornene. Dalton Transactions, 45: 7786-7793 (2016)
2. Yamaguchi T, Akao K, Takashina A, Asamura S, Unno M, Szilágyi RK, Kohzuma T: X-ray crystallographic evidence for the simultaneous presence of axial and rhombic sites in cupredoxins: Atomic resolution X-ray crystal structure analysis of pseudoazurin and DFT modelling. RSC Advances, 45: 88358-88365 (2016)
3. Fujisawa K, Kuboniwa A, Kiss M, Szilágyi RK: Mono- and binuclear tris-(3-tert-butyl-2-sulfanyl-idene-1H-imidazol-1-yl)hydro-borate bis-muth(III) dichloride complexes: a soft scorpionate ligand can coordinate to p-block elements. Acta Crystallographica Section C, Structural Chemistry, C72: 768-776 (2016)
4. Fujisawa K, Shimizu M, Szilágyi RK: Comparison of thallium(I) complexes with mesityl substituted tris(pyrazolyl)hydroborato ligands. [Tl{HB(3-Ms-5-Mepz)3}] and [Tl{HB(3-Ms-5-Mepz)2(3-Me-5-Mspz)}] Acta Crystallographica Section C, Structural Chemistry, C72: 786-790 (2016)
5. Soma S, van Stappen C, Kiss M, Szilágyi RK, Lehnert N, Fujisawa K: Distorted Tetrahedral Nickel-Nitrosyl Complexes: Spectroscopic Characterization and Electronic Structure. Journal of Biological Inorganic Chemistry, 21: 757-775 (2016)
6. Szorcik A, Matyuska F, Benyei A, Nagy NV, Szilágyi RK, Gajda T: A novel 1,3,5-triaminocyclohexane-based tripodal ligand forms a unique tetra(pyrazolate)-bridged tricopper(II) core: solution equilibrium, structure and catecholase activity. Dalton Transactions, 45: 14998-15012 (2016)
7. Táborosi A, Szilágyi RK: Behaviour of Surface Hydroxide Groups of Exfoliated Kaolinite in Gas Phase and during Water Adsorption. Dalton Transactions, 45: 2523-2535 (2016)
8. Zsirka B, Horváth E, Szabó P, Juzsakova T, Szilágyi RK, Fertig D, Makó É, Varga T, Kónya Z, Kukovecz Á, Kristóf J: Thin-walled nanoscrolls from multi-step intercalation of tubular halloysite-10Å and its rearrangement upon peroxide treatment. Applied Surface Science, 399: 245-254 (2016)
9. Frank P, Szilágyi RK, Gramlich V, Hsu H-F, Hedman B, Hodgson K: Spin-Polarization-Induced Preedge Transitions in the Sulfur K-Edge XAS Spectra of Open-Shell Transition Metal Sulfates: Spectroscopic Validation of σ -Bond Electron Transfer. Inorganic Chemistry, 56: 1080-1093 (2016)
10. Zsirka B, Táborosi A, Szabó P, Szilágyi RK, Horváth E, Juzsakova T, Fertig D, Kristof J: Surface Characterization of Mechanochemically Modified Exfoliated Halloysite Nanoscrolls. Langmuir, 10.1021/acs.langmuir.6b04606 (2016)

MTA–ELTE LENDÜLET RÁCSTÉRELMÉLETI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Katz Sándor, az MTA levelező tag
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: (1) 372 2546; fax: (1) 372 2509; e-mail: katz@bodri.elte.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Ötéves kutatási terv:

QCD átmeneti hőmérséklet meghatározása Wilson fermionokkal.

Statikus kvark-antikvark szabadenergia meghatározása.

Spektrálfüggvények meghatározása.

Nemnulla kémiai potenciál vizsgálata staggered fermionokkal.

Wilson termodinamika a fizikai pontban.

Állapotegyenlet

Megmaradó töltések fluktuációi.

Első vizsgálatok királis fermionokkal.

Nemnulla kémiai potenciál vizsgálata Wilson fermionokkal.

Nemnulla kémiai potenciál vizsgálata kontinuum limeszben.

Új módszerek.

Korábban elért eredmények:

T_c meghatározása Wilson fermionokkal.

Statikus szabadenergia meghatározása.

Spektrálfüggvények meghatározása izotróp rácson.

Fluktuációk meghatározása staggered fermionokkal.

Állapotegyenlet meghatározása

Izospin felhasadás vizsgálata.

Termodinamika királis fermionokkal

Fluktuációk magas hőmérsékleten

Fázisdiagram és állapotegyenlet véges kémiai potenciálnál

A Lendület pályázatnak a 2016. évben három fő célkitűzése volt:

Komplex Langevin dinamika vizsgálata 2D O(3) modellben és QCD-ben.

Axion kozmológia

QCD fázisdiagram állapotsűrűség módszerrel

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Komplex Langevin dinamika

Az 1+1D O(3) modellben meghatározták a nyomást és részecskesűrűséget egy széles hőmérséklet és kémiai potenciál tartományban. Duális változók és a worm algoritmus segítségével ebben a modellben lehetséges véges kémiai potenciál mellett is közvetlen Monte-

Carlo szimulációkat végezni. Az így kapott referencia eredményeket összehasonlították a komplex Langevin dinamikával kapottakkal. Az eredmények azt mutatják, hogy alacsony hőmérsékleten nem működik a komplex Langevin eljárás és ez nem javul a kontinuum limeszben sem. Az eredmények publikálása folyamatban van. A QCD fázisdiagramjára korábban végzett komplex Langevin szimulációk eredményeit időközben publikálták és megkezdték finomabb rácok vizsgálatát.

Axion kozmológia

Meghatározták a topologikus szuszceptibilitást tiszta mértékelméletben valamint dinamikus QCD-ben is. Az előbbi eredmény már publikálva lett, az utóbbi eredményt egy nagy impakt faktorú folyóiratba küldték be, bírálata folyamatban van. A topologikus szuszceptibilitás mellett az anyag állapotegyenletét is meghatározták több nagyságrend hőmérséklet tartományban az elektroyenge skáláig, az összes Standard Modell részecske figyelembevételével. Az erős CP probléma megoldására javasolt axion egyúttal a sötét anyagot alkotó részecske is lehet. A két rácseredmény (állapotegyenlet + topologikus szuszceptibilitás) együttes felhasználásával meghatározható a korai világegyetem pontos fejlődése és a „misalignment” mechanizmus során a keletkezett axionok mennyisége, azok hozzájárulása a sötét anyaghoz a tömegük függvényében. Az axionikus sötét anyag mennyiségétől függően meghatározták az axion tömegét mely 50-1500 μeV -nak adódott.

QCD fázisdiagram állapotsűrűség módszerrel. Kis rácokon megkezdték a QCD fázisdiagram vizsgálatát alacsony hőmérsékleten. Az állapotsűrűség módszer során a pion kondenzátumot rögzítik különböző értékekre, majd a rögzített kondenzátum mellett kapott eredmények integrálásával kapják meg a teljes eredményeket. Mivel véges izospin kémiai potenciál mellett végeznek szimulációkat és innen súlyoznak át barion kémiai potenciálra, így a (barionikus kémiai potenciál esetén nem megjelenő) pion kondenzáció problémát jelenthet. Ezen segít az állapotsűrűség módszer, melynek segítségével olyan konfigurációkat is generálnak, melyeken nincs pion kondenzátum.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Claudia Ratti (Houston), Rene Bellwied (Houston). Közös elnyert gépidő az USA DOE INCITE pályázatán (2016. január – 2017. december)

IV. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bellwied R, Borsanyi S, Fodor Z, Katz SD, Pasztor A, Ratti C, Szabo KK: Fluctuations and correlations in high temperature QCD. Phys. Rev. D, 92:(11) 114505 (2015)
2. Bellwied R, Borsanyi S, Fodor Z, Günther J, Katz SD, Ratti C, Szabo KK: The QCD phase diagram from analytic continuation. Phys. Lett. B, 751: 559-564 (2015)
3. Fodor Z, Holland K, Kuti J, Mondal S, Nogradi D, Wong CH: The running coupling of the minimal sextet composite Higgs model. JHEP, 1509: 039 (2015)
4. Fodor Z, Katz SD, Sexty D, Török C: Complex Langevin dynamics for dynamical QCD at nonzero chemical potential: A comparison with multiparameter reweighting. Phys. Rev. D, 92:(9) 094516 (2015)

5. Ujfalusi L, Giordano M, Pittler F, Kovács TG, Varga I: Anderson transition and multifractals in the spectrum of the Dirac operator of Quantum Chromodynamics at high temperature. *Phys. Rev. D*, 92:(9) 094513 (2015)
6. Borsanyi S, Dierigl M, Fodor Z, Katz SD, Mages SW, Nogradi D, Redondo J, Ringwald A, Szabo KK: Axion cosmology, lattice QCD and the dilute instanton gas. *Phys. Lett. B*, 752: 175-181 (2016)
7. Fodor Z, Hoelbling C, Katz SD, Lellouch L, Portelli A, Szabo KK, Toth BC: Quantum electrodynamics in finite volume and nonrelativistic effective field theories. *Phys. Lett. B*, 755: 245-248 (2016)
8. Durr S, Fodor Z, Hoelbling C, Katz SD, Krieg S, Lellouch L, Lippert T, Metivet T, Portelli A, Szabo KK, Torrero C, Toth BC, Varnhorst L: Lattice computation of the nucleon scalar quark contents at the physical point. *Phys. Rev. Lett.*, 116:(17) 172001 (2016)
9. Harland D, Nogradi D: On the charge density and asymptotic tail of a monopole. *J. Math. Phys.*, 57:(2) 022903 (2016)
10. Fodor Z, Holland K, Kuti J, Mondal S, Nogradi D, Wong CH: Electroweak interactions and dark baryons in the sextet BSM model with a composite Higgs particle. *Phys. Rev. D*, 94:(1) 014503 (2016)
11. Giordano M, Kovacs T G, Pittler F: An Anderson-like model of the QCD chiral transition. *JHEP*, 1606: 007 (2016)

MTA-PE LENDÜLET TRANZSLÁCIÓS GLIKOMIKA KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Guttman András, az MTA külső tagja
8200 Veszprém, Egyetem u 10.

telefon: (88) 624 063; fax: (94) 999 695; e-mail: lendulet@lendulet.uni-pannon.hu
a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012.

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA-PE Transzlációs Glikomika kutatócsoport 5 éves kutatási célja új, integrált eszközök és módszerek kifejlesztése illetve alkalmazása olyan speciális glikomikai kutatásokban, ahol a minta csak nagyon limitált mennyiségben áll rendelkezésre, pl. keringő ráksejtek esetében. A csoport megalapítása óta a rákos folyamatban a sejtek felszíni kommunikációjában lényeges szerepet játszó glikoproteinek komplex cukorszerkezetének nagy érzékenységű vizsgálatához fejlesztett ki mikrofluidikai módszereket és bioinformatikai eszközöket. A támogatási időszakban a terveknek megfelelően az előző évben folyó modellezési munkák mellett, megkezdődtek a különböző daganatos sejtvonallakkal történő laboratóriumi mérések. A tervezett feladatokon túl sor került még egy új bioinformatikai szoftver és adatbázis kidolgozására is, mely jelentősen megkönnyíti az eredmények feldolgozását és kiértékelését.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A projekt a munkatervnek megfelelően halad. A kutatócsoport munkájának eredményeit rendszeresen közli a szakterület vezető folyóirataiban, melyek közül az alábbiakat emeljük ki:

A csoport által kifejlesztett GUcal szoftver képes ún. Glukóz Unit (GU) értékek számítására elektroferogramok automatikus feldolgozásával. A kiszámolt GU értékek alapján az alkalmazás adatbázis keresését hajt végre a csúcsokhoz tartozó glikán molekulák szerkezetének meghatározásához. A beépített adatbázis jelenleg humán eredetű immunglobulin G fehérjék N-glikánjainak szerkezeteit tartalmazza, melyek APTS jelölt szénhidrátok CE-LIF meghatározásából származnak. A kidolgozott bioinformatikai szoftver szabadon elérhető akadémiai használatra, így komoly nemzetközi tudományos érdeklődésre tart számot – www.gucal.hu [1].

Komplex és lineáris cukorstruktúrák az elválasztás hőmérsékletének függvényében eltérően vándorolnak egymáshoz képest kapilláris elektroforézis során. Ez az effektus különösen erősen jelentkezik viszkozitás és polimer adalékok alkalmazásánál. Eredményeik alapján megállapítható, hogy a hőmérséklet szabályozása ezen molekulák elektroforetikus elválasztásánál rendkívül fontos az eredmények reprodukálhatósága és adatbázisok alapján történő értékelhetősége szempontjából. Elsőként került közlésre, hogy az aktiválási energia kulcsfontosságú szerepet játszik az elektromigrációs folyamatok megértésében, mely molekula modellezéssel is igazolható [2, 3].

Húsz független laboratórium a világ három földrészéről (USA, Európa, Ázsia) vizsgálta az N-glikánok analízisére használt kapilláris elektroforézis és uHPLC módszerek reprodukálhatóságát és transzferálhatóságát a migrációs/elúciós idő, csúcs alatti terület és az elválasztott csúcsok százalékos megoszlása szempontjából, melyet a rangos mAbs folyóiratban közöltek [4].

A kutatócsoport a formalin hatását vizsgálta formalin fixált és paraffinba ágyazott glikoprotein, humán szérum és egérből származó tumor szövetminták esetében. A vizsgálatok azt a fontos eredményt mutatták, hogy a formalin fixálás nem okoz változást az N-glikánok

szerkezetében. Az eredmények alapján szöveti repozitóriumok aktuális és retrospektív feldolgozása során új tumor szénhidrát biomarkerek felfedezése várható [5].

A cirkuláló tumorsejt (CTC) analízis teljes rendszerintegrációjának megvalósítása céljából a kutatócsoport glutation-S-transferáz (GST) tag-et tartalmazó PNGase F enzimet immobilizált szilárd fázisú töltetet tartalmazó mikrokolonnák [6], valamint mágneses mikrorészecskék [7] felszínére. A mágneses mikro- és nanorészecskék egyre jelentősebb szerepet töltenek be a bioanalitikai és orvosi alkalmazásokban, mivel külső mágneses térrel könnyen manipulálhatók [8]. Az enzimek immobilizálása révén növelhető az enzim stabilitása és az enzim/szubsztrát arány, mellyel az enzimátikus emésztés ideje jelentősen lerövidül. Továbbá az immobilizációval a funkcionizált töltetek újra felhasználása is lehetséges [9]. Az immobilizált enzim segítségével a folyadék fázisú emésztésnél gyorsabban, a minta enzimfehérjékkel történő beszennyezése nélkül, külső manipulációval (mágneses tér illetve automata pipettázó rendszer) biztosította a csoport az integrált minta-előkészítéshez az N-glikánok glikoproteinekről történő specifikus emésztését.

Az N-glikozilációs vizsgálatok száma folyamatosan növekszik, de az egy kapilláris rendszerű módszerek általában megkövetelik a mérési ciklusok teljes lefutását. Ennek kiküszöbölésre kifejlesztésre került egy ún. többszörös injektálási eljárás N-glikozilációs vizsgálatok ultra gyors kivitelezéséhez, mely lézer indukált fluoreszcens detektáláson alapszik. Az új eljárásnak köszönhetően 96 darab minta vizsgálata 4 óra alatt megvalósítható szemben a konvencionális eljárás 12 órás időtartamával [10].

Fehérjék kapilláris elektroforézissel történő analízisekor a kapilláris belső felületének megfelelő bevonása szükséges a nem specifikus fehérje adszorpció elkerülésére és az elektroosmotikus áramlás módosítására. Olyan teljesen automatizált lineáris poliakrilamid bevonási eljárást dolgozott ki a kutatócsoport, amely a kapilláris elektroforézis készülékben könnyen elvégezhető. A bevont falú kapilláris több 100 futtatás után is nagyon stabilnak bizonyult. A módszer lehetővé teszi a bevonat automatizált regenerálását, ezzel megnövelve a bevont falú kapilláris élettartamát [11].

b) Tudomány és társadalom

A csoport több ismeretterjesztő előadással – többek között beiskolázási és pályorientációs céllal – mutatta be, hogy a Lendület program által támogatott kutatások hogyan járulnak hozzá a rákos betegségek korai felismerésével kapcsolatos kérdések megválaszolásához, ezzel is felkeltve a nem szakmabeliek érdeklődését. A Kutatók Éjszakája rendezvénysorozat keretein belül a sejtbefogást bemutató tudomány-népszerűsítő program került bemutatásra főként középiskolás diákok és szüleik számára.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport elismert hazai és nemzetközi kutatóintézetekkel valamint vállalatokkal alakított ki, illetve tart fenn szoros együttműködést. A Sciex és Beckman (Brea, CA) cégek kapilláris elektroforézis készülékekkel, szilárdtest lézerrel és folyadék mintákat kezelő robottal (BioMek) támogatta a csoport munkáját. A csoport egyik kutatója több hetes szakmai gyakorlaton vett részt a Sciex (Brea, CA) vállalatnál glikomika témakörben. Folytatódtak a csoport korábban megkezdett együttműködései a Cseh Tudományos Akadémia brnói Analitikai Kémiai Intézetével, a párizsi Curie Intézettel és az Innsbrucki Orvosi Egyetemmel. Az Országos Onkológiai Intézet és a Debreceni Egyetem MMKK megfelelő orvosi háttérrel biztosít a csoport analitikai glikomikai vizsgálataihoz. A mikrochipek prototipizálása a debreceni MTA-ATOMKI és a budapesti MTA-KFKI laboratóriumaiban történik. A Lendület

program keretében 2016-ben új PhD programok kerültek meghirdetésre valamint az év során A kutatócsoport vezetője Orvosi Genombiológia, Analitikai Rendszerbiológia és Glikomika tárgyából tartott MSc és PhD szintű kurzusokat.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A folyó évben elnyert és megkezdett pályázatok: A csoport jelentős ipari támogatásra tett szert a Sciex (Brea CA, USA; 160 M Ft – tömegspektrométer), Prozyme Inc (Hayward CA, USA; 2,7 M Ft - enzimek) és PhyNexus (San Jose CA: 3 M Ft - mikrokolonnák) cégektől, valamint alapkutatási támogatást nyert (TÉT 2016-0041; 1,477 M Ft).

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Jarvas G, Szigeti M, Chapman J, Guttman A: Triple-Internal Standard Based Glycan Structural Assignment Method for Capillary Electrophoresis Analysis of Carbohydrates. *Anal. Chem.*, 88(23): 11364–11367 (2016) [Link](#)
2. Kerekgyarto M, Jarvas G, Novak L, Guttman A: Activation energy associated with the electromigration of oligosaccharides through viscosity modifier and polymeric additive containing background electrolytes. *Electrophoresis*, 37(4): 573-578 (2016) [Link](#)
3. Jarvas G, Kerekgyarto M, Guttman A: On the electromigration of charged fluorophore-labeled oligosaccharides in polyethylene oxide solutions. *Electrophoresis*, 37:(17-18) 2347-2351 (2016) [Link](#)
4. Szekrenyes A, Park SS, Santos M, Warren B, Jones A, Cosgrave E, Haxo T, Pourkaveh S, Szabo Z, Sosic Z, Feng P, Varadi Cs, Falmagne JB, Sejwal P, Michels D, Freckleton G, Hamm M, Manuilov A, Duffy T, Schwartz M, Luo JK, van Dyck J, Leung PK, Olajos M, Moritz B, Kowle R, Kai G, Wenbo W, Wegstein J, Guttman A: Multi-Site N-Glycan Mapping Study 1: CE-LIF. *mAbs*. 8(1): 56-64 (2016) [Link](#)
5. Donczo B, Szigeti M, Ostoros Gy, Gacs A, Továri J, Guttman A: N-glycosylation analysis of formalin fixed paraffin embedded samples by capillary electrophoresis. *Electrophoresis*, 37(17-18): 2292-2296 (2016) [Link](#)
6. Szigeti M, Bodnar J, Gjerde D, Keresztessy Zs, Szekrenyes A, Guttman A: Rapid N-glycan release from glycoproteins by immobilized PNGase F microcolumns. *J. Chromatogr. B*, 1032: 139-143 (2016) [Link](#)
7. Bodnar J, Szekrenyes A, Szigeti M, Jarvas G, Krenkova J, Foret F, Guttman A: Enzymatic removal of N-glycans by PNGase F coated magnetic microparticles. *Electrophoresis*, 37(10): 1264-1269 (2016) [Link](#)
8. Hajba L, Guttman A: Magnetic nanoparticles in cancer theranostic: Towards handheld point of care devices. *Biotechnol. Adv.*, 34(4): 354-361 (2016) [Link](#)
9. Hajba L, Guttman A: Continuous flow biochemical reactors: biocatalysis, bioconversion and bioanalytical applications utilizing immobilized microfluidic enzyme reactors. *J. Flow Chem.*, 6(1): 8-12 (2016) [Link](#)
10. Kovacs Zs, Szarka M, Szigeti M, Guttman A: Separation window dependent multiple injection (SWDMI) for large scale analysis of therapeutic antibody N-glycans. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 128: 367-370 (2016) [Link](#)
11. Bodnár J, Hajba L, Guttman A: A fully automated linear polyacrylamide coating and regeneration method for capillary electrophoresis of proteins. *Electrophoresis*, 37:(23-24) 3154-3159 (2016) [Link](#)

MTA–SZTE LENDÜLET FOLDAMER KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Martinek Tamás, az MTA doktora

6720 Szeged, Eötvös u. 6.

telefon: (62) 545 768; fax: (62) 545 705; e-mail: martinek@pharm.u-szeged.hu

a kutatócsoport megalakulásának éve: 2011

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport fő célkitűzése új, a biológiai alkalmazások szempontjából ígéretes nagyfelszínű foldamer szerkezetek létrehozása és azok felhasználása fehérje-fehérje/fehérje-szénhidrát kölcsönhatások gátlására. Az alábbi egymásra épülő részfeladatokat hajtják végre:

- Új, nagy átmérőjű hélixek létrehozása.
- Meghatározott szerkezetű, kontrollált hélixkötegek és nem aggregálódó β -szendvics mimetikumok létrehozása.
- Fehérje-fehérje kölcsönhatás gátlása foldamerrel: β -amiloid oligomer aggregátumok neurotoxikus hatásának kivédése.
- Foldamerekkel történő fehérje-szénhidrát kölcsönhatás gátlása: Galektin-1 (Gal-1) protein tumordajka blokkolása.

A projektben új típusú másodlagos és harmadlagos foldamer szerkezeteket kapnak, amelyek gyógyszerkémiailag alkalmazásai új utat nyithatnak farmakológiailag fontos PPI/PCI kölcsönhatások gátlásában és nagy társadalmi kihatással bíró betegségekben (Alzheimer kór, daganatok) juthatnak közelebb a terápiához.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Új, nagy átmérőjű hélixek létrehozása

A Sztereokémiai mintázat alkalmazásának kiterjesztése

Új biomimetikus hélixeket terveztek és jellemeztek kísérletesen. Az általuk felismert sztereokémiai mintázatok módszerével két új hélix típust hoztak létre: az $\alpha\beta$ -H16/18 és az $\alpha\alpha\beta$ -H9/12/9/10 hélixeket.

Oldalláncok sztérikus taszításával való hélix-tervezés

A szekvenciákat nagy térkitöltésű bicikloheptén oldalláncot tartalmazó β -aminosavak és β^3 -aminosavak felhasználásával tervezték. Így sikeresen állítottak elő a β -H18 hélixet, ami a közlés pillanatában a legnagyobb átmérőjű alifás foldamer hélix volt. Az eredmény jelentősége továbbá abban áll, hogy a nagyátmérőjű hélix önasszociációval stabilizálódik, ami egy általános viselkedést vetít előre.

Nagy átmérőjű hélixek stabilizálása önasszociációval

Felfedeztek egy újabb nagy átmérőjű β -peptid hélixet, amelyet alternáló sztereokémiával valósítottak meg. Leírták a ciklusos oldalláncú aminosavakkal létrehozott β -H18/20 hélix lánchossz- és oldószerfüggő képződését, valamint a hélixek axiális (fej-láb) önrendeződését (3. ábra). Ez a hélix típus jelenleg a legnagyobb átmérőjű peptidomimetikus foldamer hélix a szakirodalomban.

Meghatározott szerkezetű foldamer harmadlagos szerkezetek létrehozása

Nem aggregálódó β -szendvics mimetikumok létrehozása

A β -szendvics mimetikumoknál nem hozott sikert, a fentről-lefelé (top-down) megközelítést követték kombinálva molekuláris dinamikai számításokkal. Elsőként hoztak létre protein méretű, β -aminosavakat tartalmazó β -szendvics modellt. Ez az áttörés a területen lehetővé teszi, hogy a β -szendvics mimetikumba 25% mesterséges aminosavat építsenek bele (az eredetileg benne lévő D- α -aminosavakkal együtt), ami irodalmi adatok alapján jelentősen megnövelheti a proteáz rezisztenciát és a hatóanyag-alapvázként történő hasznosítás előtt megnyithatja az utat.

Fehérje-fehérje kölcsönhatások gátlása foldamerrel

A Neurotoxikus β -amiloid oligomer aggregátumok felismerése és hatásuk kivédése foldamer konjugátumokkal

Céljuk az volt, hogy fragmentáló megközelítést alkalmazva módszert fejlesszenek ki foldamer-alapú, protein felismerő ligandum létrehozására. Rövid foldamer szekvenciákat terveztek és szintetizáltak, amelyek képesek lehetnek a toxikus A β oligomerek felszínének felismerésére.

Tekintettel arra, hogy az A β oligomerek testfolyadékokból való kimutatása nagy érdeklődésre tart számot, a legjobb multivalens származékot továbbfejlesztették, hogy képes legyen egy szendvics ELISA-típusú kísérleti elrendezésben detektálni az A β oligomereket. Tesztelték a felületre kötés geometriáját, a templátot, a detektáló szekvencia specifikus A β antitestet, és a vizualizációs módszert. Így az általuk először megvalósított foldamer-alapú szendvics ELISA a szekvencia specifikus anti-A β antitestekkel működő módszerekkel (pl. INNOTEST kit) összemérhető érzékenységet mutat, de az A β oligomerekre szelektív; A β monomereket nem mutatja ki.

Galektin-1 tumordajka protein blokkolása

A fentről-lefelé (top-down) tervezési elvet követve, az anginex β -redős magjában szisztematikus nyíltláncú β^3 -aminosav helyettesítéseket végeztek és megvizsgálták, hogy ez milyen hatással van a harmadlagos szerkezetre, a Gal-1-gyel való kölcsönhatásra és a bioaktivitásra. Kimutatták, hogy az indukálható harmadlagos szerkezettel összhangban bizonyos anyagok nagyságrendileg hasonló gátlást okoztak az endotél sejtek szaporodásában. Ezzel elsőként állítottak elő bioaktív α/β -peptid β -redő modelleket.

MTA-SZTE LENDÜLET FOTOELEKTROKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Janáky Csaba, PhD

6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

telefon: (62) 532 7433; e-mail: janaky@chem.u-szeged.hu

honlap: http://www2.sci.u-szeged.hu/physchem/MTA_PERG/index.html

a kutatócsoport megalakulásának éve: 2014

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

Az MTA-SZTE „Lendület” Fotoelektrokémiai Kutatócsoport olyan szerves félvezetőkön és szerves vezető polimereken alapuló összetett anyagokat vizsgál, melyek hasznosíthatók lehetnek tüzelőanyagok közvetlen előállítására, szén-dioxid napfény segítségével történő átalakításával. Céljuk, hogy ezen szabályozott nanoszerkezettel rendelkező összetett anyagok tulajdonságait és viselkedését az összetétellel, és az előállítási módszer szabályozásával hangolják. A munkaterv második évre kitűzött szakmai céljait maradéktalanul teljesítették, továbbá a munkájuk során további nagyon ígéretes, a témához kapcsolódó kutatási vonalakat tártak fel. Számos új, hosszú távú szakmai együttműködést indítottak és erősítettek meg, valamint új műszerek üzembe helyezésével megteremtették egy modern fotoelektrokémiai laboratórium analitikai hátterét.

2016-os év során az alábbi konkrét feladatokat végezték el

A 2015-ben beszerzett GC-MS valamint GC-BID rendszerek, optimalizálása, kalibrálása, valamint a gázfázis on-line analízisének megoldása.

Az előállított három új N-tartalmú monomerből elektrokémiai polimerizációval készített polimerek (foto)elektrokémiai CO₂-redukciós vizsgálata, szerkezet-hatás összefüggések felderítése.

További monomerek előállítása, azokból vezető polimerek készítése.

Polianilinból és polipirrolból előállított nagy felületű szén elektródok készítése, vizsgálata, és CO₂ redukciós aktivitásának vizsgálata.

Oxid nanostruktúrák előállítása, jellemzése, és fotoelektrokémiai vizsgálata (NiO, CuNb₂O₆, ZnNb₂O₆, Bi₂Ti₂O₇, CuCrO₂, és további összetett oxidok)

Szén nanoszerkezetekre (3D grafén, szén-nanocsőköteg) oxid nanokristályok leválasztása és a kompozitok CO₂ redukciós aktivitásának vizsgálata.

Hibrid polimer/félvezető nanoszerkezetek előállítása és vizsgálata (pl. SiC/PEDOT, Cu₂O polianilin). Az így kapott hibridek (foto)elektrokémiai CO₂-redukciós vizsgálata.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatási tevékenység talán legjelentősebb eredménye, hogy több polimerre igazolták a korábban felderített azon szerkezet-hatás összefüggéseket, amelyek meghatározzák, hogy milyen szerves félvezetőket lehet alkalmazni a fotoelektrokémiai CO₂-redukcióban. Ezen eredményeik első elemeit publikálták a Chemical Communications folyóiratban.

További fontos eredmény, hogy a tavaly új altémaként elindított a különféle szén nanoszerkezeteken alapuló fotoaktív hibridek területén, sikerült az első fontos következtetéseket levonniuk. Ezen nagyfelületű elektródokon alapuló fotoelektrokatalizátorok

használata komoly lépést jelent az ipari alkalmazhatóság irányába vezető úton. Megjelent a témában az első közlemény is (Cu_2O nanokristályok leválasztása szén-nanocsövekre), amely komoly szakmai érdeklődést váltott ki.

Összefoglalták, hogy miért játszik kitüntetett szerepet a $\text{Cu}/\text{Cu}_2\text{O}$ határfelület mind az elektrokémiai, mind a fotoelektrokémiai szén-dioxid redukcióban (ACS Energy Letters).

Kettő, a kutatócsoportban dolgozó hallgató sikerrel mutatták be munkájukat a helyi TDK-n, ahol I. és II. díjat kaptak.

Végül megemlítenéd, hogy a kutatócsoport vezető aktív részvételével Szeged megnyerte a jogot a Nemzetközi Elektrokémiai Társaság (ISE) 2017. évi Topical Meeting-jének megrendezésére, melynek témája a Fotoelektrokémia lesz.

b) Tudomány és társadalom

A Fény Nemzetközi Éve rendezvénysorozathoz kötődően több tudományos ismeretterjesztő előadást és tudománynépszerűsítő előadást tartott a csoport. Többek között a szegedi Eötvös Loránd Szakkollégium Kémia Műhelyében meghívott előadóként beszéltek a napenergia kiaknázásának lehetőségeiről és fontosságáról.

Folyamatosan frissítik a kutatócsoport honlapját (http://www2.sci.u-szeged.hu/physchem/MTA_PERG/index.html), amely az érdeklődők számára naprakész információkkal szolgál a csoport tevékenységéről.

Kiemelkedően nagyszámú sajtómegjelenésük volt, mind a helyi, mind az országos sajtóban. A kutatócsoport vezetője előadást tartott többek között az M5-ös csatorna Mindenki Akadémiája című műsorában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

Új együttműködést alakítottak ki a University of New Mexico (USA) egy csoportjával, amelyben új, környezetbarát módszerrel előállított, nemesfémmentes elektro-katalizátorokat vizsgáltak. Ezen együttműködés valószínűleg hosszú életű lesz, mivel a közös munka során számos további vizsgálatra érdemes jelenségek történtek sikeres azonosítaniuk. A hazai együttműködések közül fontos kiemelni az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont kutatócsoportjával, valamint az SZTE kutatócsoportjával való közös munkát. Az előbbi csoport nanoszerkezetű CuI/PbI_2 határfelületek elméleti leírásában segít. Utóbbi csoporttal együttműködésben azt vizsgálják, hogy mennyiben hasonlít, és mennyiben különbözik a termikusan és elektromosan aktivált reakciók, félvezető/fém katalizátorokat használva.

Ezek mellett továbbra is szoros kapcsolatot ápolnak UT Arlington (USA) kutatócsoportjával.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A 2016-ban hirdették ki a korábban beadott European Research Council (ERC) Starting Grant pályázatának az eredményét, melyen a kutatócsoport vezetője támogatást nyert (1,5 M Euro).

Az alábbi két pályázaton több kutatócsoporttal együtt pályáztak sikeresen, melynek keretében nanoszerkezetű határfelületeken vizsgálhatják az elektron-transzfer folyamatát.

GINOP 2.3.2 Stratégiai K+F műhelyek kiválósága

GINOP 2.3.3 Kutatási infrastruktúra megerősítése – nemzetköziesedés, hálózatosodás

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

Az elmúlt egy év során 11 nemzetközi publikáció jelent meg. A teljes publikációs lista az MTMT-n elérhető, azonosító: 10022474. Ezek közül a legjelentősebbek:

1. Kecsenovity E, Endrődi B, Pápa Z, Hernádi K, Rajeshwar K, Janáky C: Decoration of ultralong carbon nanotubes with Cu₂O nanocrystals: a hybrid platform for enhanced photoelectrochemical CO₂ reduction. Journal of Materials Chemistry A, 4: 3139-3147 (2016)
2. Hursán D, Kormányos A, Rajeshwar K, Janáky C: Polyaniline films photoelectrochemically reduce CO₂ to alcohols. Chemical Communications, 52: 8858-8861 (2016)

MTA-SZTE LENDÜLET PÓRUSOS NANOKOMPOZITOK KUTATÓCSOPORT

kutatócsoport-vezető: Kukovecz Ákos, PhD

6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

telefon: (62) 544 620; fax: (62) 544 619; e-mail: kakos@chem.u-szeged.hu

honlap: <http://www.porousnanocomposites.com>

a kutatócsoport megalakulásának éve: 2012

I. A kutatóhely fő feladatai 2016-ban

A kutatócsoport 2012. július 1-én kezdte meg működését. Céljuk a nanopórusos szilárd anyagok (különösen az egydimenziós nanoszerkezetekből felépülő hálózatok) és a fluidumok kölcsönhatásainak, a nano- és a mikrovilág határán zajló fizikai-kémiai folyamatoknak a jobb megértése. Öt éves kutatási tervük három alappillére az új pórusos nanokompozit anyagok fejlesztése, a párolgási profil nevű analitikai kémiai módszer elméleti és gyakorlati fejlesztése, valamint szelektív gázérzékelők készítése a fluktuációval javított érzékelés módszer segítségével.

A beszámolási időszakban fő céljuk a nanokompozitok fejlesztése és fotokatalitikus hasznosítása, valamint a vízcseppek és nanopórusos filmek kölcsönhatásainak tanulmányozása volt.

II. A 2016-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási eredmények

A szilika alapú kutatási irányban üreges szilika nanogömböket készítettek, majd ezeket gélmátrixba ágyazva olyan kompozitokat nyertek, amikben autokatalitikus frontreakciókat futtattak. Elsőként igazolták, hogy a szilikahéj aminopropil funkcionálizálása toluolos közegben nem jár morfológiai változással.

Megmutatták, hogy párolgási profiljuk alapján az optikai izomerek is megkülönböztethetők alkalmasan funkcionálizált nanopórusos közeget használva. Részlegesen oxidált többfalú szén nanocsövekre 1,8-diamino-oktán linkerrel BOC védett L-fenilalanint kapcsoltak, majd az így nyert anyagból készített önhordó filmen mérték az R(+) és az S(-) alfa-metil-benzilamin párolgási profiljait, amiket különbözőnek találtak. Az S izomer esetén tapasztalható lokális ellenállásmaximum a víz anomáliás párolgási profiljának analógiájára értelmezhetőnek tűnik.

Elsőként igazolták a bolygó golyósmalmos őrlés Burgio-Rojac féle őrlési energia számítási modelljének helyességét szubmikrométeres részecskékre, és eközben meghatározták a többfalú szén nanocsövek eltöréséhez szükséges beütési küszöbenergia értékét (35 mJ-beütés-1) is. A nanocsövek átlagos hosszának és Raman I_D/I_G intenzitásarányának őrlés közbeni változására statisztikus modellt fejlesztettek, majd az ebből levezethető állításokat kísérletileg igazolták a Burgio-Rojac őrlési energia térkép reprezentációban.

Értelmezték a funkcionizálatlan és a karboxilcsoportokkal funkcionizált többfalú szén nanocsövekből készített önhordó filmek és a rájuk helyezett vízcsepp között mérhető hőátadási és anyagátadási együtthatóban mutatkozó látszólagos anomáliát. Elsőként figyelték meg, hogy egy felületi vízcsepp és egy szén nanocső film között a hőátadás és az anyagátadás is különböző attól függően, hogy a nanocsövek falán vannak-e oxigéntartalmú (karboxil) funkciós csoportok vagy sem. Látszólagos anomáliát abban az értelemben tapasztaltak, hogy mindkét folyamat a funkcionizálatlan nanocsövekből készített, tehát elvileg hidrofóbabb

film és a vízcsepp között volt kedvezményezett. A jelenséget sikerült értelmezniük a felmkületi horgonyhatás feltételezésével.

Ritkaföldfémekkel dópolt stroncium-aluminát foszforokat tartalmazó funkcionális nanokompozitokat készítettek. Stroncium-aluminát foszforokat szilikahab mátrixba építve nyomjelzőként, ZnO:Co+Ag rendszerben pedig fotokatalitikus módosítóként tudtak használni. Utóbbi különösen érdekes a fenntartható fejlődés szempontjából, mivel itt a foszfor utánvilágító hatását kihasználva egy nagyságrendet tudták a rendszer energiaszükségletén csökkenteni úgy, hogy a fotokatalitikusan átalakított modellszennyező mennyisége lényegesen nem változott.

Megmutatták, hogy az önhordó szén nanocső filmek elektromos ellenállását befolyásoló legfontosabb jellemző a térkitöltési hányad. Modellt dolgoztak ki a többfalú szén nanocsővekből készített önhordó filmek összenyomás-függő elektromos ellenállásának számítására. A modell helyességét kísérleti adatokkal történő összevetéssel igazolták. A film piezorezisztív viselkedésének oka a nanocső–nanocső kontaktusok számának emelkedése összenyomáskor, és hogy az elektromos ellenállást befolyásoló legfontosabb jellemző a térkitöltési hányad.

A kutatócsoport vezetője öt nemzetközi rendezvényen tartott meghívott szóbeli előadást. Tagja volt az EuroBIC 13 nemzetközi konferencia helyi szervező bizottságának, társelnöke a SIWAN 2016 konferenciának és főszerkesztője a Nanopages című tudományos, Scopus által referált folyóiratnak.

b) Tudomány és társadalom

A kutatócsoport a kezdetektől nagy hangsúlyt fektet a tájékoztatására és az ismeretterjesztésre. A beszámolási időszakban a csoport egy UV-Vis spektrofotométer kihelyezésével és laborlátogatások szervezésével támogatta a szegedi Radnóti Miklós Kísérleti Gimnázium kémiaoktatását. A csoport honlapján (<http://www.porousnanocomposites.com>) és közösségi média oldalán is folyamatosan tájékoztatja az érdeklődőket a csoport életét érintő eseményekről, eredményekről, műszerbeszerzésekről stb.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi K+F kapcsolatai 2016-ban

A csoport tagjai több mint 20 európai egyetemmel, kutatóintézettel és vállalattal tartanak élő kapcsolatot. Legfontosabb külföldi együttműködő partnereik: Oului Egyetem (Finnország), Rice Egyetem (USA), Újvidéki Egyetem (Szerbia), Bakui Állami Egyetem (Azerbajdzsán), Kolozsvári Egyetem Románia), National Taiwan University (Taiwan). További 18 partnerrel kerültek kapcsolatba H2020 INFRADEV "PRO-METRFood" projekt (nyert, futamidő 2017 január 1 - december 31) kapcsán, másik 10 új kapcsolatuk pedig a H2020 SFS "UPGRADE" projekt (beadva 2017 február) révén keletkezett. 2016-ban lejárt a sikeres M-ERA.NET "VOCSensor" pályázatuk, ennek folytatásaként 2016-ban újabb M-ERA.NET pályázatot nyújtottak be. Ez a "CLEARPV" az első szűrőn támogatást kapott, ezért a teljes pályázatot 2016 novemberében benyújthatták, jelenleg döntésre várnak. Egy indiai professzorral (Indian Institute of Technology, Delhi) az előző évben megkezdett közös kutatómunka két új impaktfaktoros közleményt és egy meghívott konferencia előadást eredményezett.

A csoport legfontosabb hazai partnerei az MTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, az SZTE FKAT Nemlineáris Dinamika és Kinetika Kutatócsoport és az SZTE SZKT Anyag és Oldatszerkezeti Kutatócsoport. Mellettük többek közt az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont és a BME munkatársaival ápolnak jó munkakapcsolatot. 2016-ban a Pannon Egyetem egyik kutatójával kezdtek együtt dolgozni a párolgási profilok modellezése területén.

A csoport valamennyi diplomás tagja részt vesz az SZTE oktatásában. A csoport vezetője több főkéllégiumi kurzus előadója és az anyagmérnök alapszak szakfelelőse, a csoport tagjai pedig számolási és laboratóriumi gyakorlatokat, valamint hallgatói munkákat vezetnek.

IV. A 2016-ban elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai

GINOP 2.3.3-15-2016-00010 infrastrukturális pályázat: "Szerkezetvizsgálati infrastruktúra fejlesztése önszerveződő rendszerek alkalmazásaihoz: atomi szinttől a szubmikrométeres léptékig". A projektben az egyik készülék és a hozzá kapcsolódó téma felelőse a kutatócsoport vezetője, az ehhez a részhez tartozó költségvetés 249 000 E Ft

GINOP 2.3.2-15-2016-00013 kiválósági pályázat: "Funkcionális felületeken alapuló intelligens anyagok – az előállítástól az alkalmazásokig". A projektben a Szenzorikai téma nevesített vezetője a kutatócsoport vezetője, az ehhez allokált költségvetés 80 000 E Ft.

GINOP 2.2.1-15-2016 K+F versenyképességi és kiválósági együttműködések "Kizárólag magas iontartalmú folyadékban oldódni képes, 3D nyomtatásra alkalmas, DNS kódrendszerrel ellátott polimer és az erre alapozott üzletileg hasznosítható UAV-UUV drón hibrid prototípus fejlesztése" - konzorciális pályázat, amelyben a kutatócsoport vezetője az SZTE partner szakmai vezetője. SZTE-re jutó költségvetés 89 000 E Ft.

Külföldi

NFFA-118/2016 "Functional Nanocomposites of Ultrathin Graphitic Carbon Nitride (g-C₃N₄) Nanosheets: A Catalytic Approach", témavezető a kutatócsoport vezetője. Támogatás: kb. 390 E Ft pénzbeli támogatás + 10 mérési nap (értéke nem számszerűsíthető)

H2020-INFRADEV-2016-2017 "PRO-METROFOOD", Támogatás: 20 070 E Ft.

V. A 2016-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bogya ES, Szilágyi B, Kukovecz Á: Surface pinning explains the low heat transfer coefficient between water and a carbon nanotube film. Carbon, 100: 27-35 (2016)
2. Kumar V, Haspel H, Nagy K, Rawal A, Kukovecz Á: Leveraging compressive stresses to attenuate the electrical resistivity of buckypaper. Carbon, 110: 62-68 (2016)
3. Kozma G, Puskas R, Papp IZ, Belteky P, Konya Z, Kukovecz Á: Experimental validation of the Burgio-Rojac model of planetary ball milling by the length control of multiwall carbon nanotubes. Carbon, 105: 615-621 (2016)

**A MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI LENDÜLET-
KUTATÓCSOPORTOK FŐBB MUTATÓI ÉS PÉNZÜGYI ADATAI 2016-BAN**

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Egzotikus Kvantumfázis Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1	Ebből kutató ² :	1
PhD, kandidátus:	0,75	MTA doktora:	0,25
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			13
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			13
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			13
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			13
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	46,099	Összes független hivatkozás száma (2015):	160
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			196
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		poszterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		11 651	E Ft
Teljes saját bevétel:		26 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	26 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Emberi Egyensúlyozás Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,41	Ebből kutató ² :	1,41
PhD, kandidátus:	MTA doktora: 0,25	Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,91
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			1
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			1
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			1
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	0,732	Összes független hivatkozás száma (2015):	0
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			0
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			0
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka: 7		Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc): 2		PhD:	2
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	42 000	E Ft	
Teljes saját bevétel:	2 649	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	2649	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Jövő Internet Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	2,49	Ebből kutató ² :	1,49
PhD, kandidátus:	0,66	MTA doktora: 0,5	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,33
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			13
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			13
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			1
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	2,186	Összes független hivatkozás száma (2015):	65
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			107
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		posztterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	13	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			4
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	20 000	E Ft	
Teljes saját bevétel:	85 000	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	2000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	13 000	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	45 000	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	25 000	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,5	Ebből kutató ² :	1,5
PhD, kandidátus:	1,5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			5
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			5
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	18,56	Összes független hivatkozás száma (2015):	41
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			51
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			7
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	28 600	E Ft	
Teljes saját bevétel:	33 303	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	9592	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3600	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	20 111	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Kiber-fizikai Rendszerek Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4,32	Ebből kutató ² :	4,32
PhD, kandidátus:	0,24	MTA doktora:	0,25
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			4,07
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			20
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			20
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			1
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	0,99	Összes független hivatkozás száma (2015):	0
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			0
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			13
		posztterek száma:	1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	11	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	5
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		34 650	E Ft
Teljes saját bevétel:		43 402	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		43 402	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	5,65	Ebből kutató ² :	5,15
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	0,5
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			2,55
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			12
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			11
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			10
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			10
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	29,971	Összes független hivatkozás száma (2015):	36
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			80
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			3
		posztterek száma:	6
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			4
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	0
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		40 800	E Ft
Teljes saját bevétel:		9000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	9000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Magneto-optikai Spektroszkópiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	5,92	Ebből kutató ² :	6,22
PhD, kandidátus:	2,3	MTA doktora:	0,3
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			4,5
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			15
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			15
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			14
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			14
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	58,808	Összes független hivatkozás száma (2015):	6
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			9
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			36
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			21
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			6
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	8
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	61 470	E Ft	
Teljes saját bevétel:	26 800	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	21 000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	5800	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Spintronikai Kutatócsoport (PROSPIN)

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,49	Ebből kutató ² :	1,49
PhD, kandidátus:	0,12	MTA doktora:	0,75
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			1
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,62
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			7
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			7
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			7
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			7
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	25,268	Összes független hivatkozás száma (2015):	0
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			0
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			1
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	35 814	E Ft	
Teljes saját bevétel:	10 000	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	10 000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-BME Lendület Statisztikus Térelméleti Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,92	Ebből kutató ² :	1,55
PhD, kandidátus:	0,75	MTA doktora: 0,5	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1,05
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			8
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	29,22	Összes független hivatkozás száma (2015):	141
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			179
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0,75	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			10
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	2
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		26 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		18 278	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	12 080	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6198	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-DE Lendület Funkcionálanalízis Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	2,35	Ebből kutató ² :	2,35
PhD, kandidátus:	1,25	MTA doktora:	0,25
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			2,1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			14
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			14
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			14
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			14
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	13,571	Összes független hivatkozás száma (2015):	19
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			22
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			32
		posztterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		20 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		2700	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	500	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2200	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület Biofizikai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	0,75	Ebből kutató ² :	0,75
PhD, kandidátus:	0,5	MTA doktora:	0,25
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			5
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			5
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			1
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			4
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	31,645	Összes független hivatkozás száma (2015):	36
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			62
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	MTA doktora:	
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			
		posztterek száma:	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			
Témavezetések száma: TDK munka:		Diplomamunka (BSc):	
Diplomamunka (MSc):		PhD:	
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		10 570	E Ft
Teljes saját bevétel:			E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:			E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület CMS Részecske- és Magfizikai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,6	Ebből kutató ² :	1,6
PhD, kandidátus:	1,5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,6
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			36
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			36
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			36
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			36
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	195,121	Összes független hivatkozás száma (2015):	2
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			2
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			8
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	3
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		37 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		16 866	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	16 866	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület Dinoszaurusz Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,25	Ebből kutató ² :	1,25
PhD, kandidátus:	MTA doktora: 0,5	Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			7
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			5
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			5
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	9,87	Összes független hivatkozás száma (2015):	116
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			188
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ : 0		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			8
		posztterek száma:	1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 4		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			1
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka: 1		Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc): 2		PhD:	1
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		11 162	E Ft
Teljes saját bevétel:		12 766	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:		10 146	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		2200	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		360	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		60	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület EIRSA Asztrofizikai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1	Ebből kutató ² :	1
PhD, kandidátus:	0,5	MTA doktora:	0,5
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,5
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			24
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			24
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			24
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			24
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	164,816	Összes független hivatkozás száma (2015):	195
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			509
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	MTA doktora:	
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		posztterek száma:	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			
Témavezetések száma: TDK munka:		Diplomamunka (BSc):	
Diplomamunka (MSc):		PhD:	
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		27 395	E Ft
Teljes saját bevétel:			E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:			E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület Forró Univerzum Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	0,74	Ebből kutató ² :	0,49
PhD, kandidátus:	0,49	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			0,16
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			0
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			0
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			0
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	0	Összes független hivatkozás száma (2015):	0
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			0
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			8
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			0,5
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	0
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		37 000	E Ft
Teljes saját bevétel:		0	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0 E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			0 E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület Katalízis és Szerves Szintézisek
Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	2,16	Ebből kutató ² :	2,16
PhD, kandidátus:	0,5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			1,66
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			7
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			7
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	30,673	Összes független hivatkozás száma (2015):	93
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			121
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 2	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			1
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	2
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	21 077	E Ft	
Teljes saját bevétel:	11 000	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	11 000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület Kémiai Szerkezet/Reaktivitás Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1	Ebből kutató ² :	1
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,5
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			3
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			3
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			3
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			3
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	7,151	Összes független hivatkozás száma (2015):	0
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			0
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD:	MTA doktora:	
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		posztterek száma:	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			
Témavezetések száma: TDK munka:		Diplomamunka (BSc):	
Diplomamunka (MSc):		PhD:	
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		20 000	E Ft
Teljes saját bevétel:			E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:			E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Lendület Ráctérelméleti Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4,35	Ebből kutató ² :	3,48
PhD, kandidátus:	1,16	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag: 0,5
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			2,48
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			5
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			5
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			5
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			5
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	20,252	Összes független hivatkozás száma (2015):	161
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			206
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			7
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	2
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		25 800	E Ft
Teljes saját bevétel:		24 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	24 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-PE Lendület Transzlációs Glikomika Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	6,09	Ebből kutató ² :	3,83
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	1
		Rendes tag és levelező tag:	
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			4
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			1,83
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			10
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			10
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			1
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			9
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	1
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	33,359	Összes független hivatkozás száma (2015):	47
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			58
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			14
		poszterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			5
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			1
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	7
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :	21 600	E Ft	
Teljes saját bevétel:	183 700	E Ft	
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	15 000	E Ft	
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3000	E Ft	
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft	
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	165 700	E Ft	
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :	0	E Ft	

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Lendület Foldamer Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	1,75	Ebből kutató ² :	1,75
PhD, kandidátus:	0,75	MTA doktora:	0,25
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :		Rendes tag és levelező tag:	
35 év alatti, kutatócsoportban levő kutatók száma ⁴ :			1,5
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			4
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			4
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			4
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			4
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	17,15	Összes független hivatkozás száma (2015):	77
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			95
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :		PhD:	
		MTA doktora:	
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :		külföldi oltalmak száma ¹¹ :	
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :		posztterek száma:	
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			
Témavezetések száma: TDK munka:		Diplomamunka (BSc):	
Diplomamunka (MSc):		PhD:	
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		18039	E Ft
Teljes saját bevétel:			E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:			E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :			E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Lendület Fotoelektrokémiai Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	3,41	Ebből kutató ² :	3,91
PhD, kandidátus:	1,5	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			3,41
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			8
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			8
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			8
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			7
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	33,67	Összes független hivatkozás száma (2015):	22
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			36
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 1	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			9
		poszterek száma:	9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			3
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	4
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		39 400	E Ft
Teljes saját bevétel:		5500	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		5500	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2016-ban

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Lendület Pórusos Nanokompozitok Kutatócsoport

<u>1. LÉTSZÁMADATOK</u>			
Átlagléttség ¹ :	4,48	Ebből kutató ² :	2
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	Rendes tag és levelező tag:
A kutatócsoporthoz kötődő akadémikusok száma ³ :			0
35 év alatti, kutatócsoporti állományban levő kutatók száma ⁴ :			0,41
<u>2. PUBLIKÁCIÓK</u>			
Az év folyamán megjelent összes (tud, okt. és ismeretterjesztő) publikáció száma ⁵ :			20
Az év folyamán megjelent teljes tudományos publikáció száma ⁶ :			19
Tanulmány, cikk tudományos folyóiratban magyarul:			0
hazai tudományos folyóiratban idegen nyelven:			0
külföldi tudományos folyóiratban idegen nyelven:			19
<i>Ebből</i> impaktfaktoros publikáció			19
Könyv, atlasz	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet, térkép	magyarul: 0	idegen nyelven:	0
<u>3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK</u>			
Összesített impaktfaktor ⁷ :	77,876	Összes független hivatkozás száma (2015):	98
Összes hivatkozás száma (2015) ⁸ :			124
<u>4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2016-BAN</u>			
Tud. fokozat megszerzése ⁹ :	PhD: 0	MTA doktora:	0
<u>5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME</u>			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma ¹⁰ :	0	külföldi oltalmak száma ¹¹ :	0
<u>6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN</u>			
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma ¹² :			5
		posztterek száma:	10
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma ¹³ :			0
<u>7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG</u>			
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ¹⁴ :			2
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	3
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	5
<u>8. PÉNZÜGYI ADATOK</u>			
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ¹⁵ :		30 348	E Ft
Teljes saját bevétel:		10 000	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
	A tárgyévre vonatkozó támogatás és bevétel:	10 000	E Ft
Az év folyamán az egyéb hazai pályázati forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán az EU forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel ¹⁸ :		0	E Ft

