

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2006. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

I.

Matematikai és természettudományi kutatóintézetek



Budapest

2007

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KUTATÓHELYEINEK
2006. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

I.

Matematikai és természettudományi kutatóintézetek

Budapest

2007

A Magyar Tudományos Akadémia természettudományi kutatóhelyeinek beszámolóí alapján –
az intézmények vezetőinek aktív közreműködésével – szerkesztették az MTA Titkársága

Kutatóintézeti Főosztályának munkatársai

Banczerowski Januszné mb. főosztályvezető

Herczeg György

Redler László

ISSN: 1418-835X

F.k.: Banczerowski Januszné

Akaprint Kft. F.v.: Freier László

Tartalomjegyzék

Előszó	5
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések	7
Atommagkutató Intézet	9
Földrajztudományi Kutatóintézet	25
Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet	33
Geokémiai Kutatóintézet	43
Izotópkutató Intézet	52
Kémiai Kutatóközpont	62
Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet	65
Kémiai Kutatóközpont Felületkémiai és Katalízis Intézet	75
Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézet	84
Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet	94
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet	105
KFKI Atomenergia Kutatóintézet	117
KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet	130
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet	146
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet	163
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet	175
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet	193

ELŐSZÓ

A Magyar Tudományos Akadémia intézethálózata több mint egy évtizede hagyományosan közreadja éves beszámolóját, amelyben összefoglalja a kutatóintézetek tudományos kutatási eredményeit, valamint bepillantást enged tevékenységének jellemző, értékelő adataiba, mutatóiba. Ebben az évben ismét három kötetben jelentetjük meg a matematikai és természettudományok, az élettudományok és a társadalomtudományok eredményeit.

Az elmúlt években megindult az intézethálózat profiljának korszerűsödése, és e tendencia várhatóan folyamatos marad. A hálózat megőrizte az alapozó kutatásokban hagyományosan birtokolt erős pozícióját, ugyanakkor tevékenységének jelentős részévé vált a graduális és posztgraduális oktatásban való részvétel, s ma már a nemzeti innovációs rendszernek is figyelmen kívül nem hagyható, fontos elemévé lett. Elvitathatatlan az a tény, hogy a hazai K+F kutatás jelentős részét az MTA kutatóhálózata adja. Az intézetekben művelt kutatások interdiszciplinaritása szélesedett, megteremtve ezzel a lehetőségét a hálózat intézetei közötti együttműködések intenzitásának növeléséhez. Kutatási eredményeik hasznosítására több intézetben kis, innovatív spin-off cégek jöttek létre, telephelyeiken számos magáncég számára biztosítják a kutatás-fejlesztéshez szükséges szellemi kapacitást és kutatási infrastruktúrát.

A változó társadalmi és gazdasági környezet bizonyos tekintetben nagyobb lehetőségeket, ugyanakkor nem egy területen szűkülő kereteket és szigorúbb feltételeket hozott. Az akadémiai intézetek – számos jel szerint – lépést tudtak tartani a megváltozott körülményekkel. Az intézetek számos kutatója, kutatócsoportja megőrizte elismertségét tudományterületének nemzetközi porondján, mint ezt publikációik száma, idézettségük és a nemzetközi tudományos bizottságokban, folyóiratok szerkesztőbizottságában betöltött számos tisztségük igazolja. A hálózat eredményeinek nemzetközi elismerését mutatja, hogy az elmúlt években hét intézete kiválósági címet – Center of Excellence – nyert el európai pályázatokon.

A 2006. évben az akadémiai kutatóintézetek a nehezedő feltételek ellenére megőrizték magas színvonalú teljesítő képességüket és az előző évhez közel hasonló eredményeket értek el – mindezt a költségvetés támogatásának kiegyensúlyozatlansága, az ország ingadozó kutatás-fejlesztési politikája, hosszú távú kutatás-fejlesztési stratégiájának hiánya, a pályázati finanszírozás igen nehézkes, bürokratikus jellege ellenére is.

Kutatóintézeteink létszáma 2006-ban szinte változatlan maradt az előző évihez képest, ezen belül viszont a kutatói létszám mind a természettudományi, mind a társadalomtudományi területen – csekély mértékben – növekedett.

Az összes tudományos publikáció száma az előző évi növekedéstől eltérően 6393-ról 6153-ra csökkent, mintegy 3,8%-kal. A csökkenés ugyan kis mértékű, de mindhárom tudományterületen észrevehető volt a változás, ami a 2005-ös enyhe létszámcsökkenés hatása mellett a támogatások csökkenésének is tulajdonítható. Az élettudományok területén az összes tudományos publikáció száma közel 9%-kal csökkent, a matematika és természettudományoknál kisebb volt a csökkenés, kb. 4%, a társadalomtudományi területen 2,1%. Az összes tudományos publikáció 41%-a nemzetközi együttműködés keretében készült, ez néhány százalékos emelkedést mutat. A referált nemzetközi folyóiratokban megjelent cikkek száma összességében 2,8%-kal csökkent, évek óta az összes publikáció több mint fele

(55%-a) tartozik a minőségi publikációkhoz. A társadalomtudományi intézetek tudományos publikációinak 27,7%-a idegen nyelven jelent meg a korábbi évek arányának megfelelően.

Az egy kutatóra eső összes publikáció száma 2,57 (élettudományoknál 1,38; matematika és természettudományoknál 1,84, társadalomtudományoknál 4,5), az SCI referált cikkek száma 0,94 (élettudományoknál 0,74; matematika és természettudományoknál 1,03), az egy kutatóra eső idegen nyelvű publikáció a társadalomtudományoknál 1,3, tehát gyakorlatilag azonos az előző évi értékekkel. Természettudományi területen változatlan volt az összesített impakt-faktor száma, és ez vonatkozik a hivatkozások számára is.

A tudományos eredmények bemutatásának általánosan elfogadott módja a konferenciákon való előadás. Nemzetközi rendezvényeken 2006-ban 2526 előadásban és 1356 poszteren számoltak be kutatóink tudományos eredményeikről. A nemzetközi rendezvényeken tartott előadások száma 2,1%-kal növekedett az előző évhez viszonyítva, és növekedett a poszterek száma is kb. 57%-kal, bizonyítva kutatásaink nemzetközi jelentőségét. Nemzetközi elismerésünket bizonyítja, hogy a kutatók mintegy 27%-a tagja valamilyen nemzetközi tudományos bizottságnak, és 17%-a nemzetközi folyóirat szerkesztői bizottságnak is.

Az elmúlt évben 139-cel növekedett a minősített kutatók száma (természettudomány: 32 MTA doktora, 107 PhD; társadalomtudomány: 8 MTA doktora, 19 PhD). A kutatók közül 908-an vettek részt valamilyen formában a felsőfokú képzésben, szinte ugyanannyian, mint 2005-ben.

2006-ban változás történt mind a hazai, mind pedig a külföldi pályázatokból elnyerhető támogatások összegében. Jóllehet a nemzetközi pályázati sikeresség a természet- és a társadalomtudományok területén egyaránt jelentősen növekedett, a hazai pályázati források beszűkülése markánsan megmutatkozott. Megváltoztak a hazai források belső arányai: az OTKA-témák száma kis mértékben csökkent, ugyanakkor átlagosan 13%-kal növekedett a támogatás nagysága. Az NKTH-pályázatok esetében azonban mind a témák száma, mind a támogatás mértéke jelentős csökkenést mutat. Hasonló helyzetről számolhatunk be az NFT-pályázatok esetében is. A külföldi pályázati források között jelentősek voltak az EU FP-6-os pályázatok, és megindult az FP-7-es pályázatok szerveződése is, ezek azonban legkorábban 2007-ben, zömük pedig a jövő évben képezhet számottevő forrást intézeteink számára. Növekedést mutat az előző évekhez képest az intézetek egyéb bevételeinek alakulása.

A beszámoló kötetei – meggyőződésem szerint – hitelesen tükrözik az intézetekben az elmúlt esztendőben végzett munkát, jól mutatják kutatóink tenni akarását, az elért eredmények elméleti és gyakorlati hasznát. A 2006. év – minden problémájával együtt is – sikeresen zárult. Az elkövetkezendő időszak sem ígérkezik könnyűnek. Bízom abban, hogy a Magyar Tudományos Akadémia és ezen belül az intézményhálózat meg fogja találni helyét és sikeres lesz a tudományos kutatás reformok által kijelölt, újjáalakuló keretei között.

Budapest, 2007. május 7.

Meskó Attila

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

Minden táblázatban szereplő adatot az intézetek adtak meg. Több éves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg lett feltüntetve forintban.

A beszámoló táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

¹ Az éves gazdasági beszámolóban szereplő **átlagos statisztikai állományi létszám**.

² A kutatóhely átlagos statisztikai állományi létszámában 2006. évben szereplő, kutatói kulcsszám szerint besorolt személyek száma foglalkoztatásuk időarányos hányadában.

³ Mindazon tudományos publikációk száma, amelyeket az illető kutatóhely ²-ben definiált szerzője jelentetett meg és amelyek megfelelnek a TPA ajánlásban megadott feltételeknek, a *publikáción szerepel a kutatóhely neve*. Az ismeretterjesztő publikációkat – amennyiben a TPA tartalmazza őket – értelemszerűen az előző sorban szerepeltettük.

⁴ Az év folyamán az adott kutatóhely vagy jogelődje publikációjára kapott összes hivatkozás, függetlenül a publikáció megjelenésének évétől.

⁵ A 2006-ban megvédett disszertációk száma a TPA adatai alapján.

⁶ Csak nemzetközi rendezvények számítanak ide, külön az előadások és külön a poszterek száma (abban az esetben is, ha konferencia kiadványban nem jelentek meg).

⁷ Mindazon személyek száma, akik hazai felsőoktatási intézetben rendszeresen (nem feltétlenül heti rendszerességgel), tantervi keretek között oktatnak (alapképzés, kreditet adó doktori kurzusok). A külföldi egyetem számára végzett oktatási tevékenység, a felkérésre tartott előadások és a szakdolgozat, diplomamunka, PhD-tématerv vezetés a beszámoló III. pontjában található.

⁸ Az időszak folyamán teljes költségvetési támogatást a következők szerint határoztuk meg: a 2006. évi eredeti költségvetési támogatásból le kell vonni a felújítási támogatást és az esetleges évközi zárolást, de hozzá kell adni a fiatal kutatói támogatást és a külön feladatra kapott pótelőirányzatot, amelybe nem számíthatók be a pályázati támogatásokra (pl. OTKA, MEH, KvVM, stb.) átcsoportosított összegek és a központi beruházás. Ez így a 2006. évi tényleges működési támogatás.

⁹ 2006-ban az MTA keret terhére kapott fiatal kutatói álláshelyek száma.

¹⁰ Nemzeti Fejlesztési Terv (GVOP, stb.) keretében elnyert támogatások.

¹¹ A nagyobb szervezetek, egyezmények, szerződések, alapítványok pályázatai alapján nyert támogatást (pl. EU, ESF, EUREKA, PHARE, NATO, EMBO, NSF, MTA kétoldalú együttműködései, stb.) tartalmazzák.

¹² Minden olyan nem említett hazai vagy külföldi pályázat, amelyik támogatta a kutatóhely tudományos és oktató munkáját.

¹³ OTKA, NKTH és egyéb pályázati pénzekből az az összeg, amelyet az intézetek koordinátorként más intézményekhez, tanszékekhez, vállalkozókhoz továbbítottak a tárgyévben.

¹⁴ Az előző pontokban fel nem tüntetett, kutatóhelyen készített tanulmányok, eszközök, berendezések, fajták, eljárások, stb. száma és megnevezése.

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET

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

Telefon: 06-52-509200, Fax: 06-52-416181

e-mail: rg1@atomki.hu; honlap: <http://www.atomki.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet alapfeladatai 2006-ben nem változtak; ezek az alapító okiratban foglaltak szerint a következők: alap- és alkalmazott kutatások folytatása az atommagfizikában és atomfizikában; fizikai ismeretek és módszerek alkalmazása más tudományágakban (anyagtudomány és anyagvizsgálat, földtudományok és környezetkutatás, orvosi-biológiai kutatások stb.) és a gyakorlatban (ipar, mezőgazdaság, orvosi gyakorlat stb.); alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése; közreműködés a felsőoktatásban.

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

Részecskefizika

Jelentős elméleti eredményeket értek el a második kvantumszindinamikai sugárzási korrekciók számítására alkalmas általános módszer kifejlesztése érdekében. Sikertült olyan közelítő hatáskeresztmetszeteket levezetni, amelyek kielégítően közelítik a faszintű hatáskeresztmetszetet arra az esetre, amikor egy vagy két végállapoti részecske kinematikailag feloldhatatlan. Sikertült továbbá olyan kielégítő közelítő hatáskeresztmetszet-formulákat is felírni, amelyek egy egyhurok-hatáskeresztmetszetet közelítenek hasonló esetekre. [Ezek az eredmények egy nemzetközi együttműködésben születtek, két ATOMKI-s tag részvételével. Az intézeti ráfordítás 12,9 M Ft, amiből 0,9 M Ft pályázati forrásból származik. Rövid jelöléssel: Nagyobb csoport (2) fő, 12,9 (0,9) M Ft]

Pontosították a CPT-szimmetria ellenőrzését antiprotonos atomok lézerspektroszkópiája segítségével. [4 (1) fő, 4,5 (2,5) M Ft]

A CERN-CMS mellett sikeresen beüzemelték az elosztott intelligenciára és hálózati technológiára alapozott LED-videoszenzor képfeldolgozó rendszert. [9 (4) fő, 23,5 (13,5) M Ft]

Magfizika

A '80-as évek elején felmerült az a lehetőség, hogy az erősen neutrontöbbletes atommagokban a héjmodell-átlagtér alakjának változása következtében az egyrészecske-energiák annyira megváltoznak, hogy a stabilitási völgy közelében megismert mágikus számokhoz tartozó héjzáródások megszűnnek. Az ATOMKI kutatói Japánban a RIKEN nehézionlaboratóriumában radioaktív ionnyalábok felhasználásával tanulmányozták a ^{27}Ne és ^{28}Ne atommagokat a $^1\text{H}(^{28}\text{Ne}, ^{28}\text{Ne})$ és $^1\text{H}(^{28}\text{Ne}, ^{27}\text{Ne})$ reakciókkal folyékony hidrogén céltárgy alkalmazásával inverz kinematikában. Meghatározták a neutronok kvadrupólus átmeneti

mátrixelemét a ^{28}Ne atommagban, a ^{27}Ne izotópnál pedig két alacsonyan fekvő gerjesztett állapotot figyeltek meg egyszerre. Ezek a kísérleti eredmények olyan elmélet keretei között értelmezhetők, melyben az $N=20$ héjköz $Z=10$ -es rendszámnál nagyon kicsi, azaz közvetetten azt bizonyítják, hogy a 20-as mágiusság eltűnik a neutrongazdag atommagoknál. [37 (3) fő, 16 (1) M Ft]

Az AGOR gyorsítóberendezés (KVI, Groningen, Hollandia) 43 MeV/nukleon energiájú tríciumnyalábjával vizsgálták a $^{48}\text{Ca}(t,^3\text{He})$ és a $^{58}\text{Ni}(t,^3\text{He})$ töltötttrészecske-reakciókat. A gerjesztésienergia-spektrumokat 30 MeV-ig mérték 350 keV-es feloldással. A reakció torzított hullámos Born-leírását a végmagnak egy újfajta véletlenfázis-közelítéssel leírásával társítva mikroszkopikus értelmezést adtak az észlelt Gamow–Teller-típusú óriásrezonancia-gerjesztésekre. [20 (1) fő, 5,2 (0,2) M Ft]

A Diamant töltötttrészecske-detektorrendszerrel kiegészített Euroball-IV γ -detektorrendszer segítségével a $^{64}\text{Ni}+^{64}\text{Ni}$ magreakciót vizsgálták, hogy kimutassák a modellszámítások által megjósolt hiperdeformált forgási sávok létét. Találtak hiperdeformált alakhoz tartozó "hegygerinc"-szerkezetet a ^{118}Te , ^{124}Xe és $^{124,125}\text{Cs}$ atommagok γ -spektrumaiban. További hét szomszédos atommagban pedig szuperdeformált alakra jellemző "hegygerinc"-szerkezetet találtak. [77 (10) fő, 32 (2) M Ft]

A $^{14}\text{N}(p,\gamma)^{15}\text{O}$ reakció hatáskeresztmetszetét korábbi saját, szilárd céltárgyas mérések után extrém alacsony energián, gázcéltárggyal mérték meg, és az eredményekből a hidrogénégés CNO-ciklusának sebességére következtek. [31 (3) fő, 12 (2) M Ft]

A napneutrínók termeléséért részben felelős $^3\text{He}(\alpha,\gamma)^7\text{Be}$ reakciót minden eddiginél alacsonyabb energián tanulmányozták a LUNA földalatti laboratóriumban. Az eredmények jelentősen csökkentették a napmodellek magfizikai bemenő-paramétereinek bizonytalanságát. [30 (4) fő, 11 (1) M Ft]

Megmérték a ^7Be atommag felezési idejének változását különböző anyagokba implantált ^7Be esetében. Azt találták, hogy a mérések hibahatárán belül a felezési idő nem függ az anyagi közegtől. Erre a vizsgálatra azért volt szükség, mert az ellenkező lehetőségre utaló becslések láttak napvilágot. [23 (3) fő, 11 (1) M Ft]

Megmérték a $^{106,108}\text{Cd}(p,\gamma)^{107,109}\text{In}$ befogási hatáskeresztmetszeteket az asztrofizikai p-folyamat szempontjából lényeges energiatarományban. A mért adatok alapján kimutatták, hogy a statisztikus modell megfelelő pontossággal képes e reakciók leírására. [5 (5) fő, 11 (1) M Ft]

Bebizonyították, hogy a ^{22}O atommag esetében a ^{16}C magban korábban felfedezett neutron-lecsatolódás nem tapasztalható. [36 (5) fő, 11 (1) M Ft]

Bebizonyították, hogy a hatáskeresztmetszet meghatározásának többrészecske-reakciók felhasználásával történő indirekt módszere alkalmazható a $^7\text{Li}(p,\alpha)^4\text{He}$ reakció vizsgálatára. [15 (2) fő, 10,5 (0,5) M Ft]

Az atommagok egzotikus alakú állapotainak háromrészecskes klaszterizációját tanulmányozták. E munka módszertanilag is jelentős, hiszen arra nézve tartalmaz útmutatást, miként lehet a Pauli-féle kizárási elvet közelítőleg tekintetbe venni soknukleon-rendszerek esetében. E vizsgálatok rámutattak arra az érdekes lehetőségre, hogy ugyanazon alkotóelemeket tartalmazó klaszterizáció előfordulhat a mag alap-, szuperdeformált és hiperdeformált állapotában egyaránt. [4 (2) fő, 6,7 (0,7) M Ft]

Vizsgálták, hogy komplex energiájú kvázirészecskék alkalmazhatók-e magfizikai számolásokban. A neutronban gazdag oxigén- és nikkelizotópokra meghatározták a releváns komplex kvázirészecske-rezonanciákat. Az ^{132}Sn -közeli magok egy- és kétkvázirészecske-rezonanciáinak energia- és részecskeszám-függését tanulmányozták. Azt találták, hogy a keskeny egyrészecske-rezonanciákon alapuló kvázirezonanciák általában a részecskeszám növelése mellett is keskenyek maradnak. [3 (1) fő, 4 (0) M Ft]

Szupernehéz atommagok önkonzisztensen számolt energiáiból a héjkorrekció figyelembevételével meghatározták az energia sima részének tömegszám-függését. Függvénykapcsolatokat adtak meg a makroszkopikus modell paramétereit között. [4 (1) fő, 4 (0) M Ft]

Mérési elvet dolgoztak ki a kvantummechanikai relatív információ összefonódott két kvantumbites rendszerekből való kinyerésére. [1 (1) fő, 5 (0) M Ft]

PT-szimmetrikus potenciálok vizsgálatát kiterjesztették 2 és 3 térbeli dimenzióban értelmezett problémákra, és vizsgálták azok egzakt megoldásának feltételeit. Kimutatták, hogy egyes esetekben a feladat szeparálható egy hermitikus radiális és egy PT-szimmetrikus szögfüggő Schrödinger-egyenletre úgy, hogy az utóbbiban a potenciál PT-szimmetriája sértetlen. [1 (1) fő, 5,25 (0,25) M Ft]

Széles körű nemzetközi együttműködésben folytatták a NAÜ nukleáris adatbázisának bővítését, mely orvosi és ipari alkalmazások számára készül. Protonnyalábokkal Yb, W, Er, Co, In céltárgyakon, deuteronnyalábokkal Sn, Au, Co, V, Ti, Ta, Nb, In, W, Tm, Pr, Er, Ho céltárgyakon, alfa-részekkel Er, Yb céltárgyakon előidézett reakciók gerjesztési függvényét mérték és számították ki elméletileg. [9 (4) fő, 22 (2) M Ft]

Német–magyar és osztrák–magyar együttműködésben több különböző formájú gépalkatrész nukleáris kopásvizsgálatának módszerét dolgozták ki, és az együttműködő partner által küldött mintákon a vizsgálatokat el is végezték. A vizsgálatok eredményeinek egy része közvetlen ipari felhasználást nyer. [3 (3) fő, 12 (2) M Ft]

Atomfizika

Az előző években épített repülésiidő-elektronspektrométeren megkezdték az előre irányuló szögekbe történő korrelált elektronemisszióra vonatkozó méréseket. A vizsgált folyamatban két elektron egyidejű emissziója megy végbe úgy, hogy mindkét elektron a gerjesztő ionnal azonos irányban és közelítőleg azonos sebességgel repül ki az ütközésből. Az elektron energiaspektrumában egy jellegzetes csúcs, a „cusp” figyelhető meg. A folyamat kísérleti tanulmányozásához három részecskét (két emittált elektront, valamint a töltésállapota szerint analizált kimenő iont) kell egyidejűleg detektálni. Az intézet VdG-1 gyorsítóján végzett mérések első értékelhető eredményét 200 keV-es He^0 atomokat He atomokkal ütköztetve kapták, a két elektront a kimenő He^+ ionnal detektálva koincidenzában. Az egyik elektron (rögzített) energiájának függvényében adódó cusp-eltolódásokból az ütközésben fellépő erős elektronkorreláció jelenlétére következtettek. [2 (2) fő, 18 (0) M Ft]

A lineárisan polarizált fotonok atomokkal történő ütközésében keletkező fotoelektronok hatáskeresztmetszeteiben szisztematikus bal-jobb aszimmetriát figyeltek meg. A méréseket az ESA-22 elektronspektrométerrel a lundi Max-II szinkrotron végezték. Gondos ellenőrző méréseik azt mutatják, hogy az észlelt aszimmetria nagy valószínűséggel valódi fizikai folyamat eredménye, és nem instrumentális effektus. A mért és a standard modell alapján

számolt adatok közötti eltérés egyértelműen mutatja, hogy a megfigyelt aszimmetria nem magyarázható a gyenge kölcsönhatással. [9 (4) fő, 25,7 (0,7) M Ft]

Megállapították, hogy a biológiai szövetekben lelassuló ionok által keltett másodlagos elektronok lényeges szerepet játszanak a fontosabb molekulák (elsősorban a DNS) károsításában, széttrésében. Sugárterápia esetén a másodlagos elektronok spektruma alapvető fontosságú a célterület környékének sugárterhelése szempontjából. Azt találták, hogy az ionok lefékeződésének célterülethez közeli, de még az előtti szakaszaiban a relatíve gyors elektronok emissziója a többszörös szórás miatt jelentős mértékben megnő, ami erősen roncsoló belsőhéj-ionizációs folyamatokhoz vezethet. A többszörös elektronszórási folyamatok vizsgálatára a VdG-5 gyorsító nyalábján újabb méréseket is végeztek. [5 (4) fő, 12,3 (0,3) M Ft]

Ionspektroszkópiai módszerrel vizsgálták a különböző szimmetriájú víz-, metán- és benzolmolekulák elektronhéjaiban a többszörös lyukkeltésnek, valamint a molekula széttrésésének a lyukkeltést követő folyamatát. Néhány fragmentációs csatornában határozott anizotrópiát sikerült találniuk. [6 (2) fő, 6,3 (0,3) M Ft]

A szigetelő kapillárisokban létrejövő ionterelődés mechanizmusát vizsgálták Al_2O_3 anyagú nanokapilláris mintákon. Megállapították, hogy a néhány keV-es energiájú Ne^{6+} ionok egy jelentős része a beesés irányához képest 10 fokkal elforgatott, 140 és 250 nm átmérőjű, 15000 nm hosszú kapillárisokon is töltéscsere nélkül képes áthaladni, és a kapillárisok tengelyének irányában lép ki. Ezt a channelingre emlékeztető jelenséget a szigetelő csatornák belső felületének önszerveződő módon létrejövő feltöltődése hozza létre. Részletesen megmérték a kapillárisok ionterelő képességét, és ennek időbeni kifejlődését is. [11 (6) fő, 24,8 (0,8) M Ft]

Folytatták fullerének és fullerénmódosulatok kutatását. Tiszta és kevert fullerénplazmákat állítottak elő az elektron-ciklotronrezonanciás (ECR) ionforrás új kiépítésében. A fullerén mellett a plazma másik komponense vas vagy ferrocén volt. Azt vizsgálták, hogyan változik a plazma összetétele a komponensek arányainak és az ECR beállításainak (mágneses tér, mikrohullám teljesítmény stb.) függvényében. [7 (3) fő, 16 (1,0) M Ft]

Elméletileg vizsgálták a kétszeres ionizáció folyamatát $3,6 \text{ MeV/amu Au}^{53+}$ – He és $100 \text{ MeV/amu C}^{6+}$ – He ütközésekben. Számításaikban csak az aszimptotikus atomi állapotokban fellépő korrelációt vették figyelembe. Eredményeik alátámasztják a korábbi kísérleti adatokra és elméleti vizsgálatokra támaszkodó érvelést, amely szerint a végállapotú korrelációnak meghatározó a szerepe. Rámutattak, hogy a korreláció eddigi tanulmányozására bevezetett korrelációs függvény nem egyértelmű, és javasolták egy módosítását. [3 (1) fő, 2 (0) M Ft]

Analizálták az ionizációs folyamat leírása során alkalmazott torzított hullámú közelítéseket. Ezekben az átmenti amplitúdó rendszerint két tag összegeként írható fel. Az egyik tag a torzított, míg a másik a torzító potenciál okozta átmenetet írja le. Megmutatták, hogy a széles körben alkalmazott „folytonosan torzított hullámos közelítés eikonál típusú kezdeti állapottal” (CDW-EIS) esetén a torzító potenciál okozta járulék zérus. Ezzel remélhetőleg sikerült pontot tenni az irodalomban kialakult vitára, melyet az az állítás váltott ki, hogy a korábbi CDW-EIS számításokban joggalánul hanyagolták el a torzító potenciál járulékát. [4 (1) fő, 2 (0) M Ft]

Magyar-amerikai együttműködésben vizsgálták, hogy a Darmstadtban most létesülő FAIR gyorsítókomplexumnál tanulmányozhatók lesznek-e az ún. inverz ($e,2e$) folyamatok a relativisztikus sebességtartományban. (Az inverz ($e,2e$) folyamatokban, a „direkt” esettől eltérően, nem elektront, hanem egy iont gyorsítanak, és azt kis kötési energiájú elektronokat

tartalmazó céltárgyba (pl. hidrogéngázba) lövik, és az ütközésben keletkező két kirepülő elektron impulzusvektorait mérik koincidenzában.) [4 (2) fő, 4 (1,0) M Ft]

Az ATOMKI elektron-ciklotronrezonanciás (ECR) ionforrását 2005–2006 folyamán egy infrastrukturális GVOP-pályázat támogatásával jelentősen átalakították. Alapkiépítésben a berendezés továbbra is kisméretű, magas ionizáltsági fokú plazmákat állít elő, melyből nagytöltésű ionnyalábok vonhatók ki. Egy új elrendezésben viszont alacsonyabb mikrohullám-frekvencián nagyobb térfogatú, de kevésbé lefosztott ionokból álló plazmákat kapunk. Ilyenkor a berendezés elsősorban anyagkutatásra, fémfelületek plazmakezelésére és plazma–fal-kölcsönhatások tanulmányozására alkalmas. A világon ez az első ilyen kétfunkciós ECR-berendezés. [5 (3) fő, 20 (8,0) M Ft]

Továbbfejlesztették az ECR-plazmák szimulációjára korábban kifejlesztett programcsomagot, amellyel az ECR és hasonló szerkezetű ionforrás mágneses csapdája bármennyi elektronjának mozgása és energiaváltozása numerikusan és grafikusán is követhető. [5 (3) fő, 5,2 (0,2) M Ft]

Megállapították, hogy a Cu és Ni fémekből fotonokkal keltett rezonáns KLL Auger-elektronok kísérleti spektrumalakjának leírásához a rezonáns rugalmatlan röntgenszórás és a fémek elektronszerkezetének modellezésén kívül figyelembe kell venni az elektronoknak a vakanciakeltés okozta energiaveszteségeit is. [8 (3) fő, 1,2 (0,2) M Ft]

4, 6, és 8 keV energiájú fotonokkal polikristályos Ge-rétegekből keltett 2s fotoelektronok spektrumait mérték, és modellek segítségével az energia függvényében meghatározták a vakanciakeltés, az elektrontranszport és az elektronok felületen történő áthaladása (plazmonkeltés) okozta energia-veszteségének arányát. Kimutatták, hogy a felületi veszteségek járuléka igen kicsiny, és a modellek egybehangzó eredményeket adnak. [6 (4) fő, 5,5 (0,5) M Ft]

Új egyszerű eljárást dolgoztak ki szabadelektron-közelítéssel leírható elektronszerkezetű anyagokból röntgensugárzással keltett fotoelektronok energiaspektrumainak analizésére és a különböző eredetű energiaveszteségek meghatározására, amely a többszörös rugalmatlan elektronszórás hatását a korábbi hasonló modelleknél pontosabban veszi figyelembe. Az új módszert alkalmazták polikristályos vékony Ge-rétegből keltett 2s fotoelektron-spektrumok elemzésére. Az eredmények jól egyeznek az elektronszórás Monte-Carlo-módszerrel történő szimulációján alapuló parciális intenzitások analizise elnevezésű modellel kapott eredményekkel. [7 (6) fő, 2,5 (0,5) M Ft]

Kisenergiájú elektronok bolyongási problémáit tanulmányozták Monte-Carlo-módszer segítségével, figyelembe véve az elektronok spinjét, valamint mind a rugalmas, mind pedig a rugalmatlan folyamatokat (elektron–lyuk-párkeltés, tömbi és felületi plazmon gerjesztése, Stoner-gerjesztés). Az első számítások igen jó egyezést mutatnak a kísérleti megfigyelésekkel. [4 (1) fő, 1 (0) M Ft]

Berilliumkristályban végbemenő atomkilökődési kaszkádokat szimuláltak molekuláris dinamikai módszerrel. Első lépésként a berilliumatomok kölcsönhatását kéttest-potenciállal írták le, és előkészületeket tettek soktest-potenciálok használatára is. A vizsgálatokkal az energetikai célú fúziós reaktorok extrém sugárterhelésnek kitett belső falának viselkedését kutatják, ezek a tríciumtenyésztő köpeny neutronsokszorozó közegének fejlesztéséhez fontosak. [5 (3) fő, 8 (0) M Ft]

Komplex, több anyagvizsgálati (ezen belül fotoelektron-spektroszkópiái) módszert alkalmazó eljárást dolgoztak ki atomerőművi szerkezeti anyagok korróziós állapotának monitorizálására. Megállapították, hogy a Paksi Atomerőműben korábban alkalmazott dekontaminációs eljárás a felületi passzív réteget amorf és kristályos fázisokból álló „hibrid” szerkezetté alakította és megvastagította, ami a korrózióra való hajlamot növelte. A kidolgozott komplex eljárás elősegíti a korrózióvédelem szempontjából is optimális dekontaminációs technika kifejlesztését. Az eredményeket a Paksi Atomerőműben hasznosítják. [14 (4) fő, 5 (0) M Ft]

Különböző szemcseméretű $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ nanoporokat állítottak elő mechanikai őrléssel. Raman-spektroszkópiát alkalmazva meghatározták a szuperionikus kristályok több optikai jellemzőjét, és értelmezték azokat. [6 (1) fő, 2 (0) M Ft]

$\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ kerámiát készítettek mechanikai őrléssel előállított nanoporokból. A piezoelektromos tulajdonságokkal rendelkező kerámia egyik fontos potenciális alkalmazási területe lehet a hidrofónia (szonártechnika). Rezonanciatechnikát alkalmazva néhány elektromechanikai paraméter meghatározását végezték el. [8 (1) fő, 2 (0) M Ft]

Cu/Ni multirétegekben végbemenő diffúziós folyamatokat vizsgáltak repülési idő-neutron-reflektometriával az ILL grenoble-i reaktornál. [8 (1) fő, 3,2 (0,2) M Ft]

Al-adalékolt vékony ZnO-rétegek Al-koncentrációjának meghatározására új fotoelektron-spektroszkópiái módszert dolgoztak ki. Az Al-adalék koncentrációjától erősen függ a ZnO-réteg vezetőképessége. Ilyen rétegeket napelemek fényátersztő vezető felületi rétegeként alkalmaznak. Az eredmények hasznosításában érdekelt a Kraft Projekt Rt. [6 (4) fő, 11 (1) M Ft]

A LaSrCoO és EuSrCoO perovszkitvegyületekben végbemenő mágneses és elektromos transzportot mérték. Az anyagok belső mágneses szerkezetére és elektromos vezetési mechanizmusára irányuló vizsgálatok hozzájárulnak a „kolosszális mágneses ellenállás” (CMR) eredetének megértéséhez. [2 (3) fő, 20,5 (0,5) M Ft]

Elméleti számolásokat végeztek mágnesesen csatolt vékony szupravezető rétegek kritikus hőmérsékletének rétegszám-függésére a renormálás csoport-módszeren alapuló tömeges sine-Gordon-modell segítségével. Megállapították, hogy a mások által előszeretettel használt sine-Gordon-modell nem alkalmas a Josephson-csatolással rendelkező szupravezető rétegszerkezet leírására. Ehelyett viszont kiváló a mágneses csatolás okozta fázisszerkezet feltérképezésére. Eredményeik teljesen összhangban vannak mások által, más módszerekkel elvégzett számításokkal. [3 (1) fő, 10 (0) M Ft]

A SIMS/SNMS berendezéssel vizsgálták magnetronos porlasztással készült vékony filmekben és elektrokémiai leválasztással készült Cu/Co(Ni) multiréteges vékony filmekben az elemek mélységi eloszlását. A vizsgálat célja egyrészt az előállított filmek minősítése, másrészt az elektrokémiai leválasztás atomi folyamatainak tanulmányozása volt. Az alkalmazott módszer révén sikerült megérteni a mágneses filmek kialakításakor lejátszódó elektrokémiai folyamatokat. Perovszkit-vegyületekben oxigén és prazeodímium koncentrációját határozták meg. Bizonyos elemek kis mennyiségű adalékai (pl. O- vagy Pr) jelentősen megváltoztatják a perovszkit-vegyületek mágneses és elektromos tulajdonságait. A SIMS/SNMS berendezés érzékenysége egyedülálló lehetőséget ad ezen adalékolási folyamatok vizsgálatára. Üzembeállítottak egy nanométer mélységi feloldású profilométert, melynek segítségével a SIMS/SNMS által előidézett porlasztási kráter alakját lehet ellenőrizni a legjobb mélységi

feloldás elérése céljából. Ipari megrendelésre három nemzetközi cég részére is végeztek méréseket, elemanalízist és mélységiprofil-meghatározást. [2 (2) fő, 15,5 (0,5) M Ft]

Szilárdtestekben lokalizáltan létező háromtest-rendszerek rezonanciaállapotait modellezték 2 és 3 dimenzióban. Meghatározták a rezonanciaállapotok energiájának tömegaránytól való függését. Rámutattak, hogy a szilárdtestekben kialakuló elektron–lyuk rendszerek rezonanciái a jelenleg elérhető kísérleti eszközökkel is kimutathatók. [3 (2) fő, 8 (0) M Ft]

Véges és végtelen szabadsági fokú kvantummechanikai rendszerek fázisátmenetét és a fázisokat jellemző szimmetriák viselkedését tanulmányozták. Megmutatták, hogy a végtelen szabadsági fokú rendszereket jellemző fázisátmenet a véges rendszerekben is észlelhető. A fázist meghatározó dinamikai szimmetria pedig, dacolva a szimmetriasértő kölcsönhatás romboló voltával, kvázidinamikai szimmetria formájában érvényes marad egészen a kritikus pontig, sőt néha még azon túl is. [3 (1) fő, 3,2 (0,2) M Ft]

Folytatták a hiszterézises optimalizáció módszerének fejlesztését, és az ezzel kapcsolatos nagy volumenű számításokat. A módszer optimalizációs problémák széles körére kiterjeszhető, hatékonyságát a kezdeti próbálkozásokhoz képest nagyságrendekkel sikerült javítaniuk. Az eljárás különösen hatékonyak bizonyult olyan spinüvegmodellek alapállapotának meghatározására, amelyekben hosszú hatótávolságú kölcsönhatások vannak. [1 (1) fő, 8 (0) M Ft]

Detektálási és jelfeldolgozási technika

Si pin-fotodiódák töltöttrészecske-detektorként való alkalmazhatóságát és sugárkárosodását vizsgálva megállapították, hogy a korszerű szilícium fotodiódák a „dedikált” félvezető detektorokkal egyenértékű tulajdonságokkal (szivárgási áram, holt réteg, energiafelbontó képesség stb.) rendelkeznek, holott lényegesen olcsóbbak. Megállapították továbbá, hogy a detektált részecskék okozta sugárkárosodás hatására bekövetkező töltésbegyűjtési hatásfokcsökkenést kellően nagy feszültség alkalmazásával jelentősen mérsékelni lehet – meghosszabbítva ezzel a fotodióda-detektorok élettartamát. [7 (4) fő, 14,5 (0,5) M Ft]

Félvezető detektorok kapacitás–feszültség karakterisztikáiban sikerült kimutatniuk a detektált részecskék által a detektorban okozott, a mélységgel változó eloszlású sugárnyelődés okozta változásokat. [6 (3) fő, 10 (0) M Ft]

Nemzetközi együttműködésben (Osaka Electro-Communication University, Japán) röntgen- és gamma-sugárzás detektálására szolgáló korszerű félvezető detektorok fejlesztésében vettek részt. Elsősorban a p^+ és n^+ -elektródok körüli védőgyűrű(k)nek és az alkalmazott potenciáloknak a detektorok záróirányú visszarámára gyakorolt hatását vizsgálták. Megállapították, hogy bár alkalmas feltételekkel a visszarám igen jelentősen csökkenthető, az áramzaj mégsem csökken, mivel az több független zajkomponens eredője. A fejlesztések célja a detektorok gyakorlati alkalmazhatóságának a javítása. [8 (2) fő, 3 (0) M Ft]

Ipari gyémántokból készült nukleáris detektorokat sugároztak be $p+Be$ reakcióból származó neutronokkal. A sugárkárosodás során keletkező atomkilökődések számának változtatásával szabályozni lehet a detektorok elektromos paramétereit, és nagyintenzitású sugárzási terekben is jól használható nagy térbeli feloldású gyors detektorokat lehet létrehozni. [25 (3) fő, 7 (4) M Ft]

Kis állatok vizsgálatára alkalmas pozitronemissziós tomográfhoz „második generációs” detektormodulokat fejlesztettek ki tükrisztályokból álló szcintillációs detektormátrix és helyzetérzékeny fotoelektronsokszorozó felhasználásával. Az alkalmazott kisebb tükrisztálykeresztmetszet és a többemű nagyobb detektormátrix a PET térbeli feloldóképességét, a nagyobb kristályhossz pedig a detektálási határfokot növeli. A fejlesztés eredményét a Mediso Kft. fogja gyártásra előkészíteni.

Kifejlesztették és tesztelték a helyzetérzékeny detektort kiszolgáló analóg „frontend”-elektronikát. Megkezdték az ehhez kapcsolódó FPGA-alapú adatgyűjtő egység fejlesztését. A Mediso Kft-vel közösen kifejlesztettek egy PET-detektorok időzítési tulajdonságait szimuláló programot. [30 (5) fő, 32,7 (12,7) M Ft]

Ionnyaláb-analitika

Világviszonylatban is korszerű műszerekkel felszerelt ionnyaláb-analitikai laboratóriumot hoztak létre egy infrastrukturális GVOP pályázatban (2005-2006) kitűzött céloknak megfelelően. [20 (20) fő, 66,8 (26,8) M Ft]

A légköri aeroszolok kutatása területén a régió légköri aeroszol terhelését jelző adatbázisukat értékelve szezonális változásokat, tendenciákat állapítottak meg az aeroszol 10 µm-es és 2,5 µm-es mérettel jellemzett részecskéinek tömegeire, elemiszen-tartalmára és egyéb fontosabb elemi összetevőinek koncentrációjára vonatkozóan. Elvégezték a sztochasztikus-tűdőmodell-program tervezett fejlesztését. [6 (6) fő, 47,6 (3,6) M Ft]

A magyar-szlovén TÉT pályázathoz kapcsolódva, a NANODERM projektum keretében folytatott kutatások továbbvitelként különböző növekedési fázisban (anagén és katagén) lévő szőrtüszők elemeloszlását határozták meg. Plasztikai műtéten átesett felnőttek bőrének és szervkultúrából származó emberi szőrtüszőknek az analízise betekintést nyújt a szőrtüsző funkciójának, fejlődésének, valamint ciklikus aktivitásának részleteibe. [6 (2) fő, 4,1 (0,1) M Ft]

A DE Neurológiai Klinikával együttműködve összefüggést találtak a nyaki verőerekben levő kalciumeloszlás és az intimamedia vastagsága között. [7 (4) fő, 4 (0) M Ft]

Sikerrel alkalmaztak [(hfac)Cu]poly(siloxane) vegyületeket prekuzorként tintasugaras nyomtatási technológiára alapozott eljárásban mintázatok létrehozására. Ennek a direkt írásos módszernek a mikroelektronikában, pl. nyomtatott áramkörök előállításában/javításában lehet jelentősége. Kimutatták, hogy a mintázatok Cu-dúsak, így jó vezetőképességgel rendelkeznek, ugyanakkor a mintázatok körül háló helyezkedik el, ami rövidzárlatot okozhat. Meghatározták a mintázatok morfológiáját és vastagságeloszlását, ami alapján modellt alkottak a leválasztás mechanizmusára. Eredményeik alapján megmutatták, hogy a leválasztott mintázat minősége a prekuzor mellett a hordozó kémiai minőségétől is függ. Az alkalmazott komplexre a direkt írás módszerét teljeskörűen leírták és eredményeiket tudományos közleményben közölték. [5 (1) fő, 4 (0) M Ft]

Meghatározták könnyű elemek deutronindukált gamma-sugárzásának (DIGE) differenciális hatáskeresztmetszeteit az analitikai szempontból fontos energiatartományban, lehetővé téve ezen elemek sztenderdek nélküli mennyiségi analízisét. Ezek az irodalomban eddig el nem érhető adatok a nemzetközi adatbázis részeivé váltak. [5 (5) fő, 11 (1) M Ft]

Meghatározták a protonok által a polimer céltárgyban a behatolás mentén okozott törésmutató-változást. Ez nagyon fontos ismeret „eltemetett” (tehát a közeg belsejében lévő) optikai hullámvezetők tervezéséhez; az irodalomban eddig ilyen megközelítést mások nem alkalmaztak. [6 (2) fő, 6,4 (0,4) M Ft]

Protonnyalábos mikromegmunkálással szilícium visszacsapó szelepeket készítettek a besugárzás beesési szögének és az ionenergiáknak a változtatásával. E lehetőségek révén más litográfiai eljárások közül egyedül ez a módszer alkalmas ilyen típusú szerkezetek előállításához. [5 (2) fő, 6,4 (0,4) M Ft]

Az ADEPR új típusú negatív rezisztanyag továbbfejlesztésében vettek részt, továbbá új eljárást dolgoztak ki hosszú eltemetett csatornák kialakítására ebben és az SU-8 negatív rezisztanyagban. [5 (2) fő, 6,4 (0,4) M Ft]

Környezetanalitika és kormeghatározás

1994-96-ban az ATOMKI 4 db kombinált $^3\text{H}/^{14}\text{C}$ mintavevőt telepített a Paksi Atomerőmű 2 km-es körzetében létesített környezetellenőrző állomásokra és egyet a dunaföldvári háttérmérő állomásra. A havonta vett minták mérési adatai alapján 2006-ban megállapították:

- Az erőmű 2 km-es körzetében a légkör ^{14}C aktivitása az erőműből kibocsátott anyag miatt átlagosan 1-2 mBq m^{-3} értékkel magasabb, mint a természetes érték (Dunaföldvár, ~45 mBq m^{-3}). Az erőművi járuléka a távolság harmadik hatványával csökken, 3 km távolságban gyakorlatilag nem mutatható ki.

- Az atmoszféra fajlagos $^{14}\text{CO}_2$ aktivitása általában még az erőmű közvetlen környezetében sem érte el a „tisztá levegőben” (magaslati levegőben) mérhető értéket (kozmosz sugárzás hatásának köszönhető természetes háttér). Ennek oka a fosszilis tüzelőanyagokból a légkör alsó részébe kerülő inaktív szén-dioxid (Suess-effektus) növekvő mennyisége. A mérési sorozat érdekességét az adja, hogy a légköri szén-dioxid-tartalom eredetéről is információt nyújt, ebben az értelemben az adatsorok Kelet-Közép-Európában egyedülállóak.

- A levegő HT gáztól származó aktivitása a kimutathatóság határán van. A vízpára fajlagos T-aktivitása a csapadékokra jellemző szezonális változást mutatja, átlagos trícium-koncentrációja másfél-kétszerese a Debrecenben hullott csapadék trícium-koncentrációjának. [5 (5) fő, 14 (4) M Ft]

Az ATOMKI-ban a radiokarbonos kormeghatározási módszerhez korszerű gyorsító tömegspektrométeres (AMS) méréstechnika is kiépülőben van. 2005-ben az intézet munkatársai megépítettek az AMS ^{14}C kormeghatározáshoz egy gázkezelőt és grafit-előállító rendszert. A kifejlesztett mintakezelési módszereket (hatásfok, tisztaság, memória-effektus) 2006-ban izotópanalitikai módszerekkel ellenőrizték a Leccei Egyetemmel együttműködve. A vizsgálatok azt mutatják, hogy a kidolgozott módszerekkel rendkívül tiszta, jó minőségű grafit céltárgyak állíthatók elő. [7 (5) fő, 20 (10) M Ft]

A romániai Porcika barlangból származó 2 m mélységű jég fúrómagban a tríciumtartalom alapján meghatározták az 1963-as atombombacsúcs helyét, mely lehetővé tette a barlangi jegesedés léptékének mérését. [3 (1) fő, 1 (0) M Ft]

Többoldalú folyamatos nemzetközi együttműködés keretében végzett kutatások eredményeként összefoglaló munka készült a Kárpát-Pannon régió vulkanizmusának kronológiájáról.

Ebben a munkában mintegy húszmillió év alatt lezajlott vulkáni tevékenység tér-időbeli rekonstruálása található. [13 (2) fő, 6,3 (0,3) M Ft]

A Tokaji-hegység két legfontosabb nyersanyag-előfordulásának (Pálháza: perlit, Füzérradvány: illit) kutatása révén ismertté váltak a telepek kialakulásának körülményei, valamint a vulkáni tevékenységgel való kapcsolatuk. Ez a munka az ELTE Ásványtani Tanszékével való együttműködésben folyt. [2 (1) fő, 4,3 (0,3) M Ft]

Elvégezték a Pohorje plutonjának (Szlovénia) részletes kronológiai vizsgálatát. Bizonyították, hogy a gránittest körülbelül 16-18 millió évvel ezelőtt került a felszínre, és a magmatizmus lezajlása a Pannon-medence kialakulásával kapcsolatos. Ezt a munkát a Szlovén Geológiai Intézettel közösen végezték. [2 (1) fő, 1,1 (0,1) M Ft]

A Papuk kisfokú metamorfózisát alsó- és felsőkréta-korinak találták, a Keleti Bükkét pedig felsőkréta-korinak. [2 (1) fő, 2,2 (0,2) M Ft]

Gazdasági hasznosulásban érdekelt vállalkozások megbízásából végzett vizsgálataik azt igazolták, hogy az utóvulkanikus működésből származó mofettagázok radontartalmának döntő része a felszínközeli talajrétegekből származik. [4 (1) fő, 2 (0) M Ft]

Radioaktív anyagok terjedését modellezték annak érdekében, hogy hozzájáruljanak azoknak a heterogén fedési eljárásoknak az optimalizálásához, amelyeket hulladéklerakókban az ipari tevékenység következtében bedúsult természetesen előforduló radioaktív anyagok lefedésére alkalmaznak. Hasznosulásban érdekelték: az ÁNTSZ Sugárvédelmi Decentrumai. [3 (1) fő, 5 (0) M Ft]

Radiokémia

Az előző évben kidolgozott on-line módszerhez megépítették a nagy fajlagos aktivitású [¹¹C]CH₃I prekuzort előállító berendezést. A diagnosztikai kutatások céljára készült eszköz lényege egy kapilláris reaktor, amelyben nagy fajlagos aktivitású CH₃I nyerhető.

Három, különböző Si/Al arányú (25, 75 és 300) H-, valamint Fe-béta zeolit katalizátoron vizsgálták a metanol konverzióját jelzett metanollal. [3 (3) fő, 14,8 (1,8) M Ft]

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kutatási kapcsolatok

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

- a részecskefizika és a magfizika területén: az MTA RMKI, a Debreceni Egyetem (DE) Kísérleti Fizikai Tanszéke és Elméleti Fizikai Tanszéke, az MTA AEKI, a BME Nukleáris Technikai Intézete;
- az atomfizika és alkalmazásai területén: a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke és Szilárdtestfizikai Tanszéke, a BME Kísérleti Fizikai Tanszéke, a Miskolci Egyetem Fizikai Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, az MTA MFA, a TEVA Magyarország Zrt;

- a kondenzált rendszerek fizikájának területén: az MTA MFA, az MTA SZFKI, az MTA RMKI, az MTA SZTE Lézerfizikai Kutatócsoportja, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, a DE Szilárdtestfizikai Tanszéke, az ELTE Magkémiai Intézete;
- a detektálási és jelfeldolgozási technika területén: a DE Nukleáris Medicina Központja, a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke;
- ionnyaláb-analitika területén: a DE több tanszéke és klinikája, az MTA SZFKI, az MTA AEKI, a Veszprémi Egyetem Levegőkémiai Kutatócsoportja, a Szegedi TE, az Országos Környezet-egészségügyi Intézet, az Országos Meteorológiai Szolgálat;
- környezetanalitika és kormeghatározás területén: a DE, az ELTE és a Miskolci Egyetem több tanszéke, az MTA GKI, a MÁFI, az ELGI, az OKK-OSSKI, a VITUKI, a Paksi Atomerőmű Zrt., a püspökszilágyi RHKT Kht., a Mecsekérc Zrt.;
- a régészeti kutatások területén: a Magyar Nemzeti Múzeum és a hazai múzeumi hálózat több intézménye;
- radiokémia területén: a DE Nukleáris Medicina Központja

Részvétel a felsőoktatásban

Az intézet 2006-ban megtartotta a felsőoktatásban korábban is betöltött szerepét, a Debreceni Egyetemmel fenntartott hagyományos kapcsolatait. Az ATOMKI 9 kutatója a beszámolási időszakban meghirdetett 22 kurzus keretében 416 tantervi óra megtartásával járult hozzá a Debreceni Egyetemen (DE) folyó oktatáshoz. 2 harminc órás kurzust a Szegedi Tudományegyetemen tartottak meg. A megtartott gyakorlati órák száma 2006-ban 254 volt. A pregraduális képzésben fizikus, fizika tanári, informatikus, környezettan, környezettudományi valamint a környezetgazdálkodási agrármérnök szakon oktattak (előadások, speciális laboratóriumi gyakorlatok, TDK- és diplomamunkák). A beszámolási időszak folyamán 10 PhD és 7 diplomamunkás hallgató, továbbá 2 TDK-s hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 996 óra volt.

A DE TTK és az ATOMKI közös Környezetfizikai Tanszéke (2007-től: a DE TTK kihelyezett Környezetfizikai Tanszéke) helyileg az ATOMKI területén működik. A tanszék a csökkenő létszámú fizika szakos hallgatók mellett jelentős számú környezettan tanári, valamint környezettudomány szakos hallgató képzésében vesz részt.

Nemzetközi kapcsolatok

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

- a magfizika és alkalmazásai körében 16 ország 33 egyetemével és kutatóintézetével;
- az atomfizika területén 17 ország 30 kutatóhelyével;
- a kondenzált rendszerek fizikájának területén 9 ország 12 kutatóhelyével;
- a detektálási és jelfeldolgozási technika területén Svédország 3 kutatóhelyével;
- ionnyaláb-analitika területén 3 ország 4 kutatóhelyével;
- környezetanalitika és kormeghatározás területén 10 ország 13 kutatóhelyével;

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az ATOMKI kutatói 2006-ban 23, alvállalkozóként további 4 OTKA pályázati téma kidolgozásában vettek részt. Az elnyert GVOP-pályázatok száma 3 volt. Konzorciumi tagként vagy alvállalkozóként három NKFP pályázat céljainak megvalósításában vettek részt.

Az intézet 2006-ban nemzetközi, részben pályázati rendszerben szervezett kutatási programjai között 2 COST-program, 4 keretprogrambeli projektum, 3 NAŰ-projektum és 2 CERN-projektum volt. Ehhez járult még az intézet részvétele több sokoldalú nemzetközi együttműködésben, így többek között az EXOGAM programban és a LUNA-II kollaborációban.

Államközi (TÉT) egyezményeken alapuló, pályázati rendszerben támogatott együttműködési kapcsolatok voltak 19 témában argentin, cseh, dél-afrikai, görög, horvát, kínai, osztrák, román és szlovén kutatóhelyekkel.

A MTA által kötött egyezményeken alapuló kétoldalú együttműködési kapcsolatok 18 témában belga, cseh, egyesült államokbeli, finn, francia, horvátországi, japán, lengyel, mexikói, német, román, valamint szerbiai kutatóintézetekkel és egyetemi kutatóhelyekkel folytatott együttműködésekre terjedtek ki. Mind a TÉT egyezmények, mind az MTA által kötött nemzetközi megállapodások – az általuk biztosított többletforrások szintjétől függetlenül – jelentős mértékben járultak hozzá az intézet nemzetközi kapcsolatainak erősítéséhez. Egyes esetekben az együttműködésnek főhatósági egyezményre alapozott volta elengedhetetlennek bizonyult.

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

1. Algora A, Cseh J, Darai J, Hess PO: Ternary clusterization and quadrupole deformation, Phys. Lett. B639, 451-455 (2006)
2. Al-Khatib A, Timár J, Algora A, Dombrádi Zs, Gál J, Kalinka G et al. (75), Molnár J, Nyakó BM, Sohler D, Zolnai L: Competition between collective and noncollective excitation modes at high spin in ^{124}Ba , Phys. Rev. C74, 4305(18) (2006)
3. Bemmerer D, Confortola F, Costantini H, Formicola A, Gyürky Gy, Bonetti R et al. (30), Elekes Z, Fülöp Zs, Somorjai E: Activation measurement of the $^3\text{He}(\alpha,\gamma)^7\text{Be}$ cross section at low energy, Phys. Rev. Lett. 97, 122502-1 – 122502-5 (2006)
4. Biri S, Fekete É, Kitagawa A, Muramatsu M, Jánossy A, Pálinkás J: Fullerenes in ECR Ion Sources, Review of Scientific Instruments 77, 03A314 (2006)
5. Ditrói F, Takács S, Tárkányi F, Reichel M, Scherge M, Gervé A: Thin layer activation of large areas for wear study, Wear 261, 1397(2006)

6. Dombrádi Zs, Elekes Z, Saito A, Aoi N, Baba H, Demichi K, Fülöp Zs et al. (37): Vanishing N=20 shell gap: Study of excited states in $^{27,28}\text{Ne}$, Phys. Rev. Lett. 96, 182501-1 – 182501-4 (2006)
7. Elekes Z, Dombrádi Zs, Aoi N, Bishop S, Fülöp Zs, Gibelin J et al. (36), Kalinka G, Sohler D: Search for neutron decoupling in ^{22}O via the (d,d' γ) reaction, Phys. Rev. C74, 017306-1 – 017306-3 (2006)
8. Elekes Z, Dombrádi Zs, Saito A, Aoi N, Baba H, Demichi K et al. (37), Fülöp Zs: Proton inelastic scattering studies at the borders of the "island of inversion": The $^{30,31}\text{Na}$ and $^{33,34}\text{Mg}$ case, Phys. Rev. C73, 044314-1 – 044314-5 (2006)
9. Gaodefroy L, Sorlin O, Beaumel D, Blumenfeld Y, Dombrádi Zs, Fortier S et al. (32), Sohler D: Reduction of the spin-orbit splittings at the N = 28 shell closure, Phys. Rev. Lett. 97, 9:2501 (2006)
10. Gómez Morilla I, Simon A, Simon R, Williams CT, Kiss AZ, Grime GW: An evaluation of the accuracy and precision of X-Ray microanalysis techniques using BCR-126A glass reference material, Nucl. Instr. Meth. B249 897-902 (2006)
11. Guillot J, Galés S, Beaumel D, Fortier S, Rich E, Van Giai N et al.(21), Hunyadi M: The (t, ^3He) reaction at 43 MeV/nucleon on ^{48}Ca and ^{58}Ni : Results and microscopic interpretation, Phys. Rev. C73, 1:4616 (2006)
12. Gulyás L, Igarashi A, Kirchner T: Double ionization of helium by fast ion impact I: Reexamination of the correlation function, Phys. Rev. A74, 032713 (2006)
13. Koltay E, Borbély-Kiss I, Kertész Zs, Kiss AZ, Szabó Gy: Assignment of Saharan dust sources to episodes in Hungarian atmosphere by PIXE and TOMS observations, J. of Radioanalytical and Nucl. Chem. 267, No.2, 449–459 (2006)
14. Kövér L, Berényi Z, Cserny I, Lugosi L, Drube W, Mukoyama T et al. (7): Initial- and final-state excitations in $\text{KL}_{23}\text{L}_{23}$ Auger spectra of Cu and Ni metals, induced near threshold, Phys. Rev. B73, 195101 (2006)
15. Mátéfi-Tempfli S, Mátéfi-Tempfli M, Piraux L, Juhász Z, Biri S, Fekete É et al. (12), Iván I, Gáll LF, Sulik B, Viktor Gy, Pálinkás J: Guided transmission of slow Ne(6+) ions through the nanochannels of highly ordered anodic alumina, Nanotechnology 17, 3915 (2006)
16. Nándori I, Vad K: Length-scale dependence of vortex dynamics in HTSC superconductors, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials 8, 1161 (2006)
17. Pál KF: Hysteretic optimization for the Sherrington-Kirkpatrick spin glass, Physica A 367, 261 (2006)
18. Pécskay Z, Lexa J, Szakács A, Seghedi I, Balogh K, Konecny V et al. (13): Geochronology of Neogene magmatism in the Carpathian arc and intra-Carpathian area, Geologica Carpathica 57, 6, 511-530 (2006)

19. Rickerby J, Simon A, Jeynes C, Morgan JT, Steinke JHG: 1,1,1,5,5,5-Hexafluoroacetylacetonate copper(I) poly(vinylsiloxane)s as precursors for copper direct-write, Chemistry of Materials 18, 2489-2498 (2006)
20. Simon A, Csákó T, Jeynes C, Szörényi T: High lateral resolution 2D mapping of the B/C ratio in a boron carbide film formed by femtosecond pulsed laser deposition, Nucl. Instr. Meth. B249, 454-457 (2006)
21. Schnitchen C, Charman D, Magyari E, Braun M, Grigorszky I, Tóthmérész B, Molnár M, Szántó Zs: Reconstructing hydrological variability from testate amoebae analysis in Carpathian peatlands, Journal of Paleolimnology 36, 1 (2006)
22. Del Duca V, Somogyi G, Trócsányi Z: Progress on NNLO subtraction, Nucl. Phys. B Proceedings Supplement 157, 37 (2006)
23. Světlík I, Tomášková L, Molnár M, Svingor ě, Futó I, Pintér T et al. (8): Monitoring of atmospheric $^{14}\text{CO}_2$ in Central European countries, Czechoslovak Journal of Physics 56 (1), 291-297 (2006)
24. Szíki GA, Simon A, Szikszai Z, Kertész Zs, Dobos E: Gamma ray production cross-sections of deuteron induced nuclear reactions for light element analysis, Nucl. Instr. Meth. B251, 343-351 (2006)
25. Timár J, Vaman C, Starosta K, Fossan DB, Koike T, Sohler D et al. (8): Role of the core in degeneracy of chiral candidate band doubling: ^{103}Rh , Phys. Rev. C73, 011301(R) (2006)
26. Vad K, Mészáros S, Nándori I, Sas B: Length-scale-dependent phase transition in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ single crystals, Philosophical Magazine 86, 2115 (2006)
27. Valastyán I, Kerek A, Molnár J, Novák D, Végh J, Emri M, Trón L: A SPECT demonstrator - revival of a gamma camera, Nucl. Instr. Meth. in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 563, 274 (2006)
28. Varga D, Tökési K, Berényi Z, Tóth J, Kövér L: Observation of the hydrogen peak in the spectra of electrons backscattered from polyethylene, Surf. Interface Anal. 38, 544 (2006)
29. Vértesi T: Relative information encoded in the degree of entanglement to discriminate bipartite states, Phys. Lett. A357, 167-170 (2006)
30. Zouros TJM, Sulik B, Gulyás L, Orbán A: Production of projectile $1s2s2p$ 4P states by transfer-loss in collisions of O^{5+} and F^{6+} ions with H_2 and He targets, Journal of Physics B39, L45-L52 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Atommagkutató Intézet

Átlaglétszám ¹ :	191	Ebből kutató ² :	95
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			14
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			321
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			292
<i>Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban:</i>	191	<i>idegen nyelvű hazai folyóiratban:</i>	13
<i>nemzetközi együttműködés keretében:</i>	216	<i>SCI által regisztrált folyóiratban:</i>	218
összesített impakt faktor:	404	összes hivatkozás száma ⁴ :	2100
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2100
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	3 jegyzet: 0
<i>idegen nyelven</i> könyv:	1	könyvfejezet:	4 jegyzet: 0
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	3
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből külföldön:</i>	0	<i>ebből külföldön:</i>	1
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	115	posztterek száma:	62
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	22	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			852,8 MFt
Beruházási támogatás:	43,5 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	16
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			27
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		43 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3,6 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			3
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		33,6 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			26
EU forrásból:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	6,1 MFt
Egyéb:	22	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	44,1 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			14
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		9,6 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			6
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		18,1 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0,6 MFt

VI/a. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹⁴

Az intézet neve: Atommagkutató Intézet

Sikeresen pályáztak egy spin-off cég alapítására GVOP pályázat keretében. Az elnyert pályázati összeg 23 MFt, a vállalkozás tevékenységi köre ipari tömörségvizsgálati problémák megoldása. Ez évben megtörtént a VákuumTömörség és MérésTechnika Kft. megalapítása, megkezdték a pályázati feladatok végrehajtását, és mellette már jelentős ipari megrendelések is vannak (Electrolux, TEVA, Vibroacoustic, GE).

A Svédországból kapott He3-He4 keverési hűtőgép mérési célokra történő átalakítása megtörtént, a mérésekhez való felkészülés folyik.

A Toyota Central R&D Labs Inc. és az Atomki együttműködési szerződést kötöttek Az innovációs folyamat modellezése különös tekintettel az új technológiák elterjedésére című téma kutatására. Az év folyamán az együttműködés kiterjedt szilárd anyagok törésének a modellezésére is.

Márciusban megrendezték az Atomki hagyományos ismeretterjesztő programját, a Fizikusnapokat, amelynek témája 2006-ban a társadalmi jelenségek fizikája volt.

Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából a Debreceni Egyetem Kísérlet Fizikai Tanszékével közösen megrendezték a Radioaktivitás: a természet része című kiállítást a debreceni Kölcsey Központban (2006. november 13-21).

FÖLDRAJZTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1112 Budapest, Budaörsi u. 43-45.

Telefon: 309-2600, Fax: 309-2690

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

2006-ban a kutatóhely tudományos tevékenységét a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának tagjaként végezte. Az intézet kiemelt tudományos feladatai közé tartoztak a hazai természeti környezet rövid és hosszú távú változásaihoz, továbbá a társadalmi térszerkezet átalakulásához kapcsolódó vizsgálatok, amelyek egyaránt kapcsolódtak nemzetközi pályázatok során a tárgyévben, ill. korábban elnyert kutatási projektekhez (EU-LIFE SOWAP, EU-6 BORASSUS, INTERREG III/B CADSES, ACRE, PSP MTA-DFG stb.) és a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (NKFP-5, OTKA, KVM, HTMH stb.). Kiemelt feladat volt az IAG Regionális Geomorfológiai Konferenciájára (2006. szept., Goiana, Brazília) való felkészülés, és ott az intézet legújabb geomorfológiai kutatási eredményeinek bemutatása.

Az intézet természetföldrajzi kutatásainak fő feladatait a tárgyévben az alábbi kutatási programok önálló, ill. együttműködésben való művelése jelentette: a SOWAP keretében folyó, EU-LIFE által is támogatott „Talaj- és felszíni vízvédelem minimum talajművelés alkalmazásával Észak- és Közép-Európában” c. projekt; az EU-6. keretprogramja keretében támogatott „A pálmalevélből készült geotextíliák alkalmazása talajvédelmi céllal” c. BORASSUS projekt; „A lineáris erózió domborzatformáló és környezetalakító szerepe Magyarországon” c. MTA FKI-FVM-ELTE közös projekt; továbbá az MTA által koordinált VAHAVA projekt keretében vizsgálták a várható klímaváltozás tájföldrajzi és felszínfejlődési következményeit, valamint a talajerózióra gyakorolt hatásait

A Zágrábi Egyetemen való együttműködés keretében folytatták a Kárpát-Adria régió negyedidőszaki képződményeinek geokronológiai és litosztratigráfiai vizsgálatait hazai és Isztriai-félszigeti mintaterületeken. 2006-ban is intenzív kutatások folytak a nukleáris energiatermelés során keletkező veszélyes hulladékok lerakására és biztonságos elhelyezésére alkalmas területek komplex földtudományi vizsgálata során. Ennek keretében széleskörű lejtőállékonysági, szedimentológiai, talajeróziós vizsgálatokra került sor a Bodai Aleurit, továbbá Püspökszilágy és Bataapáti települések környezetében.

A társadalomföldrajzi kutatások keretében 2006-ban is a kiemelt feladatok között szerepelt a már futó 11 OTKA téma művelése (Magyarország etnikai földrajza és recens etnikai folyamatok vizsgálata a szomszédos országokban; A korszerű magyar ipar térszerkezeti összefüggései; A városrehabilitáció és a bérlakás-programok hatása a lakásmobilitásra; A hazai lakáspiac átalakulásának földrajzi jellemzői; Magyarország modern turizmusföldrajza; A mobilkommunikációs szolgáltatások fejlődésének földrajzi sajátosságai Magyarországon, Magyarország kistájkatasztere).

2006-ban folytatódott az EU-5 keretprogramhoz kapcsolódó, a városi zöldterületek rehabilitációját szolgáló URGE projekt (INTERREG III/B), továbbá az EU-6 keretében „A kreatív tudásszint növelésének szerepe az európai nagyvárosi régiók versenyképességének javításában” c. ACRE projekt (Amszterdami Egyetemmel közös kutatás). Az NKFP-5 OM projekt keretében lezárultak a Kárpát-medencei magyar települések és régiók térszerkezeti fejlődésének vizsgálatai, akárcsak az OFA és a HTMH felkérésére végzett, a kelet-közép-európai migrációs folyamatok és a fekete munka terjedése között tapasztalható térszerkezeti sajátosságok feltárása.

Időarányos feladatok elvégzésére került sor a Magyarország Kistájkezelésének átdolgozását és bővítését célzó OTKA kutatás keretében. A 2004-ben megindított, széleskörű természet- és társadalomföldrajzi szakmai együttműködésben (OMSZ, TAKI, SZTE) folyó munka során 2006-ban az Alföld kistájakat dolgozták fel. A Tisza-völgy árvíz által veszélyeztetett süllyedésterületeire vonatkozó kutatási program keretében folytatódtak a Közép-Tisza melléki és a Körös-menti területek hullámtéri feliszapolódásával kapcsolatos vizsgálatok.

Kiemelt feladat volt a tárgyévben az MTA elnökségének megbízására végzett, és nemzetközi szintű tudományos elismerést arató „South Eastern Europe in Maps” c. angol atlaszmű bővített és aktualizált második kiadásának elkészítése, továbbá az Ukrán Tudományos Akadémia Földrajzi Intézetével (Kijev) kooperációban készülő „Ukraine in Maps” c. angol nyelvű tematikus atlasz munkálatainak előkészítése.

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

A SOWAP projekt keretében mintaterületeken végzett vizsgálataikkal bebizonyították, hogy a talajkímélő művelési módoknak a talajerózióra gyakorolt hatása számos vonatkozásban sokkal kedvezőbb, mint a hagyományos művelésé. Ezt bizonyítják az alacsonyabb fajlagos talajvesztései és lefolyásértékek, a talaj magasabb nitrogén-koncentrációja, a talajok felső rétegének jobb tápanyag-ellátottsága, a magasabb humusztartalom, valamint a talaj termőrétegének és felszínének egyaránt gazdagabb élővilága.

Kutatásban résztvevők száma: 16 fő, ebből intézeti: 6 fő Becsült intézeti ráfordítás: 12 M Ft, ebből pályázati forrás: 12 M Ft

Eredmény hasznosíthatósága: A talajkímélő művelési módok hatásainak mélyebb megismerése segíti a talajvédelem hatékonyságának növelését.

A BORASSUS keretében folyó kutatás során, modellterületen végzett kísérletekkel bizonyították, hogy a juta alapanyagú geotextiliák hatékonyan védik a talajt az erős csapadékesemény hatására bekövetkező lepusztulástól. Kimutatták, hogy a geotextília borítás nincs káros hatással a talajok szemcse-összetételének alakulására, és ez a borítás nagyobb lefolyást eredményez az erózióknak kitett lejtőkön anélkül, hogy komoly talajlehordás következne be. Megállapították, hogy a talajvédelem ezen újabb módszere hozzájárul a tájdegradációs folyamatok fékezéséhez, aminek káros hatásait tovább erősödhetnek a szélsőséges csapadékesemények gyakoribbá válásával a gyér növényzet csekély ellenálló képessége miatt. Az új típusú környezetkímélő hatású talajvédelmi eszköz elterjedéséhez szükség van a helyi társadalmak hagyományos talajvédelmi gyakorlatának átalakítására.

Kutatásban résztvevők száma: 14 fő, ebből intézeti: 5 fő Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 10 M Ft

Eredmény használhatósága: Környezetkímélő mezőgazdálkodási gyakorlat tudományos megalapozását szolgálja, a talajok hosszú távú megóvásával biztosítva a tápanyag megőrzését.

Minta-vízgyűjtő területen végzett vizsgálataikkal kimutatták a felszínen és a felszín alatt egyaránt támadó lineáris erózió káros, a talajképző kőzetekre is kiterjedő hatásait, a vizsgált területekre vonatkozóan a löszmélyutak pusztulását, majd az így kapott eredményeket GIS adatbázisban tárolták, és a területről alkotott, a folyamatok hosszú távú extrapolációját lehetővé tevő digitális domborzatmodellen ábrázolták.

Kutatásban résztvevők száma: 6 fő, ebből intézeti: 4 fő Becsült intézeti ráfordítás: 5 M Ft, ebből pályázati forrás: 4 M Ft

Eredmény használhatósága: Az eróziós folyamatok sajátosságainak mélyebb megismerése segíti a talajvédelem hatékonyságának növelését.

NKFP pályázathoz kapcsolódó társadalomföldrajzi kutatások keretében a Kárpát-medence régióinak és településcsoportjainak vizsgálata során kimutatták azokat az okokat, amelyek a makrorégióban a 20. század végétől a felerősödő térbeli mobilitásban, valamint a nemzeti, különösen a magyar kisebbségek fokozatos beolvadásában öltöttek testet. Kutatásokkal bizonyították a nemzetközivé váló munkaerőpiac pozitív gazdasági hatásait (jövedelem-növekedés, javuló életszínvonal), ill. negatív regionális és társadalmi következményeit (közösségek szétesése, családi kapcsolatok lazulása, a roma népesség fokozatos térnyerése). Mindez jelentősen eltér a Nyugat-Európában tapasztalható regionális trendektől és, sajátos fejlődési pályára tereli a régió országait.

Kutatásban résztvevők száma: 4 fő, ebből intézeti: 3 fő Becsült intézeti ráfordítás: 1,6 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,6 M Ft

Eredmény használhatósága: Elősegíti a migráció és az etnikai folyamatok változó természetének megértését a kelet-közép-európai társadalmi és gazdasági átalakulási folyamatokban. A kutatási eredmény a felsőoktatásban (népességföldrajzi tananyag) is jól használható.

A magyar lakáspiac térszerkezetének átalakulását vizsgálva megállapították, hogy az ezredforduló után a hazai lakáspiac dinamikájának mértéke demográfiai, gazdasági, idegenforgalmi és migrációs eredetű, amely hatások regionálisan igen eltérő mértékűek. Vizsgálataik eredményeként különböző lakástípus-térségeket különítettek el, és kimutatták az ún. „lakásminőség-lépcső” kialakulását az elértéktelenedő lakásállományúvá váló, leszakadó ingatlanpiacú régiók, ill. a dinamikus lakáspiacú térségek között.

Kutatásban résztvevők száma: 2 fő, ebből intézeti: 2 fő Becsült intézeti ráfordítás: 1 M Ft, ebből pályázati forrás: 1 M Ft

Eredmény használhatósága: Hozzájárul a hazai lakásállomány minőségében fennálló, a társadalmi egyenlőtlenségeket is tükröző területi különbségek érzékletetéséhez, amely elősegítheti egy átgondoltabb hazai lakás- és ingatlanpolitika kialakítását.

A „Magyarország turizmusföldrajza” program keretében 2006-ban kidolgozták a falusi turizmus fejlesztésének földrajzi feltételrendszerét. A kapott eredményeknek hosszú távon komoly vidékfejlesztő hatásuk lehet. Külön kiemelték még az elmaradott, országhatár menti régiók e téren meglévő, bizonyíthatóan nagyrészt kihasználatlan tartalékait, mind az idegenforgalmi vonzótevékenyítőket, mind az aktív turizmus különféle formáit illetően a magyar-

szlovák és a magyar-ukrán határmenti régiókban. Ellenpéldaként állították szembe a térségek turizmusfejlesztési problémáit az osztrák-magyar határmente prosperitást mutató példáival.

Kutatásban résztvevők száma: 2 fő, ebből intézeti: 1 fő Becsült intézeti ráfordítás: 1,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,5 M Ft

Eredmény hasznosíthatósága: A hátrányos turisztikai helyzetű kistérségek idegenforgalmi vonzerejének növelésében, a turizmusföldrajz felsőfokú oktatásában, továbbá az idegenforgalmi szakemberképzés színvonalának emelésében.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatóintézet 2006-ban is széles körű együttműködést folytatott az MTA földtudományi intézeteivel, emellett az MTA egyéb rokontudományi intézetei közül a Regionális Kutatások Központjával, az Etnikai és Kisebbségkutató Intézettel, a Történettudományi Intézettel, a TAKI-val, a Botanikai Kutatóintézettel, a Szociológiai Kutatóintézettel, valamint különféle szaktárcák kutatóhelyeivel (KVM, FM, OMSZ, KTI, VITUKI stb.).

Több országos horderejű kutatásban (pl. VAHAVA) vettek részt, amelyet a MEH Nemzeti Területfejlesztési Hivatala, továbbá különböző minisztériumok, (GM, KVM, OM, KüM), ill. más országos hatáskörű szervek (ÁNTSZ, HTMH, KSH), alapítványok indítottak, ill. koordináltak. Az egyes egyetemek földrajzi, ill. földtudományi tanszékeivel közösen művelti kutatási témacsoportok, témák száma megközelítette a 20-at.

Tudományos kutatóik 2006-ban is szerteágazó felsőoktatási tevékenységet folytattak. Számos felsőoktatási intézményben végeztek oktatást félállású oktatóként, ill. óraadóként. A legszorosabb kapcsolata az intézet kutatóinak az egyetemekkel volt (ELTE, PTE, SZIE, SJE, PE, NYME, ME), de a főiskolák (BBE, KJF, BGF, MÜTF) geográfus, ill. terület- és településfejlesztő szakember képzésében is tevékenyen részt vettek. 2006-ban 11-en folytattak felsőoktatási tevékenységet munkatársaik közül, amelynek során a következő tantárgyakat oktatták:

A Kárpát-medence geomorfológiája

Földrajzi modellezés a térinformatikában

Tájföldrajz

Globális környezeti változások

A terület- és településfejlesztés alapjai

Természet- és környezetvédelmi menedzsment

Modellezés a természetföldrajzban

Általános gazdaságföldrajz

Magyarország gazdasági földrajza

Etnikai, vallási és politikai földrajz

Általános népesség- és településföldrajz

Politikai földrajz

A turizmusföldrajz

Közlekedési és távközlési földrajz

2006-ban is aktív oktatási tevékenység folyt az ELTE-nek az intézethez kihelyezett Alkalmazott Földrajzi Tanszéki Csoportjában, amelynek egy évtizede ad otthont az FKI. A beszámolási évben 8 kutatójuk kapcsolódott be a hazai geográfus hallgatók PhD képzésébe, ill. egyetemi diplomamunkák irányításába. 10 kutató véleményezett felsőoktatási és akadémiai pályázati munkákat, PhD dolgozatokat, diplomamunkákat. 5 munkatársuk vezetett

terepgyakorlatokat hazai és külföldi egyetemi hallgatói csoportok részére, 3 fiatal kutató (MTA álláshelyen) végzi az ELTE, ill. a PTE doktoriskoláját. 1 tudományos munkatársuk PhD fokozatot szerzett. Az intézet igazgatója a Szent István Akadémia rendes tagja. Egy tudományos tanácsadójuk a HUNGEO elnöke lett.

A beszámolási évben 13 kutatójuk összesen 66 előadást tartott, ebből 28-at nemzetközi tudományos rendezvényeken. A hazai tudományos események közül kiemelkednek a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának februári akadémiai beszámoló ülésén, a X. Osztály májusi ülésén, III. Magyar Földrajzi Konferencián, továbbá a novemberi Intézeti Tudományos Napon rendezett konferencián elhangzott előadások, illetve kiállított poszterek. Egy tudományos tanácsadójuk az MTA Földrajzi I. Tudományos Bizottságának elnökhelyettesi feladatait látja el.

Az intézet 2006-ban is nagy figyelmet fordított meglévő sokoldalú *nemzetközi kapcsolatainak* ápolására és bővítésére. Ennek keretében törekedett minél több EU-projektbe (köztük az EU-6 keretprogramba) való bekapcsolódásra és a nemzetközi pályázatokon való sikeres szereplésre, kihasználva kutatógárdája széles nemzetközi kapcsolatait. Egy főmunkatársuk a szlovákiai Selye János Egyetemen is ellát felsőoktatási feladatokat.

A 2006. év tudományos szakmai rendezvényei közül az intézet szervezte meg a III. Magyar Földrajzi Konferenciát (MTA, Budapest, szept.), a BORASSUS projekt Nemzetközi Workshop ülését (FKI, Budapest, júl.) Ugyancsak az intézetben rendezték meg 2006-ban a Rónai András születésének 100. évfordulójára szervezett tudományos konferenciát (FKI, Budapest, nov).

A külföldi tudományos rendezvények közül az intézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, korreferátumokkal, ill. konzulensként: az IAG Regionális Geomorfológia Konferenciája (Goiana, Brazília), ISA 16th World Congress (Durban, Dél-Afrika), BORASSUS Conference (Pretoria, Dél-Afrika), 14th Congress of ISCO (Marrakesh, Marokkó), SCCA Conference (Bratislava, Szlovákia), Greenkeys Workshop (Volos, Görögö.), FAFO Workshop 2006 (Oslo), EURS International Conference (Roskilde, Hollandia), ACRE Conference (Wien), DFG Conference (Wittenberg) ENSZ-HABITAT Világkongresszus (Vancouver, Kanada), International Conference on Tourism (Kréta, Görögország), ERA Conference (Constanta, Románia), valamint a SOWAP svájci (Bern) és az ACRE németországi (Drezda) ülésén.

A Kárpát-medence magyarlakta területeinek térszerkezeti problémáival foglalkozó kutatóik Bécsben, Komárnóban, Besztercebányán, Szatmárnémetiben, Kismartonban és Zágrábban konferenciákon, tanácskozásokon, workshopokon szerepeltek.

2006-ban az intézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak a Horvát, a Román, a Szlovák, az Ukrán Tudományos Akadémiával, a németországi Institut für Länderkunde-val, (Lipcse), a kijevei Sevcsenko Egyetemmel, továbbá a zágrábi, a lipcsei, a poznani, a müncheni, a berni, berlini, az osloei, és a komárnói egyetemekkel. E kapcsolatok számos vonatkozásban kötődnek az említett nemzetközi együttműködésben folyó kutatásokhoz, ill. különböző fajta kétoldalú tudományos együttműködésekhez. 2006-ban is bővültek az intézet nemzetközi kapcsolatai a wittenbergi és a hamburgi egyetemekkel.

Munkatársaik 2006-ban is vendégül láttak külföldi kutatókat, akiknek magyarországi szakmai programját szervezték elsősorban Ukrajnából, Romániából, Németországból, Ausztriából és a Kárpát-medence felsőoktatási intézményeiből (Nyitra, Révkomárom, Beregszász, Kolozsvár, Zágráb).

Hat munkatársuk vesz részt hosszabb ideje bizottsági tagként nemzetközi tudományos szervezetek munkájában, 5 fő nemzetközi földrajzi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja. A Természetföldrajzi osztály vezetője az ESSC alelnöke, egyben az IGU Magyar Nemzeti Bizottságának elnöke. Az intézet igazgatója az INQUA Magyar Tagozatának elnöke. Az intézet kutatóinak idegen nyelvű tanulmányai 8 külföldi szakfolyóiratban és számos konferencia kiadványban jelentek meg.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2006-ban két OTKA pályázatot (Negyedidőszaki üledékek korrelációja Duna menti löszökben; Városrehabilitációs programok hatása a nagyvárosi népességre Magyarországon), nyertek el. A korábban elnyert hazai pályázatok között jelentős arányban voltak jelen 2006-ban is az OTKA pályázatok (a művelt témák száma: 11), továbbá egy posztdoktori és 1 NKFP projekt. Az intézet sikerrel pályázott a Bábaapáti felszínalatti radioaktív hulladéktároló hosszú távú biztonságos üzemeltetéséhez kapcsolódó feladatokra, amelynek keretében kutatói átfogó geomorfológiai, geoökológiai, hidrogeográfiai, talajeróziós vizsgálatokat, továbbá demográfiai, gazdasági térszerkezeti, infrastruktúra-fejlesztési és földhasználati kutatásokat végeztek a lerakó környezetére vonatkozóan.

Korábbi kutatási eredményei révén kiegészítő pályázat elnyerésével folytathatta el az intézet a Püspökszilágyi RHFT földtani kutatására vonatkozó megbízást, amelynek keretében 2006-ban lejtőkítetttségi és talajeróziós vizsgálatok folytak a veszélyes hulladék-lerakóhely környezetében, más ágazati kutatócégekkel (Mecsekérc Rt, Erőterv Rt, VITUKI stb.) együttműködésben.

A hatékonyabb árvízvédelmet szolgáló, több éve folyó Tisza-projekt (elnyert pályázat) keretében folytatták a leendő tározóterek céljára kiválasztott mintaterületeken (Észak-Bereg-sík, Szolnok és Csongrád térsége) a felszín-fejlődés lokális elemeinek vizsgálatát és geoökológiai térképezésüket az eredményesebb vízgazdálkodás megvalósítása szempontjából.

2006 októberében kezdték meg az EU 6-os keretprogram alá tartozó ACRE pályázathoz kapcsolódó kutatásokat. A 4 éves projekt azt vizsgálja, hogy milyen tényezők befolyásolják az európai nagyvárosi régiókban a kreatív tudásalapú gazdaság megtelepedését, és ezt a városfejlesztési politikák hogyan képesek elősegíteni.

Folytatták az INTERREG III/B CADSES keretében folyó GreenKeys projektet, amely a nagyvárosok zöldterület növelését célozza. Ennek során kidolgozták a program részét képező kritérium-katalógust (ICC - Interdisciplinary Catalogue of Criteria), és elkészítették az ehhez kapcsolódó monitoring rendszer végleges változatát.

Folytatódtak a kutatások a 2004-ben elnyert MTA-DFG projekt („Revitalisierung von gründerzeitlichen Altbauwohnquartieren in Budapest”) c. témakörben, ahol 11 ezer épület

állapotadatait gyűjtötték össze és dolgozták fel, tematikus térképsorozaton ábrázolva az 1990-2005 között végbement változásokat, amellyel rámutattak a revitalizáció területileg differenciált módon érvényesülő szegregációs hatásaira.

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

1. Dövényi Z. szerk. Fodor Ferenc: A magyar földrajztudomány története. – MTA FKI Budapest, 868 p. (2006)
2. Kovács Z, Wiessner R (Hrsg.): Stadtentwicklung in der Transformation: Vergleichende Untersuchung zum Strukturwandel in Budapest und Leipzig. – Geogr. Forschungsinstitut UAW–Inst für geographie, Univ Leipzig, Budapest–Leipzig. 202 s. (2006)
3. Schweitzer F, Kis É: Ősföldrajzi változások vizsgálata a stillfriedi feltárás környezetében. – In: Hevesi A. szerk.: Földrajz. Tiszteletkötet Hahn György 70. születésnapjára. Miskolci Egyetem, Miskolc, pp. 133-148. (2006)
4. Kocsis K, Bottlik Zs, Tátrai P: Etnikai térfolyamatok a Kárpát-medence határainkon túli régióiban. – Elmélet–Módszer–Gyakorlat 61. MTA FKI, Budapest. 198 p. (2006)
5. Kertész Á: Az éghajlati tényezők szerepe a lineáris erózióban. – Földrajzi Közlemények 54. 3-4. pp. 115-122 (2006)
6. Dövényi Z: Some regional aspects of the international migration in Hungary. – Minorities Research, Lucidus Kiadó, Budapest. pp. 9-19. (2006)
7. Kertész Á, Tóth A, Jakab G, Kozma K, Madarász B, Szalai Z: A természetes alapanyagú geotextiliák hatása a talaj nedvességviszonyaira. – In: Kertész Á. szerk.: A III. Magyar Földrajzi Konferencia előadásai. MTA FKI Budapest, CD ROM. (2006)
8. Szalai Z: Effects on Canalization on the Sediment quality of the Danube. – IAG Human Impacts on the Landscape, Pécs, 55 p. (2006)
9. Kocsis K: Changing ethnic-religious patterns in South Eastern Europe during the 20th century. – In: Henkel, R. ed.: South Eastern European countries on their way to Europe, Inst. Für Landerkunde, Leipzig, pp. 7-22. (2006)
10. Michalkó G: A turizmussal összefüggő életminőség-index kidolgozásának alapjai. – Turizmus Bulletin 10. 2. pp. 19-26. (2006)
11. Egedy T: A városrehabilitációs stratégiák szerepe az épület- és lakásállomány megújulásában. – Tér és Társadalom 20. 1. pp. 57-71. (2006)

Vi. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Földrajztudományi Kutatóintézet

Átlagléttség ¹ :	49	Ebből kutató ² :	27
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			82
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			76
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	4	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	4	SCI által regisztrált folyóiratban:	0
összesített impakt faktor:	0	összes hivatkozás száma ⁴ :	1205
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			952
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	2	könyvfejezet:	2
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	28	posztterek száma:	7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			11
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			260 M Ft
Beruházási támogatás:	0 M Ft	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	3
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13 M Ft
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			2
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 M Ft
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 M Ft
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 M Ft
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			5
EU forrásból:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	28 M Ft
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20 M Ft
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 M Ft
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			9
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	37 M Ft
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 M Ft

GEODÉZIAI ÉS GEOFIZIKAI KUTATÓINTÉZET

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

Telefon: 99/508-340; Fax 99/508-355

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A tevékenység döntő részét jelentik a geodézia, a geofizika és a szeizmológia területéhez tartozó alapkutatások végzése, az ezekhez szorosan kapcsolódó terepi és laboratóriumi munkák folytatása, a terepi és a laboratóriumi megfigyelések adatainak tudományos feldolgozása, értelmezése és közzététele. Az intézet feladatát képezi továbbá a szakterület módszereinek (elméleti és gyakorlati), vizsgálati eszközeinek (műszerek) fejlesztése, létrehozása. Az intézet feladata az országos szeizmológiai hálózat és ügyelet működtetése, fejlesztése, tematikájának következtében szükséges szeizmológiai, földmágneses, ionoszféra és geodinamikai obszervatóriumok, obszervatóriumi hálózatok működtetése, adatok gyűjtése, regisztrálása.

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

Geodéziai Főosztály

Obszervatóriumi és terepi geodinamikai megfigyelések, a megfigyelések technikájának és metodikájának fejlesztése (A kutatásokban 3 kutató és 2 mérnök vett részt, a rendelkezésre álló pénzkeret 16 millió forint volt, melynek 30%-a pályázati forrásokból származott.)

Üzemeltették a Sopronbánfalvi Geodinamikai Obszervatóriumot, továbbfejlesztették a regisztráló berendezéseket, a kapott extenzométer és mikrobarográf adatokat rendszeresen feldolgozták és értelmezték.

Új módszert dolgoztak ki extenzométerek obszervatóriumi kalibrálására, amellyel sikerült a korábbi pontosságot a duplájára növelni. Jelenleg – nemzetközi vonatkozásban is – ez a legpontosabb módszer extenzométerek kalibrálására.

Szlovák-magyar akadémiai együttműködés keretében újrakalibrálták a vyhnei obszervatóriumban levő extenzométert, ezzel jelentősen pontosították az ott folyó méréseket, ami a Pannon-medence jelenkori tektonikai folyamatainak tanulmányozása szempontjából nagy jelentőségű.

A környezeti hatások jobb megértése céljából részletesen megvizsgálták a felszínközeli, bakonyai 3D extenzométeres állomás stabilitását és összehasonlították az uránbányában volt mély extenzométeres állomás stabilitásával.

EU 5 OASYS program keretében először mutattak ki kapcsolatot a dunaföldvári magaspart fűrólyuk dőlésmérőkkel mért mozgása és a terület geológiai felépítése, tektonikája között.

A Duna-menti magaspartok földcsuszamlás veszélyeztetettségével kapcsolatos besorolás/osztályozás egy lehetséges módszerét, illetve megközelítését dolgozták ki fuzzy és neuro-fuzzy rendszerekkel elméleti alapon, figyelembe véve a jelenség kiváltó tényezőit, mint input adatokat.

Löszök és paleotalajok szedimentológiai és geokémiai paraméterek alapján történő osztályozását dolgozták ki fuzzy halmaz elméleti alapokon, amely a területen egy új megközelítést jelent.

Osztrák-magyar Tét együttműködés keretében háromkomponensű gyorsulásmérővel üzemelő mérőműszert fejlesztettek ki a dunai magaspártok rövid ideig tartó, igen kismértékű mozgásainak megfigyelésére.

EU 5 SAMCO projekt keretében eljárást dolgoztak ki, hogy a földi árapály, mint periódikus gerjesztés, miként használható fel nagy létesítmények, objektumok szerkezeti állapotának és földrengéskockázatának becslésére.

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

A Föld pólusának koordináta- és a tengely körüli forgássebesség változásaival foglalkozó kutatásaikat részben a Szeizmológiai Főosztály kutatóival közösen végzik.

Megállapították, hogy a Föld pólusának koordináta-változásai, mint egy speciális idősor matematikailag különböző módokon modellezhető. A kiválasztott modell paraméterei a valóban megfigyelt idősorai alapján becsülhetők. A kiválasztott és az illesztett modell eltérése jellemezhető. A becslési módszereknek figyelembe kell venni azt a tény, hogy a megfigyelt értékek, amelyek alapján becsüljük a modell paramétereit, általában nem függetlenek.

Tanulmányozták a pólusmozgás analizálására szolgáló szakirodalmi matematikai modelleket. Az időben folytonos és diszkrét egydimenziós stacionárius Gauss-Markov folyamatok statisztikai vizsgálata során kiderült, hogy a pólusmozgás két koordináta-idősorának vizsgálatát egy modellen belül célszerű elvégezni.

A Föld pillanatnyi forgástengelyének egyéves és féléves periódusú mozgásának kiszűrésére az általuk korábban kidolgozott speciális trigonometrikus interpolációt használták. A maradék folyamat ún. Chandler-féle változása nem pontosan periodikus és az amplitúdója is változik, ezért sztochasztikus differenciálegyenlettel és additív trigonometrikus komponensekkel modellezhető.

A Föld pólusának mozgását időben folytonos, kétdimenziós stacionárius sztochasztikus folyamatnak modellezték, amelyet komplex alakban kezeltek. A folyamat komplex empirikus korrelációs függvényének paramétereire torzítatlan becsléseket adtak.

A nemlineáris Gauss-Markov modell egyenleteinek megoldása érdekében megteremtették a számítástechnikai hátteret a Buchberger-féle programrendszer használatához. Tesztelték az algoritmusokat a nemlineáris egyenletrendszerek megoldására.

A Gauss-Jacobi kombinatorikus kiegyenlítő-számítási elvet a legfontosabb nemlineáris geodéziai transzformációs feladatok megoldására alkalmazták. A 2D hasonlósági transzformáció egzakt megoldásáról megmutatták, hogy megegyezik a súlyozott átlagok alapján kapott megoldással.

Két geodéziai koordinátarendszerben megadott három-három pontpár 7 paraméteres 3D hasonlósági transzformációjára 36 darab nemlineáris egyenletrendszert vezettek le. A kapott eredményeket kategorizálták, és az egyes típusok megoldásának matematikai programjait is kidolgozták.

Kimutatták, hogy a GOCE műhold gradiometriai adatainak inverziójával reális esély van a Moho felületen jelenleg feltételezett sűrűség kontraszt értékének pontosítására, mivel az alsó kéreg – felső köpeny határfelület topográfiájának hatása elérheti akár a ± 1 Eötvös szélsőértéket is a tervezett pályamagasságban.

Magyarországon elsőként részletesen megvizsgálták a felszíni és ballonszondázási meteorológiai adatok alkalmazást a GSP mérések feldolgozásában. A ballonadatok magassági eloszlásának vizsgálatához bevezettek egy új, a Hopfield-féle megközelítés alapelvét

felhasználó, egyedileg illesztett modellt. A ballonadatokból levezetett száraz és nedves refraktivitási összetevők paramétereit legkisebb négyzetes kiegyenlítéssel határozták meg. A modellek tengerszintre vonatkozó refraktivitása, az effektív magasság és az alakszám megfelelően biztosítja a mért adatokhoz történő illeszkedést.

A Hopfield és a Saastamoinen modellek elméleti összehasonlításával megállapították, hogy bizonyos feltételek mellett a két modell az eltérő formalizmus ellenére is gyakorlatilag azonos eredményt szolgáltat, ha a légkör hidrosztatikai egyensúlyi állapotban van. Ekkor a Hopfield modell önkényesen választott alakszáma ($ad/w = 4$) közel van a konstansok alapján levezethető ($ad/w = 4.3-4.5$) alakszámhoz és az effektív magasság is összhangban van a felszíni adatokból és a Saastamoinen modellből levezethető effektív magassággal.

Geofizikai Főosztály

Űridőjárás-, űrklíma- és aeronómiai kutatások, amelynek társadalmi haszna a távközlés biztonsága, az indukciós kockázat mérséklése, illetve a globális klímaváltozás okainak jobb megértése (Résztvevők: 9 kutató és 4 segédedő. A pénzügyi forrás 50-60%-ban pályázati és megbízási forrásokból származott.)

Kimutatták, hogy a szoláris elektromágneses spektrum részeként, a kemény röntgensugárzás esetenként több nagyságrendet meghaladó intenzitásváltozása a felelős Schumann-rezonancia frekvenciák elhangolódásáért, ami a Föld-ionoszféra üregrezonátor magasságváltozásának a következménye.

Nagy időfelbontású háttér Schumann-rezonancia amplitúdó/intenzitás adatokkal bebizonyították, hogy a Föld-ionoszféra üregrezonátor nappali-éjszakai aszimmetriája kimutatható az aszimmetria geometriai méreténél nagyobb hullámhosszakon is, megcáfolva ezáltal évtizedes elméleti megfontolásokat.

Kimutatták, hogy a villámkisülések Schumann-rezonancia tranziensekből levezethető árammomentum spektruma függ a tranziens regisztráló állomás napfelkelte/naplemente terminátorvonalhoz viszonyított helyzetétől.

Elméleti megfontolások alapján kimutatták, hogy a semleges felső légkör, az ionoszféra és a belső magnetoszféra (plazmaszféra) közötti csatolás megalapozottan alátámasztható az ionoszféra F tartományában már régről ismert téli anomália, az erővonal-rezonancia (FLR) típusú pulzációkban ugyancsak régebben kimutatott téli anomália, valamint a semleges felső légkör sűrűségében az északi és deli félgömb között tapasztalt aszimmetria összevetésével.

Az F2 réteg magasságának ($hmF2$) hosszú időtartamú változásában tapasztalható területi változásokat a nem migráló légköri ár-ápállyal hozták összefüggésbe.

- Megállapították, hogy sporadikus E (Es) ionizáció, mint egyik ionoszférikus irregularitás a HF rádióhullámok terjedésére vékony diffrakciós rácsként hat.

A légköri potenciálgradiens elmúlt évtizedekbeli folyamatos csökkenése – korábbi európai adatok után – irkutszki adatok feldolgozásával is bizonyítást nyert.

Cluster-adatok alapján kimutatták, hogy a földi magnetoszféra előtti térségben az energizált (10-32 keV közötti energiájú) ionok egy diffúziós elmélettel leírható, a napszél paramétereitől erősen függő folyamat részesei. Elsőként vették észre a lökéshullámtól visszavert ionnyaláb irányszög szerinti szóródását.

Új, objektív mérőszámot vezettek be (az Ah indexet) a geomágneses aktivitás regisztrálására, egyesítve az IHV és a K-alapú indexek előnyeit. Immár kétségtelen, hogy az aa index nem alkalmas a mágneses aktivitás hosszú távú vizsgálatára. A geomágneses aktivitás globális

leképezése évszázados időskálán csak akkor lehetséges, ha a globális index egyenlő mértékben tartalmaz adatot egyenlítői, közép-, és szub-arktikus régiókból.

Az 1957-től folyamatosan meghatározott T aktivitási index automatikus meghatározására, olyan szoftvert fejlesztettek, ami alkalmas különböző ionoszférikus és magnetoszférikus jelenségek jellemző frekvenciaosztályainak indexálására. A neurális hálózatok hatékony mintázatfelismerő tulajdonságait felhasználva kísérletet tettek a geoelektromos változások bizonyos jellegzetességeinek (kvázi-harmonikus jelcsoportok) kiválogatására.

Bizonyos úridőjárás feltételek mellett magas korreláció mutatható ki a pulzációs aktivitás és a whistlerek gyakorisága között. A nagy időbeli és térbeli felbontású SEGMA hálózat adatainak felhasználásával vizsgálatokat kezdtek a pc3 típusú pulzációk és a whistler módusú hullámterjedés összefüggésének minden korábbinál részletesebb kimutatására.

Magnetohidrodinamikusan numerikus szimulációkkal kimutatták az eddigi empirikus függvények korlátait. Megállapították, hogy a magnetopauza alakjának pontosabb meghatározásához – amely a napszél dinamikus nyomásától és a bolygóközi mágneses tér észak-déli irányú komponensétől függ – figyelembe kell venni a magnetoszféra erővonal-erőzión miatti aszimmetriáját.

A nagyenergiájú részecskék különféle paleomagnetoszférákban történő terjedésével kapcsolatban megállapították, hogy erősen lecsökkent dipólmomentumú paleomagnetoszférákban 10 MeV energiájú szoláris protonok még közepes földrajzi szélességeken is könnyen elérhetik az atmoszférát. Numerikus magnetohidrodinamikai szimulációk segítségével kimutatták, hogy magasabb rendű multipoláris paleomagnetoszférákban kettőnél több sarki sapka is létezhet. További nyitott erővonalartományok képződhetnek, amelyek mégjobban megkönnyítik az adiabatikus részecskepopuláció behatolását a belső magnetoszférába.

Elektromágneses szerkezetkutatás és környezet-geofizika, amelynek gazdasági-társadalmi haszna a geopotenciál megismerése és jövőbeni feltárása, illetve az egészséges környezeti feltételek biztosítása (Résztevők száma: 4 kutató és 2 segéderő, a költségek (50-60%-ban pályázati és megbízási forrásból származnak.)

A CEL-7 mélyszeizmikus szelvény magnetotellurikus mérését 2006-ban Ausztriában folytatták, és elkezdték a magyar és az osztrák szakasz együttes feldolgozását.

A magnetotellurikus inverzió modellválasztási (legtöbb esetben 2D) zsákutcájának elkerülése érdekében javasolják az impedanciatenzor invariáns-leképezését is az inverziós megoldások mellett. A modell-bonyolultsági sorrend nem a természetesnek tűnő 1D-2D-3D, hanem 1D-3D, és az izotróp 2D-inverzió gyakran használhatatlan. E feltételezés a CEL07 szelvény mentén is megerősítést nyert.

Három európai és két amerikai obszervatóriumhálózatra 7 teljes év adatait feldolgozva geomágneses mélyszondázási görbéket határoztak meg

Meghatározták számos geoelektromos elrendezés eddig ismeretlen paraméter-érzékenység térképét. Újonnan kidolgozott módszerükkel elemezték a különböző elektróda-elrendezések kutatási mélységét, amely vizsgálat a korábban elfogadott NMK paraméterekben ellentmondások sorát hozta a felszínre.

Nemzetközi monográfiákban összefoglalták az Intézet elektromágneses litoszféra-kutatásának eddigi eredményeit.

A nemzeti földrengés megfigyelő hálózat fejlesztése, a megfigyelések eredményeinek feldolgozása, értelmezése és társadalmi hasznosítása (3 kutató és 2 segéderő vett részt a munkában). A műszerek árát pályázatokból biztosították. A telepítési és üzemeltetési költségek hozzávetőleg 40%-a származik költségvetési forrásból.

A 2004-ben megkezdett szélessávú (very broad band) szeizmológiai állomáshálózat 2006-ban tovább bővült és jelenleg hat állomást foglal magába. A már működő állomások (Mórág, Pizskéstető, Sopron, Budapest, Tarpa és Becsehely) a budapesti feldolgozó hálózattal valós idejű („on-line”) összeköttetésben állnak, a nemzetközi észlelőhálózat szerves részeivé lettek, az általuk rögzített szeizmogramokat számos külföldi tudományos intézmény használja. Az új – alapkutatási és a szeizmológiai szolgálat céljára szolgáló – földrengésjelző hálózat működésének anyagi és technikai feltételei még mindig nem megoldottak. Fentiekben túlmenően az 1990-es évek közepétől Magyarországon kilenc, zömmel a Paksi Atomerőmű Rt. tulajdonát képező, rövidperiódusú autonóm üzemelésű földrengésjelző állomás is üzemel. Ezek közül kettő esetében 2006-ban sikerült a valós idejű adatátvitelt megoldaniuk. A nyolc állomásból álló on-line állomáshálózat regisztrált földrengések paramétereit azonnal, automatikusan meghatározó rendszert hoztak létre. Az így kapott földrengés-paraméter értékek meghatározási pontosságának növelése érdekében egy ún. „virtuális állomáshálózatot” hoztak létre. Ez a magyar valós időben elérhető állomásokon kívül a környező és távolibb országok hasonló állomásaiból áll, melyek száma jelenleg 30 (8 magyar+22 külföldi).

2006-ban 230 helyi, illetve közeli rengés paramétereit határozták meg az $M_L=0.4-4.5$ magnitúdó tartományban. Itt szükséges megemlíteni, hogy az elmúlt év során Magyarországon két olyan erős, számottevő károkat okozó földrengés pattant ki (Beregdaróc, 2006. november 23, $M_L=4.3$; Gyömrő, 2006. december 31, $M_L=4.1$), amilyenre több mint húsz év óta nem volt példa. Elvégezték a 2006-ban keletkezett földrengések Magyarország területén megfigyelt makroszeizmikus anyagának feldolgozását (intenzitásbecslés). A 2005. évben végzett megfigyelési anyagok feldolgozási eredményeit felhasználva jelentették meg a „Hungarian Earthquake Bulletin” 11. számát. Elvégezték a hazai állomások megfigyelési anyagainak rendszeres kiértékelését, archiválását. A regisztrátumok feldolgozása után a kiértékelte adatokat az ISC (International Seismological Centre) számára havonta megküldték.

A 2005-ös esztendőben elsősorban a hazánkban kipattant, digitálisan regisztrált földrengések hipocentrumának és fészekmechanizmusának meghatározását az általuk kifejlesztett probabilsztikus hullámforma inverziót megvalósító programcsomag segítségével végezték. A vizsgált rengések alapján megerősítést nyert az a korábbi feltételezésük, hogy a megfigyelt események tektonikai eredetűek és többségük oldaleltolódásos (strike-slip) mozgással járt. A mozgások jellege kompressziós irányuk ÉK-DNY, ami jó egyezést mutat a vizsgált területre jellemző fő feszültségiránnyal.

A Magyar Földrengés Katalógus (456-1996) és a Magyarországi Földrengések Évkönyve (1996-2006) adatait felhasználva meghatározták a veszélyeztetettség numerikus meghatározása szempontjából fontos elképzelhető legnagyobb földrengés magnitúdóját (M_{max}). A maximum likelihood becslés alkalmazásával számításaik a Kárpát-medence területére $M_{max}=6.4\pm 0.3$ értéket kaptak.

Folytatódott az utoljára 2000-ben megjelent, a földrengés kockázat meghatározásához szükséges, „Magyar földrengés katalógus (456-1995)” anyagának kiegészítése, a 2006-ban keletkezett földrengések mellett folytatták korábbi (történeti) földrengések anyagának

gyűjtését és értelmezését. Ez utóbbi munka során 2006-ben a bányai szeizmikus forrászóna vizsgálatára került sor.

A műszeres mérések és azok feldolgozásának eredményei jelentősen hozzájárulnak a környezeti kockázatok földrengésekből eredő részének pontos meghatározásához és csökkentéséhez. Ugyanakkor ismeretük nélkülözhetetlen a szilárd Föld folyamatainak megismerése során, hozzájárulásuk fontos a Magyarország alatti kéreg és felső köpeny szerkezetének és folyamatainak megismeréséhez. A főosztály kutatói jelentős szerepet vállalnak a földtudományok és ezen belül a szeizmológia eredményeinek népszerűsítésében a tömegtájékoztatásban és előadások tartásával, melyek során sok száz érdeklődő számára adtak betekintést a Budapesti Földrengésjelző Observatóriumban folyó munkáról. Huszonnégy órás ügyeleti rendszerük állandóan az érdeklődők rendelkezésére állt.

Módszertani és földfizikai kutatások (Résztvevők: 5 kutató. Forrás: 50% OTKA és egyéb pályázatok.)

Mikroszeizmikus zajmérések adatainak feldolgozásával nyerhető ún. H/V görbék révén információhoz jutottak a mérési pontok alatt a felszín közeli tartomány vertikális S-hullám sebesség eloszlására vonatkozóan.

Feldolgozták a 2005-ös év során összegyűjtött, a hazai szélessávú szeizmológiai állomásokról származó teleszeizmikus adatokat azzal a céllal, hogy lineáris és stochasztikus inverzió révén megállapítsák a Kárpát-medence alatti kéregvastagságot. Nyugat- és Dél-Magyarországon mindkét típusú inverzió eredménye (28. 5 és 27 km) jól összeegyeztethető volt a korábbi szeizmikus refrakciós és reflexiós mérések által szolgáltatott kéregvastagság adatokkal, míg a Dunántúli- és Északi-középhegység alatt a korábban feltételezettnél nagyobb vastagság-értékeket határoztak meg (33.5 km és 33 km).

A mórági és a budapesti szélessávú egy-dimenziós S-hullám sebességmodelljeit összevetve megállapították: a különböző módszerek nyújtotta eredmények nem különböznek számottevően és így a modellekben szereplő értékek abszolút sebességeknek tekinthetők. Az ettől eltérő esetekben a sebesség gradiensek jó közelítéssel megegyeznek, azonban a kapott sebességértékek eltérnek. Az alacsonyfrekvenciás vevőfüggvényeken jól megfigyelhető a 670 km-es diszkontinuitási felületnek megfelelően erős sebesség-gradiens. A 410 km-es diszkontinuitás hiánya a nagy Poisson-aránnyal rendelkező szubdukálódott óceáni lemezmaradvány jelenlétét valószínűsíti.

Több hazai és külföldi intézmény kutatóival együttműködve szeizmológiai információkra támaszkodva vizsgálták az adriai és a Pannon medence tektonikai fejlődését.

Különböző földrengés zónákban kipattant közepes és nagy földrengések epicentrumainak környezetében megfigyelt deformációk vizsgálata alapján megállapították, hogy azok karakterisztikus földrengéseinek visszatérési ideje átlagosan 250 év. A GPS mérések pontosságának esetleges jövőbeli javulása lehetővé teszi majd e visszatérési idő értékének pontosítását.

Az IERS (Observatoire d'Paris) és az OTA Oceanográfiai Intézet kutatóival együttműködve modellvizsgálatok segítségével igazolták: a földmágneses excentrikus dipolikus tér összetevőinek időbeli változásai szoros statisztikus kapcsolatban állnak a naphossz változásokkal a dekadális (10-70 év) periódusok tartományában. Ez arra mutat, hogy a magban végbemenő magnetohidrodinamikus áramlások ebben a periódus tartományban szimmetrikusak az excentrikus földmágneses dipólus tengelyéhez viszonyítva.

A Föld esetében a sajátrezgések és a földárapály kutatás terén bevált matematikai apparátust alkalmazva megmutatták, hogy a Szaturnusz gravitációs hatása, az Enceladus megfigyelt pálya lapultsága esetén, képes e kisebb égitest jégből álló köpenyét mintegy 300 év alatt

megolvasztani és részben párává alakítani. Így megmagyarázható e kis Szaturnusz hold meglepő tektonikai aktivitása.

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

A hazai földrengésekhez kapcsolódó térinformatikai rendszertük földrengésadatait (mind a makroszeizmikust, mind a mikroszeizmikust) kiegészítették és pontosították: megadták a földrengések helymeghatározási pontosságát és a fészekmechanizmus adatokat.

NATO bilaterális együttműködés keretében Bulgáriában paleorengés-vizsgálatok céljából cseppköveket kutattak fel és megmérték azok sajátfrekvenciáit és méreteit. A kiválasztott cseppkövek fizikai paramétereit meghatározták, és ennek ismeretében megadták a 'kritikus' gyorsulás értékét, pontosítva ezzel Bulgária földrengés veszélyeztetettségéről alkotott képet.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai intézményi kapcsolatok:

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

Hazai oktatási tevékenység:

Nyugat-Magyarországi Egyetem: nappali környezettudományi és környezetmérnöki képzés, Kitabel Pál Környezettudományi Doktori Iskola geo-környezettudományi program, matematikai alapozó tárgyak, diplomamunka-konzulens, bírálóbizottság diplomavédésnél, doktori szigorlatoknál, doktori témavezetések, államvizsga bizottság, Eötvös Loránd Tudományegyetem és Miskolci Egyetem: előadások, doktori iskola előadások, gyakorlatok és szakdolgozatok, doktori témavezetések, BMGE: doktori iskola előadások.

Nemzetközi kapcsolatok:

Geophysical Prospecting (Deputy Editor),
Journal of Applied Geodesy (Editorial Board)
Contributions to Geophysics and Geodesy (Advisory Board)
CEI Earth Science Committee of the WG Science & Technology (Secretary General), CEI Working Group on Earthquakes (coordinator).

Részvétel az E-STAR (European Solar Terrestrial and Atmospheric Research) programban.

COST 296, WP1.4, 2.2 (Mitigation of Ionospheric Effects on Radio Systems), COST 625 (3D monitoring of active tectonic structures), COST 721, COST P18 (The Physics of Lightning Flash and its Effects).

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

Brémai Nemzetközi Egyetem, Prágai Légkörfizikai Intézet, Pekingi Földtudományi Intézet, L'Aquila-i Egyetem, Bécsi Akadémia Úrkutatási Intézet, Grazi Műszaki Egyetem, Jénai Egyetem, Neuchatel-i Egyetem, Reading University, Meteorological Department, Anglia, Massachusetts Institute of Technology, Parsons Laboratory, USA, Tel Aviv University – Izrael, Bécsi Műszaki Egyetem, Université Paris Sud, CETP (St. Maur), GeoForschungsZentrum Potsdam, Observatoire de Paris, Teheran University, Stuttgart University, Darmstadt University of Technology, Institut of Oceanography of the Russian Academy of Sciences, Usikov Institute for Radio-Physics and Electronics National Academy of Sciences of the Ukraine, Kharkov.

IAG Comm V: Earth Tides és annak SC3 munkacsoportja: Fundamental Parameters, IAG SG 2.2 'Forward Gravity Modeling Using Global Database', IAG SC4.2 Working Group 4 'Monitoring of Landslides and System Analysis'(elnök).

Külföldi oktatói tevékenység:

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

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok:

Az intézet 7 OTKA-pályázatot gondoz, illetve nyert el:

- A földi árapály és a vele kapcsolatos geodinamikai jelenségek mérési módszereinek továbbfejlesztése, a Pannon medencében regisztrált adatok feldolgozása és komplex értelmezése
- Új direkt és inverz módszerek a nehézségi erőter szintetikus modellezésében
- Nem konvencionális geoelektromos elrendezések
- Lokális földrengések hipocentrumának és fészekmechanizmusának meghatározása
- Geo-elektromágnesség és a változó Föld – tudományos iskolai projekt
- Korszerű matematikai modellek alkalmazása a geodéziában
- A földforgásvektor kölcsönhatása geodinamikai folyamatokkal

Költségvetési Támogatási Pályázat

Földi gamma-sugár felvillanások

A magnetoszféra vizsgálata

Számítóközpont fejlesztése

ND_INRG_05- PERMSZOL-297-10 Baross Gábor Program, Nyugat-dunántúli Innovációs Fejlesztések: Permanens mű-holdas szolgáltató állomás létesítése regionális műszaki és környezetgazdálkodási innovációk támogatására

Nemzetközi pályázatok:

EVG1-2001-00061 OASYS, Földcsuszamlás riasztó rendszer integrált optimalizációja, (EU5)
G1RT-CT-2001-05040, SAMCO, Szerkezetek becslése, monitorozása és ellenőrzése, (EU5)
MT projekt-megbízás az Osztrák Tud. Akadémiától, ill. a Bécsi Műszaki Egyetemtől (TUW)
EVR1-CT-2002-00507, MEREDIAN-2, Szeizmológiai hálózatok fejlesztése, (EU5)
NATO Collaborative Linkage Grant, „Seismic vulnerability of high risk structures”
Osztrák-Magyar TÉT együttműködés: Rövidperiódusú pólusmozgások értelmezése

MTA bilaterális együttműködések:

DFG-MTA: A Liouville egyenlet geodinamikai alkalmazása; CNRS-MTA: Oscillations of polar motion influenced by seismic activity; Orosz-Magyar: Extenzométeres mérések eredményeinek értelmezése, árapály súrlódás; Román-Magyar: A Kárpát-medence tektonikai mozgásvizsgálata; Szlovák-Magyar: Extenzométeres mérések; Bulgár-Magyar: Földrengés-kockázat becslési eljárások fejlesztése

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

1. Martini D, Mursula K: Correcting the geomagnetic IHV index of the Eskdalemuir observatory. *Ann. Geophys*, 24, 3411-3419 (2006)
2. Mentés Gy, Eper-Pápai I: Investigation of meteorological effects on strain measurements at two stations in Hungary. *Journal of Geodynamics*, 41, 259-267 (2006)
3. Mursula K, Martini D: Centennial increase in geomagnetic activity: Latitudinal differences and global estimates. *J. Geophys. Res.*, 111, A08209, doi: 10.1029/2005JA011549 (2006)
4. Pospisil L, Ádám A 2006: Review of the Crust-Lithosphere Research in the Carpathians. In: J. Golonka and R.I. Picha, eds.: *The Carpathians and their foreland. Geology and hydrocarbon resources. AAPG Memoir*, 84, p. 635-649. (Chapter 21)
5. Varga P, Rybicki KR, Denis C: Comments on fast tidal cycling and the origin of the life ICARUS, 277-280 (2006)
6. Varga P: Temporal variation of geodynamical properties due to tidal friction. *Journal of Geodynamics*, 41, 140-146 (2006)
7. Wéber Z: Probabilistic local waveform inversion for moment tensor and hypocentral location. *Geophys. J. Int.* 165, 607-621 (2006)
8. Williams E, Boldi R, Bór J, Sátori G, Price C, Greenberg E et al.: Lightning flashes conducive to the production and escape of gamma radiation to space. *Journal of Geophysical Research*, 111, D16209, doi: 10.1029/2005JD006447 (2006)
9. Zieger B, Vogt A, Ridley J, Glassmeier K-H: A Parametric Study of Magnetosphere-Ionosphere Coupling in the Paleomagnetosphere. *Advances in Space Research*, 38, 1707-1712 (2006)
10. Zieger B, Vogt J, Glassmeier K-H: Scaling Relations in the Paleomagnetosphere Derived From MHD Simulations. *Journal of Geophysical Research*, 111, A06203 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet

Átlagléttség ¹ :	66	Ebből kutató ² :	31
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			11
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			67
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			65
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	46	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	3
nemzetközi együttműködés keretében:	14	SCI által regisztrált folyóiratban:	13
összesített impakt faktor:	23,62	összes hivatkozás száma ⁴ :	149
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			106
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	1
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	7
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	45	poszterek száma:	12
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	15	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	8
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			271 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	3
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			7
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			34 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,4 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			8 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			8
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

GEOKÉMIAI KUTATÓINTÉZET

1112 Budapest, Budaörsi út 45.

Telefon/Fax: 319-3137

e-mail: arkai@geochem.hu, honlap: www.geochem.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Geokémiai Kutatóintézet fő feladata geokémiai alapkutatások végzése a kőzetgenetika, az ásványi nyersanyagképződés és a környezetgeokémia területén. Ennek megfelelően 2006-ban folytatták az intézetben nagy hagyományokkal és széleskörű szakmai elismertséggel rendelkező klasszikus alapkutatási témák művelését. Így vizsgálták a magmás és metamorf képződmények, illetve a velük együtt előforduló fluidumok képződési körülményeit és jellegzetességeit. Folytatták az ásványi nyersanyagok geokémiai jellemzését és genetikai modellezését. Az egyre növekvő jelentőségű környezettudományi kutatások keretében tanulmányozták a múltbéli és jelenkori környezet állapotának változásait. Kutatták a nehézfémek talajbeli viselkedését, a közelmúlt klímaváltozásait dokumentáló változatos földtani képződmények geokémiai jellegét, továbbá a hévizek szerves komponenseinek sajátosságait. Tanulmányozták az épített környezetet és a kulturális örökségünk tárgyi emlékeit ért antropogén hatásokat is. Kiemelt figyelmet fordítottak továbbá a nagy aktivitású radioaktív hulladékok elhelyezésére kiválasztott földtani képződmény egyes kifejlődéseinek komplex geokémiai vizsgálatára.

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

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

Metamorf kőzettani kutatásaik keretében – nemzetközi együttműködésben – új modellt dolgoztak ki a dioktaéderes, ún. kevert Na/K-tartalmú világos csillámok diagenetikus, kezdeti metamorf keletkezéséről, fejlődéséről. A nano-domén modell lényege az, hogy inhomogenitást tételez fel nemcsak a csillámszerkezet különböző rétegekői síkjai között, hanem egy adott rétegekői sík kationtartalmában és -eloszlásában is. Ez a rendezetlen kation-eloszlás a hőmérséklet növekedésével rendezetté válik, és elkülönülnek, méreteiket tekintve pedig növekszenek a muszkovit (K), paragonit (Na) és margarit (Ca) domének. A modell kidolgozásához hozzájárult a Magyarország és a környező Alpi-Kárpáti-Dinári térség jelentős nagyszerkezeti egységeiben előforduló metapelitek fontos ásványszerkezeti és metamorf kőzettani paramétereit egyesítő, általuk létrehozott adatbázis. A Szendrői-hegység Gadna Gn-1 jelű mélyfúrása által feltárt metapelit összlet részletes ásványtani vizsgálatával tisztázták a Na- és a K-dús csillámfázisok viszonyait. Fontos új eredmény a halloysit kimutatása a szelvény felső szakaszából.

Befejezték a Tiszai Egység dél-alföldi részén mélyült Újszentiván Uszi-2 számú mélyfúrás csillámpaláján végzett, kvantitatív fázisdiagramokon alapuló metamorf petrogenetikai vizsgálatosorozatot. Ennek során meghatározták a gránát-sztaurolit csillámpala metamorfózisának korát, nyomás-hőmérséklet viszonyait és e fizikai paraméterek időbeli

változásait. Termobarometriai módszerek és kvantitatív fázisdiagramok segítségével meghatározták egy, a horvátországi Szlavóniai-hegységből származó, kisnyomású, andalúzit-sztaurolit indexásványokkal jellemezhető metamorf sorozat képződési körülményeit is.

Részletes ásványtani mérésekkel, valamint a szerves anyag termikus érettségi paramétereinek több, különböző módszerrel történt vizsgálatával meghatározták a horvátországi Medvednica hegység takarós egységeit ért metamorf átalakulás hőmérsékleti viszonyait. Megállapították, hogy a Raman-spektroszkópos paraméterek az esetleges jó egyezés ellenére is a finomszemcsés sziliciklasztos és karbonátos eredetű, diagenetikus–kishőmérsékletű anchimetamorf átalakulást szenvedett kőzetekben az „autigén” szerves anyag mellett gyakran előforduló, törmelékes, nagyobb „érettségi” fokot mutató szervesanyag-generáció jelenlétéből adódóan, hőmérséklet becslésére csak nagy körültekintéssel alkalmazhatóak. A Medvednica-hegység metamorf fejlődéstörténetét összehasonlították a földtani értelemben véve rokon ÉK-Magyarországi egységek metamorfózisával.

A Szendrői-hegységből különböző üledékes fácieseket képviselő metamorf karbonátos kőzetformációk vizsgálatával megállapították, hogy a kőzetek egyes karbonátgenerációi (pl. lencsék, sávok és karbonáterezések) stabilizotóp-összetételük alapján nem különülnek el egyértelműen a kőzetek fő tömegét (mátrixát) alkotó anyagtól, azonban az átlagos kőzetmintákhoz képest kisebb kristallitmérettel rendelkeznek.

A jórészt hazai és nemzetközi együttműködésekben végzett metamorf ásvány-kőzettani kutatások eredményeinek hasznosulása elsősorban földtani alapkutatási jellegű. Ezek az eredmények hozzájárulnak a hazai metamorf képződmények jobb megismeréséhez, ezáltal a Pannon-medence pontosabb geodinamikai rekonstrukciójához. Eredményeiket – többek között – az Aggtelek-Rudabányai-hegység Magyar Állami Földtani Intézet által 2006-ban könyv alakban kiadott térképmagyarázójában is felhasználták. *A kutatásokban 16 kutató vett részt, ebből 6 fő volt a GKKI alkalmazásában. Az intézeti ráfordítás 6,3 M Ft volt, ebből 5 M Ft pályázati forrásból elnyert összeg.*

Magmás kőzettani kutatásaik körében az eddigi legnagyobb, saját méréseken alapuló adatbázis létrehozásával meghatározták az ún. kimberlitekben található polikristályos gyémánt, más néven a diamondit kőzetzárványok (xenolitok) kőzetalkotó ásványainak kémiai jellegeit, valamint a gyémánt kristályosodásának fizikai és kémiai körülményeit. A nyomelem és stabilizotóp adatok együttes értelmezésével arra a következtetésre jutottak, hogy a polikristályos gyémánt köpeny eredetű, szilikát olvadékok és vizet is tartalmazó karbonátos fluidumból vált ki, amely fluidum jelentős mértékű frakcionáción ment keresztül. Eredményeik pontosítására nagynyomású kísérletekkel tanulmányozták a szintetikus szén-karbonát (dolomit)-szilikát (eklogit) rendszer kristályosodását, és leírták a rendszerben nagy nyomáson keletkező szilikátfázisok kristályosodási sorrendjét.

Hazai bazaltokból származó, felsőköpeny eredetű peridotit xenolit sorozat vizsgálatával kimutatták egy fontos kőzetalkotó ásvány, a klinopiroxén kristályrács-paramétereinek változásait és ezek okait. Megállapították, hogy a vizsgált rácsparaméterek az alumíniumtartalom csökkenése mellett a nyomástól is függenek. Ez utóbbi összefüggés a xenolitok származási mélységének relatív becslését tette lehetővé. Az egyensúlyi nyomás csökkenését a szöveti deformáció előrehaladtával a köpenydiapír jelenlétével és a litoszféra vékonyodásával magyarázták.

A Kanári-szigetek létrejöttét meghatározó köpenyplume (több száz km mélységből eredő magmafeláramlás) anyagának kőzetátalakulási folyamatait tanulmányozva stabilizotóp-

geokémiai elemzések adatai révén meghatározták az egyes szigetek kiemelkedésének mértékét. Az eredmények hozzájárulnak a jelenleg vitatott képződési, bizonyos magmás folyamatokban alapvető szerepet játszó plume-ok genetikájának megértéséhez.

A nemzetközi együttműködésben zajló magmás közettani-geokémiai eredményeknek földtani alap kutatási haszna van. *A kutatásokban 9 kutató vett részt, ebből 3 fő volt a GKKI alkalmazásában. Az intézeti ráfordítás 6,9 M Ft volt, ebből 5,8 M Ft a pályázati forrásból elnyert összeg.*

Egyes hazai ásványi nyersanyagok kutatását folytatva komplex botanikai és kémiai vizsgálatokkal meghatározták a hazai barnaköszének képződési körülményeit. Pirolízis vizsgálatokkal jellemezték a szénhidrogén-potenciáljukat. Megállapították, hogy a pirolízis-termékek mennyiségében és összetételében is tükröződik az egyes kerogének makromolekuláinak eltérő eredete és sorsa a lerakódás és diagenézis során. Fontos felismerés, hogy a köszenekben található sporomorfák fizikai és kémiai állapota is befolyásolja a pirolízis eredményeket, ezen kívül a különböző érettségi szintek, illetve a lúpövi viszonyok is meghatározóak. A vizsgált szeneket palinológiai alapon csoportosították, és azokat összevetették a pirolízis vizsgálatok során felállított csoportokkal.

Kimutatták továbbá a dunántúli-középhegységi mangánérc-telepek záró képződményét alkotó kovás vasérc kifejlődés tufa eredetét. Igazolták a sztromatolit formájában megjelenő vasbaktériumok fémdúsító szerepét is.

Az ásványi nyersanyagok kutatásában elért eredmények a hazai ásványi nyersanyag-vagyon felmérésén és képződési körülményeinek megismerésén túl a környezeti problémák feltárásához és elhárításához is felhasználhatóak. *Az eredményeket 18 fős kutatócsoport érte el, ebből 6 fő volt a GKKI alkalmazásában. Az intézeti ráfordítás 3,3 M Ft volt, ebből 1 M Ft pályázati forrásból származott.*

A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak vizsgálata

Az MTA Fejezeti Keret támogatásával tovább folytatták a Mecsek-hegységi Bodai Aleurolit Formáció, mint a nagy radioaktivitású hulladékok elhelyezésére kiválasztott földtani képződmény ásványtani-geokémiai vizsgálatát. Laboratóriumi szimulációs kísérletek segítségével megállapították, hogy az intézet munkatársai által újonnan leírt analcím-félszikes kőzet-változat esetében a képződmény természetes előfordulási helyzetében tapasztalt geokémiai körülmények kis változása esetén nem kell számolni a kőzet jelentős kémiai és ásványos átalakulásával. A képződmény potenciális szennyező radionuklidokkal szemben kimutatott megkötő képessége jelentős, azaz hatékony szigetelőként képes működni. A pórusfluidumok elemzési eredményei azt bizonyították, hogy a képződmény különböző kifejlődései nagy mennyiségű vizet tudnak kis hőmérsékletű tartományban felvenni és leadni. Mivel a pórusfluidumok a környezeti vízzel közvetlen kapcsolatban vannak, az eredeti pórusfluidumok vizsgálatához speciális fúrási és mintavételi technika alkalmazása szükséges a jövőben.

Az eredmények a nagy radioaktivitású hulladékok földtani környezetben történő elhelyezésének biztonságát növelik, új alapadatokat szolgáltatva a tervezéshez. A vizsgálatoknak regionális, sőt országos jelentősége van, hiszen a radioaktív hulladékok tárolójának esetleges működési zavara a regionális életminőséget rendkívüli mértékben ronthatja, az esetleges kárelhárítással kapcsolatosan felmerülő költségek pedig nemzetgazdasági mértékűek lehetnek. *Az eredményeket 5 fős kutatócsoport érte el, ezek*

mindegyike a GKKI alkalmazottja. Az intézeti ráfordítás 7,9 M Ft volt, ebből 4,26 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.

A *nehézfémek geokémiai körforgalma* témakörben közvetlen ásványtani vizsgálatokkal is igazolták a különböző nehézfémek eltérő viselkedését az adszorpciós folyamatokban. Megállapították, hogy az egyes talajfázisok nem csak adszorpciós képességükkel, de a talaj ásványtani-geokémiai jellegeire gyakorolt hatásaikkal is befolyásolják a talaj nehézfém-megkötő képességét. Kompetitív helyzetben az egyes fázisok szerepe a különböző nehézfémek megkötésében jelentősen változhat, jelezve a talaj szelektivitásának érzékenységet a nehézfémek megkötésében. Tapasztalataik szerint az analitikai elektronmikroszkóp kiváló lehetőséget nyújt a fémek talaj szervesetlen alkotóin végbemenő megkötődési folyamatainak tanulmányozásához. Adszorpciós kísérleteiknél azt találták, hogy a keveréteges szerkezetű, illit/szmetit típusú talaj-agyagásványokon a nehézfémek beépülése jelentős szerkezeti átalakulást eredményez, ami valószínűleg egyfajta háromdimenziós rendeződés eredménye. Az eddigi vizsgálatok alapján arra következtettek, hogy a megkötött fémmennyiség és ez a szerkezeti változás a közberétegzett szmekttartalommal áll összefüggésben.

A talaj–nehézfém kapcsolat mélyreható vizsgálata megkönnyítheti a szennyezések pontos elkülönítését, lehatárolását és viselkedésének megértését. *Az eredményeket 11 fő kutatócsoport érte el, ebből 5 fő volt a GKKI alkalmazottja. Az intézeti ráfordítás 4,5 M Ft volt, ebből 3,2 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.*

A Geokémiai Kutatóintézetben 2006-ban megalakult Geokémia és Paleoklíma Kutatócsoport a *földtörténeti közelmúlt (néhány ezer – tízezer év) klímaváltozási eseményeinek vizsgálatával* foglalkozik a Kárpát-medence változatos földtani képződményeinek geokémiai elemzésével. A nagy (éves-évtizedes) időbeli felbontást lehetővé tevő cseppkővizsgálatokból kapott legújabb eredmények szerint kb. 3800 évvel ezelőtt jelentős lehűlés, majd felmelegedés játszódott le a területen, ami a csapadékmennyiség változásával is együtt járt. Megállapították, hogy míg a lehűlési szakaszban az évtizedes változások amplitúdója nem különbözik a stabil klímaszakaszban megfigyelttől, a felmelegedési szakaszban ezen ciklusok amplitúdója csaknem kétszeresére nő. A nagy mennyiségű, szisztematikus vizsgálat egyben a Kárpát-medence rövid távú klímaváltozási folyamatainak modellezéséhez szolgált alapvető jelentőségű adatokat.

Rámutattak a közel azonos korú, de eltérő izotópos összetételű hazai édesvízi mészkövek tanulmányozásának paleohidrologiai és -klimatológiai jelentőségére. Úgy találták, hogy az oldott karbonátot hordozó víz és a képződő édesvízi mészkő közötti izotóp frakcionációs folyamatok, a CO₂ kigázosodása, a víz kémiai állapotának változása a kifolyási ponttól távolodva, valamint a párolgás izotóp-összetétel módosító hatása fontos tényező az édesvízi mészkövek stabilizotópos összetételének alakulásában.

Kimutatták, hogy az azonos éghajlati és csapadék-viszonyok között lévő barlangok padozati jegének stabilizotópos összetétele nagymértékben függ a helyi morfológiától és a beszivárgási viszonyoktól. Módszert fejlesztettek ki barlangi cseppkövek képződésekor bezáródott vízzárványok hidrogénizotópos mérésére.

Meghatározták a Balaton víztestének stabilizotópos párolgási vonalát, ami – bár jól illeszkedik a regionális jellemzőkhöz – egyedi tulajdonságokat is mutat. Ezek az egyedi tulajdonságok a tavi üledék izotópos adatainak értelmezésénél figyelembe veendőek.

A Mátra déli előterében, a visontai kvarter „vörösagyag” talaj-üledékes komplexumában szokatlan nagy mennyiségben és formában megjelenő autigén karbonátkiválások vizsgálatával meghatározták a karbonát-alkotó kalcium forrását. Paleotalajok karbonátásványainak jellemzésével igazolták az adott felszínek eltérő növényi borítottságát a különböző talajbetelepülések képződése idején. Mikromorfológiai vizsgálatokkal igazolták az aragonit jelenlétét a gyökérsejtekben kivált karbonátszemcsékben, ami ilyen képződményekben eddig nem volt ismert. A Visegrádi-hegységben található, ún. Basaharc Dupla paleotalajban és a környező löszben előforduló agyagásványok közül először mutattak ki beidellit, ami egy, a talajokban viszonylag ritka, dioktaédes duzzadó agyagásvány. Ez az ásvány mindeddig egyetlen magyarországi löszelőfordulásból sem volt ismert.

A klímaváltozás óriási hatással lehet a gazdasági életre általában, valamint az életminőségre közvetlenül. A fenti eredmények a Kárpát-medencebeli klímarekonstrukció újabb módszerekkel történő kiegészítését szolgálják, segítve ezzel a tudományos alapokra épülő egyre pontosabb klímaváltozási forgatókönyvek megalkotását. *Az eredményeket 5 fős kutatócsoport érte el, mindannyian a GKKI alkalmazottai. Az intézeti ráfordítás 7,4 M Ft volt, ebből 5,5 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.*

Tovább vizsgálva a *hazai hévizek szervesanyag-tartalmát* megállapították, hogy a hévizek szerves alkotóinak jelenlétét, illetve mennyiségét a vizek geokémiai fáciése és hőmérséklete egyaránt befolyásolja. Tapasztalataik szerint a termálvizek hőmérséklete a humin- és fulvosavak infravörös spektrumainak jellegét (ujjlenyomatát) és a humin- és fulvosavak nettó felületi protonfeleslegét is befolyásolja. Ez utóbbi megegyezik a savak disszociációs fokával. A nagyobb hőmérsékletű mintákban nagyobb a karboxil csoportok mennyisége, és más az aromás gyűrűk kondenzációs foka és a helyettesítések következtében a konjugáció.

Ezen vizsgálatok alapvető fontosságúak a hévizek minősítése szempontjából. Ezek a képződmények turisztikai vonzerejük révén számos régió legfontosabb gazdasági lehetőségét képviselik. *Az eredményeket 4 fős kutatócsoport érte el, ebből 2 fő volt a GKKI alkalmazottja. Az intézeti ráfordítás 4,5 M Ft volt, ebből 2,3 M Ft volt pályázati forrásból elnyert összeg.*

A *kulturális örökség vizsgálata* témakörben régészeti leletmentésből származó kagylóhéjak stabil oxigén- és szénizotóp-összetétel változásait vizsgálták. Az eredmények kiértékelésével a különböző időszakok (késő rézkortól a római korig hét elkülöníthető időszak) izotópgörbefutásainak éghajlatbeli különbségekhez való hozzárendelése vált lehetővé.

Mészkövek és márványok komplex ásványtani-geokémiai vizsgálatával pontosították a Salzburg, Eger, illetve az Esztergom környéki kerámia alapanyagokat feldolgozó műhelyek jellemzőit a késő középkor és a kora újkor emlékei körében. Ezek az eredmények hozzájárultak a helyi termékeknek a regionális, illetve a távolsági kereskedelemben terjedő termékektől történő elválasztásához.

Az eredményeket 4 fős kutatócsoport érte el, mindannyian a GKKI alkalmazottjai. Az intézeti ráfordítás 2,9 M Ft volt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A *metamorf ásvány-kőzettani kutatásokat* széleskörű hazai és nemzetközi együttműködéseket is felhasználva folytatták. A hazai intézmények közül elsősorban az MTA Atommagkutató Intézetével, az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével, a Magyar

Állami Földtani Intézettel és az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel működtek együtt. Ebben a témakörben hivatalos nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn a Horvát Tudományos és Művészeti Akadémiával, három éves bilaterális együttműködési szerződés keretében, „A Belső-Dinaridák, a Bükkium és a Tiszai egység metamorf képződményeinek összehasonlító vizsgálata” című témában. Az együttműködés során 2006-ban a Medvednica hegység Paleozoos sorozatát vizsgálták, eredményeiket pedig nemzetközi konferenciákon mutatták be. Ehhez a témához kapcsolódik a GKKI-nak a Leobeni Egyetem Alkalmazott Földtani és Geofizikai Tanszékével közös projekt pályázata, amelyet az Osztrák-Magyar Akció Alapítvány támogatott. A téma megnevezése: “Regional correlation in the triple junction of the Alp-Carpathian-Dinaridic-Pannonian region using carbonaceous matter”. A rétegszilikátok kutatásában további informális nemzetközi együttműködést folytattak a baltimore-i Johns Hopkins Egyetemmel, a cadizi, a granadai, az ovidioi, a padovai, a zágrábi, a salzburgi és a pozsonyi egyetemekkel, valamint a Krétai Műszaki Egyetemmel és a negevi Ben Gurion Egyetemmel. Az intézet igazgatója az International Union of Geological Sciences, Subcommittee on Systematics of Metamorphic Rocks (IUGS-SCMR) tagja, a kis hőmérsékletű metamorf képződményekkel foglalkozó nemzetközi munkacsoport vezetője.

A *magmás kőzettani-geokémiai kutatásokon* belül a polikristályos gyémántok kutatása nemzetközi együttműködésben az Osztrák és a Magyar Tudományos Akadémiák közötti kétoldalú egyezmény támogatásával zajlott. A Pannon-medence köpenyrégiójának és metamorf összleteinek stabilizotópos vizsgálata a Természettudományi Múzeum, az ELTE-MTA Geológiai Kutatócsoport, a Lausanne-i és a Münchener Egyetem kutatóival folytatott együttműködésben történt. A La Lagunai Egyetem (Spanyolország) kutatóival közös TÉT kutatási projekt keretében a Kanári-szigetek vulkanizmusának vizsgálata folyt. A kutatási projekt keretében egy spanyol kutató töltött 2x2 hetet a Geokémiai Kutatóintézetben, ahol stabilizotóp- és nyomelem-geokémiai vizsgálatokat végzett a magyar résztvevők segítségével. Emellett előkészítették az eredmények publikálását és nemzetközi konferencián történő bemutatását. A témakörben informális együttműködést alakítottak még ki a kanadai Memorial University of Newfoundland-dal.

A *hazai ásványi nyersanyagok kutatása* széleskörű hazai és nemzetközi együttműködés keretében zajlott. A hazai intézmények közül az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel, a Magyar Állami Földtani Intézettel, a Szent István Egyetemmel, az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével és a MOL Rt.-vel működtek együtt. Informális nemzetközi kapcsolatot ápoltak az alábbi intézményekkel: Amerikai Geológiai Szolgálat, Université Claude Bernard Lyon, Kanazawa Egyetem, Japán, Orosz Tudományos Akadémia és a Freibergi Egyetem.

A *nagy aktivitású radioaktív hulladék elhelyezésére* potenciálisan alkalmas képződmények kutatásával kapcsolatban együttműködést folytattak a Mecsekérc Környezetvédelmi Zrt.-vel, a belgiumi SCK-CEN Waste & Disposal osztályával, a svájci NAGRA, Mont Terri Rock Laboratory-val, a Berni Egyetemmel, valamint a franciaországi BRGM, University of Orsay és az ANDRA kutatóival.

A *talajok környezet-geokémiai és -ásványtani kutatása* OTKA kutatás keretében az Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel, továbbá informálisan az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével, az MTA Anyagtudományi és Környezetkémiai Kutatóintézetével, valamint a Bristoli Egyetemmel együttműködve történt. Együttműködést tartottak fenn továbbá az Eötvös Loránd Tudományegyetem több tanszékével, a Magyar

Állami Földtani Intézettel, a Szent István Egyetemmel, a tübingeni Eberhard-Karls Egyetemmel, a freibergi Műszaki Egyetemmel és a Horvát Földtani Intézettel is.

Az *izotópsztratigráfiai-paleoklimatológiai tanulmányok* elsősorban az MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport, a Magyar Állami Földtani Intézet és az MTA-MTM Őslénytani Kutatócsoport kutatóival közös kutatómunka keretében folytak. További informális kapcsolatot tartottak fenn a témában az MTA Balatoni Limnológiai Kutatóintézettel, a Szegedi Tudományegyetemmel, az MTA Atommagkutató Intézetével, az MTA Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézetével, illetve a lublini Maria Curie-Skłodowska Egyetemmel, a denizli-i Pamukkale University-vel, a hannoveri Leibniz Institute for Applied Geosciences-szel, a nebraskai University of Nebraska Medical Centerrel, a Román Tudományos Akadémiával, a Bergeni Egyetemmel és a Zágrábi Egyetemmel.

A *hévizek szerves anyagainak vizsgálata* során a Magyar Állami Földtani Intézettel és a Szegedi Tudományegyetemmel működtek együtt.

A *kulturális örökség vizsgálata* témakörben a Magyar Nemzeti Múzeummal, a Kulturális Örökségvédelmi Hivatallal és a Tübingeni Egyetemmel folytattak közös kutatásokat.

Az intézet egy munkatársa az International Association of Geochemistry and Cosmochemistry és az IUGS Magyar Nemzeti Bizottságának titkára, valamint a European Science Foundation értékelő bizottságának tagja. Egy kutató az International Union of Geological Sciences (IUGS) Magyar Nemzeti Bizottságának tagja. Az intézet egy munkatársa az MTA Geonómiai Albizottságának elnöke, egy másik pedig a Geokémiai és Ásvány-Közetani Tudományos Bizottság titkára. Ez utóbbi bizottságnak az intézetből 5 kutató tagja. Egy munkatárs az MTA Bolyai János Ösztöndíj Szakértői Kollégium tagja. Az intézet igazgatója a Magyar Akkreditációs Bizottság Földtudományi Szakbizottságának tagja, egy másik munkatársa pedig az OTKA Földtudomány 1 zsűri elnöke. Egy kutató a Magyarhoni Földtani Társulat tiszteleti tagja, ketten az MFT Választmányának tagjai. Egy munkatárs az MFT Tudománytörténeti Szakosztályának elnöke. Egy munkatárs tagja az MFT Ásványtan-Geokémiai Szakosztály vezetőségének, egy másik az Agyagásványtani Szakosztály titkára. Az intézet igazgatója a Magyar Geológiai Szolgálat Tudományos Tanácsának tagja volt. Egy-egy kutató tagja az „Acta Mineralogica et Petrographica”, a „Schweizerische Mineralogische und Petrographische Mitteilungen”, valamint az „Acta Geologica Hungarica” című folyóirat szerkesztőbizottságainak.

A GKKI igazgatója egyetemi magántanár a Szegedi Tudományegyetemen, földtudományi szakon, valamint az ELTE TTK Földtudományi Doktori Iskolájának akkreditált tagja. Négy kutató vesz részt az egyetemi alapképezésben az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, a Szegedi Tudományegyetemen, valamint a Képzőművészeti Egyetemen. Két munkatárs témavezetőként irányította PhD hallgatók doktori értekezésének elkészítését az ELTE TTK Földtudományi Doktori Iskolája keretében.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A beszámolási évben a GKKI kutatói 10 OTKA pályázatban voltak témavezetők és kettőben szerepeltek alvállalkozóként. A beszámolási évben 2 új OTKA pályázat indult, ezek segítségével az eddigi kutatási irányvonalakat újszerű módszerekkel és vizsgálati lehetőségekkel egészítették ki. Egy kutató újabb 1 évre OTKA posztdoktori pályázatot nyert

el, ami lehetővé tette egy minősített fiatal kutató foglalkoztatását, és nagyban hozzájárult kutatásainak anyagi fedezetéhez.

Az MTA Geokémiai Kutatóintézet és a Horvát Tudományos és Művészeti Akadémia közötti együttműködési munkaterv címe: Comparative metamorphic petrogenetic study of Internal Dinarides, Bükk Unit and Tisia (A Belső-Dinaridák, a Bükkium és a Tiszai egység metamorf képződményeinek összehasonlító vizsgálata). A 2001-ben indult és 2004-ben megújított szerződésben résztvevő intézmények: az MTA GKKI, az MTA ATOMKI, valamint a HTMA Geokémiai Bizottsága és az Institute for Mineralogy and Petrology, Department of Geology, Faculty of Science, University of Zagreb. Az együttműködés kiváló keretet biztosított egy fiatal kutató PhD témájának kidolgozásához. (A PhD értekezés 2006-ban elkészült.) Az együttműködés fő tudományos eredménye: a horvátországi Medvednica hegység eddig pontosan még nem ismert metamorf fejlődéstörténetének rekonstrukciója korszerű módszerekkel, valamint ennek összehasonlítása a hasonló ÉK-magyarországi földtani képződményekkel. Ez az együttműködés egyben módszertani kooperáció is (a GKKI-ban kifejlesztett módszerek bevezetésének elősegítése a Zágrábi Egyetemen).

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

1. Bajnóczy B, Horváth Z, Demény A, Mindszenty A: Stable isotope geochemistry of calcrete nodules and septarian concretions in a Quaternary "red clay" paleovertisol from Hungary. *Isotopes for Environmental and Health Studies* 42: 335-350 (2006)
2. Balen D, Horváth P, Tomljenović B, Finger F, Humer B, Pamić J et al. (7 Árkai P): A record of pre-Variscan Barrovian regional metamorphism in the eastern part of the Slavonian Mountains (NE Croatia). *Mineralogy and Petrology* 87: 1-2; 143-162 (2006)
3. Demény A, Vennemann TW, Harangi Sz, Homonnay Z, Fórizs I: H₂O-dD-FeIII relations of dehydrogenation and dehydration processes in magmatic amphiboles. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* 20: 5; 919-925 (2006)
4. Hetényi M, Nyilas T, Sajgó Cs, Brukner-Wein A: Heterogeneous organic matter from the surface horizon of a temperate-zone marsh. *Organic Geochemistry* 37: 1931-1942 (2006)
5. Kisch HJ, Árkai P, Brime C: On the calibration of the illite Kübler index (illite „crystallinity”). *Schweizerische Mineralogische und Petrographische Mitteilungen* 84: 323-331 2004 [megjelent: 2006. májusában]

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Geokémiai Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	32	Ebből kutató ² :	17
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			8
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			28
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			28
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	15	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	3
nemzetközi együttműködés keretében:	8	SCI által regisztrált folyóiratban:	9
összesített impakt faktor:	13,979	összes hivatkozás száma ⁴ :	283
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			194
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	5
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	0
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	0	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	6	posztterek száma:	28
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			154 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	2
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			12
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			24,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			3
EU forrásból:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,0 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			1
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			4,6 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			30
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			16,9 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0,5 MFt

IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly T.M.u.29-33. 1525 Budapest, Pf. 77.

Telefon: 392-2531, Fax: 395-9080

e-mail: wojn@alpha0.iki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2006. évi terve a fő tudományos és fejlesztési feladatokat két csoportba foglalta: Nukleáris kutatás és fejlesztés, különösen a prompt gamma aktivációs analitikai (PGAA) módszerek és alkalmazásuk, valamint a sugárbiztonságot és védettséget ellenőrző eljárások fejlesztése; a heterogén katalitikus rendszerek különböző meghatározó elemeinek vizsgálata.

A 2006. évre külön is megjelölt három konkrét feladat közül legnagyobb figyelmet igénylő volt a Paksi Atomerőműben bekövetkezett üzemzavar felszámolásával kapcsolatosan az újratokozott fűtőelem maradványok hasadóanyag tartalmának meghatározása, a tokok gumigyűrűi sugárállósági vizsgálata. Az intézet által 2005-ben kidolgozott módszert üzemi körülmények között kipróbálták, a mérésekre a tokozás befejezését követően, két ütemben kerül sor. A sugárállósági vizsgálatokat elvégezték. Teljesült az országban levő több mint 60 használaton kívüli plutonium-berillium neutron forrás hasadóanyag tartalmának meghatározása, valamint újra tokozása is a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Kht (RHKKht) megbízásából.

A szervezeti önállóságát 2006-ban visszanyert intézet működéséhez szükséges személyi, szervezeti és finanszírozási feltételeket sikerült biztosítani. Erősödtek a kapcsolatok a nukleáris területen érdekelt szervezetekkel. Az intézet e téren végzett tevékenységének elismerését is bizonyítja egy vezető munkatárs részesítése Wigner Díjban. A Nukleáris Kutatások Osztálya két újabb jelentős nemzetközi pályázatot nyert el, a nukleáris biztonság terén az Országos Atomenergia Hivatal (OAH) számára az Intézet folyamatos feladatokat látott el és több fejlesztési célt teljesített. Az izotóp nyomjelzéses katalíziskutatások nemzetközi ismertségét mutatja, hogy az „Isotopes in Heterogeneous Catalysis” c. monográfia (Imp. Coll. Press, London 2006) három, a radioaktív izotópok alkalmazását bemutató fejezete közül kettőnek, ezt megelőzően pedig, a Radiotracer Studies of Interfaces c. monográfia (Elsevier, 2004) adszorpcióval és katalitikus reakciókkal foglalkozó fejezetének szerzője is intézeti munkatárs. Az intézeti katalízis kutatás nemzetközi elismerését és az eredményes nemzetközi kooperációt is mutatja egy vezető katalízis kutató díszdoktorrá avatása a franciaországi Poitiers-i Egyetemen.

Jelentős feladat volt a „11-ik Tihany Nemzetközi Sugárkémiai Szimpózium” szervezése és a kiadvány szerkesztése. A Szimpózium a sugárhatás-kémiai kutatások általánosan elismert eseménye, amelynek megrendezésére 1962 óta 4 évenként kerül sor az intézet szervezésében.

Az intézet publikációs tevékenységét jellemző számszerű adatok lényegében azonosak a 2005-ben elért jellemző adatokkal.

Az intézet működésének forrásai folyamatosan biztosíthatók voltak. Megoszlásuk:

MTA tám.: 41.37 %; Pályázati forrás: 9.39 % (OTKA: 2.09 %, más hazai: 2.3 %, Külf.: 5%), OAH megbízás: 7.57 %; Vállalati megbízás: 20.18 %; Egyéb bevétel: 21.49 %.

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

Nukleáris kutatások (célzott alapkutatás, kísérleti fejlesztés)*

Cél: a Prompt Gamma Aktivációs Analitika (PGAA) módszer fejlesztése, alkalmazási körének kiterjesztése és széleskörű alkalmazása.

A PGAA fejlesztése: γ keltési hatáskeresztmetszeteket, γ -intenzitásokat határoztak meg, bevezették időfüggő bomlási folyamatok alkalmazását, és modernizálták a PGAA mérőállomást különböző nemzetközi projektek keretében. A fő eredmény egy nagy tisztaságú germánium detektor hatásfokának meghatározása és a legfontosabb nagy energiás γ -intenzitás standard, a $^{14}\text{N}(n,\gamma)^{15}\text{N}$ reakció átmenetei pontos ($\pm 1\%$) intenzitásának meghatározásából. Az intenzitás értékek 2.7 MeV felett néhány százalékkal nagyobbak bizonyultak a korábban elfogadottnál. Ez számottevő hatással lehet több, különböző alkalmazások során meghatározott mérési eredmény értékére (pl. „ γ -fűtés” és nagy energiás γ -dózisok mértéke), ami bizonyos nukleáris adatok újraértékelését igényli.

A γ -detektorok hatásfok bizonytalanságának meghatározásával kapcsolatos új eredmény a variancia-kovariancia számítások szisztematikus alkalmazása, amelynek során kimutatták, hogy az intenzitás hányadosok közeli energiákon elenyésző bizonytalansággal rendelkeznek. Ez a PGAA mérési eredmények bizonyos eseteiben számottevően csökkenti az eddig meghatározott koncentráció értékek hibáját.

A PGAA alkalmazásával újabb eredményeket értek el nukleáris, anyagtudományi, geológiai és archeometriai kutatásokban, gyakorlati feladatok megoldásában.

Nukleáris alkalmazások: termikus neutron befogási hatáskeresztmetszeteket határoztak meg hidegneutron nyalábbal, adatokat mértek és szolgáltatottak a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ) diszkrét magnívó-könyvtárhoz. Meghatározták ^{56}Fe nívósűrűségét és a gamma-erősségfüggvény növekedését állapotották meg alacsony energiák esetén.

Anyagtudományi alkalmazások: Doziméter anyagokat PGAA és termolumineszcencia módszerrel jellemeztek, C60 és C70 fullerének szennyezéseinek összetételét határozták meg, megvizsgálták szén nanocsövek alkalmazhatóságát szilícium-nitrid mátrixok megerősítésére.

Geológiai és archeometriai alkalmazások: Bór koncentrációkat határoztak meg vulkánokban, Li, Be és B mennyiségét határozták meg nagynyomású metamorf kőzetekben és Égei-tengeri gránitokban. Magyar-, német-, olaszországi és angliai eredetű régészeti leletek, műtárgyak összetételét állapították meg, és adatokat szolgáltatottak származásuk időpontjának és helyének megállapításához.

Közvetlen gazdasági eredményt a halogénlámpában alkalmazott fémhalogenidek összetételének meghatározása szolgáltatott (GE Consumer and Ind. Budapest).

[Kutatóév: 4,5; Becsült ráfordítás: 31,5 M Ft; Külső forrás: 45 M Ft]

További gazdasági eredmények a NAP VENEUS05 projekt keretében, a projektben résztvevő vállalatok által átvett neutronoptikai fejlesztések alapján várhatók. Az új nukleáris adatok az egész nukleáris technika több területén nyernek gyakorlati alkalmazást, beépülnek a nagy (nemzetközi) nukleáris adatbázisokba (ENDF/B-VI., JEFF3, EXFOR).

*az egyes témák minősítése a 2004. évi CXXXIV.törv 4§ alapján

Sugárbiztonsági kutatás-fejlesztés

(célzott alapkutatás, kísérleti fejlesztés és gyakorlati alkalmazás)

Ellenőrző módszerek: 0,01 g nagyságrendű U-235 tartalom kimutatására alkalmas, tetszőlegesen növelhető érzékenységgű, neutron interrogáción alapuló módszert dolgoztak ki aktív sugárkapuhoz. Eljárást dolgoztak ki reaktor fűtőelem kötegekben levő urán dúsítása – ill. reprocessálása – időpontjának meghatározására. A módszer a nukleáris anyagok biztosítéki ellenőrzése (nuclear safeguards), valamint illegális forgalmuk („illicit trafficking”) elleni védekezés eszközeként alkalmazható. A PA Zrt-ben a sérült, újratokozott fűtőelem-maradványok hasadóanyag tartalmának meghatározására 2005-ben kidolgozott eljárás kipróbálása üzemi körülmények között is megtörtént. 2007-ben az intézet munkatársai meghatározzák a tokok nagy részének hasadó anyag tartalmát.

Az ellenőrzési módszerek eszköztárát jelentősen bővítik az ICP-MS (tömegspektrometriás) berendezésre épülő eljárások. Kidolgozták a lefoglalt vagy talált minták urán-tartalmának és izotóp-összetételének gyors meghatározására alkalmas lézerablációs módszert, a leggyakoribb hosszú felezési idejű radionuklidok meghatározására. A nyomelem ujjlenyomat vizsgálatára, atomerőművi és környezeti minták elemzésére alkalmas módszereket fejlesztettek ki. Kielégítő eredményt mutatott az IPC-MS és a γ -spektroszkópia által szolgáltatott adatok összehasonlítása.

[Kutatóév: 8; Becsült ráfordítás: 57 M Ft; Külső forrás: 95 M Ft]

Míndezek a módszerek – a kifejlesztésük során elért tudományos eredmények mellett – kifejezett gyakorlati célokat szolgálnak: a nukleáris biztonság és védelem eszköztárát bővítik, hatékonyságát növelik, hozzájárulnak azt állam ilyen irányú nemzetközi kötelezettségeinek teljesítéséhez.

Sugárdozimetria: Különböző aktivátor (Ag, ill. Mn) koncentrációjú litium–tetraborát lumineszcens minta-sorozatokat készítettek. Megállapították, hogy a sugárzással iniciált prompt emisszió, a radiolumineszcencia, valamint a termolumineszcencia spektrális eloszlása megegyezik a fotolumineszcenciáéval. Környezetvédelmi ellenőrzési célra nagyérzékenységgű, különböző LET függésű TL dózismérőt fejlesztettek ki külföldi származású $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{C}$ és $\text{CaSO}_4:\text{Tm}$ felhasználásával.

Sugártechnológiai folyamatok ellenőrzésére tetrazólium ibolya (TV) radiokróm anyagot tartalmazó vizes, ill. vizes-alkoholos doziméter oldatokat, valamint polivinil alkohol (PVA) alapú doziméter filmeket fejlesztettek ki

[Kutatóév: 4; Becsült ráfordítás: 28 M Ft; Külső forrás: 6 M Ft]

Izotópmigráció: Anionos specieszek ($\text{H}^{14}\text{CO}_3^-$ és $^{99}\text{TcO}_4^-$) migrációját vizsgálták a Bodai Aleurolit Formációból származó mintákon. Az ásványi összetétel a folyamatot jelentősen befolyásolja, pl. a szmektit duzzadása újabb pórusok megnyitásával nagyobb teret enged a diffúciónak. A karbonátos dolomitos komponensen szén izotópcseré játszódik le a közetvíz és a szilárd fázis között. A vizsgálatok eredményei a kiegészített paksi fűtőelemek végleges hazai elhelyezési helyének kiválasztását segíthetik.

[Kutatóév: 2; Becsült ráfordítás: 14 M Ft; Külső forrás: 1,5 M Ft]

Sugárhatáskémiai kutatások

(célzott alapkutatás és ipari alkalmazás)

Polimerizációkinetika: Izopropil gyök sugáriniciált reakcióit vizsgálták a biokémiai folyamatokban fontos szerepet játszó maleinsav és fumársav különböző mértékben protonált

formáival. Megállapították, hogy a fumársav disszociálatlanul aktívabb, míg maleinsav esetében a disszociáció útján képződő anion reagál nagyobb sebességgel. A különbség oka az izopropilgyök nukleofil jellege. Cellulóz szövetekre ojtás során különféle monomerekkel különböző mértékű hidrofíl jelleget tapasztaltak. Megállapították, hogy az n-vinil-pirrolidon monomer egyidejű besugárzásának hatékonysága egy nagyságrenddel nagyobb, mint az előzetes besugárzásé.

Programozott tulajdonságú polimerek: NIPAAm nanogéleket állítottak elő poliNIPAAm oldat besugárzásával; a térhálósítás kinetikáját és mechanizmusát impulzus radiolízissel tanulmányozták. NIPAAm, valamint NIPAAm monomereket ojtottak polisztirol, polietilén és polietiléntereftalát felszínre γ -, elektron- és plazma-besugárzással. Az ojtott felszíneket sejtkultúrák tenyésztésére, valamint sejtek enzim használata nélküli „betakarítására” tesztelik.

Ipari szennyvizek sugárzásos ártalmatlanítása: Általános elméleti összefüggést vezettek le színezékek degradációjának kinetikájára. Megállapították, hogy az AR 1 színezék elszíntelenedésének és teljes lebomlásának kinetikája alapvetően eltérő.

[Kutatóév: 0,5 Becsült ráfordítás: 30 M Ft Külső forrás: 6 M Ft]

Sugárállósági vizsgálatok: Megállapították, hogy a sérült paksi fűtőelemek elhelyezésére szolgáló tokok gumigyűrűi rendkívül sugárállóak; fizikai tulajdonságaik a várható sugárdózist többszörösen meghaladó dózisok hatására is csak kis mértékben módosulnak.

[Kutatóév: 0,5 Becsült ráfordítás: 15 M Ft Külső forrás: 1,8 M Ft]

Katalizátor rendszerek és katalitikus folyamatok vizsgálata
(tisztá és célzott alap kutatás)

Különböző PROX (CO preferenciális oxidációja hidrogén jelenlétében) katalizátor rendszerek előállítás, szerkezetük és tulajdonságaik vizsgálata:

AuMnO_x, MnO_x és PtCeO_x katalizátor rendszerek tulajdonságait és működésük mechanizmusát vizsgálták. Megállapították,

- hogy CO₂ és 10% víz jelenléte nem befolyásolja PtCeO_x katalitikus aktivitását és a felület oxidációs állapotát; CO₂ növeli a felületi karbonát koncentrációját, a víz nem módosítja a felületi specieszek összetételét.
- a PtCeO_x katalizátoron lejátszódó PROX és víz-gáz shift (WGS: CO + H₂O) reakció során teljesen eltérő tulajdonságú és felületszerkezetű katalitikus rendszerek alakulnak ki.
- a PtCeO_x katalizátor a PROX reakcióban sokkal alacsonyabb hőmérsékleten (363 K) aktív, mint a WGS reakcióban (473 K-nél).
- PROX reakcióban a Ce⁴⁺, WGS-ben Ce³⁺ állapotban van jelen a cérium;
- a WGS reakcióban a víz OH csoportokat képezve adszorbeálódik a redukált oxidon, a PROX-ra jellemző hidrofém-hidas szerkezettől eltérően;
- a felületi formiátok képződése a WGS reakciót elősegíti, a PROX-ot fékezi;
- a hidrogén hidas szerkezet az oxigén-hidrogén felületi reakció eredményeképpen alakul ki. a redukált vakanciákat tartalmazó CeO_x oxidálja az adszorbeált szén-monoxidot, ami
- alacsony hőmérsékleten magas PROX szelektivitást eredményez a víz gátolt deszorpciója következtében.

Bizonyították, hogy az MnO_x fázis mobilis oxigén koncentrációja az oxidáció sebességét alapvetően befolyásolja. Au nanoszemcsék jelenléte az Au/MnO_x minták stabilitását és élettartamát széles (373–453 K) tartományban megnöveli. A PROX-ban aktív Au katalizátorok DeNO_x reakciók hőmérsékletén (~ 700 K) gyorsan veszítik el aktivitásukat. Az

eredmények a tüzelőanyag cellák használatához szükséges CO-mentes hidrogén előállítása során hasznosíthatók.

[Kutató év: 4,0; Becsült ráfordítás: 18 M Ft; Külső forrás: 6,5 M Ft]

Arany alapú katalizátorok vizsgálata: Különböző módszerekkel előállított SiO_2 és TiO_2 hordozóra vitt arany katalizátorok CO oxidációs aktivitásának összehasonlítása alapján megállapították, hogy az Au szorból készült Au/SiO_2 és Au/TiO_2 (anatáz) mechanikai keverésével előállított minták CO oxidációs aktivitása kisebb a hasonló összetételű, különböző Ti-prekursorok kontrollált hidrolízisével készültekénél. Ez arra mutat, hogy az Au/amorf TiO_2 határfelület aktivitása nagyobb, mint az Au/anatáz határfelületé;

A vizes szuszpendálással kezelt keverék minta aktivitása megnövekedett, amit az Au és anatáz részecskék átrendeződésének és Ti-O-Si kötések kialakulásának tulajdonítanak. A kezelt mintában csökkent az Au szinterelődése a keverék mintához képest. A részecskék átrendeződésének irányításában és stabilizálásában, az Au/TiO_2 határfelület növekedésében fontos szerepet játszanak a jelenlévő szerves stabilizátorok és az adszorpció elősegítésére alkalmazott szerves polimer.

Vizsgálták Au-TiO_2 nanoszerkezetek kialakulását SBA-15 mezopórusos hordozóban. A Ti-izopropoxid hidrolízisével módosított SBA-15 hordozóra „deposition-precipitation” (DP) módszerrel leválasztott Au minta CO oxidációs aktivitása jelentősen meghaladta az analóg amorf SiO_2 hordozós mintáét, amely részben az Au részecskék szinterelődéssel szembeni jelentősen megnövekedett stabilitásának tulajdonítható. A transzmissziós elektronmikroszkópos (TEM) vizsgálatok alapján az Au részecskék nagy része az SBA-15 csatornarendszerében helyezkedett el, amit a kalcinálás és a reakció sem változtatott meg.

Pd-Au kétfémes katalizátorokon a felületi arany koncentráció a különböző komponensek leválasztási sorrendjétől függően más, de szinergizmus nem tapasztalható.

Alkoholos redukció és nagyenergiájú impulzus elektron besugárzása útján előállított SiO_2 hordozós $\text{Au}_{\text{mag}}\text{-Pd}_{\text{héj}}$ nanoszerkezetek acetilén hidrogénező aktivitása csökken a magméret és a héjvastagság csökkenésével.

[Kutatóév: 4,5; Becsült ráfordítás: 30 M Ft; Külső forrás: 5,0 M Ft]

Metán aktiválása fém + Ga/H-ZSM-5 zeolitokon

A metán nagyobb szénhidrogénekké történő átalakítását tanulmányozták N_2O jelenlétében és megállapították, hogy

- a metán soklépéses átalakulása a $\text{CH}_4 + \text{N}_2\text{O} + \text{MeGa/H-ZSM-5}$ (Me: Fe, Co, Mo, Ag, Au) rendszerben nem a Mars van Krevelen mechanizmus, hanem összetett oxigénátviteli redox mechanizmus szerint játszódik le.
- az N_2O a felületi ZCH_xO_x specieszekkel reagálva reoxidálja a ZOH centrumokat.
- Ga hozzáadása az egyfémes Fe/H-ZSM-5 katalizátorhoz jelentősen megnöveli annak aktivitását és a 100%-os konverzió hőmérséklete 75-K-el csökken.

[Kutatóév: 1,5; Becsült ráfordítás: 10 M Ft; Külső forrás: 0,5 M Ft]

Kétfémes katalizátorok vizsgálata: Ge-al és Sn-al módosított, különböző diszperzitású $\text{Rh/Al}_2\text{O}_3$ minták aktivitását vizsgálták metil-ciklopentán gyűrűfelynyilási reakcióban. Megállapították, hogy az optimális módosító mennyiség diszperzitásfüggő: nagy diszperzitású mintáknál $\frac{1}{4}$, kis diszperzitásúaknál $\frac{1}{2}$ monorétegnek megfelelő mennyiségű módosító eredményez optimális aktivitást. Meghatározták a második fém szelektív lerakódásának legjobban kedvező készitési feltételeket.

A ródium elektrokémiai leválasztásával előállított hordozómentes és hordozós (3% Pt/SiO₂) Pt-Rh (Pt:Rh ~2:1) minták valódi kétfémes szerkezetűek, mindkét fém komponenstől eltérő tulajdonságúak. A hordozómentes minta kétfémes jellegét megőrzi olyan felületi kezelés után is, amelynek eredményeképpen a felületi rétegekben Rh nem mutatható ki. A mintákat ciklikus voltammetria, XPS, TEM és metil-ciklopentán konverziójával jellemezték.

Kimutatták, hogy szulfidált M(8-10) Mo katalizátorokon a tiofén hidrodesszulfurálódása (HDS) és a ciklohexén hidrogénezése azonos koncentrációjú és energiaeloszlású aktív helyeken játszódik le. Különböző Ni:Mo atomarányú NiMo_x katalizátorok HDS aktivitásának mértéke a felületi Ni-koncentrációval arányos, amit ciklohexán dehidrogénezés, CO₂ kemiszorpció és XPS vizsgálatok adatai bizonyítanak.

Az eredmények hozzájárulnak a kétfémes katalizátorok hatásmechanizmusának megértéséhez.

[Kutatóév: 4; Becsült ráfordítás: 28 M Ft; Külső forrás: 5 M Ft]

Felületi és tömbi szerkezeti kutatások:

Si egykristály felületen kialakított Keggin szerkezetű fémoxi-hidroxidok STM, STS és XPS vizsgálatával kimutatták, hogy a Keggin egységek szerkezete kontrolláltan változtatható a templát molekulák megváltoztatásával.

Megállapították, hogy a szén-nanocső hordozós Fe és Co katalizátorok készítése fém acetát impregnálással nagyobb olefin és nagy szénatomszámú szelektivitású katalizátort eredményez, mint a fémoxid nanorészecskék hordozóra helyezése.

Katalitikus és in situ Mössbauer spektroszkópiás mérések útján bizonyították, hogy egy erős oxidálószer, a N₂O bontása során a vas az alacsonyabb oxidációs állapotában (Fe²⁺) stabilis a Fe-ZSM-5 katalizátor rácsközi pozícióiban.

Az Al-Fe réteges kettős hidroxidokból készített katalizátorok jelentős aktivitásának bizonyultak az N₂O bontásában, és az NH₃ által iniciált redukciójában is. Ebben jelentős szerepet játszik a szerkezetbe ionos diszperzítésben beépült vas.

Az eredmények a katalitikus rendszer egyes összetevői szerepének értelmezéséhez járulnak hozzá.

[Kutatóév: 9; Becsült ráfordítás: 32 M Ft; Külső forrás: 2 M Ft]

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézet hazai kapcsolatai kiterjednek a felsőoktatás, a kutatás és a műszaki együttműködés területére. Felsőoktatás terén az intézeti munkatársak laboratóriumi gyakorlatokat vezetnek (BME, ELTE), valamint egyéb oktatási tevékenységet (PhD hallgatók vezetése és előadások tartása) végeznek, (BME, ELTE és Pannon Egyetem). Három munkatárs Doktori Iskola tagja a Pannon Egyetemen.

A tudományos együttműködésben a fő hazai partnerek:

a csillebérci telephely kutatóintézetei a PGAA, a sugárbiztonsági fejlesztés és a katalizátorkutatásban;

a Szegedi Tudományegyetem és a Kémiai Kutatóközpont a katalizátorkutatásban;

az ELTE egyes szilárd test szerkezeti (röntgenes) kutatásokban, a PGAA geológiai alkalmazásában és urán meghatározását célzó kutatásokban;

a BMGE a nukleáris anyagok meghatározását célzó vizsgálatokban, sugárhatáskémiai és katalízis kutatásokban;

a Pannon Egyetem transzuránok kémiája és sugárzásos szennyvízkezelés témakörökben;

a Magyar Nemzeti Múzeum a PGAA archeometriai alkalmazásában.

A vállalatok közül a PA Zrt, az RHK Kht, az AGROSTER besugárzó, a GE Budapest a Mecsekérc Zrt. és természetesen az Izotóp Intézet Kft a főbb közvetlen partnerek. Kiterjedt folyamatos szakmai együttműködés van az IKI és az OAH munkatársai között a nukleáris biztonsággal kapcsolatos kérdésekben, mind a rutin feladatok, mind a fejlesztési kérdések terén.

Közel 50 külföldi kutatóhellyel folytatnak az intézet munkatársai kétoldalú tudományos együttműködést, akadémiák közötti és TÉT keretben, továbbá közvetlen személyes kapcsolatok révén. További jelentős számú intézménnyel van együttműködés a multilaterális (COST, CONCORDE, VENEUS NAP, FUNMIG) programok keretében.

A nukleáris kutatások (PGAA) terén együttműködés alakult ki nagy külföldi centrumokkal: NIST, Lawrence NL, Berkeley NL, Lawrence Livermore NL; Inst. Laue Langevin, Grenoble, CEA Cadarache, Dubna és az EU IRRNN (referencia anyagokkal foglalkozó EU intézet). A sugárbiztonsági kutatás-fejlesztésben a Jülich-i Nukleáris Int., a NAÜ és annak monacói Környezetkutató Laboratóriuma, az EU JRC intézetei közül az ITU (az EU Transzurán Intézete) és JPSC (ISPRA) intézetek a kiemelkedő partnerek.

A 2005-ben indult EU 6-os FUNMIG IP 516514 projectben (Fundamental Processes of Radionuclide Migration) folytatódik az intézet részvétele. A keretprogramban a nagyaktivitású radioaktív hulladékok (kiégett atomerőművi fűtőelemek) radioizotópjai geológiai formációkban végbemenő vándorlásának alapfolyamatait vizsgálják. A kapott eredmények a nagy aktivitású nukleáris hulladékok hazai elhelyezésénél is hasznosíthatók lehetnek, mivel a magyar részvétel tárgya a programban a Bodai Aleurolit Formációból származó minták vizsgálata. E formációt tekintik jelenleg perspektivikusnak a hazai elhelyezés szempontjából. Itt említendő, hogy az intézet közvetlenül is együttműködik a formáció geológiai tulajdonságait vizsgáló Mecsekérc Zrt-vel.

2006-ban zárult egy, a NAÜ által szervezett, 11 ország kutatóinak részvételével művelt kutatássorozat, amely új sugárzásos szennyvízkezelési technológiák kidolgozására irányult. A közös kutatások összegzését részben az intézet kutatói végzik el. A NAÜ tervezi e témakörben újabb, több résztvevős program indítását.

A katalíziskutatások széles nemzetközi együttműködésben folynak. TÉT együttműködésben modell katalizátorok jellemzése, Au alapú katalizátorok előállítás, nanoszerkezetű oxid-hordozók előállítás, MTA-CNR Au alapú kétfémes CO oxidáció, MTA-CSIC u.a. DeNox reakciókban.

2006-ban lezárásra került három FP6 program: COST D15/005/99 a nanoszerkezetű katalizátorok előállítás, jellemzése és alkalmazása témakörben (9 résztvevő, koordinátor az IKI) és a COST D15/016/01 az arany alapú katalizátorok alkalmazása CO-oxidációjában és és PROX folyamatokban (7 résztvevő, koordinátor Paris University); CONCORDE: nanoszerkezetű oxid katalizátorok kutatása, 42 résztvevő). Az EU illetékes fóruma a teljesítményt mindkét projektben kiválóan ítélte.

Évek óta szoros együttműködés alakult ki a berlini Fritz Haber intézettel (Max Planck Ges), amelynek tárgya különböző fémek kalitikus tulajdonságainak összevetése elektronspektroszkópiai úton meghatározható jellemzőikkel. Az együttműködést 2006-ban kiterjesztették PROX kutatásokra is, aminek keretében mód van részben a legkorszerűbb felületkémi (nagynyomású in situ XPS és DRIFT) vizsgálatokra. E témában már régebben folyik együttműködés a palermói Egyetemen is, részben AuPd katalizátorok vizsgálatában. A kétfémes katalizátorok terén folyó kutatásokban a Poitiers-i Egyetem a fő kooperációs partner.

Az intézet elismertségét és jó nemzetközi kapcsolatait mutatja az is, hogy két, 2008-ban Budapesten rendezendő nemzetközi nukleáris konferenciának (NRC - Seventh International Conference on Nuclear and Radiochemistry és ISIAEM08 – International Symposium on the Industrial Applications of the Mössbauer Effect) az intézet vezető munkatársai lesznek a társelnökei.

Össességében az intézet nagy kapacitást igénylő témáinak biztosított a hazai és nemzetközi együttműködési háttere.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2006-ban az intézet munkatársai 5 OAH-támogatást pályáztak meg és nyertek el neutron interrogációs, fűtőelem kormeghatározási, nukleáris minták elemzését célzó ICP-MS módszer, maszkolt hasadóanyag kimutatására és sugárforrás automatikus kategóriába sorolását célzó eljárások kidolgozására. Az előirányzott célok teljesültek, ennek alapján további támogatás 2007-ben is pályázható. Ezek a feladatok a módszerek fejlesztése mellett azok elterjesztését is elősegíthetik. Példa erre a PuBe és AmBe neutronforrások hasadóanyag tartalma meghatározási módszerének kidolgozása, amellyel az RHK Kht-nál nyert pályázatot az intézet, a módszert pedig, a NAŰ „Support Program” keretében ajánlja bevezetni.

2006-ban az intézetben 11 elnyert OTKA pályázat keretében indultak kutatások a sugárhatáskémia, katalízis, nukleáris kémia és nukleárisbiztonság területén.

2006 novemberében indult a 4 éves EFNUDAT elnevezésű FP6 13 projekt, amely 11 európai uniós intézményben nukleáris adatok meghatározását irányozza elő. A projekt az európai nukleáris infrastruktúra kiépítését segíti elő; hozzájárul ahhoz, hogy erősödjön az IKI európai kapcsolatrendszere a nukleáris területen.

2006-ban indult FP6 STREP NEST projekt (2005-2008), amely a neutronfizikai és technikai eszközök fejlesztését irányozza elő a kulturális-örökség és az archeológiai kutatások eszköztárába illesztésük érdekében. A projekt, amely 10 résztvevővel folyik, felhasználja az NKTH pályázat alapján 2005-ben indult VENEUS05 (visegrádi) projekt eredményeit. Az eszközök működőképességét a közelmúltban tartott helyszíni munkaértekezleten demonstrálták. A projekt keretében új berendezések (minták pozicionálását szolgáló eszközök, neutron tomográf) installálására is sor kerül PGAA-NIPS mérőállomásnál.

2007-től indul az FP7-COST D-36 keretében az „Interface functionalisation of gold-based bimetallic nanoparticles ...” c. EU projekt 8 külföldi partnerrel. A címből kitűnően a kutatás célja nagy szelektivitású Au tartalmú kétfémes katalizátorok készítése a szinergia- és/vagy promotor-effektus segítségével.

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

1. BorkóL, Gucci L: Non-oxidative methane transformations into higher hydrocarbons over bimetallic Pt-Co catalysts supported on Al₂O₃ and NaY Topics in Catalysis vol. 39., nos. 1-2, 35-43 (2006)
2. Horváth A, Beck A, Sárkány A, Stefler Gy, Varga Zs, Geszti O, Tóth L, Gucci L: Silica-Supported Au Nanoparticles Decorated by TiO₂ Formation, Morphology and CO Oxidation Activity J. Phys. Chem. B 110, 15417-15425 (2006)
3. Wootsch A, Paál Z, Györffy N, Ello S, Boghian I, Leverd J, Pirault-Roy L: Characterization and catalytic study of Pt-Ge/Al₂O₃ catalysts prepared by organometallic grafting J. of Catalysis 238, 67-78 (2006)
4. Pozdnyakova O, Teschner D, Wootsch A, Kröhnert J, Steinhauer B, Sauer H, Tóth L, Jentoft FC, Knop-Gericke A, Paál Z, Schlögl R: Preferential CO oxidation in hydrogen (PROX) on ceria-supported catalysts, part II: Oxidation states and surface species on Pd/CeO₂ under reaction conditions, suggested reaction mechanism J. of Catalysis 237, 17-28 (2006)
5. Teschner D, Vass E, Hävecker M, Zafeirotos S, Schnörch P, Sauer H, Knop-Gericke A, Schlögl R, Chamam M, Wootsch A, Canning AS, Gamman JJ, Jackson SD, McGregor J, Gladden LF: Alkyne hydrogenation over Pd catalysts: A new paradigm, J. of Catalysis 242, 26-37 (2006)
6. Révay Zs: Calculation of uncertainties in prompt gamma activation analysis Nucl. Instr. and Meth. In Phys. A 564, 688-697 (2006)
7. Belgya T: Improved accuracy of γ -ray intensities from basic principles for the calibration reaction $^{14}\text{N}(n,\gamma)^{15}\text{N}$ Phys. Rev. C 74, 024603-1-024603-8 (2006)
8. Wojnárovits L, Takács E, Emmi SS: Reaction of the 2-hydroxy-2-propyl radical with acrylate type molecules in aqueous solution: Radical addition or electron transfer Chem. Phys. 327, 335-343 (2006)
9. Stefánka Zs, Koellensperger G, Stinger G, Hann S: Down-scaling narrowbore LC-ICP-MS to capillary LC-ICP-MS: a comparative Study of different introduction systems J. of Anal. Atomic Spectrometry 21, 86-89 (2006)
10. Nguyen CT, Bagi J, Lakosi L: A novel method of quantitative assay of PuBe neutron sources by neutron coincidence technique Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 246, 409-416 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Izotópkutató Intézet

Átlaglétszám ¹ :	88	Ebből kutató ² :	45
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			18
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			87
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			63
<i>Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban:</i>	61	<i>idegen nyelvű hazai folyóiratban:</i>	7
<i>nemzetközi együttműködés keretében:</i>	27	<i>SCI által regisztrált folyóiratban:</i>	61
összesített impakt faktor:	115,258	összes hivatkozás száma ⁴ :	850
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			710
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	0
<i>idegen nyelven</i> könyv:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből külföldön:</i>	0	<i>ebből külföldön:</i>	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	34	poszterek száma:	370
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			331,3 MFt
Beruházási támogatás:	2,4 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	4
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			11
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	15,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			8
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	14,6 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	136,9 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			8
EU forrásból:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	30,0 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,7 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			2
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

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

Telefon: 438-1111, Fax: 438-1143

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

Biomolekuláris Kémiai Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1110, Fax: 438-1145
e-mail: ghajos@chemres.hu

Felületkémiai és Katalízis Intézet

1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1111, Fax: 438-1143
e-mail: palg@chemres.hu

Szerkezeti Kémiai Intézet

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

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1130, Fax.: 438-1147
e-mail: szepvol@chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

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

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

A központ tevékenységében lényeges szerepük van a hazai, ill. az európai iparvállalatokat segítő, a versenyképesség fokozását, korszerű termékek és eljárások kidolgozását szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége van a 2004-ben elnyert, „Kémia az életminőség javításáért” c. (GVOP) koordinációs kutatóközponti pályázat feladatai 2006. évi teljesítésének. A kitűzött célok elérését jelentős mértékben segítette az európai programokban való részvétel, illetve az a tény, hogy a központ két intézete európai kiválósági központként működött a biomolekuláris kémiai kutatások és a nanotudományi kutatások területén.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2006. évi tudományos kutatásait a *funkcionális anyagok kémiai kutatása*, előállításuknak, szerkezetüknek és tulajdonságaiknak vizsgálata foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai a következők voltak:

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

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont

Átlaglétszám ¹ :	360	Ebből kutató ² :	208
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			84
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			302
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			301
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	208	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	5
nemzetközi együttműködés keretében:	109	SCI által regisztrált folyóiratban:	207
összesített impakt faktor:	462,754	összes hivatkozás száma ⁴ :	4310
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			3748
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	10
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	40
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	8	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	3
Bejelentett találmányok száma:	4	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	151	poszterek száma:	138
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			52
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	30	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	41
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			1631 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	21
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			42
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			85,7 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			31
NKFP: 10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		146,3 MFt
Egyéb: 21	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		11,2 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			15
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			375,7 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			16
EU forrásból: 10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		87,0 MFt
Egyéb: 6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		12,5 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			7
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			32,2 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			99
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			293,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása az élő szervezetek kémiai folyamatainak, az ezekben szerepet játszó molekuláknak a megismerése, a folyamatok kedvező irányú befolyásolása, illetve a molekulák tervezése és szintézise területén.

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

Az intézet fontos kötelezettségei közé tartozott 2006. évben mind a hazai, mind az európai kutatási pályázatok időszerű feladatainak teljesítése.

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

Nukleotidkémiai és peptidkémiai kutatások

A GVOP által támogatott, hazai konzorciumi együttműködés keretében, módosított uracil-tartalmú oligonukleotidokat szintetizáltak az uracil-DNS endonukleáz (UDE) enzim kötődési tulajdonságainak tanulmányozása céljából. Az említett enzim szubsztrát-specifitásának vizsgálatához egy kettősen jelzett U-tartalmú oligomert (egy hajtű formában stabilis molekuláris jelzőt) is szintetizáltak.

Tekintve, hogy az UDE enzim a teljes átalakulással fejlődő rovarok egy adott fejlődési stádiumában fontos szerepet játszik, ezért megismerése, különböző molekuláris biológiai alkalmazásokon kívül, esetleg lehetővé tenné új típusú rovarirtó szerek kifejlesztését is.

Új, 5-szubsztituált-uracil peptid-nukleinsav (PNS) építőegységek, majd ezek felhasználásával modell PNS-oligomerek előállítását célzó munkájuk során Pd-katalizált keresztkapcsolások alkalmazásával három új 5-alkinil- és hat új 5-aril-uracil-PNS monomert állítottak elő. Megállapították, hogy az 5-aril-uracil-PNS monomerek előállításánál a normál Stille-kapcsolások hozama magasabb, mint az alternatív inverz Stille- vagy Suzuki-kapcsolásoké.

Az 5-aril-, ill. 5-alkinil-uracil bázisokat tartalmazó peptidnukleinsavak, várhatólag erős és szelektív hibridizációs tulajdonságaik folytán, elsősorban analitikai célra, géndiagnosztikai szerekként (pl. PNS-mikrochipekben) alkalmazhatók különféle kórokozók kimutatására. Ezen kívül, antiszensz vagy antigén oligonukleotidokba beépítve elvileg terápiás célra is alkalmasak lehetnek.

A glikopeptidek kulcsszerepet töltenek be a sejtfelismerési folyamatokban. Kisebb molekulatömegű glikopeptidek szintézisére és gyógyszerként történő felhasználásukra számos

sikeres próbálkozás történt. Az O-glikozidos kötést tartalmazó glikopeptidek terápiás célú alkalmazását viszont kémiai és enzimatis instabilitásuk korlátozza. Az anomer pozícióban formilcsoportot tartalmazó C-glikozidok ezért fontos intermedierei lehetnek számos biológiailag hatékony peptidszarmazék szintézisének. A formilcsoport bevitele azonban, a cukormolekula anomer szén atomjára, meglehetősen problematikus. Az irodalomban leírt eljárások hátrányai – drága alapanyagok, a formilcsoport regenerálásával járó többlépéses reakciók, valamint a ózonolízis erős oxidatív körülményei – korlátozzák ezen módszerek használatát. β -Tetrabenzil- és tetraallil-galaktozil- és glükozil-cianidokból komplex alumínium-hidridekkel (DIBAL, Red-Al) végzett redukív hidrolízissel, telített és telítetlen 1-formil C-glikozidokat állítottak elő. A telítetlen formil C-glikálok redukciójával 2-deoxi-cukor aldehidek állíthatók elő, amelyek értékes intermedierek deoxi-cukrokat tartalmazó gyógyszerek szintézisében. A formil-C-galaktopiranozidból Strecker-reakcióval β -aminonitrileket állítottak elő, amelyekből szilárdfázisú peptidszintézissel peptidláncba építhető C-glikoaminosavak nyerhetők. Vízmentes körülmények között aceton-ciánhidrin cianid-donor és királis amin reagenssel (S-1-metil-benzilamin) aszimmetrikus Strecker-reakcióban a királis induktor a várt S-konfigurációjú β -aminonitril termék képződését eredményezte tetrahydrofuranban. Fordított diasztereoselektivitást tapasztaltak diklórmetánban.

Kutatói kapacitás: 5,5 fő, *ebből intézeti állományban:* 5,5 fő. *Becsült intézeti ráfordítás:* 37 M Ft, *ebből pályázati forrás:* 8,7 M Ft

Szintetikus szerves kémiai kutatások

Palládium-katalizált keresztkapcsolásos reakciók vizsgálata során új, piridazinnal kondenzált szarmazékok szintézisét oldották meg. Kimutatták az új szarmazékok antiplazmodiális hatását. Triazinszarmazékok körében neurokémiaileg értékes vegyületeket szintetizáltak, azonosították és meghatározták a szerkezetüket.

Piridingyűrűs ikerionos vegyületek körében új tandem-típusú gyűrűtranszformációt mutattak ki, aminek segítségével korábban nem ismert gyűrűvázak szintézisét oldották meg.

A bifunkcionális, kinin alapú organokatalizátorok alkalmazási körét további Michael-típusú addíciókra is kiterjesztették. Vizsgálták a reakciók mechanizmusát. A reakciók lefutásának leírására új mechanizmust javasoltak.

Fázisjelölési technikát alkalmaztak Lawesson-reagensek feleslegének, illetve maradékának eltávolítása céljából. Így egy régóta fennálló szintetikus problémát sikerült megoldaniuk. A technikát az elmúlt évben továbbfejlesztették, s így a fluoros kémiának egy új változatát sikerült kidolgozniuk.

Kutatói kapacitás: 13 fő, *ebből intézeti állományban:* 12 fő. *Becsült intézeti ráfordítás:* 85 M Ft, *ebből pályázati forrás:* 12 M Ft

Természetes szerves anyagok kutatása

Vinkaminból kiindulva félszintézissel négy lépésben magvalósították a (-)-vinkapusszin előállítását.

A 8-oxo-ergolén sikeres szintézise alapján olyan, a D-gyűrűben öttagú ergolin-szarmazékot készítettek, mely az eddig nem szintetizált egyetlen klavinalkaloid, a cikloklavin előállításának utolsó intermediere. Az utolsó lépésként megvalósítandó ciklopropán-gyűrű

kialakítását modellvegyületeken tanulmányozva, sikeres módszert dolgoztak ki, melynek alapján a cikloklavint kis mennyiségben kimutatták, izolálták, és szerkezetét igazolták.

A lizergsav-származékok epimerizációjának vizsgálata során eddig nem tapasztalt dimerizáció révén keletkező sztereoizomerek szerkezetének és térszerkezetének tisztázását követően (NMR- és krisztallográfiai-módszerek révén) a reakció mechanizmusát is felderítették, részben kémiai úton, részben kvantumkémiai számítások segítségével.

Új, glükózidáz-inhibitor hatású polihidroxi-piperidinek és -pirrolidinek enantioszelektív szintézisét továbbfejlesztve, egy francia kutatóhellyel kooperálva, további 12 származékot állítottak elő enantioszelektív úton.

Az alkaloidok enantioszelektív szintézisében az optikailag aktív pipekolsav és származékai fontos intermediereként szerepelnek. Mind magának a pipekolsavnak, észterének, Weinreb-amidjának, mind pedig 4-acetoxi- és 4-hidroxi-származékainak gazdaságos és enantioszelektív előállítását megvalósították. Az epiquinamide nevű, békabőröböl izolált kinolizidin-vázis alkaloid totálszintézisét racém formában befejezték, s megkezdték a pipekolsav enantiomer származékainak felhasználásával az optikailag aktív alkaloid szintézisét.

Kutatói kapacitás: 5,5 fő, ebből intézeti állományban: 5,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 37 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft

Molekulárfarmakológiai kutatások

Meghatározták egy korszerű, leukémia elleni gyógyszer, az Imatinib (Novartis Pharma) szelektív kötődését humán alfa₁-savas glikoprotein (AGP) genetikai variánsain. Megállapították, hogy az F1S-variánsnak domináns szerepe van a gyógyszer specifikus kötődésében. Tanulmányozták a lehetséges kötődési gyógyszer-interakciókat.

CD/UV-Vis spektroszkópiás vizsgálatokkal részletesen feltárták a tojásfehérjében található, az emberi szérum AGP-vel homológ fehérje ligandumkötő sajátságait. Megállapították, hogy a két fehérje specifikus kötőhelye nagyfokú szerkezeti hasonlóságot mutat. Igazolták, hogy anti-prion és anti-amiloid hatású gyógyszerek jellegzetes képviselői savanyú poliszacharidokkal (heparin, kondroitin-szulfát) ionos kölcsönhatások által stabilizált nem-kovalens komplexeket hoznak létre.

Karotin-ciklodextrin vízdoldható komplexeket vizsgáltak kiroptikai módszerekkel. Meghatározták a komplexek aggregációs hajlamát, in vitro tesztben jellemezték a komplexek antioxidáns tulajdonságát. HPLC-s analitikai módszert állítottak be a komplex vizsgálatára.

Kutatói kapacitás: 5,6 fő, ebből intézeti állományban: 5,1 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 30 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,2 M Ft

Neurokémiai kutatások

Azonosítottak egy glutaminsav által közvetlenül kiváltott, GABA-felszabadulással járó folyamatot, és modellt dolgoztak ki a mechanizmus magyarázatára. A modell az alapkutatót tekintve jelentős előrelépést ér el: közvetlen kapcsolatot teremt a serkentő és gátló agyi folyamatok között. Ugyanakkor az alkalmazott kutatásban is új stratégiát nyújt a fokozott glutaminsav-aktivitással járó agyi rendellenességek (pl. epilepszia, ischemia) gyógyszeres kezelésében.

A gamma-hidroxi vajsav (GHB) hatásmechanizmusát vizsgálták a függőség kialakulásáért felelős agyterületből, a nucleus accumbensből készített szövetszeleteken. Kimutatták, hogy GHB hatására az asztroglia sejtekben kalciumionok szabadulnak fel az intracelluláris kalciumion raktárakból, és az asztroglia sejtek nem vezikuláris transzporttal glutaminsavat adnak le. Kísérleteik rámutatnak a gliasejtek szerepére a függőség kialakulásában, és ezzel új terápiás lehetőségek kidolgozásához szolgáltatnak fontos háttérinformációt.

Célfehérje szerkezeten alapuló protokollt dolgoztak ki vegyületek kötődési kölcsönhatásának *in silico* szkrínelésére. Molekulamechanikai és molekuladinamikai számítási módszerek kombinált alkalmazásával modellezték két célfehérje-bakteriális Glu-transzporter és metabotróp glutaminsav-receptor kötődőmén farmakofóráját. Kezdeményezésük nagyhatékonyságú, neuroprotektív hatású molekulák tervezésében nyújt segítséget.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 58 M Ft, ebből pályázati forrás: 6 M Ft

Farmakobiokémiai kutatások

Szendvics konfigurációban tartott humán és patkány primer májsejtekben vizsgálták endogén vegyületek és xenobiotikumok metabolizmusát és transzportját. Eredményeik igazolják, hogy az *in vitro* körülmények között is a képződő metabolitok a kanalikuláris Mrp2 és a szinuszoidális Mrp3 transzportereken keresztül eliminálódnak, hasonlóan, mint *in vivo* körülmények között. Ez az eredmény igazolja, hogy a transzporterek *in vitro* körülmények között is specifikusan transzlokálódnak a májsejtek membránfelszíneire, és ez a modell alkalmas a transzporterek szabályozásának - gátlásának, aktiválásának - *in vitro* modellezésére. A csoport kutatói által kidolgozott módszer alkalmas arra, hogy a gyógyszerfejlesztések során vizsgálendő potenciális interakciókat előre jelezze. Hozzájárul a transzport folyamatokat érintő toxikus interakciók mechanizmusának felderítéséhez is.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 4,5 M Ft

A Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával kialakított együttműködés keretében vizsgálják a transzplantációra kerülő (donor) máj gyógyszerlebontó (méregtelenítő) képességét. A diagnosztikai rendszer a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő CYP-enzimek aktivitásának és gén-expressziójának meghatározásán (fenotipizálás) alapul. Ezzel lehetőség van arra, hogy vérből történő mérésekkel következtessenek a máj aktuális gyógyszermetabolizáló képességére, valamint arra, hogy előre jelezzék a donor máj esetleges csökkent gyógyszermetabolizáló képességét, ami befolyásolhatja a beteg gyógyszeres kezelését, csökkentve a felesleges gyógyszeres terhelést.

Érzékeny, kvalitatív és kvantitatív LC-MS/MS módszert dolgoztak ki a transzplantált betegeknek immunszuppresszánsként alkalmazott cyclosporin-A(CSA)-nak és metabolitjainak vérből történő meghatározására, ami a klinikai gyakorlatban rutinszerűen alkalmazott mérési technikákat kiegészítve, segít különbséget tenni az alacsony CSA-szint okozta szervkölődés, valamint a magas CSA- és CSA-metabolit szint okozta toxicitás között.

Megállapították, hogy emberben a dehidroepiandrosteron a PXR (pregnán X receptor) és CAR (konstitutív androsztán receptor) nukleáris receptorok aktiválásán keresztül indukálja a CYP2B6, CYP2C9, CYP2C19 és CYP3A4 enzimeket.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 38 M Ft, ebből pályázati forrás: 15 M Ft

Szenzibilizátorok fotodinamikai kutatása

Újonnan szintetizált szenzibilizátorok fotodinamikus hatását vizsgálták sejtenyészetben a daganatos betegségek terápiájában használható gyógyszer(ek) kifejlesztése céljából.

Az edzésnek és a sportolóknál használatos étrend-kiegészítőknek a hatását meghatározták egyes redox paraméterekre és idegrendszeri funkciókra állatmodellekben, hogy megállapítsák azok kihatását a szervezet általános állapotára, különös tekintettel az emlékezőképességre.

Vizsgálták az ellés körülményeinek hatását borjúk és az anyaállatok redox és antioxidáns paramétereire szarvasmarhánál. Megállapították, hogy ezeknek a paramétereknek az újszülöttek egészségi állapota és életben maradása szempontjából meghatározó jelentőségük van.

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

Szénhidrátkémiai kutatások

Eljárást dolgoztak ki a klinikai kipróbálás alatt álló Dermavir, terápiás AIDS-vakcina szénhidrát-egységének szintézisére. Ugyancsak eljárást dolgoztak ki a Dermavir-vakcina szénhidráttal módosított polimer komponensének gyártására. Az említettek révén megteremtették a Dermavir-vakcina hazai gyártásának előfeltételeit. Az előzőkön túlmenően másodgenerációs vakcinák kifejlesztéséhez új szénhidrát-egységeket szintetizáltak.

A glikózaminoglikán oligoszacharidok kutatásának területén, szintetizálták a heparán-szulfátnak a prionok kötődésért felelős tetraszacharid egységét. Glikózaminoglikán oligoszacharidok több aza-cukortartalmú analógját is előállították biológiai vizsgálatok céljára.

Kutatói kapacitás: 5 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, ebből pályázati forrás: 15 M Ft

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

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

Az oktatómunkában való intenzív részvételüket mutatja, hogy az Intézet 8 kutatója rendszeresen végez oktatási tevékenységet az ELTE-n, ill. a Semmelweis Egyetemen.

Az MTA SZBK Enzimológiai Intézettel, az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoporttal és a MolCat Tudományos Kutató és Fejlesztő Bt-vel együttműködve, kimutatták és jellemezték az uracil-DNS-endonukleáz enzimet. Meghatározták a stabilitását *Drosophila* sejtextraktumokban a fejlődés különböző stádiumaiban.

A „Növényvédőszeres kölcsönhatása humán efflux transzporterfehérjékkel” c. témában a szegedi Solvo Biotechnology partnerintézménnyel együttműködve, megállapították, hogy a

klóracetanilid herbicidek szerkezetüktől függően aktiválják az MDR1 ATPase aktivitást. Az MRP1 csak glutation jelenlétében mutatott kölcsönhatást klóracetanilid herbicid metabolitokkal.

Igen eredményes kutatási együttműködések alakítottak ki a Szegedi Tudományegyetem, Mikrobiológiai Tanszékével multidrog-rezisztencia gátlásának vizsgálatára, valamint a Semmelweis Egyetem Orvosi-vegytani Tanszékével kondenzált piridazin-származékok előállítása céljából. Az eredményeket közös publikációkban foglalták össze.

A Semmelweis Egyetemen igen gyümölcsöző kapcsolatokat hoztak létre több területen is. Így pl. a közös kutatások során megállapították, hogy a gamma-hidroxi-vajsav specifikusan kötődik a *nucleus accumbens*, valamint a *globus pallidus* agymintákból izolált szinaptikus membránfrakcióban. Meghatározták, hogy az edzés, valamint a sportolóknál használatos étrendkiegészítők mely redox paraméterekre és idegrendszeri funkciókra (főleg az emlékezőképességre) vannak hatással állatmodellekben. Ezekről az eredményekről 2006-ban két közös publikációt jelentettek meg.

A Pécsi Orvostudományi Egyetem karotinoidkémiai munkacsoportjával folytatott együttműködés két közös publikációt eredményezett az év folyamán a szemisztintetikum karotinoidok szerkezetvizsgálatáról. A Richter NyRt-vel végzett közös munkáról is közös publikációkban számoltak be.

A Szent István Egyetem kutatóival idegi szubcelluláris frakciók elektronmikroszkópiáját tanulmányozták. Az együttműködés eredményeként azonosították a patkányagykéregből izolált mitokondrium frakciót.

Ugyancsak ennek az egyetemnek az Állatorvosi Karával együttműködve, meghatározták a születés folyamán és a röviddel utána változó redox és antioxidáns paramétereket szarvasmarhánál, ami az újszülöttek egészségi állapota és életben maradása szempontjából meghatározó jelentőségű.

Az intézet kutatói szervezték meg a budapesti 16. International Symposium on Microsomes and Drug Oxidations (MDO 2006) konferenciát. A rendezvényen 22 országból 391 tudományos kutató vett részt. Részt vettek a 13th FEChem Konferencia, 2006. Sopron megszervezésében is.

A hazai egyetemekkel folytatott kutatások eredményességét a 9, 2006-ban közösen megjelentetett publikáció fémjelzi.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet nemzetközi együttműködései igen jelentősek mind a tudományos, mind az ipari kapcsolatokat illetően.

A „Várhatóan multidrog rezisztenciát gátló benzotiazolok” c. témában (együttműködő partner: University of Ankara, Törökország) új tiazollal kondenzált gyűrűvázakat szintetizáltak.

Új palládium-katalizált kapcsolással egybekötött gyűrűzárást dolgoztak ki a University of Antwerpen (Belgium) kutatóival.

Az Oakland University, USA kutatóival közösen fluoros Lawesson-reagenseket fejlesztettek ki.

Enzimes reakciók alkalmazását kezdték meg nitrogén-heterociklusok átalakítására a University of Vienna (Austria) biokémiai kutatócsoportjával.

Az „Új glükózidáz inhibitor hatású polihidroxi heterociklusok szintézise és biológiai vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerek: École Polytech. Fed. Lausanne, Lab. Glycochim. et Asymm., BCH, Lausanne, Svájc; Université de Paris V. Lab. De Pharmacognose, Franciaország) új szintézismódszert dolgoztak ki, s 22 új mintát állítottak elő. A minták biológiai vizsgálatát a svájci intézetben végzik.

Japán kutatókkal folytatott tudományos együttműködés keretében (Faculty of Pharmaceutical Sciences, Mukogawa Women's University, Nishinomiya) egy állati eredetű lipokalin, a tojásfehérje alfa₁-savanyú glikoproteinje ligandumkötő sajátosságait vizsgálták CD/UV-Vis spektroszkópiával. A munka eredményeit közösen publikálták.

Az 5-HT_{3A} receptormodell tanulmányozását az University of Alaska, Fairbanks (USA) kutatóival közösen folytatják. 2006-ban egy közös publikáció született az eredményekről.

Az University of Turku (Finnország) biokémiai kutatócsoportjával folytatott kutatások, amelynek témája [³H]EBOB kötődésének alloszterikus modulálása GABA_A receptorokon egy közös publikációt eredményezett 2006-ban.

Az Institut für Physiologie, Universitätsklinikum Charité (Humboldt-Universität, Berlin) kutatóival igen eredményes kapcsolatokat sikerült kialakítaniuk az epileptikus folyamatok mechanizmusának feltárásban. Az eredményeket közös publikációban közölték.

Együttműködve a Lengyel Tudományos Akadémia Institute of Pharmacology, Kraków kutatócsoportjával, egy közös publikációt jelentettek meg.

Kínai-Magyar Tét-egyezmény keretében 35 új PDT-vegyületet állítottak elő, meghatározták a szerkezetüket, és elvégezték az in vitro teszteléseket.

Magyar-Szlovén Tét-együttműködésük (együttműködő partner: Ljubljana Egyetem) fő célja a koleszterin homeosztázis és a gyógyszermetabolizmus közti kölcsönhatásra vonatkozó ismeretanyag bővítése. Ezen belül: a gyógyszerhatások következtében a koleszterin homeosztázisában fellépő változások meghatározása transzkriptom és szterol-metabolom szinten. Az ugyanazon sejtekből származó, proteomanalízisre szánt minták további vizsgálata az EU PF-6 Steroltalk program keretében történik.

Megbízásos szerződéses együttműködést folytatnak a Hawaii Biotech amerikai gyógyszerkutató céggel egy lutein származék szérumfehérjekötődésének CD/UV-Vis spektroszkópiás vizsgálatára, valamint egy astaxanthin származék és az emberi 5-lipoxigenáz enzim kölcsönhatásának tanulmányozására (CD/UV-Vis spektroszkópiás és molekulamodellelési módszerekkel). Az együttműködés eddigi eredményeit közös publikációban foglalták össze.

Jelentős volumenű szintetikus szerves kémiai szerződéses kutatásokat végeztek az ALTANA Pharma (Konstanz, Németország) és a Sigma-Aldrich (Steinheim, Németország) cégek részére.

Wellcome Grant támogatásával folyó projekt keretében γ -hidroxivajsav agyi szerepét tanulmányozták. A közös munka eredményeként egy publikációt jelentettek meg.

Az intézet nemzetközi együttműködéseinek sikerét jól mutatja, hogy 2006-ban összesen 18 publikációjuk jelent meg ezek eredményeiről.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A hazai K+F együttműködések közül kiemelendők a közös konzorciumi pályázatok (NKTH, Jedlik Ányos pályázat), amelyeket vállalatokkal és egyetemi kutatóhelyekkel (pl. Cyclolab Kft, Pécsi Orvostudományi Egyetem, ELTE Biokémia Tanszék) együtt folytatnak.

A tárgyévben az intézet projekt-tevékenységének legmeghatározóbb eleme a 2005-ben elnyert, „Hatóanyag-tervezés népegészségügyileg kiemelten fontos megbetegedésekben szerepet játszó validált célmolekulák alapján” elnevezésű (MEDICHEM II) NKFP pályázat témáiban végzett kutatás volt. A kilenctagú, ipari partnereket is magába foglaló konzorcium keretében szerves kémiai, biokémiai és orvostudományi kutatások összehangoltan folynak. E hároméves projekt során már eddig is lényeges eredmények születtek érrendszeri, daganatos és idegrendszeri megbetegedések felismerését segítő diagnosztikai eljárások kifejlesztésében. Az új, gyógyhatású molekulák szintézisének tanulmányozása eredményeképpen egy szabadalmi bejelentés is történt.

A „Kémia az életminőség javításáért” c. Koordinációs Kutatóközpont pályázat keretében a kutatási eredmények ipari hasznosításában történtek jelentős lépések, újabb ipari partnereknek a projektbe való bevonása valósult meg.

A „Transporter Explorer” GVOP-projekt keretében bakteriális homológ röntgenszerkezet alapján modellezték a humán gamma-aminovajsav transzporter 1 altípusának háromdimenziós szerkezetét, majd a vegyületet a www.translib.chemres.hu vegyületkönyvtár adatai alapján validálták. Azonosítottak egy L-Glu által közvetlenül kiváltott, GABA-felszabadulással járó folyamatot, és modellt dolgoztak ki a mechanizmus magyarázatára. A modell jelentős tudományos előrelépést jelent: közvetlen kapcsolatot teremt a serkentő és gátló agyi folyamatok között. Ugyanakkor az alkalmazott kutatásban is új stratégiát nyújt a fokozott L-Glu aktivitással járó agyi rendellenességek (pl. epilepszia, ischemia) hatékony gyógyszeres kezelésének megvalósítására.

A „Kardioprotektív nano-formulációk karotinoidok in silico módszerekkel segített molekuláris kapszulázása útján” c. Jedlik Ányos projekt célja, hogy a lipofil karotinoid hatóanyagokat ciklodextrines komplexálás révén vízoldhatóvá tegyék, stabilizálják, aggregációs hajlamukat visszaszorítsák, fokozzák biológiai hozzáférhetőségüket. Ily módon lehetségessé válik egy stabilis, betegbarát, kardioprotektív gyógyszeripari termék előállítása. 2006. év során az intézet kutatói több új módszert dolgoztak ki, melyek közül kiemelkedő jelentőségű a ciklodextrin-karotinoid komplexek antioxidáns aktivitásának mérése vizes közegben, ami lehetővé teszi az összehasonlítást a szabad karotinoid etanolban mérhető antioxidáns hatásával.

Az „Uracil-DNS endonukleáz molekuláris biológiai alkalmazásai” c. GVOP-szerződés keretében jelentős, nukleotidkémiai eredmények születtek. Így az uracil-DNS-endonukleáz (UDE) enzim affinitás-kromatográfiás tisztítására alkalmas ligand kiválasztása céljából a kötődési próbákhoz három olyan, középen uracil-bázist tartalmazó, 13-mer oligonukleotidot szintetizáltak, amelyben az uracil-nukleozid környezetében a cukorrészt, a foszfátrészt, valamint egyidejűleg mindkettőt módosították. Szintetizálták az előbbi oligomerek közös komplementerét is azért, hogy a kötődési próbákat a megfelelő duplexekkel is el lehessen végezni.

A „Steroltalk” EU-program célja olyan új alternatív módszerek kifejlesztése, amelyeknek a segítségével a koleszterinszint-csökkentő gyógyszerjelöltek farmakológiai hatása

megbízhatóbban becsülhető, másrészt az esetleges gyógyszerkölcsonhatások időben jelezhetők. 2006-ban humán májsejteken beállították és validálták a gyógyszerinterakciók mérésére alkalmas módszereket, valamint két kísérletsorozatot végeztek el egy ismert és egy fejlesztés alatt álló koleszterinszint-csökkentővel. Donorokból származó májsejteken a vegyületek hatását transzkripciós, fehérje expresszió és metabolizmus szinteken vizsgálták együttműködésben a konzorciumi partnerekkel.

Az intézet két COST-programban is aktívan részt vesz. Mind a B16 „Reversal of Antibiotic Resistance”, mind a D31 „Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions” projektek „management committee”-jének tagja az Intézet egy-egy vezető kutatója.

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

1. Palkó R, Riedl Zs, Egyed O, Fábián L, Hajós Gy: New facile tandem route to oxo- and thioxo[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyridinium salts, *Journal of Organic Chemistry* 71(20): 7805-7812 (2006)
2. Hamza A, Schubert G, Soós T, Pápai I: Theoretical studies on the bifunctionality of chiral thiourea-based organocatalysts: Competing routes to C-C bond formation, *Journal of the American Chemical Society* 128(40): 13151-13160 (2006)
3. Kaleta Z, Tárkányi G, Gömöry Á, Kálmán F, Nagy T, Soós T: Synthesis and application of a fluorous Lawesson's reagent: Convenient chromatography-free product purification, *Organic Letters* 8(6): 1093-1095 (2006)
4. Lasztóczy B, Emri Zs, Szárics É, Héja L, Simon Á, Nyikos L, Kardos J: Suppression of neuronal network excitability and seizure-like events by 2-methyl-4-oxo-3H-quinazoline-3-acetyl piperidine in juvenile rat hippocampus: Involvement of a metabotropic glutamate receptor, *Neurochemistry International* 49(1): 41-54 (2006)
5. Moldvai I, Gáti T, Szántay CsJr, Szántay Cs: Syntheses of vinca alkaloids and related compounds. 104. A concise synthesis of (-)-vincapusine, *Journal of Organic Chemistry* 71(10): 3768-3772 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlaglétszám ¹ :	72	Ebből kutató ² :	61
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			28
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			53
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			53
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	44	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	18	SCI által regisztrált folyóiratban:	42
összesített impakt faktor:	108,089	összes hivatkozás száma ⁴ :	538
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			468
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	0
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	19	poszterek száma:	38
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	7
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			384,4 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	6
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			6
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		16,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			3
NKFP:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	88,8 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,7 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			2
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		5,9 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			4
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20,8 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,9 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			4
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		2,9 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			36
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		150,3 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a felületkémia és a heterogénkatalízis-kutatás területén, különös tekintettel a határfelületekre, az aszimmetrikus katalízisre, a nanodimenziójú részecskékre és szerkezetekre.

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

Az intézet kiemelkedően fontos tevékenységi területe volt 2006. évben a hazai, illetve az európai kutatási pályázatok aktuális feladatainak teljesítése.

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

Korróziógátló rétegek kutatása

Korrózióvédő és tapadásjavító, kromáthelyettesítő vékonyrétegeket fejlesztettek ki tiszta alumínium felülethez, és megvizsgálták ezen rétegek alkalmazhatóságát az AA 2024 T3 ötvözetben. A munka az INTAS-AIRBUS 04-80-7219 projekt keretében zajlott. Langmuir-Blodgett és önszerveződő molekuláris nanorétegeket alkalmaztak a korrózió és a mikrobák megtapadásának csökkentésére.

A korábban kifejlesztett, nagy hatékonyságú korróziós inhibitorkeverékek hatásmechanizmusát tanulmányozták nagy kloridion koncentrációjú hűtővizekben, a Petroleum Research Center (Tripoli, Líbia) megbízásából. A projekt részeként líbiai kutatók a magyar kutatóhelyen továbbképzésben vettek részt.

Passzívált vasfelületen kialakított foszfonát-védőrétegek Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata alapján megállapították, hogy a vas-foszfonát réteg vastagsága nem kimutatható; aktívabb, párologtatott és ionimplantált Fe^{57} -réteget használva viszont a vas(II)-foszfonát és a vas(III)-foszfonát réteg is kimutatható. Az ELTE Magkémia Tanszékkal együttműködve kimutatták, hogy az ionimplantálás során amorf vas is képződik, aminek az aktivitása lényegesen nagyobb, mint az α -vasé.

Kutatói kapacitás: 10 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 48 M Ft, ebből pályázati forrás: 18 M Ft

Szenzorok és nanokompozitok kutatása

Gyors hűtéssel előállított fém-kerámia nanokompozitokról és porkohászati úton feldolgozott Al-kompozitokról kimutatták, hogy mechanikai tulajdonságaik jobbak, mint a hagyományos

Al-termékeké, és előállításuk a javasolt technológiával megoldható. Az eredmények konzorciumi együttműködések (GVOP/ALUNANO, Jedlik/ALUTITAN) keretében hasznosulnak.

Egy, az egészségre veszélyes gázok kimutatására szolgáló, széles spektrumú, vegyi jelző, laboratóriumi szenzorcsoportot impedanciaspektroszkópiai mérésekkel minősítettek. Meghatározták a szenzorok érzékenységet, az optimális frekvenciákat, vizsgálták a reverzibilitást és a válaszünt.

Kutatói kapacitás: 4,5 fő, ebből intézeti állományban: 4,5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 28 M Ft, ebből pályázati forrás: 13 M Ft

Szén-nanocsövek kutatása

Elméleti kémiai módszerekkel kimutatták, hogy a (2,2), (3,3) és a (4,4) „karosszék” típusú szén nanocsövek jóval aromásabbak, és ezért addíciós reakciókkal kevésbé módosíthatók, mint a nekik megfelelő, azonos számú szenet tartalmazó derékszögű, grafit síkrácsok. E számítások a szokásos kvantumkémiai módszerekkel nem lettek volna elvégezhetőek a vizsgált rendszerek nagy méretei miatt. A számítások alapján érthető, hogy miért állítható elő a szén nanocső, míg kisméretű grafit síkrácsot eddig még nem sikerült izolálni. Az eredmények a nanocsövek funkcionálizálása szempontjából fontosak, mert segítségével ki lehet szűrni azokat a típusokat, amelyek várhatóan nehezebben, ill. könnyen(ebb)en módosíthatók, mint a „karosszék” szén nanocső.

A szén-nanocső/polimer nanokompozit kombinációkat nanoindentációval és AFM-mel vizsgálták. Megállapították, hogy a keménységet növeli a nanocső hozzáadása, de a kopásállóságot rontja. A szén-nanocső kémiai módosításait ugyancsak nemzetközi projekt (PolyCond) keretében végezték, ami a polimerek elektromos vezetőképességének javítására irányul.

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 8 M Ft, ebből pályázati forrás: 7 M Ft

Oxidáz enzimek funkcionális modellezése

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

Kutatói kapacitás: 2 fő, ebből intézeti állományban: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 11 M Ft, ebből pályázati forrás: 2 M Ft

Vékonyrétegek kutatása

Fotoplasztikus vékonyrétegeket, As-S kalkogenid üvegeket vizsgáltak nemzetközi együttműködés keretében és az összetétel függvényében különleges viselkedést találtak.

Kopásálló vékonyrétegek nanoindentációval és AFM-mel történő vizsgálata során megállapították, hogy a többkomponensű nanokompozit-rétegek kemények, de nem lyukmentesek, és tulajdonságaik inhomogének. A munka EU-együtműködés keretében (EXCELL) tovább folytatódik.

Komplex szerkezetű vékonyrétegek vizsgálatára alkalmas spektrális ellipszometert helyeztek üzembe. Az *in situ* elektrokémiai mérőegyes felépítése jelenleg folyik.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 23 M Ft, ebből pályázati forrás: 19 M Ft

Heterogénkatalitikus kutatások

2006. évben további vizsgálatokat végeztek a CO alacsony hőmérsékletű oxidációjában mind hidrogén jelenlétében (PROX reakció), mind hidrogén jelenléte nélkül. A PROX reakcióra hét komponensből (A, Pb, V, Y, La, Ce, Sm) álló katalizátor-könyvtárat terveztek. Összesen hat generációt vizsgálva jelentősen növelték a katalizátor aktivitását és szelektivitását. Kimutatták, hogy az eltérő előkezelési módszerek jelentős mértékben megváltoztatják az optimális katalizátorösszetételt. A héliumos előkezelés jelentős mértékben csökkentette az arany-, de növelte a vanádiumtartalmat. A katalizátorok fő komponensei az alábbiak: Au, Pb, Sm és V.

Kimutatták, hogy az Au/MgO, Au/Al₂O₃ és Au/SiO₂ katalizátorok redox jellegű fémoxidokkal való módosítása során a katalitikus aktivitás tovább növelhető, kimutatták a Mn, Fe, Co és Sn aktivitásnövelő hatását. A katalizátorok előkezelése során végbemenő változásokat *in situ* FTIR- és TEM-mérésekkel követték.

Folytatták a piroszölösav-etilészter heterogénkatalitikus aszimmetrikus hidrogénezésének tanulmányozását. Új, platintartalmú heterogén katalizátorokat vizsgáltak. A vizsgálatokban a fő hangsúlyt a reakciókinetikai összefüggések feltárására helyezték. Ezen túlmenően kinetikai és spektroszkópiai vizsgálatokat, valamint kvantumkémiai számításokat végeztek a cinkonidin-dimer képződésére vonatkozóan.

Nemzetközi együttműködés keretében folytatták a metán alacsony hőmérsékletű oxidációjában kombinatorikus úton tervezett, többkomponensű Au-Pt-Pd/CeO₂ katalizátorok XPS-módszerrel történő jellemzését. Ezen méréseket kiegészítették a PROX reakcióra kifejlesztett többfémű Au-Pb-V-Sm/MgO katalizátorok vizsgálatával.

Vizsgálatokat végeztek folyadékfázisban krotonaldehid krotilalkohollá történő szelektív hidrogénezésére. Különböző katalizátormérgek szelektivitást növelő hatását vizsgálták.

Nemzetközi együttműködésben vizsgálták a Pt/C katalizátorok germánium tetra-alkilekkel történő módosítását. A módosított katalizátorokat szénhidrogének átalakulásaiban, illetve szelektív hidrogénezési reakcióban tesztelték.

Kutatói kapacitás: 9 fő, ebből intézeti állományban: 9 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 80 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft

Mikro és mezopórusos anyagok kutatása

Kidolgozták a 2005-ben kifejlesztett új, szelektív alkánizomerizációs zeolitkatalizátorok (Ni-MCM-22, Ni-beta) ipari reaktorokban alkalmazható szilárdságú katalizátortestekké formázásának technológiáját. Az aktív katalizátort kötőanyaggal homogenizálták, extrudálták, majd hőkezelték. Meghatározták azokat az összetételeket és formázási műveleteket, melyek

alkalmazása mellett a leginkább megőrizhető volt az aktív komponens aktivitása és hidroizomerizációs szelektivitása. A formázott katalizátorokkal a kutatás-fejlesztésben együttműködő partner, a SZIKKTI Kft., a Mol Rt. paraffinmentesítő GOKIII üzeme katalizátortöltetének cseréjére kiírt versenytárgyaláson kíván indulni 2007-ben.

Katalizátort fejlesztettek ki illékony szerves vegyületek és/vagy ammónia emissziójának oxidatív katalitikus ártalmatlanítására. A fejlesztés eredményeire alapozva megépítették egy, a munka és környezetvédelmi követelményeket kielégítő fogtechnikai laboratóriumi kemence prototípusát. A kutatás-fejlesztésben partner Kalória Kft a kemence piaci bevezetésén dolgozik.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 23 M Ft, ebből pályázati forrás: 23 M Ft.

Nanoszerkezetű fémkatalizátorok kutatása

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

Titán-dioxidon, kvarcüvegen és kalcium-fluoridon lejátszódó aminosav-adszorpciók összehasonlítása során megállapították, hogy míg a TiO_2 -on a savas oldalláncú aminosavak jól kötődő monoréteg formájában adszorbeálódnak, SiO_2 -on gyakorlatilag nincs adszorpció, CaF_2 -on pedig az adszorbeátumok kisméretű kristályokat képeznek. A megfigyelés feltehetően kapcsolatba hozható a TiO_2 biokompatibilis viselkedésével. Megállapították, hogy a TiO_2 -on kialakult adszorbeált réteg megváltoztatja a felület elektromos tulajdonságait, amennyiben az izoelektromos pontot eltolja.

Amorf SiO_2 hordozóra és kvarcprizmára párologtatott arany vékonyrétegen kéntartalmú szerves molekulák (oktadekántiol, dodekántiol, cisztein, tiofén, 2-tiofén-acetonitril, glutation) adszorpcióját vizsgálták SFS- és röntgenfotoelektron-spektroszkópia (XPS) segítségével. Hosszú szénláncú tiolok esetében az SFS-mérések alapján rendezett, homogén réteg kialakulása állapítható meg, míg a többi molekula esetében csak az XPS-spektrumok adtak információt az adszorpcióról.

SiO_2 -hordozón kialakított Au- TiO_2 -határfelületen történő PDDA (polidialildimetil-ammóniumklorid)-adszorpció modellezésére kvarcprizma/víz és kvarcprizma/vizes PDDA-oldat határfelületeken végeztek SFS-méréseket teljes belső visszaverődési geometriában. Megállapították, hogy a negatív felületi töltéssel rendelkező kvarc a különböző pH-jú oldatokban a vízmolekulákat eltérő módon orientálja. További kísérleteikkel a PDDA-adszorpciójának további részleteit (kvarc felület áttöltődése, adszorpció réteg kialakulása) fogják vizsgálni.

Koleszterinmolekulák elhelyezkedését, rendezettségét és orientációját vizsgálták különböző összetételű lipid (zsírsav és foszfolipid) monorétegekben SFS-módszerrel. Az eredményekből arra következtettek, hogy a réteg összenomásával először a lipidmolekulák alkilláncjai rendeződnek, majd ezt követi a koleszterinmolekulák rendeződése. Nagy valószínűséggel tehát a lipidmolekulák alkilláncjai közötti hidrofób kölcsönhatások erősebbek az ezen alkilláncok és a koleszterinmolekulák közötti kölcsönhatásoknál.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 6,8 M Ft.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az intézetnek széles körű hazai együttműködései vannak. Ezekben egyetemi, valamint MTA-kutatóhelyi csoportok, továbbá vállalati partnerek vesznek részt.

Igen intenzív oktatómunkát folytatnak, elsősorban a BME-n, de részt vesznek az ELTE és a Pannon Egyetem Ph.D. iskolája oktatási feladatainak teljesítésében is. Összesen: 8 kutató vesz részt az oktatómunkában.

Kutatási együttműködéseik jelentősek, pl. a BME Fizikai Kémia Tanszékével, amellyel „Speciális tulajdonságokkal rendelkező nanostrukturált vékonyrétegek előállítására nedves kolloidkémiai eljárásokkal” c. közös OTKA-kutatási témában dolgoznak együtt.

Az ELTE Magkémiai Tanszékével a „Foszfónát védőrétegek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában született eredményeiket két folyóiratcikkben foglalták össze.

Eredményesen működnek együtt az ELTE Nukleáris Módszerek és Szerkezeti Kémiai MTA Kutatócsoportjával a "Hordozós Sn-Pt katalizátorok Mössbauer spektroszkópiai vizsgálata" c. témában, valamint a Pannon Egyetemmel a szilárd NMR-vizsgálatok területén.

Az ELTE Kolloidkémiai Tanszékkel együttműködve, polimerek és tenzidek határfelületi szerkezetének vizsgálatáról egy közös publikációban számoltak be.

Az egyetemi kutatókkal közösen 2006-ban 6 közleményt publikáltak.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek hagyományosan széles körű és eredményes nemzetközi tudományos kapcsolatai vannak. A kapcsolatoknak Tét-egytműködési, ill. kétoldalú, akadémiák közötti szerződések adnak keretet.

MTA-szlovén akadémiai, kétoldalú együttműködésben (partnerintézmény: National Institute of Chemistry, Ljubljana, Szlovénia) geometriai adatokat szerkesztettek királis szén nanocsövek elektronszerkezetének kvantumkémiai számításához.

Nanocsövek kémiai tulajdonságait modellezték az MTA-Horvát Tudományos Akadémia közötti együttműködés keretében (egytműködő partner: Institute Rudjer Bošković, Zágráb, Horvátország). Az eredményeket két közös publikációban jelentették meg.

„A nanocsövek kémiai tulajdonságainak modellezése” c. témában, az MTA-Román Tudományos Akadémia közötti együttműködés keretében közös előadásokat tartottak nemzetközi konferenciákon.

„A korrózió mikroelektrokémiai vizsgálata” c. témában potenciális inhibitorokat vizsgáltak a University La Laguna, Tenerife kutatóhellyel magyar-spanyol Tét-egyezmény keretében.

„A réz új korróziós inhibitorai – Csökkenthető a környezeti kockázat?” c. témában, magyar-horvát Tét-egyezmény alapján új korróziós inhibitorokat fejlesztettek ki. Az eredményekről négy közös publikációt jelentettek meg.

„A különböző fémek mikrobiológiai korróziója – a folyamat gátlása és gazdasági szempontok” c. magyar-portugál Tét-szerződés keretében a University of Lisbon kutatóival a

mikrobiológiai korrózió gátlására alkalmas új, gazdaságilag is versenyképes inhibitorokat fejlesztettek ki. Az eredményeket két közös publikáció foglalja össze.

Az „Új, heterogén katalizátorok kifejlesztése finomkémiai reakciókhoz” c. témában argentin-magyar Tét-egyezmény keretében (együttműködő partner: CINDECA, La Plata) nagy áteresztőképességű reaktorrendszerben vizsgálták az acetofenon hidrogénezését folyadék-fázisban mind Pt/SiO₂, mind ónnal módosított katalizátorokon.

Az MTA-CSIC együttműködésben (együttműködő partner: Instituto de Catalysis y Petroleoquímica, SCIC, Madrid) "Hordozós aranykatalizátorok előállítása és vizsgálata oxidációs reakciókban" c. témában elvégzett XPS-vizsgálatok lehetőséget adtak az Intézetben előállított katalizátorok szerkezetének felderítésére. A magyar fél kiterjedt vizsgálatokat végzett a spanyol fél által előállított hordozós aranykatalizátorokon szénmonoxid oxidációjában. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

Az Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), Santa Fe kutatóival folytatott, "Nanostrukturált kétfémes hordozós katalizátorok előállítása és vizsgálata" c. téma legújabb eredményeit közös publikációban foglalták össze.

A líbiai Petroleum Research Center, Tripoli kutatóival a "Kombinatorikus módszerek alkalmazása katalizátorok tervezésére" és a "Szénhidrogén frakciók oxidatív kénmentesítése" c. témákban dolgoznak együtt. 2006-ban egy közös publikációt jelentettek meg.

Az „Új zeolit és zeolit-szerű anyagok előállítása és szilárd-fázisú módosítása” c. témában, MTA-kétoldalú egyezményes keretben az együttműködő partnerintézménnyel (Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia) a kutatások eredményeiről közös publikációban számoltak be.

A „Membránreaktorokban alkalmazható, módosított zeolitmembránok előállítása és jellemzése” c. magyar-görög Tét-egyezményes témában (együttműködő partnerintézmény: Foundation for Research and Technology Hellas, Institute of Chemical Engineering and High Temperature Chemical Processes, Patra) több kölcsönös tanulmányutat tettek, előadásokat tartottak. A közös eredményekről egy publikációt állítottak össze.

Argentin-magyar Tét-egyezmény (együttműködő partnerintézmény: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe) keretében az „Indium szerkezetek jellemzése indium és indium-palládium zeolitokban” c. témában több szemináriumi előadás tartottak, és egyeztették a közös munkatervet.

A University of Michigan, Ann Arbor (USA) kutatóival közösen részletes modellszámításokkal elemezték az SFS-módszer révén nyerhető orientációs információ jellegét, és megmutatták, milyen lineáris és nemlineáris optikai módszerek kombinált használatával válik lehetővé a határfelületi adszorbeátumok orientációeloszlásának eddiginél pontosabb megadása. Az erről szóló publikációt közlésre benyújtották. Megállapították, hogy a töltött felületen adszorbeálódott Faktor XII elnevezésű fehérje molekulái speciális rendeződést mutatnak, ami egyben aktiválja is őket.

A széles körű nemzetközi kutatási együttműködések eredményeként 2006-ban 10 közös publikációt jelentettek meg.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

GVOP-projekt keretében „A katalitikus technológiák környezetterhelésének csökkentése új, hordozós nikkelkatalizátorok kifejlesztésével” c. témában új, szelektív alkán-hidroizomerizációs katalizátorokat dolgoztak ki az együttműködő partnerintézményekkel (SZIKKTI Szilikát és Kerámia Anyagkutató és Fejlesztő Kft., Budapest; Kalória Hőtechnikai Kft.). Az eredményekről közös publikációt is megjelentettek.

Ugyancsak GVOP-projektben „Új, szennyvíz- és iszapkezelésre alkalmas adalékanyag előállítás a rudabányai vasérc-dúsító meddőjének kémiai feldolgozásával” c. témában eljárást fejlesztettek ki flokkulálószerként alkalmazható vas(III)-klorid oldat gyártására az együttműködő partnerekkel (Multiprojekt Fejlesztő, Vállalkozó, Kivitelező Kft., Budaörs; Jelen és Jövő Kft, Szeged).

Az intézet a HUNN Sixth Framework Programme-Hungarian Network of Excellent Centers on Nanosciences c. projekt koordinátora. A projektben 13 intézmény vesz részt, ebből 7 magyar (MTA KK, BME, ELTE, Miskolci Egyetem, Debreceni Egyetem, Szegedi Tudományegyetem, BAYATI) és 6 külföldi intézmény (SciTech Link Svédország; Tel Aviv University, Izrael; NMRC, Cork, Írország; Lund University, Svédország; Atomic Energy Commission Grenoble, Franciaország, és University of Newcastle, Nagy-Britannia). A projekt célja egy virtuális magyar nanotudományi központ létrehozása, amelynek a feladata a Magyarországon nanokutatással foglalkozó intézmények hálózatának, kölcsönös információcseréjének kialakítása, adatbázisok létrehozása, kutatócserék elősegítése, közös oktatási anyagok kialakítása és a magyar részvétel elősegítése a keretprogramban. Fontos feladatuk volt a kutatóintézetek és a nanotechnológiával foglalkozó vállalati szakemberek munkájának összehangolása, ami pl. az ún. „Technological Transfer Day” keretében történt. Nagy hangsúlyt helyeztek a hazai kis- és középvállalatok bevonására. Az oktatási program keretében a svéd projektmenedzser mind az FP6-os, mind az FP7-es programirásról egy-egy napos iskolát tartott.

A CHEXTAN - Chiral expression and transfer at the nanoscale (Marie Curie-program) és az EXCELL - Network of excellence - to overcome the fragmentation of European research in multifunctional thin films (Network of Excellence) programok lehetőséget adtak, elsősorban fiatal kutatók részére, hosszabb ideig tartó tanulmányutak megvalósítására.

A POLYCOND-Creating competitive edge for European polymer processing industry driving new added value products with polymer (Integral Project) c. projektben 20 intézmény vesz részt.

Az intézet fő feladata a nanocsövek felületmódosítása volt. Sok szintetikus munkát végeztek, aminek során a kísérletek nagyításának megoldása jelentette a legnagyobb nehézséget.

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

1. Pilbáth A, Felhősi I, Tolnai Gy, Kálmán E: Application of self-assembly for replacing chromate in corrosion protection of zinc, Journal of Solid State Electrochemistry 10(9): 721-729 (2006)

2. Lónyi F, Kovács A, Valyon J: Hexane isomerization and cracking activity and intrinsic acidity of H-zeolites and sulfated zirconia-titania, Journal of Physical Chemistry B 110(4): 1711-1721 (2006)
3. Keszthelyi T, Pászti Z, Rigó T, Hakkel O, Telegdi J, Gucci L: Investigation of solid surfaces modified by Langmuir-Blodgett monolayers using sum-frequency vibrational spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy, Journal of Physical Chemistry B 110: 8701-8714 (2006)
4. Margitfalvi JL, Tálás E, Tfirst E: Enantioselective hydrogenation of ethyl pyruvate over cinchonidine-Pt/Al₂O₃ catalyst. A reaction kinetic approach, Topics in Catalysis 39(1-2): 77-87 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Felületkémiai és Katalízis Intézet

Átlagléttség ¹ :	51	Ebből kutató ² :	38
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			12
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			38
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			38
<i>Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban:</i>	27	<i>idegen nyelvű hazai folyóiratban:</i>	0
<i>nemzetközi együttműködés keretében:</i>	10	<i>SCI által regisztrált folyóiratban:</i>	24
összesített impakt faktor:	47,695	összes hivatkozás száma ⁴ :	454
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			395
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	2 jegyzet: 0
<i>idegen nyelven</i> könyv:	0	könyvfejezet:	6 jegyzet: 0
Megvédett PhD értekezés:	0	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	2	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből külföldön:</i>	0	<i>ebből külföldön:</i>	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	41	posztterek száma:	20
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	12
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			261,8 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	6
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			11
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			15,8 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			12
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18,4 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2,7 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			78,9 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			6
EU forrásból:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	45,6 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,8 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			2
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			9,9 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			8
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			42,1 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

Kémiai Kutatóközpont
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a molekulák és a szupramolekuláris szerkezetek sajátságainak különböző spektroszkópiai és diffrakciós mérési módszerekkel, továbbá elméleti kémiai vizsgálatokkal történő feltárására.

Az intézet feladatai közé tartoztak még a következők: részvétel az egyetemi oktatásban és a posztgraduális képzésben, szakmai tanácsadás, valamint gyakorlati célú kutatási-fejlesztési feladatok elvégzése. Jelentős hányadot képviselt továbbá a hazai, valamint a különböző európai projektekhez kapcsolódó, kémiai szerkezetkutatási feladatokban való részvétel is.

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

Molekulaspektroszkópiai kutatások

Az új, multidetektoros, infravörös mikroszkóp üzembehelyezését követően, folytatták az FTIR- és Raman-spektroszkópia, valamint -mikroszkópia orvos-biológiai alkalmazásainak kutatását, különös tekintettel a prevencióban nagy érdeklődésre számító, saját kezdeményezésű orvosi diagnosztikai alkalmazásokra. Az Országos Onkológiai Intézettel együttműködve emlőrákos betegek vizsgálatára sikeresen adaptálták a módszerüket. Az eljárás és a berendezés szabadalmaztatása most van folyamatban.

A rezgési átmenetmomentum-irányok kísérleti spektroszkópiai és elméleti számításokkal történő meghatározására a korábban (bolgár és finn együttműködéssel) kifejlesztett módszert sikeresen alkalmazták orientált molekulák polarizált IR-spektrumainak értelmezésében.

Elkezdték az SBA-15 és KIT-6 mezoporózus anyag hordozós nikkelfoszfid-katalizátorok katalitikus aktivitásának vizsgálatát a hidrogénező finomítási eljárásban. A katalizátort a szénmonoxid próbamolekula ad- és deszorpciójának *in situ* FTIR-spektroszkópiai vizsgálatával és az ammónia hőmérséklet-programozott deszorpciójával (TPD-vel) jellemezték.

Kutatói kapacitás: 7 fő, ebből intézeti állományban: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 42 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,7 M Ft

Fotokémiai kutatások

Folytatták az Országos Gyógyintézeti Központ Fül-orr-gége Osztályán az 5-amino-levulénsav alapú fotodinamiás terápia bevezetésének klinikai próbáit, amihez az Intézet munkatársai fejlesztették ki, és az intézeti műhely állította elő a szükséges műszeres háttérrel (fényforrás, száloptikai eszközök és fényintenzitás-mérő eszközök). A fotodinamiás terápiát sikeresen alkalmazták 10-12 új páciens esetében.

A MEDICHEM II. program keretében meghatározták polifluor-porfírinek fotofizikai paramétereit, a fotodinamias terápiában történő használhatóság megítélése érdekében. Az indolinszármazékok fotofizikai paramétereinek vizsgálatával megállapították, hogy a cianid-szubsztituens keresztlül képződő hidrogénhidas komplexek a felelősek az észlelt gyors dezaktiválódásért.

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

ESR-spektroszkópai vizsgálatok

Nanocsövekbe ágyazott mágneses fullerének dinamikai tulajdonságait vizsgálták ESR-spektroszkópiával. Az ESR-spektrumok szimulációjával a nanocsövek által korlátozott mozgások anizotrópiájára következtettek.

Citotoxikus szabad gyökök cigarettafüstben való kimutatására dolgoztak ki új spincspadázási eljárást. A ciklodextrénes asszociáció és a spincspadázás kombinálásával megnövelt hatékonyságú módszert hoztak létre reaktív oxigén specieszek vizsgálatára.

Kutatói kapacitás: 3 fő, *ebből intézeti állományban:* 3 fő. *Becsült intézeti ráfordítás:* 18 M Ft, *ebből pályázati forrás:* 18 M Ft

NMR-spektroszkópai vizsgálatok

Az új, nagyterű (600 MHz) NMR-mérőműszer beüzemelését követően, megkezdődtek a szilárd- és folyadékfázisú hármasrezonancia NMR-mérések. Meghatározták néhány, proteolitikus enzimeknek ellenálló D-aminosav szubsztituált *mucin-2* fehérje építóp (TPTPTGTQTPT) szerkezetét NMR-módszerekkel. A konformációanalízis eredménye összhangban áll a peptidszármazékok *mucin-2* fehérje specifikus ellenanyagkötő sajátságaiival, és megerősíti a hármas pozícióban levő treonin kulcsfontosságát az építóp-ellenanyag kölcsönhatásban. Patkányagyból izolált cerebrotortikális membránszuspenzió végzett NMR-vizsgálatok segítségével sikerült direkt szerkezeti bizonyítékot szerezni arra vonatkozólag, hogy a ^{13}C , ^{15}N -jelzett Glu intracelluláris folyamatok révén GABA-vá alakul, ami ezt követően kijut a sejtből.

Szilárd- és oldatfázisú ^{31}P -NMR mérések segítségével kétfémes komplexekben vizsgálták az Au-Au aurofil kölcsönhatás dinamikáját és energetikáját. Diffúziós NMR-módszereket alkalmaztak királis dialkil-ón(IV) komplexek hidrolízisének vizsgálatában.

Kutatói kapacitás: 8 fő, *ebből intézeti állományban:* 8 fő. *Becsült intézeti ráfordítás:* 57 M Ft, *ebből pályázati forrás:* - M Ft.

Reakciókinetikai kutatások

Gázfázisú vizsgálatok során az ún. "brómozási egyensúlyi reakciók" kinetikai vizsgálatával meghatározták két fontos szabadgyök, a CHClBr -gyök és a $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_2$ -gyök (acetonylgyök) képződési entalpiáját. A CHClBr -gyökre meghatározott képződési entalpia az első kísérleti adat a szakirodalomban. A kutatók a $\text{Br} + \text{CH}_2\text{ClBr}$ elemi reakció kísérleti vizsgálata során az Arrhenius-törvény érvényességét állapították meg igen széles hőmérséklettartományban. A kapcsolódó elméleti, "direkt dinamikai" számítások eredményei csak kvalitatív módon egyeznek a kísérletekkel, jelölül az elméleti módszer valószínű hiányosságainak. Mindkét vizsgált szabadgyök fontos szerepet játszik a légkör kémiai

folyamataiban: a sztratoszférikus ózonréteget károsító Cl- és Br-atomok egyik forrásaként szerepel, ill. az aceton troposzférikus lebomlásának köztterméke.

Oldatfázisú vizsgálatok során a hidrogénhid-képződés oldószerfüggésének tanulmányozását a 4-(dimetilamino)piridin és aromás szénhidrogén modellvegyületek alkoholokkal képzett komplexeinek vizsgálatával végezték. Karakterisztikus változásokat állapítottak meg az abszorpciós és a fluoreszcenciás színeképekben, amelyek alapján a komplexképződés termodinamikájára és kinetikájára vonatkozóan tettek általánosítható megállapításokat. Jelentős eredményekre jutottak annak felderítésében, hogy a komplexképződés hogyan befolyásolja az alapállapotú molekulák fényelnyelését és termodinamikai sajátságait, valamint az elektrongerjesztett állapotok reakcióit.

Kutatói kapacitás: 4 fő, ebből intézeti állományban: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 32 M Ft, Ebből pályázati forrás: 7 M Ft

Kristály-, por- és folyadékdiffrakciós kutatások

Új Sn-, Pd- és Au-komplexeket szintetizáltak. Többfunkciós ligandumokat terveztek és állítottak elő fémkomplexek önszerveződési reakciójának tanulmányozásához. Pontosították a kapcsolódó irodalmi adatokat. Ön-komplexeket vizsgálva újabb, szilárd fázisú diszmutációs reakciókat írtak le.

Nagy, négyszögletes csatornákkal bíró Pd-komplex kristályokat fedeztek föl.

Új, cukorszármazékok és szerves sók között létrejött komplexeket fedeztek fel, amelyeknek szilárd fázisú reakciókban való felhasználhatóságát is bizonyították.

A szerves kémiai szintézisekben növekvő szerepet játszó *N*-klór-arénszulfonamidátok körében végzett krisztallográfiai vizsgálataikkal kimutatták, hogy a nátrium- és a káliumsók szerkezeti és kémiai sajátságai között mutatkozó összefüggések jól értelmezhetők.

A krisztallográfiai fázisprobléma megoldására a korábban általuk kifejlesztett új módszert sikeresen alkalmazták egy igen nagy, pszeudoszimmetriát mutató kristályszerkezet meghatározására.

Vizsgálatokat végeztek önszerveződő szupramolekuláris rendszerek (makrociklusos platinakomplexek) szerkezetének meghatározására, a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzésére.

Lítium- és berilliumionot tartalmazó oldatokra (acetonitril és dimetilszulfoxid oldószerekben) vonatkozó *ab initio* számításokat és molekuláris dinamikai szimulációkat, valamint röntgendiffrakciós és neutrondiffrakciós méréseket végeztek.

Módszert dolgoztak ki vaskomplexek szerkezetének meghatározására röntgendiffrakcióval. A módszer alkalmazásának komoly szerepe lehet a katalitikus folyamatok tanulmányozásában.

Kutatói kapacitás: 12 fő, ebből intézeti állományban 12 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 72 M Ft, ebből pályázati forrás: 8 M Ft

Tömegspektrometriai kutatások

Az évek óta folytatott analitikai-diagnosztikai kutatások során szterolok vérből történő kimutatására új HPLC-MS módszert fejlesztettek ki, majd az eredmények kemometriai

kiértékelésével ezt a gyakorlatban alkalmazták. A módszer igen érzékeny, és az orvosi gyakorlatban előforduló nagy mintaszámra is sikerrel alkalmazható.

A tömegspektrométerben lejátszódó folyamatok modellezésére kifejlesztett Windows-alapú számítógépes programot (MassKinetics) sikerrel alkalmazták kvantumkémiail számításokkal kombináltan szerves kémiai reakciók modellezésére.

A BME kutatócsoportjaival a meglévő együttműködések folytatva különböző szintetikus vinka-alkaloidák szerkezetazonosítását végezték el. Az MTA KK Biomolekuláris Kémiai Intézettel együttműködve, többek között, fluorkémiai kutatásokban alkalmazták a tömegspektrometriai szerkezetvizsgálati módszereket. Az MTA KK Felületkémiai és Katalízis Intézet kutatóival együttműködésben szerkezet-tulajdonság összefüggések kutatásában alkalmaztak újszerű megközelítéseket. A Babes-Bolyai Egyetem kutatói részére átmenetifém-oximin komplexek szerkezetazonosítását végezték el, ezzel is támogatva a partner csoport kutatási tevékenységét.

Kutatói kapacitás: 5,8 fő, ebből intézeti állományban: 5,8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 37,4 M Ft, ebből pályázati forrás: 11,4 M Ft

Elméleti kémiai kutatások

Periodikus modellen elvégzett kvantumkémiail számítások segítségével jellemezték a Pt(111) és Rh(111) felületeken adszorbeált széndioxid-, metanol- és hangyasavmolekulák tulajdonságait. Kísérleti adatok (RAIRS) segítségével azonosították a Rh(111) felületen kialakult különböző rendezett CO-szerkezeteket.

Molekuláris dinamikai és folyadékdiffrakciós-módszerek segítségével megmutatták, hogy a kalciumionnak a szolvátburkában 8 metanol, a hidrátzférájában 6-8 vízmolekula található.

Diffrakciós módszerek alkalmazásával kimutatták a mikroheterogenitások létét víz-acetonitril elegyekben. Ezeket a mikroheterogenitásokat molekuláris dinamikai szimulációk segítségével is jellemezték.

Car-Parrinello molekuláris dinamikai, szimulációs számítások alapján megállapították, hogy a folyékony hangyasav szerkezetét alapvetően hidrogénkötésekkel összetartott rövid elágazó láncok határozzák meg.

Molekuláris dinamikai számításokkal megállapították, hogy a Glu transzporter-fehérjében a 2-es hajtú és a 7-es hélix régiókban tapasztalt elmozdulások valószínűleg a fehérjetranszport működésével vannak kapcsolatban.

Az amorf szerkezetű poliizobutilélen végzett ^{13}C -NMR-mérések eredményeinek értelmezése céljából, kvantumkémiail módszerekkel tanulmányozták különböző oligomerek konformációs tulajdonságait és az egyes konformerekre jellemző kémiai eltolódásokat.

Kváziklasszikus trajektóriaszámításokkal megállapították, hogy az oxigénatom és az oxigénmolekula reakciójában nem keletkezik statisztikus komplex, szemben az általánosan elfogadott feltételezéssel.

Kvantumkémiail módszerrel kiszámították a vas-porfirin és néhány gyakran előforduló ligandum komplexének szerkezetét és kötési energiáját. Megállapították, hogy a víz erősebben kötődik a komplex fématomjához, mint az oxigénmolekula.

Molekulák kvantumkémiail energiafelbontásának vizsgálata során megállapították, hogy a DFT-elméletben szereplő kicserélődési funkcionál lokális jellege elvi nehézségeket okoz, és

ennek megoldására egy elvileg új megközelítést dolgoztak ki. Megállapították továbbá, hogy az egyensúlytól eltérő magkonfigurációk esetén az energiafelbontás egy – ezideig feloldatlan – dilemmát vet fel: vagy a komponensek számértéke, vagy a távolságfüggése felel meg a kémiai intuíciónak.

Hidrogénkarbonát vízoldható ruténium-hidriddel történő hidrogénezését vizsgálták kvantumkémiai számítások segítségével. A vizsgálatok megmutatták, hogy az oldószerként jelenlévő vízmolekulák egy része a reakcióban aktív szerepet játszik, ugyanis hatékonyan katalizálja a protontranszfer folyamatokat.

Kvantumkémiai számítások alapján új reakciómechanizmust javasoltak acetil-aceton és nitroolefin aszimmetrikus tiokarbamid-származékkal katalizált, enantioszelektív Michael-addíciójára. Megmutatták, hogy a C-C kapcsolás olyan ternér komplexeken keresztül történhet meg, melyekben mindkét szubsztrátum H-hidas kötésekkel kapcsolódik a katalizátor aktív centrumaihoz. A feltárt mechanizmus összhangban van a kísérleti eredményekkel, és magyarázatot ad az organokatalitikus reakció enantioszelektivitására is.

Kvantumkémiai számítások segítségével részletesen feltárták egy olyan katalitikus folyamat mechanizmusát, melyben a széndioxid nióbiump-katalizátor jelenlétében, metanollal reagálva dimetil-karbonátot eredményez. A számítások eredményeivel értelmezni tudták a Nb(V) és Sn(IV) katalizátorok eltérő viselkedését.

Kvantumkémiai számításokkal segítették az újonnan szintetizált, katekoláz-enzim modellként szolgáló vas-komplexek szerkezetének meghatározását.

Átmenetifém foszfinok hidridicitását tanulmányozták elméleti úton, és megállapították, hogy az egyszerű kontinuum oldószermodellek megbízhatóan alkalmazhatók töltésszétválással járó reakciók energetikai viszonyainak leírására.

Pirit (100) felszín és tömbfázis XPS-spektrumát számították DFT-pszepudopotenciál módszerrel és azonosították a különböző oxidációs állapotú felszíni és tömbi kén specieszeket a core-level shift értékek alapján.

Aceton vizes oldatban végbemenő tautomerizációs folyamatait tanulmányozták ab initio molekuladinamikai számításokkal. Megmutatták, hogy a vízmolekulák jelenléte csökkenti a tautomerizációs gátat, és kimutatták, hogy a protontranszfer vízmolekulákból álló láncon keresztül, intermolekulárisan zajlik le.

Kvantumkémiai (MS-CASPT2) számításokkal meghatározták a (CH₂BrCl)-molekula UV-fotodisszociációjához tartozó potenciálfelületek közti konikus kereszteződést, továbbá kvantumdinamikai szimulációk segítségével jellemezték a fotodisszociáció folyamatát, eljárást dolgoztak ki a disszociáció koherens szabályzására.

Kutatói kapacitás: 8 fő, ebből intézeti állományban: 8 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 47 M Ft, ebből pályázati forrás: 4 M Ft

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Hazai tudományos kapcsolataik közül kiemelendők az egyetemekkel és az MTA-támogatású kutatócsoportokkal folytatott kutatási együttműködések.

A „Légköri szennyezők, ill. különböző gázok FTIR vizsgálata” és a „Fémorganikus vegyületek szerkezetkutatása” c. témákban eredményes közös kutatásokat folytattak a Pannon Egyetemen és az MTA Analitikai Kémiai Tanszéki Kutatócsoportjával. Az eredményeket három közös publikációban foglalták össze.

A „Biológiailag fontos vaskomplexek Mössbauer- és rezgési spektroszkópiai tanulmányozása” c. témában az ELTE Nukleáris Szerkezetvizsgáló Akadémiai Kutatócsoporttal dolgoznak közösen, aminek eredményeként két cikket közöltek.

A Szegedi Tudományegyetem Biokémiai Tanszékével az „Édesvízi halak szervezetére ható toxikus elemek (ólom, kadmium stb.) hatásának vizsgálata biokémiai és rezgési spektroszkópiai módszerekkel” c. témából született közös közlemény.

A Szegedi Tudományegyetem Fizikai Kémia Tanszékének kutatóival együttműködésben, különféle naftálimidszármazékok gerjesztett állapotainak energiáját és az alapállapotú molekulák szerkezetét határozták meg. Erről közös közleményt jelentettek meg.

Új, vízdoldható, kationos naftálimideket állítottak elő, feltárták a molekulászerkezet, a közegpolaritás és a kationváltoztatás hatását a szingulett és triplett gerjesztett állapotok energiavesztési folyamatainak a sebességére a BME Szerves Kémia Tanszékével együttműködésben. Az eredményeket közösen publikálták.

ESR-spektroszkópiai módszereket alkalmaztak reakciókinetikai problémák megoldására, valamint átmenetifém komplexek szerkezetvizsgálatában a Szegedi Tudományegyetem Radiokémia Tanszék és a Pannon Egyetem (Veszprém) Szerves Kémiai Tanszék kutatóival folytatott együttműködés során. Az eredményekről két közös cikkben számoltak be.

A „Hordozós nemesfém katalizátorokon adszorbeált molekulák FTIR-spektroszkópiai vizsgálata” c. témakörben szénmonoxid kemiszorpcióját vizsgálták alumínium hordozón levő Rh-, Ir- és Pt-katalizátorokon transzmissziós és emissziós infravörös spektroszkópiával. Lineáris, híd és dikarbonil típusú felületi specieszeket azonosítottak a Pannon Egyetem (Veszprém) Környezetmérnöki és Kémiai Technológiai Tanszékével együttműködésben. Az eredményekről közös dolgozatban adtak számot.

A Richter Gedeon Nyrt.-vel jelentős kutatási kapcsolatokat alakítottak ki, pl. a „Neurosteroidok meghatározása tömegspektrometriás módszerek segítségével” c. témában.

Az elméleti kémiai kutatások területén a Debreceni Egyetem Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszékével együttműködésben vízdoldható fémkomplexek belső szerkezeti átrendeződéseinek mechanizmusát vizsgálták. A Pannon Egyetem Általános és Szeretlen Kémia Tanszékével „Ruténiumkomplexek gerjesztett elektronállapotai szerkezetének és átmenetifém-porfirin komplexek alap- és gerjesztett állapotainak meghatározása kvantumkémiai módszerekkel” c. témában dolgoztak együtt. Az MTA Enzimológiai Intézzel közösen enzimatikus reakciókat modelleztek molekuladinamikai QM/MM módszerekkel.

Az egyetemekkel közös kutatások eredményeiből 2006-ban 21 publikációt jelentettek meg.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek kiterjedt nemzetközi kapcsolatai vannak. Számos európai és amerikai egyetemen alakítottak ki eredményes kutatási együttműködések.

Az „Orientált molekulák tanulmányozása infravörös lineáris dikroizmus alapján, elméleti számítások segítségével” c. témában (MTA-BTA kétoldalú egyezmény, partnerintézmény:

Institute of Organic Chemistry, BAS, Szófia, Bulgária) elért eredményeikről közös cikkben számoltak be.

Az MTA-Horvát TA kétoldalú egyezmény keretében a Department of Analytical Chemistry, Zagreb University kutatóival részletesen értelmezték a közepes méretű szerves vegyületek IR- és Raman-spektrumait kvantumkémiailag számításokon alapuló erőterekkel.

TÉT-egyezmény keretében a Department of Inorganic Chemistry, University of München kutatóival meghatározták a hatodik mellékcsoport dioxo-fém(VI) komplexeinek, mint katalizátoroknak a szerepét az olefinek epoxidálási reakcióiban.

OTA-MTA együttműködés keretében a University of Innsbruck, Institute for Ion Physics kutatóival ab initio- és molekuladinamikai számításokat, továbbá röntgendiffrakciós méréseket végeztek formamid és DMSO-oldatokon. Az eredményekről közös folyóiratcikket jelentettek meg.

MTA-CNRS együttműködés keretében (Université Henri Poincaré, Nancy) megállapították a hosszú távú korrekció hatását a DFT-módszerekkel számított potenciálgát-magasságokra.

Osztrák-magyar TÉT-egyezmény támogatásával a Max Perutz Laboratories, University of Vienna kutatóival együttműködésben N-metil-5-cianoindolin és rokon vegyületek fotofizikai paramétereit határozták meg több hőmérsékleten, különböző oldószerekben.

A „Lézerrel keltett szénplazmák emissziós spektroszkópiai analízise, különös tekintettel a C3 gyök kimutatására” c. témában eredményes együttműködést folytatnak három amerikai kutatóhellyel (The University of Tennessee, Space Institute, Tullahoma, Tennessee; Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, Livermore, California; Laser Spectroscopy Facility, Department of Chemistry, The Ohio State University, Columbus). A kutatások eddigi eredményeiről közös publikációban számoltak be.

Az ESR-spektroszkópia különféle alkalmazásai témakörben különösen sikeres együttműködést alakítottak ki az Université de Provence Marseille, az University Rosario, Argentína és a The Ohio State University, USA kutatóival. Az eredményekről 10 közös publikáció tájékoztat.

A “Photophysics of intramolecular charge transfer molecules” c. témában a Volkswagen Foundation támogatásával meghatározták a tripllett DMABN dipólusmomentumát a Max-Planck-Institut for Biophysical-Chemistry, Göttingen kutatóival közösen. Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A Dél-Afrikai Köztársasággal kötött TÉT-egyezmény keretében 2006-ban több tanulmányút valósult meg, amelyek alkalmat adtak a közös kutatások eddigi eredményeinek kiértékelésére és a további munka előkészítésére.

A University of Utah, Department of Chemistry, USA kutatóival igen sikeres közös kutatást folytatnak, aminek eredményeként a Journal of the American Society-ban jelentettek meg egy közös cikket. További publikációk vannak előkészületben. Az együttműködés támogatására pályázatot nyújtottak be az NSF-hez.

Olasz-magyar TÉT-egyttműködés keretében fehérjék tömegspektrometriás fragmentációját vizsgálták. (Közös publikáció van előkészületben.)

Román-magyar TÉT-egyttműködés során biológiai és orvosi minták tömegspektrometriai eredményeinek összehasonlító elemzését végezték el.

Spanyol-magyar Tét-együtműködésben eredményesen dolgoznak a „Humán szérum AGP mikroheterogenitása és diagnosztikai értéke” c. témában. Közös publikációt készítenek elő.

Argentín-magyar Tét-együtműködésben a „Természetes gombaölő anyagok és származékaik jellemzése tandem tömegspektrometriás módszerekkel” c. témában a kutatás konkrét feladatait készítették elő 2006-ban.

Magyar-spanyol Tét-együtműködés keretében az University of Girona kutatóival közösen (téma: energiadekompozíciós és kötésrendszámítási módszerek) kidolgozták a "fuzzy atomos" energiafelbontás DFT általánosítását, és elvégezték az energiakomponensek analízisét különös tekintettel a kicserélődés és kicserélődési potenciál térbeli eloszlására.

Az „Ab initio molekulamechanikai módszer” c. téma kutatásainak során (Magyar-orosz Tét) előtanulmányokat végeztek egy "ab initio molekulamechanikai módszer" létrehozásának lehetőségéről a Karpov Institute of Physical Chemistry, Moszkva kutatóival.

A fentiekén kívül eredményes kutatásokat folytattak a következő intézményekkel:

University of New Mexico, USA; University of Bari; University of Innsbruck; University of Canterbury; Freie Universität, Berlin; Graz University of Technology; University of Milano; ETHZ, Lugano; University of Modena; Washington University, USA.

Az intézet nemzetközi együtműködéseinek kiemelkedő eredményességét jelzi, hogy 2006-ban 57 publikációt jelentettek meg külföldi kutatóintézetekkel közösen.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet kémiai szerkezetkutatással foglalkozó csoportjai részt vállalnak mind a Koordinációs Kutatóközpont, ill. a Medichem II pályázat, mind egyéb NKTH pályázatok feladatainak megoldásában. Ezek a feladatok a Központ Biomolekuláris, ill. Felületkémiai és Katalízis Intézetének programjaihoz kapcsolódnak. A szerkezetkutatások elsősorban a tömegspektrometria, a mágneses magrezonancia-spektroszkópia, valamint az infravörös-spektroszkópia területére terjednek ki. Igen fontos alkalmazást nyernek az említett spektroszkópiai módszerek az új, orvosi diagnosztikai eljárások, továbbá a népegészségügyi jelentőségű betegségek okainak felderítésében. A felsorolt és további szerkezetvizsgálati módszerek (pl. röntgendiffrakció, ill. összeg-frekvenciakeltési spektroszkópia) jelentős szerepet játszanak a felületeken végbemenő reakciók felderítésében, továbbá mind a kristályos, mind az amorf anyagok, a szupramolekulák, valamint a folyadékok szerkezetének vizsgálatában.

Az ARCUS / PhyCAFoR, projekt keretében (téma: Physical Chemistry of the Atmosphere) a francia partnerrel (University of Lille) közösen, PhD-hallgatók továbbképzésében és témavezetésében vettek részt.

MTA-NSF-OTKA keretében folytatott kutatási együtműködésben (együtműködő partner: Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, USA) számítógépes programot dolgoztak ki sokatomos molekulák reakciódinamikai vizsgálatára.

A University of Perugia, Olaszország kutatóival közös M. Curie Training Network pályázatot nyújtottak be, valamint a COST Action D37 keretében, a QDYN munkacsoport tagjaként, reakciódinamikai programok grid változatának kidolgozását végezték el.

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

1. Bacsik Z, Gyivicsán A, Horváth K, Mink J: Determination of carbon monoxide concentration and total pressure in gas cavities in the silica glass body of light bulbs by FT-IR spectrometry, *Analytical Chemistry* 78(7): 2382-2387 (2006)
2. Simon F, Kuzmany H, Náfrádi B, Fehér T, Forró L, Fülöp F, Jánossy A, Korecz L, Rockenbauer A, Hauke F, Hirsch A: Magnetic fullerenes inside single-wall carbon nanotubes, *Physical Review Letters* 97(13): 136801-1-136801-4 (2006)
3. Imrik K, Kovács Gg, Fejes I, Szilágyi I, Sarzynski D, Dóbbé S, Bérces T, Márta F, Espinosa-Garcia J: Absolute and relative-rate kinetics experiments and direct dynamics computations for the reaction of Br atoms with CH₂ClBr, *Journal of Physical Chemistry A* 110(21): 6821-6832 (2006)
4. Deák A, Megyes T, Tárkányi G, Király P, Biczók L, Pálincás G, Stang PJ: Synthesis and solution- and solid-state characterization of gold(I) rings with short Au-Au interactions. Spontaneous resolution of a gold(I) complex, *Journal of the American Chemical Society* 128(39): 12668-12670 (2006)
5. Oszlányi G, Sütő A, Czugler M, Párkányi L: Charge flipping at work: A case of pseudosymmetry, *Journal of the American Chemical Society* 128(26): 8392-8393 (2006)
6. Megyes T, Bakó I, Radnai T, Grósz T, Kosztolányi T, Mroz B, Probst M: Structural investigation of lithium iodide in liquid dimethyl sulfoxide: Comparison between experiment and computation, *Chemical Physics* 321(1-2): 100-110 (2006)
7. de Bruin TJM, Michel C, Vékey K, Greene AE, Gimbert Y, Milet A: First C-C bond formation in the Pauson-Khand reaction: Influence of carbon-carbon triple bond polarization on regiochemistry - A density functional theory study, *Journal of Organometallic Chemistry* 691(20): 4281-4288 (2006)
8. Tóth F, Kalaus Gy, Greiner M, Kajtár-Peredy M, Gömöry Á, Hazai L, Szántay Cs: Synthesis of vinca alkaloids and related compounds. Part 106. An efficient convergent synthetic pathway to build up the ibophyllidine skeleton II. Total synthesis of (+/-)-deethylbophyllidine and (+/-)-14-epi-deethylbophyllidine, *Heterocycles* 68(11): 2301-2317 (2006)
9. Hamza A, Schubert G, Soós T, Pápai I: Theoretical studies on the bifunctionality of chiral thiourea-based organocatalysts: Competing routes to C-C bond formation, *Journal of the American Chemical Society* 128(40): 13151-13160 (2006)
10. Mayer I: Energy partitioning schemes, *Physical Chemistry Chemical Physics* 8(40): 4630-4646 (2006)
11. Horváth O, Huszánk R, Valicsek Zs, Lendvay Gy: Photophysics and photochemistry of kinetically labile, water-soluble porphyrin complexes, *Coordination Chemistry Reviews* 250(13-14): 1792-1803 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlagléttség ¹ :	69	Ebből kutató ² :	57
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			22
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			102
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			102
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	93	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	57	SCI által regisztrált folyóiratban:	90
összesített impakt faktor:	213,582	összes hivatkozás száma ⁴ :	2143
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1948
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	1
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	3	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	2
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	40	poszterek száma:	35
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	12	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			375,2 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	4
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			12
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	23,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			10
NKFP:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	39,1 MFt
Egyéb:	9	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1,3 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			5
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	161,6 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			2
EU forrásból:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	14,8 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			12
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	13,8 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2006. évi tevékenységét, a korábbi évekhez hasonlóan, az anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások szoros kapcsolata jellemezte.

Modern kísérleti és elméleti módszerekkel tanulmányozták célszerűen kiválasztott anyagi rendszerek kémiai és fizikai-kémiai tulajdonságait. Ezen ismeretek alapul szolgálnak újszerű szerkezeti és funkcionális anyagok előállításához, valamint környezetbarát ipari eljárások kidolgozásához.

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

Anyagkémiai kutatások

Plazmával és ionsugarakkal előállított nanorétegek kutatása és komplex jellemzése

Humán csípőízületi protézisek alapanyagául szolgáló ultranagy molekulatömegű polietilén (UHMWPE) felületét kezelték plazmaimmerziós ionimplantációs (PIII) módszerrel. Kísérlettervezés segítségével feltárták az előállítási körülmények, nevezetesen a gyorsító feszültség, a dózis és a dózisteljesítmény hatását a felület kémiai, továbbá nanomechanikai tulajdonságaira. A kutatási eredményeket a hőmezővásárhelyi PROTETIM kft alkalmazza a korábbiaknál hosszabb élettartamú csípőízületi protézisek gyártásánál.

C-Si-N rétegeket állítottak elő hidegplazmával aktivált szerves szilíciumvegyületekből, így tetrametil-szilánból, hexametil-disziloxánból és hexametil-diszilazánból. Megállapították, hogy a plazmafeszültség növelésével nő a rétegek C/Si aránya, valamint nanokeményége és modulusza.

Elméleti fejlesztésként megoldották, hogy a különféle nanorétegek felületkémiai vizsgálata során kapott röntgenfotoelektron-spektrumokból származtatott, ún. redukált adatok átvihetők legyenek a különféle programrendszerek között egy új fájl-formátum (XPS Reduced Data Exchange File) segítségével.

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

Korszerű mikro- és nanoszemcsés anyagok előállítása termikus plazmában

Rádiófrekvenciás (RF) termikus plazmareaktorban tanulmányozták szűk méreteloszlású, gömb alakú, üreges SiO₂ szemcsék kialakításának lehetőségét. Megállapították, hogy a plazmaparaméterek megfelelő beállításakor a kiindulási, porózus és szabálytalan alakú SiO₂

részecskék - kismértékű méretnövekedés mellett - üreges, gömbszerű szemcsékké alakulnak át. Egy másik eljárással szilíciumtartalmú kolloid oldatokat (kovasav szólt, vízüveget, SiO₂ szuszpenziót) plazmalángba porlasztva alakítottak ki gömb alakú, üreges SiO₂ szemcséket.

Vizsgálták cink- és nikkelt-cink ferritek előállítását szilárd és folyékony kiindulási anyagokból. Tanulmányozták a különböző plazmaparaméterek hatását a képződő ferritek tulajdonságaira (kémiai és fázisösszetétel, morfológia, szemcseméret eloszlás, mágneses tulajdonságok). Megállapították, hogy a megfelelő fémek nitrát-sóinak alkoholos oldatából egy lépésben lehet előállítani adott összetételű, nanoszemcsés, nagy telítési mágnességgel rendelkező ferriteket. A nagy telítési mágnességet inverz-spinel szerkezetek kialakulására utal.

Fullerének termikus plazmában történő szintézisekor vizsgálták a szennyező- és adalékanyagok hatását a termék fullerén tartalmára és a fullerén összetételére. Megállapították, hogy a kiindulási grafitporhoz 20% vasport adagolva a korom fullerén tartalma megnő. Ugyanakkor a fullerén tartalom 5% Si vagy B adalék hatására csökken. Utóbbi esetben viszont megnőtt a fullerénben a C82 és C84 klaszterek aránya.

Kutatói ráfordítás: 6 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 4 M Ft, ebből pályázati forrás: 1,4 M Ft.

Funkcionális mikro- és nanoszerkezetű társított rendszerek fejlesztése

Fehérje tartalmú terápiás szerek hatékonyabb adagolását biztosító új gyógyszerformák kifejlesztését tűzték ki célul, modell és aktív fehérjék alkalmazásával. Kidolgoztak több olyan, újszerű, társított polimer alapú és nanoszerkezetű hordozórendszert, amelyek lehetővé teszik a fehérje hatóanyag szabályozott leadását. Fehérje adszorpcióra alkalmas szerves hordozókat is kifejlesztettek, RF plazmában végzett szintézisre alapozva.

Enzim immobilizálására alkalmas nanoszerkezetű biokatalizátor hordozókat állítottak elő. Kitozán alapú hordozókat három különböző módszerrel készítettek: kicsapatásos eljárással makrogömböket, emulziós térhálósítással mikrogömböket és ionotrop gél módszerrel nanoszemcséket állítottak elő. A mikrogömbök kívánt szemcseméretét számítógépes kísérlettervezés alapján állították be.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 11 M Ft, ebből pályázati forrás: 6,2 M Ft.

Polimerek szintézise gyökös polimerizációval és kationos polimerizációval

Új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. A kvázielő polimerizáció mechanizmusának és kinetikájának törvényszerűségei alapján arra a következtetésre jutottak, hogy nemcsak a laboratóriumban előállított speciális szerkezetű, hanem kereskedelmi forgalomban kapható monomerekből (sztírolból és akrilátokból) is egy lépésben állíthatók elő nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező, hiperelágazásos polimerek.

Kvázielő gyökös és metallocén katalizátoros polimerizációs technikák alkalmazásával új szerkezetű poli(propilén-g-sztírol) ojtásos kopolimereket fejlesztettek ki, amelyek polimer elegyek kompatibilizátoraként alkalmazhatók. Felderítettek a képződő polimerek szerkezete és a szintézis paraméterei (oldallánc hossza, hőmérséklet, reagensek koncentrációja) közötti összefüggéseket.

Karbokationos polimerizációs kutatásaik kiterjedtek az izobutilén, a sztírol és ezek származékainak karbokationos, valamint a heterociklusos vegyületek gyűrűfelfnyílások

kationos polimerizációjának, a kapott polimerek módosítási reakcióinak, szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálatára. Részt vettek egy új, többcélú vakcina polimer összetevőjének kifejlesztésében. A vakcina fő alkotója egy jól definiált szerkezetű, DNS-hordozó makromolekula, a mannozilált poli(etilén-imin).

Láncvégi funkciós csoportokat hordozó poliizobutilének környezetkímélő előállítási módszereinek kutatása során elsősorban a reakcióközeg hatását vizsgálták. Megállapították, hogy az ózonnal végzett, oxidatív láncvég-módosítás hatékonysága jelentősen javul a közeg polaritásának csökkenésével. Az izobutilén polimerizációjának mechanizmusát kutatva megállapították, hogy a protoncsapda jelenlétében, karbokationos körülmények között, a poliizobutilén láncok összekapcsolódnak. Ez az összekapcsolódás nagyobb mértékűvé válik a protoncsapda koncentrációjának és a reakcióközeg polaritásának növekedésével. Vizsgálták a sztírol karbokationos polimerizációját is. Sikerült jól definiált szerkezetű, kis polidiszperzitású polisztirolt előállítani viszonylag magas hőmérsékleten, az eddig alkalmazottaknál jóval környezetkímélőbb reakcióközegben.

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

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

Az amfifil polimer kotérhálókval kapcsolatos kutatásaik egyik fontos részterülete a kotérhálók nanoreaktorként történő alkalmazása. Kétféle amfifil kotérhálóval végeztek „nanoreaktor” kísérleteket, melyek során vas-vegyületekből próbálták nanoméretű vas-oxidot előállítani. A poli(dimetil-amino-etil-metakrilát)-l-poliizobutilén illetve poli(dimetil-amino-etil-metakrilát)-l-poli(dimetil-sziloxán) amfifil kotérhálók megfelelő fázisaiba juttatott oldható vasvegyületekből megfelelő kezeléssel sikerült a vas-oxidot előállítani.

Tanulmányozták hidrofil szegmensekkel rendelkező, metakrilsav alapú amfifil kotérhálók duzzadási viselkedését szerves oldószerekben és vízben, a pH és sókoncentráció függvényében.

N-vinil-imidazol alapú amfifil kotérhálók előállítását dolgozták ki hidrofób polimerekkel; így poli(propilén-oxid)-dal illetve politetrahidrofuránnal. Tanulmányozták ezen új anyagok fémion-megkötő tulajdonságait és új összefüggéseket állapítottak meg a kotérhálók szerkezete és fémion megkötő képessége között.

Kutatói ráfordítás: 5 fő, ebből intézeti állományban van: 5 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 12 M Ft.

Polimerek degradációja és stabilizálása

Vizsgálták Phillips és Ziegler-Natta technológiával előállított polietilénhez adott különböző foszfortartalmú antioxidánsok hatásmechanizmusát. Megállapították, hogy a stabilizátorok hatékonyságát és a hatásmechanizmusát nagymértékben befolyásolja szerkezetük és a foszforhoz kapcsolódó szerves ligandumok jellege. Egyes stabilizátorok a feldolgozási stabilitást javítják, míg mások a termék színét befolyásolják kedvezően. A korábban kidolgozott reológiai módszerrel megállapították, hogy a különböző stabilizátorok eltérő hatást gyakorolnak az első feldolgozási lépésben végbemenő folyamatokra. Megállapították, hogy a HDPE-hez adagolt egyes fenolos antioxidánsok hidrolitikus stabilitása kicsi, és erősen függ a stabilizátor kémiai szerkezetétől.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 0 M Ft.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Intenzíven tanulmányozzák különböző polimerek és társított rendszereik szerkezet-tulajdonság összefüggéseit, és az azokban, külső terheléskor végbemenő deformációs folyamatokat. Külső feszültség hatására a kompozitokban mikromechanikai deformációs folyamatok indulnak meg. Akusztikus emisszióval és a térfogati deformáció módszerével vizsgálták e folyamatokat és megállapították, hogy a töltőanyagot tartalmazó kompozitokban a határfelületek elválása az uralkodó folyamat. Több társított rendszerben (nanokompozit, faliszt erősítésű anyagok) ugyanakkor egyéb mechanizmusok, pl. az erősítő anyag törése is előfordulhat. Jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. Különböző mátrixú nanokompozitokról megállapították, hogy a rétegszilikát delaminációja gyakorlatilag mindig részleges. A feldolgozás során bonyolult szerkezet alakul ki, ami eredeti szemcséket, a polimer által duzzasztott szilikát egységeket és delaminált egyedi lemezeket tartalmaz. Nagy szilikát tartalomnál pedig, egy kártyavárszerű szerkezet is kialakulhat. A delamináció mértékét a komponensek kölcsönhatása és kinetikai tényezők határozzák meg, de a szerkezetét és mennyiségét még nem lehet jellemezni.

Kutatói ráfordítás: 7 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 5 M Ft.

Elektrokémiai, elektrooszorpciós és korróziós kutatások

Felületi feszültségmérésekkel kimutatták, hogy a perklorátionok redukciója során képződő kloridionok a vascsoport elemeinek passziválódását számottevően befolyásolják: a kloridionok hatására a felületi réteg szerkezete rendezettebbé válik.

Ir(100) és más egykristályokon végeztek elektrokémiai vizsgálatokat, a vizes elektrolitoldatokkal érintkező fémfelületeken végbemenő adszorpciós folyamatok és a határfelületen kialakuló elektromos kettősréteg szerkezetének jellemzésére. Impedancia mérésekkel kimutatták, hogy a kettősréteg töltése még az ún. kettősréteg-tartományban is elsősorban az adszorbeált anionok töltéséből adódik. A mérhető impedancia-spektrumok felvilágosítást adnak arról, hogy az anionok milyen kinetikával mozognak a külső- és a belső Helmholtz sík között.

Továbbfejlesztették az előző években nanorések kialakítására és az azokban történő molekuláris vezetőképesség mérésekre alkalmas kb. 0,1 pA felbontású elektrokémiai mérőberendezést. Pászttázó elektrokémiai alagútmikroszkópia ún. távolság-spektroszkópiái üzemmódjához különösen előnyösen alkalmazható, nagy dinamikájú előerősítőt fejlesztettek ki.

Korróziós vizsgálataik során környezetbarát, vízzel hígított festékgyantákból kialakított filmek vízfelveteli kinetikáját követték impedancia spektroszkópiával és gravimetriával. A mért elektromos paramétereket jól leíró modellt fejlesztettek ki polimer filmek duzzadására. Az Al-Cu kétfémes rendszer korróziós tulajdonságainak vizsgálatok kimutatták, hogy oxigén jelenlétében az alumínium lyukkorróziójának sebessége megnő. Ugyanakkor az alumínium felületén forró vízben is olyan passzív réteg alakulhat ki, amely képes meggátolni a lyukkorrózió megindulását. E felismerések lehetővé teszik a fűtési rendszerekben lejátszódó

korróziós folyamatok értelmezését és a károsodások csökkentését. Hatékonyabb katódos védelmi eljárások kidolgozását elősegítendő tisztázták a galvánanódos katódos védelem elméleti alapjait és annak gyakorlati kérdéseit. Összefoglaló közleményt jelentettek meg a fémkorrózió körülményei közötti katalitikus oxigénredukcióról.

Kutatói ráfordítás: 8 fő, ebből intézeti állományban van: 7 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 31,2 M Ft, ebből pályázati forrás: 5,2 M Ft.

Fémkomplexek szintézise és vizsgálata és analitikai vizsgálatok sokkomponensű biológiai rendszerekben

Előállították és vizsgálták az ezüst-permanganát piridinnel alkotott komplexeit. Bár az [Agpy₂]MnO₄ régóta ismert és a szerves kémiában oxidálószerként használt vegyület, összetétele és szerkezete a mai napig nem tisztázódott. Kimutatták, hogy az előállítás során három egymással egyensúlyban álló vegyület képződik. Ezek közül kettő szerkezetét is meghatározták. Spektroszkópiás és röntgenográfias vizsgálatokkal első ízben mutatták ki az aromás C-H...O-Mn hidrogénkötés jelenlétét és ennek következményét, a piridingyűrű kvázi-intramolekuláris alacsony hőmérsékleten végbemenő redoxireakcióját.

A vashiányos anémia kezelésére használható vas-poligalakturonát komplexek szintézise során megállapították, hogy a legkedvezőbb szintéziskörülmények között is legfeljebb 11,0% vasat tartalmazó komplex képződik. A komplexben a vas 93,5%-a vas(II) állapotú. Mivel felhasználás szempontjából a komplex vasleadó képessége döntő jelentőségű, ezért a vas kioldódását folyamatosan változó pH-jú rendszerben, az élő szervezetben lejátszódó folyamatokat modellezve vizsgálták. Megállapították, hogy a vas folyamatosan oldódik: öt óra alatt 77%-a kioldódik a komplexből.

Katódos stripping voltametriás módszert dolgoztak ki a szelén koncentrációjának és módosulatának meghatározására biológia rendszerekben. A kimutatási határ 0,1 µg/l, a lineáris tartomány szűk, és a minta-előkészítéstől, ill. a mátrix minőségétől függően változik. A kidolgozott módszer olcsóbb és érzékenyebb más műszeres technikáknál, és lehetővé tesz speciációs elemzést is.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 4 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 20 M Ft, ebből pályázati forrás: 1 M Ft.

Környezetkémiai kutatások

Veszélyes szerves anyagok ártalmatlanítása RF termikus plazmában

Tanulmányozták különböző veszélyes szerves anyagok plazmakörülmények közötti termikus bontását és értékes termékeké történő átalakítását. A várható termékösszetételt termodinamikai számítások alapján becsülték. Különbéle klórozott alifás és aromás szénhidrogéneknel vizsgálták a termikus bontás körülményei és a keletkező termékek fizikai és kémiai tulajdonságai közötti összefüggéseket. Bizonyították, hogy az RF termikus plazmákban ezek a fokozottan veszélyes szerves vegyületek is jó hatékonysággal bonthatók le, és belőlük értékesíthető termék (nanoszemcsés korom) állítható elő.

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

A PVC környezetileg előnyös lebontása és átalakítása; műanyag hulladékok pirolitikus újrahasonosítását elősegítő kémiai reakciók kutatása

Tanulmányozták egyes stabilizátorok és egy antioxidáns hatását a poli(vinil-klorid) (PVC) enyhén oxidáló körülmények között végzett, láncszakadással kísért termikus bomlására. Megállapították, hogy az iparban alkalmazott hőstabilizátorok nem képesek megakadályozni a láncszakadási folyamatot. Azt találták, hogy az egyik elterjedten alkalmazott antioxidáns nemhogy gátolná a PVC termooxidatív láncszakadását, hanem jelentős mértékben gyorsítja azt. Vizsgálataikat kiterjesztették a legelterjedtebben alkalmazott lágyítószert, a dioctil-ftalátot oldószerként tartalmazó PVC-re is. A kapott eredmények arra utalnak, hogy dioctil-ftalát jelenlétében a PVC termooxidatív láncszakadása jelentősen gyorsabb, mint inert oldószerben.

Vizgálták, miként lehet eltávolítani elektronikai hulladékok pirolízis olajából a brómtartalmú égésgátlókból képződött bomlástermékeket. Nátrium-zeolitok és mezopórusos alumínium-szilikát katalizátorok hatását tanulmányozták a tetrabrom-biszfénol-A égésgátló hőbomlástermékeire. A brómozott aromás vegyületeket jelentős mértékben ki lehetett szűrni a többi szerves pirolízis termék közül a tetrabrom-biszfénol-A molekula méreténél nagyobb pórusméretű nátrium-zeolitokkal. Felderítették, hogy az antimon-oxid javítja a brómozott aromás vegyületek égésgátló hatékonyságát, egyúttal jelentősen gátolja az ütésálló polisztirol hőbomlási reakcióit is. Ezen túlmenően, az antimon-oxid fontos szerepet játszhat a szerves brómtartalom szervesmentes alakításában is.

Kutatói ráfordítás: 4 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 15 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,7 M Ft.

Biomassza anyagok hasznosításának kutatása termikus módszerekkel

Az Európai Unió LIFE programjának egyik projektjében a faszén erőműi felhasználásának lehetőségét és gazdaságosságát vizsgálják. A projekt alap gondolata: a biomassza anyagok energiatartalmának zömét célszerű hatékonyan gyártható faszénbe koncentrálni, lehetővé téve a biomassza alapú energiahordozók gazdaságos szállítását. Megállapították, hogy a szállítás és raktározás során különös gondot kell fordítani a faszén porlásának elkerülésére, mivel bizonyos gyártási paraméterek és nyersanyag típusok esetén igen reaktív, öngyulladásra hajlamos faszén por képződik. Amerikai együttműködés keretében ugyanakkor azt állapították meg, hogy a faszénporok nagy reaktivitása előnyös is lehet elgázosítás vagy közvetlen motorhajtóanyagként való hasznosítás esetén. Részt vettek az első olyan tüzelőanyag cella kifejlesztésére irányuló kutatásokban, amely a faszén oxidációjával közvetlenül termel elektromos energiát.

Részt vesznek a 2006-ban alakult nemzetközi Center of Competence in Thermo-Chemical Treatment of Biomass (CTCB) nevű virtuális kutatóhálózatban. A CTCB kutatási tervében szereplő egyik kulcstémához (energiafüvek és nagy szilikát tartalmú biomasszák optimális feldolgozása) csatlakozva tanulmányozták a Magyarországon termelt energiafű hőbomlási folyamatait, valamint a szalmából nyerhető pirolízis olaj összetételét és minőségét befolyásoló katalizátorok alkalmazási lehetőségeit. Megállapították, hogy bizonyos zeolit katalizátorok hatékonyan csökkentik a pirolízis olaj levoglukozán tartalmát és a nagyobb molekulatömegű fenolok mennyiségét, ezáltal a pirolízis olaj stabilitása növelhető.

Kutatói ráfordítás: 3 fő, ebből intézeti állományban van: 3 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 10 M Ft, ebből pályázati forrás: 2,3 M Ft.

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

Korábbi kutatásaikra alapozva, ipari partnerekkel együttműködve technológiai terveket és a gazdasági elemzést készítették, a Garé és Hidas térségében található, mintegy 100 000 tonna tömegű klórbenzolos talaj ipari méretű tisztítására. A talajvíz tisztítására Hidason felépített 50 m³/nap kapacitású, napenergiás fotokatalitikus és sztrippelő referenciaüzem jelenleg vizes szuszpenzióban használja a TiO₂ katalizátort. Mivel a katalizátor szuszpendáltatása és a tisztított vízből mikroszűrőssel történő visszanyerése eszköz- és energiaigényes, a gazdaságosság javítása céljából megkezdték fix ágyas TiO₂ katalizátorok kifejlesztését.

Korábbi hazai cián-mentesítési tapasztalataikra alapozva elkészítették egy külföldi, nagy tömegáramú kohógáz-mosó rendszert működtető vaskohászati üzem cianidos mosóvizének tisztítására szolgáló mérő és beavatkozó rendszer terveit.

Megtervezték és elkészítették az előző évben kifejlesztett, a festőüzemekben levegőtisztításra használt aktív szén adszorbensek helyszíni regenerálására szolgáló technológia mérő és folyamatszabályozó rendszerét.

Az olaszországi kültéri vizsgálatok eredményei alapján elvégezték a sekélyvizű tavak napenergiás sótalánítására kifejlesztett ipari modul CFD analízisét.

Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 25 M Ft, ebből pályázati forrás: 12,3 M Ft.

Korróziógátló inhibitor-kompozíció kidolgozása, analitikai módszerfejlesztés

Többkomponensű fémes rendszerekre, még az egyes fém-párok galvanikus kapcsolata esetén is hatékony korrózióvédelmet biztosító adalékkompozíciót fejlesztettek ki. Az eredmények alapján reális lehetőség van az etilén-glikolt kiváltó, propilén-glikol alapú, a gépjárművek hűtőrendszere mellett ipari rendszerekben is használható, alacsony dermedéspontú hűtőközeg kifejlesztésére. A kidolgozott korrózióvédő kompozíció kísérleti gyártása és üzemi vizsgálata ipari partnerüknel megkezdődött.

Különböző környezetvédelmi analitikai megbízásokhoz kapcsolódóan szennyvizek, hulladékok, valamint szennyvíziszapok vizsgálatára alkalmas analitikai módszereket optimalizáltak. Vizsgálták poliaromás szénhidrogének visszanyerésének lehetőségeit, extrakcióját és kromatográfiai meghatározását fenéküledékekből. Összehasonlították a különböző extrahálószeres és extrakciós technikák hatását az egyes komponensek visszanyerésének hatásfokára. Vizsgálták szennyvíziszapok savas feltárásának hatásfokát eltérő savkeverékek és feltárási körülmények között, és optimalták a feltárások körülményeit.

Kutatói ráfordítás: 2 fő, ebből intézeti állományban van: 2 fő. Becsült intézeti ráfordítás: 9,5 M Ft, ebből pályázati forrás: 0 M Ft.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az AKI kutatói 2006-ban is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási kapcsolataik az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével, a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetrel és az Izotópkutató Intézetrel. A hazai egyetemek közül az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel, a

Semmelweis Egyetemen, a Szegedi Egyetemen, a Pannon Egyetemen, a Debreceni Egyetemen, a Corvinus Egyetemen és a Közép-Európai Egyetemen működtek együtt különböző témákban.

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

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

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

Polipropilén plazmás felületkezelését a pozsonyi Comenius Egyetemen, az új szilícium-organikus polimereket a romániai Petru Poni Intézetrel, felfelületek felületi spektroszkópiáját pedig a svéd Luleå University of Technology kutatóival közösen tanulmányozták.

Elektrokémiai kettősréteg-vizsgálatokat a német Ulmi Egyetemen közösen végeztek. A Jülich Kutató Központtal együttműködve elektrokémiai úton állítottak elő nanoréseket és közösen jellemezték azokat.

Az intézet munkatársai a belgrádi Vinca Magfizikai Kutatóintézet munkatársaival együtt fullerének RF termikus plazmában történő előállítását tanulmányozták. Az indiai Jodhpur Egyetemen pedig permanganátok szintézisét és reakcióit vizsgálták.

Nanokompozitok szerkezet/tulajdonság összefüggéseinek megállapításában eredményesen működtek együtt a Brüsszeli Szabad Egyetemen, a holland Twente Egyetemen és a koreai Inha Egyetemen. A vezetőképes nanokompozitokkal kapcsolatos kutatásokat pedig a szlovák Polimer Intézetrel közösen folytatták.

Különböző biomassa anyagok és a faszenek reaktivitásának felderítésében a trondheimi Norvég Tudomány és Technológiai Egyetem és az USA-beli Hawaii Egyetem kutatóival dolgoztak együtt. Kapilláris kromatográfiás kutatásaikban a Cseh Tudományos Akadémia Fiziológiai Intézete volt az együttműködő partnerük.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézet kutatói által 2006-ban művelt OTKA pályázatok közül az alábbiakban értek el figyelemre méltó eredményeket:

- PVD módszerrel, magnetronos porlasztással nagy keménységű W- és Si-tartalmú, szénelapú nanokompozit rétegeket állítottak elő (T 043359). Hidegplazmás kezelést alkalmazva jelentős mennyiségű C-NH_x típusú funkciós csoportot alakítottak ki többféle szén nanocsövek felületén (T 043685). Kidolgozták tervezett tulajdonságú ferritek előállításának módszerét termikus plazmában (T 047360)
- Az elektrokémiai adszorpcióval kapcsolatos vizsgálatok (T 42452), (T 045888), valamint a rénum, irídium és ródium idegen fémfelületeken végbemenő adszorpciójának és a rénum

korróziógyorsító hatásának vizsgálata (T 31846) lehetőséget nyújtanak a korróziós folyamatok első elemi lépésének pontosabb megismeréséhez, ami alapul szolgál hatékonyabb korrózióvédelmi eljárások és technológiák kidolgozásához. Ez utóbbira irányul a réz-alumínium fém pár korróziós sajátosságait tanulmányozó pályázat is (T 37693).

- Módszereket dolgoztak ki nanoszerkezetű polimer kotérhálók, szabályosan váltakozó szerkezetű amfifil polimer kotérhálók, valamint hiperelágazásos polimerek szintézisére (IN64295), (F61299), (T046759), (T048409).
- Megállapították, hogy az elektronikai hulladékok pirolízisekor kapott olajokból a brómozott aromás égésgátlók pirolízis termékei megfelelő pórusméretű nátrium-zeolitokkal eltávolíthatók (T 047377). Megállapították, hogy a légköri aeroszol mintákból kioldható szerves anyag fő tömegében zsírsavakból, illetve zsírsav észterekből áll (T 043578).
- Meghatározták energiaültetvényekről származó lágyszárú növények és faminták összetételét, termikus tulajdonságait és extrahálható komponenseit (K061504).

Az intézet kutatói egyéb hazai kutatási pályázatokban a következő eredményeket érték el 2006-ban:

- Fehérjék szabályozott hatóanyag leadását biztosító új típusú, biokompatibilis polimert, valamint szerves hordozóanyagokat állítottak elő (GVOP-3.1.1.-2004-05-0031/3.0).
- *In vitro* fémfelszívódási vizsgálatok alapján megállapították, hogy a Mg és a Zn a fém minőségétől, kémiai formájától, koncentrációjától és az alkalmazott körülményektől függően különböző mértékben, de hatásosan átjutnak egyes biológiai membránokon (NKFP 1A005/2004).
- Előre meghatározott tulajdonságú poli(etilén-imin) előállítását dolgozták ki (DermaVi_HIKC05 Asbóth program).
- Környezetbarát, gazdaságos adalékanyag rendszert és technológiát dolgoztak ki (GVOP-3.1.1-2004-05-0027/3.0).
- Eljárást és berendezést hoztak létre a szerves szennyezőket tartalmazó levegő tisztítására alkalmazott aktív szén adalékanyagok regenerálására (GVOP-3.1.1./2004).
- Megállapították különböző adalékrendszerek hatását poliolefinekben, és faliszttartalmú kompozitokat fejlesztettek ki (Eureka)

Nemzetközi pályázatok

Az intézet kutatói az alábbi eredménnyel vettek részt 2006-ban EU pályázatok kidolgozásában:

- Módszereket dolgoztak ki enzimek rögzítésére alkalmas, kítőzán alapú, makro-, mikro- és nanoszemcsés hordozók előállítására (MRTN-CT-2004-512247).
- Megállapították, hogy a szállítás és raktározás során különös gondot kell fordítani a faszén porlásának elkerülésére, mivel bizonyos gyártási paraméterek és nyersanyag-típusok esetén igen reaktív, öngyulladásra hajlamos faszén por képződik (LIFE05 ENV/IT/000801).

Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból művelt témák:

- A Cyprus Research Promotion Foundation támogatásával polimer kotérhálók kutatását végezték, együttműködésben a Ciprusi Egyetemmel
- DuPont Research Award jóvoltából új típusú multifunkciós polimereket kutattak.
- A Clariant Huningue S.A., France megbízásából polimerek stabilizálása témában foszfortartalmú stabilizátorok hatásmechanizmusát határozták meg.

- Nanoszemcsés katalizátorokat állítottak elő RF termikus plazmában. Együttműködő intézmény: BASF, Németország.
- A Max Planck Institute for Colloids and Interfaces (Potsdam-Golm, Németország) és az AKI kutatói közösen tanulmányozták új, amfifil tulajdonságú, nanotemplátként alkalmazható poliizobutilén-b-poli(etilénoxid) blokk-kopolimerek előállítását.

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

1. Tóth A, Mohai M, Ujvári T, Bertóti I: Composition, structure and nanomechanical properties of C-Si-N thin films deposited by ion implantation assisted plasma beam CVD, Surf. Coat. Technol. 200, 6420-6424 (2006)
2. Li Z, Han B, Mészáros G, Pobelov I, Wandlowski Th, Błaszczuk A, et al. (7): Two-dimensional assembly and local redox-activity of molecular hybrid structures in an electrochemical environment, Faraday Discussions, 131, 121-143 (2006)
3. Horányi G, Láng G: Double-layer phenomena in electrochemistry: Controversial views on some fundamental notions related to electrified interfaces, Journal of Colloid and Interface Science, 296, 1-8 (2006)
4. Szépvolgyi J, Markovic Z, Todorovic-Markovic B, Nikolic Z, Mohai I, Farkas Zs, et al. (10): Effects of precursors and plasma parameters on fullerene synthesis in RF thermal plasma reactor, Plasma Chem. Plasma Process, 26, 597-608 (2006)
5. Kótai L, Fodor J, Jakab E, Sajó I, Szabó P, Lónyi F, et al. (10): A thermally induced low-temperature intramolecular redox reaction of bis(pyridine)silver(I) permanganate and its hemipyridine solvate, Transition Metal Chemistry, 31, 30-34 (2006)
6. Haraszi M, Tóth E, Iván B: Poly(methacrylic acid)-I-polyisobutylene: a novel polyelectrolyte amphiphilic conetwork, Chem. Mater., 18, 4952-4958 (2006)
7. Kádár F, Százdi L, Fekete E, Pukánszky B: Surface characteristics of layered silicates: influence on the properties of clay/polymer nanocomposites, Langmuir 22, 7848-7854 (2006)
8. Mink G: Development of low cost and highly efficient solar desalination systems. Environmental Science and Technology in Hungary, Editor: Láng I, Műszaki Kiadó, pp. 362-368 (2006)
9. Blaszó M, Czégény Zs: Catalytic destruction of brominated aromatic compounds studied in a catalyst microbed coupled to gas chromatography/mass spectrometry, Journal of Chromatography A, 1130, 91-96 (2006)
10. Mikšik I, Sedláková P, Mikulíková K, Eckhardt A, Cserhádi T, Horváth T: Matrices for capillary gel electrophoresis – a brief overview of uncommon gels, Biomedical Chromatography, 20, 458-465 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

Átlagléttség ¹ :	66	Ebből kutató ² :	52
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			22
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			127
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			126
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	63	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	5
nemzetközi együttműködés keretében:	24	SCI által regisztrált folyóiratban:	63
összesített impakt faktor:	120,664	összes hivatkozás száma ⁴ :	1267
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1037
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	7
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	30
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	2	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	1
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	51	poszterek száma:	45
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			18
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			343,8 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	5
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			13
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			29,9 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			4
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,5 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			23,6 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			4
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	5,8 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	8,8 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			1
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			19,4 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			42
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			84,6 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, XII. Konkoly-Thege út 15-17., 1525 Budapest, Pf. 67.

Telefon: 391-9322, Fax: 275-4668,

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

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

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

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

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

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

Változócsillagok

Csillagok belső szerkezete, pulzációja (11 kutató, 3 OTKA, 1 ESA PECS)

RR Lyrae változók: Eddigi megfigyeléseik arra mutatnak, hogy az alaplómódban pulzáló RR Lyrae csillagoknak a korábban gondolt 25-30%-nál sokkal nagyobb hányada mutat Blazhko effektust. Az eddig – 2004 óta – itt megfigyelt 12 ilyen típusú változócsillagból 6 modulált egyértelműen. Kiválasztási effektussal ez a magas arány nem magyarázható. Valószínűsíthető, hogy léteznek RR Lyrae csillagok még gyengébb modulációval is, amit az itt folyó mérések sem tudnak kimutatni, és a moduláció erősségének feltehetőleg nincs alsó határa.

Befejezték az RR Geminorum Blazhko csillag hosszú távú viselkedésének vizsgálatát az intézetben az elmúlt 70 év alatt felgyűlt fotometriai megfigyelések alapján. A vizsgálat kimutatta, hogy az RR Gem minden megfigyelési időszakban modulált volt, de a moduláció erőssége és jellege (tisztá amplitúdó / amplitúdó és fázis moduláció) jelentősen változott.

Kimutatták, hogy az UZ Ursae Maioris RRab változó több modulációs periódust is mutat. Ez az első Blazhko csillag, melynél a több periódusú-moduláció egyértelműen igazolható.

Az SS Cnc alaplómódbú RR Lyrae csillagot 35 éjszakai megfigyelés alapján vizsgálták 4 színben közel 6000 észlelési adat állt rendelkezésre. Eredményeik szerint ez a csillag rendelkezik az eddig ismert legrövidebb modulációs periódussal (5,31 nap) és a moduláció amplitúdója is rendkívül kicsi, 0,1 mag kék színben.

A tömeges fotometriai adatok feldolgozása szükségessé teszi olyan módszer kifejlesztését, amely segítségével megbízhatóbban becsülhető a változók bizonyos osztályai (jelen esetben az alaphangú RR Lyrae csillagok) fénygörbéinek Fourier felbontása. A módszer azon alapul, hogy kellő számú nagy pontosságú fénygörbe (a 'minta' halmaz) hagyományos módszerrel kapott Fourier felbontásai felhasználhatók egy újabb objektum Fourier paramétereinek a kiszámítására.

A T Sex megfigyelési anyagát feldolgozták, a Kurucz-féle légkörmodellek alapján elhelyezték az elméleti HRD-n is. A kapott paraméterek az elméleti instabilitási sáv kék szélére helyezik a T Sex-et, az eddig ismert értékkel szemben, ami az instabilitási sáv vörös széléhez tette a T Sex-et, ellentétben az elméleti modellekkel.

δ Cephei változók: Negyven déli cefeidáról sikerült nagyszámú radiális sebesség-adatot meghatározni spektroszkópiai mérések alapján. Tíz csillagról ezek a legelső ilyen jellegű adatok. A többinél az újabb radiális sebesség-adatok az esetleges kettősség vizsgálatát segítik elő. A V898 Cen spektroszkópiai kettőssége azonban enélkül is nyilvánvaló. E cefeida keringésből származó radiális sebesség-változása a második legnagyobb a kettős rendszerbe tartozó ismert cefeidák közül.

Az ugyancsak kettős rendszerbe tartozó ST Puppis, II. típusú cefeida pulzációs periódusát vizsgálva szinte példátlanul erős periódusváltozást mutattak ki: 17,7 és 19,2 nap között ingadozó értékekkel. A változások a megfigyelések egy évszázada alatt egészen hevesek voltak, és jellegük nem egyeztethető össze a csillagfejlődési modellekkel.

Az XZ Ceti anomális cefeida hosszú időskálán is erősen változó periódust mutat a korábban kimutatott egészen rövid (néhány hetes) időskálájú periódusváltozások mellett. A látóirányú sebesség változása alapján nem zárható ki a csillag kettős rendszerhez tartozása.

Az ESO La Silla-i 2,2 m-es távcsövére szerelt FEROS spektrográffal kapott színeképeket elemezve meghatározták 16 déli beat cefeida nehézelem-tartalmát, és ennek alapján pontosították a két gerjesztett módus periódusarányának fémtartalom-függését.

δ Scuti változók: Korábbi szerzők a GP And változónál kétmódusú pulzációt véltek felfedezni, továbbá irregularitásokat találtak a fénygörbén. A csillagról rendelkezésre álló fotoelektromos fotometriai és CCD mérések szerint a csillag szabályosan pulzáló HADS lassú periódusnövekedést mutat. A csillag közeli kísérővel rendelkezik, a fotometriai defektusok magyarázzák a korábbi hibás interpretációkat.

Elvégezték a HD 44195 δ Sct és γ Dor, illetve a HD 44283 δ Sct csillagról a 2005/2006 téli észlelési időszakban kapott adatok analízisét. A csillagok elsődleges és másodlagos COROT szeizmológiai célpontok. A HD 44195 esetében az alacsony frekvenciás tartományban azonosított két frekvencia értéke közötti 1:2 arány felveti a kettősség lehetőségét. A HD 44283 esetében meghatározott három frekvencia értékeit vizsgálva reguláris szerkezetet kaptak.

Az M67 halmaz "Blue Straggler" csillagainak az instabilitási sávba eső tagjait analizálták (8 csillag). 6 esetben nem találtak változást, míg az eddig ismert két δ Scuti típusú változónál jó frekvencia felbontást sikerült elérni. Az EW Cnc esetében 41, az EX Cnc esetében pedig 26 frekvenciát sikerült azonosítani, a standardnak számító $S/N > 4$ limit fölött. Ezek a változások 0,02 mmag nagyságrendet jelentenek. A kapott frekvenciák alapján, összevetették azokat rotáló csillag modellekkel, és azonosítani próbálták a módusokat, ez azonban nem adott egyértelmű azonosítási lehetőséget.

Fehér törpék oszcillációja: Elvégezték a GD 99 DA típusú pulzáló fehér törpéről a piszkéstetői 1m-es RCC távcsövel korábban mért adatok feldolgozását. Eredményeik

alátámasztják a csillag szokatlan pulzációs tulajdonságairól eddig alkotott képet, mely szerint a GD 99 közel a DAV instabilitási sáv vörös széléhez is mutat rövid periódusú pulzációt a hosszabb periódusok mellett. Összevetve a csillagról korábban publikált periódusadatokat az általuk kapottakkal, csoportosulások figyelhetők meg a rövid (≈ 350 s) és a hosszú (≈ 1050 s) periódusoknál, melyek szerkezetében regularitás is feltételezhető. Magyarázat lehet mindezekre egy olyan kettős rendszer, melyben mindkét tag az instabilitási sávon belül helyezkedik el.

Elkezdtek a KUV 02464+3239 jelű DAV típusú csillag észlelését szintén a pizskétetői 1m-es RCC távcsővel. Előzetes eredményeik szerint a csillag pulzációjában igen rövid (néhány óras) időskálán jelentős változások következnek be: időről-időre egy adott módus, annak harmonikusai és szubharmonikusai válnak dominánssá. A harmonikusok jelenléte nemlineáris effektusokra utal, a szubharmonikusok pedig magyarázhatók azzal, hogy a csillag egy perióduskétszerező bifurkációs fázison keresztül a kaotikus viselkedés felé fejlődik.

Pulzáló változók modellezése: A hidrodinamikai eredményekből lezáraztatott amplitúdó-egyenleteknek megfelelő, de több módust figyelembe vevő rendszerek viselkedését Monte-Carlo szimulációval vizsgálták. Az amplitúdóegyenletek együtthatóinak nagyszámú kombinációja esetén azt kapták, hogy jellemzően lényegesen kevesebb módus szerepel az állandósult multiperiodikus állapotban, mint a lineárisan gerjesztett módusok száma.

A HyCoB kódépitő rendszerüket kiegészítették egy olyan lehetőséggel, hogy az egydimenziós differenciaegyenletek (amik pl. a radiális pulzációt írják le) egy adott rendszeren belül egyszerűen többszörözhetők legyenek, és a létrehozott párhuzamos egyenletrendszerek között csatolások építhetők fel. Ennek a rendszernek több alkalmazása lehet, többek között "kvázi-kétdimenziós" kód építhető vele.

Nagyszámú nemlineáris modellt számolva feltérképezték a klasszikus cefeida változók instabilitási sávját. Az amplitúdók fázisterében stabil fixpontok és kombinációik fordultak elő. A teljes cefeida instabilitási sávra kiszámították a lineáris és nemlineáris fáziseltéréseket, és jó egyezést kaptak azon galaktikus, alapmódusban és első felhangban pulzáló csillagokra, melyekre egyidejű fotometriai és spektroszkópiai megfigyelés is rendelkezésre állt. (Ez utóbbi a radiális sebességgörbe meghatározása miatt fontos.) A fémtartalomnak csak mérsékelt hatása van a fáziskülönbségre.

A kétmódusú cefeidák elhelyezkedése a $\log P_0 - P_1/P_0$ Petersen-diagramon hasznos információval szolgál a csillag fizikai paramétereit tekintve. A két módusban is instabil lineáris modellek alapján megállapították, hogy az említett diagramon elfoglalt pozíció meglepően szoros megkötést jelent az illető csillag *fémtartalmára* nézve.

RRab csillagokra számolt nagyszámú hidrodinamikai modell alapján megerősítették, hogy ezen csillagok periódusa és minimumbeli (V-I) színindexe között egyértelmű kapcsolat van, aminek oka a hidrogén ionizációs frontja és a fotoszféra kölcsönhatása. Az eredmények alapján a 0,63 napnál hosszabb periódusú RRab csillagok jól használhatók vörösödés meghatározására.

Aktív jelenségek csillagok légkörében (5 kutató, 1 OTKA, 1 Tét pályázat)

Hosszú távú fotometriai adatokat felhasználva, Fourier analízissel aktivitási ciklusokat mutattak ki több aktív csillagon, némelyeken többszörös ciklusokat is. Az eredményül kapott ciklushosszak inkább kváziperiódusnak nevezhetők, a középérték körüli nagy szórással, illetve némely ciklushossz a szignifikancia határán van. Néhány aktív csillagról sikerült hosszabb adatsort összeállítani, felhasználva az összes irodalmi adatot, az automata távcsövek

méréseit és az archívumokban található fotografikus lemezekről származtatható adatokat. Ily módon gyűlt össze kb. 100 éves adatsor a V833 Tau törpe, és kb. 50 éves adatsor a HK Lac óriáscsillagról. Idő-frekvencia analízis kimutatta, hogy az előzőleg (egyszerű Fourier analízissel) megtalált ciklushosszak valóságok.

Doppler képkötés segítségével modellezték a ζ Andromedae RS CVn-típusú mágneses aktivitást mutató kettőscsillagot. Tesztekkel igazolták a Doppler-leképezéshez használt programkörnyezet általuk továbbfejlesztett változatának hatékonyságát. A csillag torzult geometriájából adódó fényváltozást sikerült összhangba hozni a spektroszkópiai adatokból korábban nyert eredményekkel. Az idősorba rendezett Doppler képek segítségével elsősorban sikerült kimutatniuk a csillag differenciális rotációját, amely a Napéhoz hasonló, bár annál jelentősen gyengébb.

A V861 Herculis és az EQ Tauri kontakt kettőscsillagok optikai és H α fotometriai észleléseinek feldolgozása alapján elvégezték a fénygörbék modellezését. Mindkét kettőscsillag felszínén sikerült sötét foltokat detektálni, miközben a foltoknak megfelelő helyeken H α intenzitásnövekedést tapasztaltak. A V861 Her esetében a V-R és az R-H α színindexek között sikerült korrelációt kimutatniuk.

Egy V-színben 21,3 magnitúdós M5(?) törpecsillag B, V fotometriai észleléseit feldolgozva több fler eseményt sikerült detektálni, amelyek közül a legnagyobb időtartama $t_{eq}=19,5h$, bolometrikus energiája pedig a valaha észlelt legnagyobb flerekre jellemző 10^{36} erg nagyságrendű

Elkészítettek egy foltmodellező programot, amely a korábban használt eljárásoknál és kódoknál pontosabban képes visszaállítani a kettőscsillagok felületi fényességeloszlását. Mindehhez a Lucy-Richardson néven ismeretes algoritmust módosították.

Új megközelítést javasoltak a kettőscsillagok fénygörbe modellezésének javítására. Az eljárás lényege, hogy nagyszámú mesterségesen generált fedési fénygörbe Fourier koefficienseit hasonlítják a ténylegesen mért fénygörbe megfelelő paramétereire. A módszerrel jelentős számítási idő kapacitás takarítható meg. Az eljárást az SV Cam-ra alkalmazva megállapították, hogy a közel 90°-os pályahajlás miatt hamis, (a valóságban nem létező) poláris foltokat eredményezhet az analízis.

Nemzetközi együttműködés keretében folytatták a TT Ari kataklizmikus változó-csillag tanulmányozását. A megfigyeléseket a Pizskétetői Observatórium 50 cm-es teleszkópjára szerelt hűtött UBVRI fotométerrel végezték. A legújabb méréseik megerősítik azt a már tavaly kialakulni kezdő képet, miszerint a TT Ari rendszerben drasztikus fényesség, és fénygörbe-változás következett be.

Napaktivitás (7 kutató, 1 ESA PECS)

Egy jól ismert korona kitörést (CME-t), amely 1997. május 12-én történt, tanulmányoztak egy új szemszögből: a korona kitörés mágneses talppont vidékeinek fejlődését vizsgálták. A CME kiterjedő mágneses "buboréka" az egyik talppont oldalán mágnesesen átkötődött az északi poláris korona-lyuknak az interplanetáris tér felé nyitott mágneses erővonalaival. Kimutatták, hogy az interplanetáris mágneses felhő, amely a CME kidobódott mágneses terének a Föld-közeli megjelenése csak az egyik talppontján kapcsolódott a Naphoz, további bizonyíték a CME és korona-lyuk közötti mágneses átkötődésre.

Egy komplex, 2005. január 20-án megfigyelt, három-fázisú fler és korona kitörést tanulmányoztak számos hullámhosszon. A CME kitáguló mágneses tere átkötődött egy szomszédos "streamer" interplanetáris tér felé nyitott mágneses erővonalaival, és egy másik,

nyolc órával korábban ugyanabból az aktív vidékből származó CME mágneses terével is. A mágneses átkötődésekre számos bizonyítékot mutattak be, többek között egy ritka, dekaméteres hullámhosszon eddig még soha nem észlelt un. N-típusú rádió kitörést is.

Egy alapvetően új modellt dolgoztak ki a korona kitörések kezdetén megjelenő és a kitörés forrásától sugárirányban táguló fényes gyűrűszerű un. EIT hullámok eredetére. Az általuk javasolt modell szerint a CME táguló mágneses erővonalai találkoznak és mágnesesen átkötődnek a nyugodt-nap un. mágneses szőnyegének közeli (kis léptékű) mágneses hurkaival. Ez a modell nem zárja ki a gyors MHD hullámok vagy a megnövekedett áramok jelenlétét (ez utóbbi az átkötődés egyik előfeltétele). Viszont képes magyarázatot adni az EIT hullámok eddig meg nem értett jellegzetességeire.

Elkezdtek a korreláció vizsgálatokat a foltcsoportok azimutális és meridionális elmozdulásaira. Eredményeik szerint a foltcsoportok mozgása függ attól, hogy a vizsgált időszak a napciklus felszálló, vagy leszálló ágára esik. A fejlődésük csúcán lévő foltcsoportok mozgása rendezettebb és előre tartó a felszálló ágban, de kevésbé rendezett a leszálló ágban. Ez a mozgás nem függ attól, hogy éppen milyen fázisban vannak a foltcsoportok (fejlődő / visszafejlődő).

A naptevékenységi minimummal kapcsolatban áttekintették az eljövendő maximumok nagyságára vonatkozó különböző előrejelzési módszereket. A legmegbízhatóbbnak a prekursor-módszerek bizonyultak.

Összehasonlították a foltok előfordulási gyakoriságát a foltméret és a centrálmeridián-távolság függvényében három katalógus a DPD, GPHR és a Bredfordban készített SFC (Solar Feature Catalogue) esetén. Megállapították, hogy sem a DPD, sem az SFC esetén nem mutatható ki olyan erős aszimmetria, ami a GPHR-re jellemző. Eszerint az E-W aszimmetria a GPHR-re alapozott korábbi eredményekkel ellentétben csak egy nagyon gyenge effektus lehet.

Vizsgálták az 1996-97-es minimumra az irradiancia-modelleket a DPD és két különböző fáklya-proxy felhasználásával. Azt kapták, hogy a delta és nem-delta foltcsoportok hozzájárulása között különbség mutatható ki, ha a fáklyaterületet használjuk fáklya-proxyként.

Az 1997-es SOHO/MIDI-Debrecen Data (SDD) területadatait összehasonlították a DPD adataival. Megerősítették az 1996-os adatok alapján kapott korábbi eredményüket, miszerint a SOHO/MIDI képek alapján kapott területek a felbontásbeli különbségből adódóan a DPD-nél 10-17%-kal nagyobbak. Az SDD bővítésével az átlagos látóirányú mágneses tér adatai is bekerültek az adatbázisba, így lehetővé vált ennek umbra- és penumbra területtől való függésének vizsgálata.

Folytatták a SOHO/MIDI-Debrecen Data katalógus (SDD) készítését. A kvázi-kontinuum egész-korong képek mellett elkezdtek az I0 monokromatikus képek tesztelését és felhasználását, hogy az adatbázis az órás időbeli felbontást minél jobban megközelítse. Így a 2001-es évvel bezárólag kb. évi 4-5000 egész-korong kép mérésre való kiválasztása történt meg az idén.

Folyamatosan bővítették a Debrecen Photoheliographic Data (DPD) adatbázist. A katalógus formátumát átalakították, hogy a mostanában leggyakrabban használt adatbáziskezelő programok könnyebben tudják beolvasni az adatokat. Az 1991-re, 1992-re és 1999-re vonatkozó előzetes adatokat ftp-re tették.

Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája (7 kutató, 2 OTKA, 1 Tét, 1 ESA PECS pályázat, 1 ESA pályázat)

Analizálták a V1647 Orionis fényességének és színképvonalainak változását a 2004-2005-ös kitörése alatt. Infravörösben a csillag elhalványodása után is, egészen 2006. szeptemberéig követték a csillag viselkedését. A kitörés alatti fénygörbében periodikus komponenst azonosítottak 56 napos periódussal. Megállapították, hogy a hidrogén emissziós vonalainak (H α , P β , P γ , Br γ) fluxusa monoton csökkent a kitörés két éve alatt. Mivel e vonalak az akkréciós ráta nyomjelzői, ez arra utal, hogy az akkréció üteme is monoton csökkent.

A Lynds 1333 molekulafelhőben keletkezett Nap típusú csillagok felületi eloszlásának, tömegüknek és koruknak meghatározása megmutatta, hogy a csillagkeletkezés a felhő magas galaktikus szélességű oldalán kezdődött, és alacsonyabb szélességek felé terjed. Megvizsgálták, lehetett-e a csillagkeletkezés forrása az a nagyjából millió éves szupernóva-maradvány, amelynek egyetlen megfigyelt megfelelője a Loop III nevű rádiókontinuum-struktúra.

Megmutatták, hogy a Loop III centrumának valószínű távolsága a korai modellekből becsült 150 pc helyett inkább 250 pc. Azonosították a Loop III közeledő és távolodó falait a magas galaktikus szélességeken található molekuláris gáz eloszlásában, és megmutatták, hogy Loop III lehet a csillagkeletkezés forrása a L1082 (GF 9) és a L1333 molekulafelhőkben.

Befejezték az SV Cephei közepes tömegű fiatal csillag ISOPHOT méréseinek analizését. A fényváltozásokat egy radiatív transzfer kóddal modellezték, és megmutatták, hogy a megfigyelt infravörös fényváltozásokat – illetve a közép-infravörös tartomány állandóságát – csak úgy lehet megmagyarázni, ha a korábban feltételezett csillagkörüli korong mellett egy kiterjedt, 3-dimenziós burkot is feltételeznek.

Feldolgozták az AK Sco fiatal spektroszkópiai kettős VLT/MIDI méréseit. A korábban az irodalomban javasolt korongmodellel nem sikerült szimulálni a MIDI eredményeit. Fel kellett tételezniük, hogy az egész rendszer be van ágyazva egy optikailag vékony burokba, amelynek laposabb hőmérsékletprofilja nagyobb sugárzó területet jelent.

A Spitzer infravörös műholddal 78 F színképtípusú csillag fotometriai (24, 70 és 160 μm -en) és spektroszkópiai (6-35 μm) vizsgálatát végezték el. Az eddig kiértékelt 56 csillag közül 24 mutatott infravörös excesszust egy, vagy több hullámhosszon. Ezek közül 11 új felfedezés.

Az ISO infravörös mesterséges hold ISOCAM és ISOPHOT műszereit használva a 7-200 μm -es tartományban, ezeket az IR méréseket optikai és rádió mérésekkel kiegészítve 14 BL Lac objektum sugárzásának spektrális energiaeloszlását vizsgálták. Az eredmények szerint a szinkrotron sugárzás eloszlásának csúcsa a legtöbb célpont esetében az $1\text{-}3 \times 10^{13}$ Hz tartományba esett.

Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások (13 kutató, 1 OTKA, 2 ESA PECS pályázat)

A felsőlégkör szerkezete: A tengerborítottság hatásának tisztázására az ionoszféra F2 rétegének magasságát jellemző hmF2 paramétert vizsgálták egy olyan ionoszféra állomás lánc segítségével, amelynek az északi félgömbön lévő tagjai kontinens belsejében, a déli félgömbön lévő tagjai tengerpartokon helyezkednek el. Eredményül azt kapták, hogy az északi félgömbön a kontinens felett az ionoszféra F2 rétegének a magassága az átlag felett helyezkedik el, míg a déli félgömb tengerpartjain az átlag alatt. Ez az eredmény a semleges légkörben megfigyelt aszimmetriának megfelel, ugyanis, ahol melegebb a légkör, ott kitér, és az ugyanazon sűrűségeket képviselő magasság nagyobb, mint hidegebb esetben. A szárazföldek kisebb hőkapacitása még 200-400 km magasságban is érezteti a hatását.

A Naprendszer kis égitestei: A Hubble űrtávcső Cycle 15 GO-10625, GO-10992 és DD Time (Director's Discretionary Time) programjai keretében megfigyeléseket végeztek a 73P/Schwassmann-Wachmann 3 üstökös látványos széteséséről. A Hubble űrteleszkóp megfigyelő csoport a 73P szétesett magvú üstökös mag-töredékeinek látványos képi megfigyeléseit tette közzé, amelyet a Hubble űrteleszkóp (HST) ACS/WFC széles látószögű kamerájával készítettek 2006. április 18-20. között, amikor az üstökös 173 millió km-re volt a Naptól és 32 millió km-re a Földtől.

A Rosetta űrmisszió két cél aszteroidáját nemzetközi együttműködésben figyelték meg űrműszerekkel (Rosetta OSIRIS kamera és Spitzer Space Telescope). Az SST megfigyelésekből a 2867 Steins egy E-típusú aszteroida, ami a belső szerkezetét tekintve differenciálódott kisbolygóból származhat. A Spitzer Space Telescope IRS (InfraRed Spectrograph) műszerével infravörösben spektrum megfigyeléseket végeztek a 21 Lutetia kisbolygóról 2005. december 10-én. Az előzetes kiértékelés azt mutatja, hogy a kapott infravörös fénygörbe periodikus és periódusa jól egyezik a korábbi látható fényben kapott fénygörbével.

Tovább javították a 67P/Churyumov-Gerasimenko, a Rosetta űrszonda cél-objektuma magjának modelljét. A 67P/C-G magjának effektív rádiusza 1,72 km és az alakja egy mérsékelt elnyújtott ellipszoid modellel közelíthető. A rendelkezésre álló fotometriai fénygörbékből elkészítették a szabálytalan alakú üstökös-mag egy háromdimenziós közelítő modelljét is.

A HST ACS/HRC megfigyelésekre alapozva meghatározták a 9P/Tempel 1 üstökös magjának méretét, közelítő alak-modelljét és tengelyforgási idejét, valamint a fázisfüggvényét. Felső határt adtak meg a porkibocsátási aktivitásra, amely a nagy heliocentrikus távolságban végzett HST megfigyelések idején gyakorlatilag nem volt megfigyelhető.

A DEEP IMPACT űrszonda felvételeit analizálva kimutatták, hogy a becsapódás utáni anyagkibocsátás jellemzői a behatolás mélységével arányosan változtak.

Új kisbolygót fedeztek fel, amelyet 2006XP3 jelöléssel láttak el, esetleges korábban elveszett kisbolygóval történő azonosítása folyamatban van.

Planetáris kutatások: az Enceladusszal kapcsolatban azt a munkahipotézist vetették fel, hogy a kráterek nagyobb gyakorisága az északi pólus környékén és hiányuk a déli pólus környékén arra utal, hogy az Enceladusnak nem egyforma vastag a kérge az északi és a déli félgömbön. Ez pedig egy egy-cellás víz-köpeny cirkulációval magyarázható.

A Japetus hold geológiai aktivitásának az okát keresve a világirodalomban elsőként vetették fel, hogy egy hold pályájának a nagy inklínációja ugyanolyan erős árapályfűtést okozhat, mint egy nagy excentricitás, csak az árapálydudor itt nem az egyenlítő mentén mozog a hold testéhez képest – mint ahogy excentrikus pálya esetén – hanem az egyenlítőre merőlegesen.

A Cassini szonda képein a Hyperion szivacs-szerű megjelenése egész más, mint a többi jeges holdé: elképzelhető, hogy a Hyperion annak az üstökös-magnak lehet egy darabja, amely ma feldarabolódva a Szaturnusz jég-gyűrűit alkotja. Három diagramot szerkesztettek a Naprendszer holdjainak adataira (pályainklínáció, pályaeccentricitás és sűrűség), amelyek a Hyperion hold különleges voltát is igazolták. A Hyperion nem lehet egy reguláris hold, hanem egy befogott KBO kell, hogy legyen.

Modellszámítás alapján rámutattak, hogy a Mars dűnékre ideális esetben a kicsapódó H₂O kb. mm vastag borítást adhat. A DDS-MSO modell réteges szerkezetét tovább finomították.

Exobolygók kutatása: A HATNet projekt keretében felfedezték az első extraszoláris bolygót (forró Jupiter). A rendszer érdekessége, hogy a bolygó egy fizikai kettős egyik tagja körül kering, és a tömege jelentősen kisebb, mint ahogy az a becsült/mért sugarából a standard elméleti modellek alapján várható lenne.

Fedési kettőscsillagok: Elkészült annak a kódnak egy egyszerű változata, amely magányos és kettőscsillagok fejlődési útvonalaikat képes számolni. A program bemenő paraméterei kettősök esetén: a két csillag kezdeti tömege, a kezdeti periódus, a két komponens - azonosnak vett - kezdeti hélium- és fémtartalma.

Tanulmányozták az EM Cygni fedési törpenóva periódusát, és összevetették az előző négy évtized méréseivel eredményeiket. Az elmélet szerint a pálya-periódusnak oly' mértékben kellene változnia, hogy az könnyedén mérhető lenne. Ehhez képest nem találtak periódusváltozást.

COROT űrprojekt: Folytatták mind a téli, mind a nyári COROT szeizmo területek fő és másodlagos célpontjainak fotometriai jellemzését. Területenként 3-4 csillag vizsgálatába kapcsolódtak be. A végleges feldolgozás nemzetközi keretek közt történik.

Az összes ismert adatbázist összevetették egymással, aminek során 81 eddig csak „gyanított” változót sikerült megerősíteniük. Eredményként felfedeztek és klasszifikáltak 1396 eddig nem ismert változócsillagot ill. 198 bizonytalan („feltételezett”) változót is kigyűjtöttek.

Herschel űrprojekt: Befejezték a Herschel/PACS Fine Calibration Source kalibrációs lámpájának hullámhossz-szerinti emisszivitás-vizsgálatát, és részt vettek egyéb tesztmérések kiértékelésében is. Továbbfejlesztették a távoli-infravörös égbolt kisbolygó-modelljét.

Csillagászat története: Az 1572. évi szupernóváról szóló, az Egyetemi Könyvtárban talált kéziratot tanulmányozták, összevetve az egykorú irodalommal. A kézirat szerzője egy wittenbergi diák lehetett.

Összegyűjtötték Kövesligethy Radó Tanácsköztársaság bukása utáni "meghurcoltatásának" történetét bemutató dokumentumokat a Magyar Tudományos Akadémia Könyvtárának Kézirattárában és az Egyetemi Könyvtár Levéltárában.

Archaeoasztrolómia: A Kárpát-medencei rézkori kultúrákban a sirok tájolásában mutatkozó különbségek – mivel hitvilágról van szó – etnikai és ezen belül társadalmi, vagyoni különbségeket tükröznek a vadász-katona protoeuropidok és a földműves mediterránok között.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai:

Együttműködtek a soproni GGKI-vel, az ELTE Gyógypedagógiai Főiskolai Kar, Foniátriai Tanszékével diszlexiás gyerekek vizsgálatában, a Budapesti Műszaki Főiskolával a fényszennyezés témakörben az 'Ipari Környezetvédelem' c. tárgy keretén belül, valamint az MTA SZTAKI Analogikai és Neurális számítások Laboratóriumával egy új hullámfront érzékelő fejlesztésében.

A beszámolási időszakban is részt vettek az egyetemi oktatásban előadások, gyakorlatok tartásával, valamint szakdolgozati és doktori témavezetéssel. Kutatóik az alábbi előadásokat, illetve gyakorlatokat tartották:

ELTE-n: Előadás: Csillagkeletkezési régiók, Asztrofizika 4., Az asztrofizika megfigyelési módszerei, Asztrostatisztika I., Csillagászat fizika tanári továbbképzésen, Csillagaktivitás - aktív csillagok II., Csillagrendszerek dinamikája I. - II., Obszervációs csillagászat 1, 2., 3. 4., A csillagközi por fizikája II, Szeminárium a csillagközi anyag és csillagkeletkezés legújabb eredményeiről., Szférikus csillagászat interdiszciplináris alkalmazásai.

Gyakorlat: Bevezetés a csillagászatba II., mérési gyakorlat IV. éves fizikus hallgatók számára.

DTE-n: Előadás: Bevezetés a csillagászatba, Bevezetés az úrfizikába

SZTE-n: Előadás: A csillagközi anyag és csillagkeletkezés, Űrcsillagászat, Asztrofizikai megfigyelési módszerek

Nemzetközi:

- Együttműködés az International Astronomical Union-nal (IBVS szerkesztés, IAU Comm. 27., Comm. 42 és Div. V. WWW szolgáltatások karbantartása
- Tét együttműködés az IAC-vel (Tenerife, Spanyolország) Naphoz hasonló csillagok keletkezésének vizsgálatára
- Együttműködés az amerikai Spitzer infravörös mesterséges holdra és az európai VLT teleszkópra benyújtandó pályázatok közös kidolgozásáról (MTA Csill. Kut., MPIA Heidelberg, STSI Baltimore, Stewart Obsz. Arizona)
- Részvétel az ESA Herschel űrtávcső előkészítő munkálataiban, hivatalos tagság a PACS műszer Instrument Control Centre-ben (ESA/PECS által támogatott projekt)
- Részvétel a COROT mesterséges hold előkészítő munkálataiban és az Additional Programban (ESA/PECS által támogatott projekt)
- GAIA asztrometriai űrmisszió változócsillag-munkacsoport; folyamatos részvétel a Nemzetközi Asztronautikai Akadémia munkájában
- Együttműködés a Princeton University Observatory-val, automatizált változócsillagászati megfigyelésekben
- MACHO - 'affiliált' programban való részvétel
- A DPD katalógushoz nemzetközi együttműködések keretében kapnak észleléseket a következő obszervatóriumokból: Kiszlovodszk (Oroszország), Kanzelhoehe (Ausztria), Mount Wilson (USA), Abastumani (Grúzia), Ebro (Spanyolország), Helwan (Egyiptom), Kijev, Lvov (Ukrajna), Kodaikanal (India), Ondrejov, Vassilicke Mezirici (Cseho.) és Tashkent (Üzbegisztán)
- Együttműködés a stanfordi SOHO/MDI kutatócsoporttal közös katalógus készítése céljából (ESA/PECS által támogatott projekt)
- Részvétel az ESO VLTI új generációs közép-infravörös interferométerének fejlesztésében (EU 6 FP OPTICON/JRA4 által támogatott projekt)
- Munkakapcsolat az AIP Potsdam-mal
- Francia-magyar együttműködés a Naprendszer kutatására az MTA-CNRS egyezmény keretében

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az ESA-val történt szerződés alapján három PECS pályázat fut az intézetben. Ezek közül kettő (COROT, Herschel) újonnan létrehozandó űreszközök előkészítésében, illetve programjának a lebonyolításában teszi lehetővé részvételüket. A harmadik pályázat keretében

egy ESA adatbázis (SOHO/MIDI), illetve földi bázisú megfigyelések egybevetése a feladat. Mindhárom pályázat fontos kapcsolódást jelent élvonalbeli európai projektekhez.

Az EU 6-os keretprogramjában az OPTICON project keretében vesznek részt. Ennek során részt vesznek az ESO négy 8-mes távcsövéből álló interferometriai rendszer kialakításában a MATISSE második generációs optikai interferometer fejlesztésében.

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

1. Ábrahám P, Mosoni L, Henning Th, Kóspál Á, Leinert C, Quanz SP, Ratzka Th: First AU-scale observations of V1647 Orionis with VLTI/MIDI, *Astron. & Astroph.* 449, L13-L16 (2006) (impact factor: 4,223)
2. Benkő JM, Bakos GÁ, Nuspl J: Multicolour CCD photometry of the variable stars in globular cluster M3, *Monthly Notices R.A.S.* 372, 1657-1674 (2006) (impact factor: 5,352)
3. Handler G, Jerzykiewicz M, Rodríguez E, ..., Paparó M, et al: "Astero-seismology of the β Cephei star 12 (DD) Lacertae: photometric observations, pulsational frequency analysis and mode identification, *Monthly Notices R.A.S.* 365, 327 (2006) (impact factor: 5,352)
4. Horváth I, Balázs LG, Bagoly Z, Ryde F, Mészáros A: A new definition of the intermediate group of gamma-ray bursts, *Astron. & Astroph.* 4, 223 (2006)
5. Jurcsik J, Szeidl B, Sódor Á, Dékány I, Hurta Zs, Posztobányi K, Vida K, Váradi M, Szing A: The shortest modulation period Blazhko RR Lyrae star: SS Cnc, *Astron. J.* 132, 61 (2006) (impact factor: 5,377)
6. Kiss Cs, Ábrahám P, Laureijs RJ, Moór A, Birkmann SM: Constraints on the nature of dust particles by infrared observations, *Monthly Notices R.A.S.* 373, 1213 (2006) (impact factor: 5,352)
7. Kun M, Nikolić S, Johansson LEB, Balog Z, Gáspár A: Low-mass star formation in Lynds 1333, *Monthly Notices R.A.S.* 371, 732-738 (2006) (impact factor: 5,352)
8. Moór A, Ábrahám P, Derekas A, Kiss Cs, Kiss LL, Apai D, Grady C, Henning T: Nearby debris disk systems with high fractional luminosity reconsidered, *Astroph. J.* 644, 525 (2006) (impact factor: 6,308)
9. Nagy A, Kovács G: On the incidence rate of first overtone Blazhko stars in the Large Magellanic Cloud, *Astron. & Astroph.* 454, 257-264 (2006) (impact factor: 4,223)
10. Oláh K, Korhonen H, Kővári Zs, Forgács-Dajka E, Strassmeier KG: Study of FK Comae Berenices – VI. Spot motions, phase jumps and a flip-flop from time-series modelling, *Astron. & Astroph.* 452, 303 (2006) (impact factor: 4,223)
11. Tóth I: Search for comet-like activity in asteroid 7968 Elst-Pizarro and limitation of its rotational pole orientation, *Astron. & Astroph.* 446, 333-343 (2006) (impact factor: 4,223)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	65	Ebből kutató ² :	34
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			144
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			134
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	92	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	64	SCI által regisztrált folyóiratban:	33
összesített impakt faktor:	115,804	összes hivatkozás száma ⁴ :	619
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			619
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	1
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	1
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	36	poszterek száma:	29
Rendszeres hazai felsőfokú oktatói tevékenységet végzők száma ⁷ :			15
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	5
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			264 MFt
Beruházási támogatás:	1 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	1
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			9
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	22 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			0
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			5
EU forrásból:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	1 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	20 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			4
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	18 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

VI/a. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének egyéb bemutatható eredményei¹⁴

Az intézet neve: Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

Elkészítették az 1 m-es RCC távcső automatikus mérőrendszer távvezérlő szoftverét, amelynek kísérleti éles üzeme elindult. A központi kontroll modul alkalmas a kötegelt mérés vezérlésére is, valamint a mérések nyilvántartására és napi statisztikai jelentés emailben történő küldésére.

A piszkési 50 cm-es távcsövön nagy szögfelbontású csillagászat számára kezdtek méréseket. A speckle technikához szükséges környezetet majdnem teljesen kiépítették. Néhány kettőscsillag esetében már alkalmazták a speckle technikát.

KFKI ATOMENERGIA KUTATÓINTÉZET

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

Telefon: 395-9159, Fax: 395-9293

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet fő kutatási feladatai a következő tudományterületekre terjednek ki: reaktorfizika, termohidraulika, fűtőelemek és reaktornyagok vizsgálata, operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése, atomerőművi szimuláció, anyagtudomány, sugárvédelem és környezetfizika, valamint a Budapesti Kutatóreaktor köré csoportosuló kutatások.

Az intézet tevékenységében 2006 folyamán az alaptevékenység gerincét alkotó reaktorbiztonsági kutatások mellett a perspektivikus energiatermelésre (negyedik generációs atomerőművek, kisebb mértékben fűzió) irányuló kutatások szerepe tovább nőtt.

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

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

Reaktorfizikai kutatások (13 kutató, 392 M Ft ráfordítás, 240 M Ft pályázat)

A 2005-ben indult, 2 évre tervezett, reaktorfizikai jellegű „Generation 4” kutatási témák nagy része az elnyert NAP pályázatban folytatódott tovább. Ez utóbbi projekt kimondottan egy típussal, a szuperkritikus reaktorokkal foglalkozik. 2006-ban megkezdődött a zóna tervezéséhez és az üzemzavar elemzésekhez szükséges kódrendszer kidolgozása. Ennek keretében a teszteléshez szükséges reaktorfizikai benchmark feladatokat definiálták, megoldották, valamint meghatározták az üzemzavar-elemzések elfogadási kritériumait. A jövőben elképzelt különböző típusok izotópháztartásának, az egyes típusokban kiegészített fűtőanyag más típusokban való újrahasznosításának vizsgálata a NAP pályázaton kívül folytatódott tovább.

Elkészítették a Budapesti Kutatóreaktor háromdimenziós reaktorfizikai modelljét, mely alkalmas mind a zónatervezésre, mind az üzemzavar elemzésekre. Megtervezték a kisdúsítású fűtőelemekből álló zónát, kiszámították az ún. reaktorfizikai keret-paramétereket mind a jelenlegi mind a kisdúsítású fűtőelemekből álló zónára.

Az üzemzavarok bizonytalansági elemzései témakörben kidolgozták a forrócsatorna számítások bizonytalansági elemzéseinek metodikáját (forrócsatorna faktor bizonytalanságának figyelembe vétele, termohidraulikai paraméterek bizonytalanságainak meghatározása, esetleg a forrásos krízis valószínűségi kezelése). A forrócsatorna számítás bizonytalansági elemzéshez felhasználták a korábbi vizsgálatok tapasztalatait, amelyek során ismertté váltak az eredményeket lényegesen befolyásoló paraméterek. Ezekben a vizsgálatokban a MUFURC

reaktorfizikai és a TRABCO termohidraulikai programokat használták. Ezen kívül elvégezték a bizonytalansági elemzések során alkalmazandó bizonytalan input paraméterek eloszlásainak meghatározását konzisztens matematikai módszerek alapján, nagyszámú mérési eredmény kiértékelésével (pl. indítási mérések).

Termohidraulikai kutatások (10 kutató, 183 M Ft ráfordítás, 119 M Ft pályázat)

A PA Zrt. megrendelésére a fűtőelem kazettában zajló keveredési folyamatok további kutatása keretében megterveztek - a PMK nagyberendezéshez kapcsolódóan - egy mérőkört, ahol a mérőszakasz egy fél kazetta hosszúságú, de névleges kazetta-geometriájú és részlegesen elektromosan fűthető kötegből és azon átlátszó anyagból elkészített 1:1 geometriájú kazettafejből áll. A tervezés során kiderült, hogy a köteg egyes elemeinek magyarországi elkészítése nem lehetséges, ezeket a paksi fűtőelemeket gyártó orosz cégtől kellett megrendelni. Az eredeti távolságtartó rácsok, keverőrács és központi rúd megérkezése után az év végén kezdődhetett meg a kötegmodell szerelése. Az év során a kísérleti munka keretében a PIV (particle image velocimetry) mérőberendezéssel egy kicsi, de a valódihoz hasonló bonyolultságú kötegrész modellen végeztek méréseket. Az eredményeket a FLUENT kóddal végzett számításokkal összehasonlítva igen jó egyezést tapasztaltak, ami a későbbi kódvalidációs eljárás sikere szempontjából igen biztató.

Az év második felében a paksi atomerőmű 4. blokkja már a megemelt – 108%-os – teljesítményen üzemelt. Ezen a blokkon a hidroakkumulátorokból a nem-kondenzálódó gázok primer körbe jutásának megakadályozására nagy pontosságú vízszintjelző rendszert alkalmaztak. A rendszer működésének ellenőrzésére a PA Zrt. egy kísérletsorozatot rendelt, amelynek a végrehajtásához egy 200 mm átmérőjű és 5000 mm hosszú csőszakaszból hidroakkumulátor modellt készítettek. A kísérletek azt bizonyították, hogy a megbízható működéshez a szintmérőrendszer átalakítására van szükség. Az eredmények figyelembe vételével a következő – 1-es – blokk a terveknek megfelelő időpontban megkezdheti működését a megemelt teljesítményszinten.

A GVOP AKF pályázat (Kondenzációból eredő vízűtés vizsgálata csővezetékben) keretében a fenti mérés miatt némi késéssel megtörtént a 200 mm átmérőjű és 5000 mm hosszú csőszakasz beépítése, és megkezdődött a speciális műszerezés kialakítása a pályázat második munkaszakasza szerinti mérések elvégzésére. A mérőszakasz olyan érzékelőkkel lett felszerelve, amelyek alkalmasak a kondenzáció okozta nyomáscsúcsok milliszekundum időtartamú mérésére. A berendezés nyomáspróbája és műszaki átvétele megtörtént, de a mérések csak 2007. elején kezdődhetnek. Megkezdődött a WAHA kód alkalmazása a kísérletek leírására: a nyomáscsúcs nagyságát a kód megfelelően adja vissza, de további vizsgálatot igényel, hogy mi okozza a számításokban periodikusan megjelenő, lecsengő nyomáscsúcsokat.

A paksi atomerőmű minden blokkjának a gőzrendszerén két db. ún. atmoszférába redukáló (AR) szelep van felszerelve, amelyek a szekunder oldali gőznyomást korlátozzák bizonyos üzemzavarok esetén. Ezen szelepek működési algoritmusai mások voltak az 1., 2. illetve a 3., 4. blokkok esetében. A PA Zrt. úgy döntött, hogy egységesíti az algoritmusokat és ezért azokat a biztonsági elemzéseket, ahol a szelepműködési algoritmus befolyásolhatja az üzemzavar

lefolysását, meg kellett ismételni. Ezeket az elemzéseket elvégezték, és az eredmények azt mutatták, hogy az egységes szelepműködési algoritmus megfelelő.

Folytatták a PA Zrt. megrendelésére a PTS elemzéseket támogató termohidraulikai elemzéseket 100% és 108% teljesítményszinten. E további számításokhoz a VEIKI valószínűségi megközelítés alapján kijelölte a PTS elemzésekkel vizsgálni szükséges tranziensek körét. A valószínűségi vizsgálatok a lehetséges üzemzavarok két területén mutattak PTS szempontból fontosnak értékelhető eseteket: egyrészt a leállás alatti üzemállapotban bekövetkező gőzvezeték törések esetei, másrészt olyan primer körű hűtőközeg veszteséssel járó folyamatok, ahol a folyamat késői – alacsony nyomású – állapotában a hűtőközeg veszteség megszűnik, pl. egy meghibásodott szelep visszazár. Ezeket a pótlólagos elemzéseket elvégezték és az eredményeket átadták további felhasználásra.

Számításokat végeztek annak alátámasztására, hogy a paksi atomerőmű blokkjaira kifejlesztett üzemzavar elhárítási utasítások a 108%-os teljesítményen üzemelő blokkok esetében is érvényben maradnak pl. egy teljes feszültség-kieséses üzemzavar esetén.

Folytatták a részvételt az OAH támogatásával az OECD BEMUSE projektjében, ahol a 2006. évi feladat a nagy-töréses LOFT kísérlet számításának bizonytalanság-elemzése volt. A GRS módszerrel alapuló vizsgálathoz 36 paraméter bizonytalansági eloszlás-függvényét határozták meg, majd ezek véletlenszerű variálásával 105 számítást végeztek. A folyamatot jellemző maximális burkolathőmérséklet bizonytalansága valamivel több, mint 300 K-re adódott.

Fűtőelem és reaktoranyag kutatások (16 kutató, 259 M Ft ráfordítás, 172 M Ft pályázat)

2006 januárjában indult az OECD-IAEA Paks Fuel Project, amely a 2003. évi paksi üzemzavar tudományos vizsgálatára irányul. A kétéves projektben magyar és külföldi résztvevők az üzemzavar számítógépes modellezésével foglalkoznak. A projektben az AEKI-re hárult a paksi üzemzavar adatbázisának összeállítása, valamint a partnerek tevékenységének koordinálása.

A CODEX berendezésen két nagyléptékű kísérletre került sor 2006-ban. A mérések során a paksi üzemzavarhoz hasonló körülményeket kellett előállítani annak érdekében, hogy a kísérletben reprodukálni lehessen a fűtőelemek tönkremenetelének módjait és mértékét. A kísérletek sok új információt szolgáltattak a fűtőelemek sérüléséről magas hőmérsékletű hidrogéndús vízgőz atmoszférában. Hasonló mérésekre eddig még sehol nem került sor.

2006. évi tervek között szerepelt a fűtőelemekre vonatkozó LOCA kritériumok felülvizsgálata is. Ennek már komoly előzményei vannak az AEKI-ben. 2006-ban néhány további mérésre, valamint a korábbi kísérletek feldolgozására és publikálására került sor.

A paksi atomerőmű részére 2006-ban számos elemzés készült a pihentető medence és az üzemanyag kezelő rendszerek üzemzavaraira. A téma nemzetközi érdeklődésre is számot tart, mert az atomerőműves biztonsági elemzések általában csak a reaktorra és a primerkörre terjednek ki és nem érintik külföldön sem a pihentető medencét. Az AEKI létrehozta a megfelelő számítási modelleket és nagyszámú elemzést hajtott végre. A számítások

eredményeként több olyan intézkedés bevezetésére került sor a Paksi Atomerőműben, amelyek szükségesek lehetnek a pihentető medence üzemzavarainak elhárításában.

Fontos fejlesztések történtek a FUROM és a TRANSURANUS fűtőelem viselkedési kódokban. A FUROM kódhoz új gázkibocsátási modell készült, míg a TRANSURANUS kódba – kísérleti adatokon alapuló – burkolat elridegedési modell került beépítésre, amely figyelembe veszi a hidrogén felvétel folyamatát is. A FUROM kóddal sikeres számítások készültek a Paksi Atomerőmű teljesítmény-változással járó tranzienseire.

Új berendezés létesült, amellyel lehetővé vált cirkónium mintadarabok hidrogénezése jól kontrollált körülmények között. Cseh-magyar együttműködésben alacsony hőmérsékletű (600 °C) mérésekre került sor, amelyekből származó minták minőségileg más szerkezetet mutattak, mint a korábban magas hőmérsékleten hidrogénezett anyagok.

A besugárzott burkolatanyaggal folyó mérésekben 2006-ban a rideg ötvözet kilágylását vizsgálták. Sikertült kimutatni, hogy bizonyos hőmérsékleteken és bizonyos hőkezelési idők elteltével a besugárzásból származó ridegedés elmúlik és az anyag visszanyeri eredeti mechanikai tulajdonságait.

Sikeres kísérletekre került sor a ruténium magas hőmérsékletű oxidációját és a ruténium-oxidok terjedését kutató mérési program keretében. 2006-ban az ún. fehér zárványokból származó kikerülést vizsgálták, amely azért fontos, mert a ruténium ilyen zárványok formájában van jelen a kiégett fűtőelemekben.

A reaktortartályok üzemidő hosszabbítási programjához a sugárkárosodás elridegítő hatásának ismerete alapvetően fontos. Az EU finanszírozású kutatási témák közül folytatódott az ún. mestergörbe alkalmazása az elemzésekben és a virtuális anyagvizsgáló reaktor fejlesztése. A Paksi Atomerőmű által finanszírozott PTS (nyomás alatti termikus sokk) elemzésekhez szükséges mechanikai modellt és a módszertant kidolgozták. A termomechanikai és törésmechanikai számítások elkezdődtek.

Részt vesznek az EU finanszírozású COVERS programban, amelynek célja a VVER reaktorok élettartamának meghosszabbításával kapcsolatos ismeretek összegyűjtése és cseréje. A projekt két tudományos munkacsoportjából az egyiket az AEKI vezeti (Szerkezeti anyagok öregedése). Folytatódott a PERFECT programban a törésmechanikai problémák többskálás modellezése. Részt vettek a HOTLAB, AMES, NESC, ATHENA EU hálózatok munkájában, előadásokkal, írott anyagok készítésével és találkozók szervezésével is. Az MTR+I3 programban témavezetőként vesznek részt a szuperkritikus nyomású besugárzó csatorna fejlesztésben. A programban résztvevő partnerek célja az anyagvizsgáló kutatóreaktorok eszközparkjának fejlesztése.

Az NKTH által finanszírozott NAP NUKENERG programban a fúziós és negyedik generációs fissziós reaktorok szerkezeti anyagainak vizsgálata folyik, valamint fűtőelem-viselkedési számítások. Elkezdődött a magas hőmérsékletű, szuperkritikus nyomású vízben lejátszódó korrózió tanulmányozása.

Operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése (9 kutató, 409 MFt ráfordítás, 263 MFt pályázat)

Folytatódott a Paksi Atomerőmű VERONA zónaellenőrző rendszer felújítása: először a teljesléptékű szimulátort kiszolgáló rendszert cserélték le, majd a 4. blokkon az üzemi rendszer átadása történt meg. Az őszi nagyjavítás alatt a 3. blokkon is végrehajtották az új rendszer üzembe helyezését és tesztelését, itt a kb. kéthónapos próbaüzem december közepén sikeresen befejeződött.

Az új rendszerre való teljes áttérést mindkét blokkon egyéves párhuzamos üzem előzte meg.

Az új rendszer fontos funkciót töltött be a 4. blokkon, ahol 2006-ban végrehajtották a reaktor teljesítményének 108%-ra növelését. Az 1485 MW zónateljesítmény elérése több lépcsőben történt, eközben már az új rendszer szolgálta ki operatív információval a blokkvezénylő személyzetét.

A teljesítménynövelés egyik feltétele volt az új zónaellenőrző rendszer jelentősen megnövelt modellezési és számítástechnikai kapacitása. Az új VERONA verzió a réginél részletesebb és pontosabb zónaanalízist biztosít, így – immár bizonyítottan – alkalmas arra, hogy a paksi reaktorblokkok növelt teljesítményen történő biztonságos üzemeltetéséhez előírt pontossági és megbízhatósági követelményeket teljesítse.

2006-ban folytatódott a Paksi Atomerőműben működő reaktor zajdiagnosztikai rendszerek átfogó felújítása, mely 2005-ben kezdődött meg egy előzetes verzió telepítésével a 3. blokkon. A 3. blokkon a 2006-os nagyjavítás alatt telepítették a PAZAR adatgyűjtő rendszer végleges (teljes kiépítésű) verzióját. Teljes kiépítésű PAZAR adatgyűjtő változat került 2006-ban a 4. blokkra is, így az új rendszer már két blokkon működik üzemszerűen.

A jövő évi munka előkészítéseként 2006 őszén sikeresen lezajlott az 1. blokkra telepítendő PAZAR konfiguráció ún. gyártóművi tesztje és a mérő-modulok szisztematikus ellenőrzése.

A PAZAR a paksi zajdiagnosztika mérőrendszerek egy új generációja, amely megbízható hardver elemeket tartalmaz, osztott architektúrában működik és modern a kezelői felülete. A PAZAR adatgyűjtő a régi rendszerhez képest többszörös mérőkapacitással rendelkezik, ezáltal számos új lehetőséget ad a technológiai rendellenességek kimutatására a zajdiagnosztika, a jelhitelesítés és a korai meghibásodás diagnosztika eszközeivel.

Atomerőművi szimulációs kutatások (9 kutató, 346 M Ft ráfordítás, 124 M Ft pályázat)

Folytatódtak a csökötegben zajló keveredési folyamatok nagy örvény szimulációi. Megtörtént a számítási eredmények összehasonlítása mérésekkel. Az összehasonlítás során nem csak a hűtőközeg sebességének várható értékei, de a Reynolds feszültségek, tehát a sebesség fluktuációk korrelációinak várható értékei is jó egyezést mutattak. Egy hipotézis készült a normál feszültségekben megfigyelt kismértékű eltérések magyarázatára, amelynek ellenőrzése jelenleg folyik.

Spainol kollégákkal együttműködve a rács Boltzmann módszer képességeit vizsgálták részletesen, turbulens áramlások esetére. Összevetve a koherens struktúrák legjellemzőbb

mérhető paramétereit, kiváló egyezést mutatkozott a rács Boltzmann szimuláció eredményei és spektrális számítások eredményei között.

Folytatódtak a magnetohidrodinamikai vizsgálatok, melyek során a "z pinchben" megfigyelhető instabilitási mechanizmusokat tanulmányozták. Egy két kötetes jelentés készült, amelyben össze vannak foglalva a fúziós és físsiós kutatások szempontjából közös területek. A jelentésben részletesen be vannak mutatva azok az elképzelések, amelyek szerint az ITER is készülni fog.

Modellrendszer készült a negyedik generációs erőművek termohidraulikai problémáinak vizsgálatához, majd bemutatták, hogy a pszedukritikus hőmérséklet közelében megfigyelhető anomáliás hőtranszport jelenségek egy szokatlan hőátadási mechanizmus, az ún. piston effektus figyelembe vételével magyarázhatók. A modellrendszer segítségével olyan alapvető hőátadási, és az azokhoz társuló hidrodinamikai folyamatokat vizsgáltak mint pl. a Rayleigh-Benard konvekció megindulása szuperkritikus nyomáson. A kapott numerikus eredmények kiváló egyezést mutattak az elméleti eredményekkel, lehetővé téve a modellrendszer alkalmazását összetettebb feladatok esetén is.

A NURESIM nemzetközi projekt keretein belül folytatódtak a buborékos áramlások numerikus vizsgálatai. Buborék növekedését és annak falról történő leválását modellezték, és megkezdtek ezeknek a numerikus eredményeknek is az összevetését a mérésekkel. A forrás jelenségének vizsgálatánál egyértelműen kiderült, hogy a folyamatok helyes leírásához igen részletes forrás modellre van szükség, amely különbséget tesz a tömegtranszport számítása során az ún. mikroréteg és a buborék egyéb felületei között. Megkezdődtek a buborék leválási vizsgálatok csökötegben is.

Gyakorlati feladatként át kellett alakítani a paksi teljesléptékű szimulátor modell rendszerét, a valós blokkokon végrehajtott technológiai változtatásoknak megfelelően, hogy ez alkalmassá váljon a 108%-ra növelt teljesítményű üzem hiteles oktatására.

Új, modern instruktori rendszer készült a szimulátorhoz, amelynek funkciói jelentősen bővültek: többek között lehetségessé vált a visszajátszás (re-play) üzem, és egy BlueTooth-os PDA rendszerbe állításával létrejött a távolról vezérelhető üzem. Ennek segítségével az alapoktatás alkalmával az instruktork - ha úgy ítéli jónak - a vezénylőben együtt tartózkodhat az oktatott személyzettel.

Anyagtudományi kutatások (13 kutató, 137 M Ft ráfordítás, 54 M Ft pályázat)

Nagyérzékenységű nukleáris analitikai módszer került kidolgozásra üvegszálak komponenseinek meghatározására, a szálak légzőrendszeri kiüledésének és egészségre gyakorolt hatásának vizsgálatára. A hagyományos aktivációs analitikával összehasonlítva a most kidolgozott epibóros besugárzás előnyösen alkalmazható kedvezőtlen mátrixok esetében (pl. geológiai, biológiai minták). A mintegy 110, az aktivációs analitikában használatos közepes és hosszú felezési idejű izotópot keltő (n, γ) magreakció közül 30-ra az adott bóros arányekolástól függő korrekciós tényezők meghatározására kerültek.

A Budapesti Kutatóreaktorban (BKR) elvégzett vízkémiai vizsgálatok során neutron aktivációs analízissel határozták meg a klorid, a bromid és a jodid ionok, oldott és lebegő korróziós fémek (Al, Fe, Cr, Mn, Cu, Co) koncentrációit a primerköri hűtőközegben. A normál üzemmenet során, illetve átmeneti üzemiállapotokban (indítás és leállást követően) kapott értékeket összehasonlították a megfelelő hatósági korlátokkal.

Az MTA Izotópkutató Intézet munkatársaival együttműködve új, roncsolásmentes gamma-spektrometriai mérési eljárás kidolgozására került sor urán tartalmú minták vizsgálatára, a minták lehetséges eredetének meghatározása céljából. A mérési módszer a $^{214}\text{Bi}/^{234}\text{U}$ leány/anyaelem izotópok aktivitás arányának meghatározásán alapul. A módszer alkalmas tetszőleges alakú és formájú minták, így reaktor fűtőelemek kormeghatározására is.

Megmérték a dimetilelilén karbamid nehézvízes oldatainak kisszögű neutronszórását és sűrűségét a koncentráció és hőmérséklet függvényében. Az eredményekből következtetéseket vontak le az oldott anyag hidratációs szférájának szerkezetére, valamint a molekulák közötti kölcsönhatásokra.

Kidolgozásra került egy módszer, amellyel ellenőrizni lehet a biztonsági analízisben alkalmazott statisztikai becslés megbízhatóságát. Folytatódott a zajos jelekből történő állapotváltozás detektálásra alkalmas módszerek vizsgálata.

Elkészültek az első ipari jellegű tárgy (gáz nyomásszabályzó) diszkrét neutron tomográfiai felvételei és kiértékelésre kerültek az ie. IV. századból származó tiszti sisak radiográfiai képei is.

A korróziós kutatások területén, a PERFECT EU 6. keretprogramban folytatódott a rozsdamentes acélok korróziós mechanizmusának meghatározása szobahőmérsékleten, valamint magas hőmérsékleteken (300°C -on) és nagy nyomáson is, melyek a működő atomreaktor primer körének körülményeit modellezzik. Az Országos Atomenergia Hivatal támogatásával szobahőmérsékletű és magas hőmérsékletű elektrokémiai vizsgálatok folytak a fűtőelem-burkolatanyagként használatos Zr-1%Nb lokális és feszültségkorróziós viselkedésének leírására.

A Paksi Atomerőműben 2003-ban bekövetkezett üzemzavarral kapcsolatban – az Országos Atomenergia Hivatal támogatásával – meghatározásra került, hogy az urán és számos hasadási termék milyen mértékben kötődik meg a $20\text{-}60^{\circ}\text{C}$ hőmérséklettartományban rozsdamentes acél és Zr-1%Nb felületén.

Elkészült a szuperkritikus víz tulajdonságainak tanulmányozását biztosító mintatartó család első két tagja A berendezésekben már több alkalommal sikerült szuperkritikus állapotba hozni a vizet.

Az urán oxidációs állapotát vizsgálták a mecseki meddőhányó még fedetlen részéről vett mintákban és eredeti uránérc mintákban μ -XANES módszerrel. Az urántartalmú részecskék azonosítása besugárzást követően szilárd fázisú nyomdetektorral történt. Megállapításra került, hogy a meddőben az urán nagyobb részben a kevésbé mobilis +4-es, kisebb részben +6-os oxidációs állapotban van. Az eredeti uránércből nyert részecskékben a két oxidációs állapot aránya nagyon változó, de összességében az oxidáltabb forma dominál.

Sugárvédelmi és környezetfizikai kutatások (20 kutató, 362 M Ft ráfordítás, 192 M Ft pályázat)

A Sugárvédelmi Laboratórium két területen végez széleskörű kutatásokat. Az egyik téma a kozmikus sugárzás monitorozására alkalmas berendezések építése, illetve az emberi egészségre gyakorolt hatás modellezése, a másik az energiatermelés és a közlekedés környezeti kárainak becslése.

Az űrkutatásban nemzetközi szinten is kiemelkedő eredményeket értek el. Részt vettek a ESA (Európai Űrügynökség) szervezésében a Nemzetközi Űrállomáson folyó kozmikus sugárzási vizsgálatokban és ennek keretében elsőként határozták meg egy űrsétát szimuláló emberszerű fantom tüdejében és veséjében a kozmikus sugárzás dózist. Részt vettek az ESA űrbiológiai programja keretében a Foton-M3 biológiai műhold kísérlet előkészítésében, ebben kidolgoztak egy teljes űrdozimetriai rendszert, melynek megvalósítására és a műhold felbocsátására 2007. szeptemberben kerül sor orosz hordozórakéta felhasználásával (Biopan program). Részt vettek a jelenleg is folyamatban lévő, a Nemzetközi Űrállomáson folyó kozmikus sugárzás dózisviszonyainak feltérképezésében az orosz űrprogram keretében (Brados program). Ezen eredményekkel a magyar űrkutatás továbbra is az élvonalban maradhat.

Az AEKI-ben kifejlesztett és elkészített, a Nemzetközi Űrállomás orosz moduljára (Zvezda) 2003-ban feljuttatott Pille dózismérő rendszerrel folyamatosan méréseket végeznek a dóziseloszlás feltérképezésére, illetve mérik az űrhajósok személyi dózist űrséták alatt és rendkívüli naptevékenység idején. Sikeresen megtörtént a Pille tapasztalatai alapján kifejlesztett földi, kereskedelmi célú PorTL rendszer típusvizsgálata és engedélyeztetése az Országos Mérésügyi Hivatalban. Ezzel olyan eszköz jött létre, amely forradalmasíthatja a földi, illetve a repülőgépek utazási magasságában elszenvedett kozmikus dózisok mérésének technikáját.

Folyamatosan végzik az ESA Rosetta üstököskutató szonda Philae leszálló egységére az AEKI közreműködésével készített plazma- (ROMAP/SPM) és pordetektor (SESAME/DIM) repülés alatti ellenőrzését, a teszt-adatok kiértékelését, a további tesztek és a leszállási program előkészítését, valamint azok földi kalibrálását.

A sugárzás és a légszennyezés kis dózisainak biológiai hatása több tudományág alapkérdésévé vált. E tématerületeken alkalmazott modellek egyik legnagyobb gyengesége, hogy azok nem veszik figyelembe a légzőrendszer igen komplex geometriáját. Ezért az elmúlt évben új módszert dolgoztak ki az emberi bronchiális légutak morfológiájának digitalizálására orvosi képalkotó eszközök felhasználásával. A módszer lehetővé teszi, hogy realizitikus három-dimenziós légúti geometrián is lehessen mikrodozimetriai számításokat végezni.

A lineáris küszöb nélküli dózis – biológiai hatás elemzéséhez részletesen vizsgálták, hogy az uránbányában dolgozó munkások tüdejében, hogyan alakul a rákkeltekezés szempontjából legfontosabb mikrodozimetriai paraméterek sejtszintű eloszlása a centrális légutakban a bányában töltött idő függvényében. Ezen eredményeket felhasználva, az előző évben kifejlesztett komplex mikrodozimetriai modell segítségével meghatározták a tracheo-bronchialis sejtek inaktíválódásának, illetve transzformálódásának valószínűségét a centrális légutak sejtjeire. Ezzel létrehozták és alkalmazták az első biofizikai mechanizmusokon alapuló tüdőrákkeltekezési modellt. A modell segítségével becsülhető lesz pl. a magas

radonhátterű lakások, munkahelyek, barlangok tüdőrák-kockáza, ami nemdohányosoknál és passzív dohányosoknál is az első tüdőrák-kockázati tényező (US EPA 2005). E modellnek nemcsak alapkutatói, hanem nemzetgazdasági haszna is jelentős, hiszen a kockázat pontosabb becslésével költséghatékony munkaegészségügyi szabályozás lehetséges.

Az Atomenergia Kutatóintézetben korábban kifejlesztett, a nukleáris baleset-elhárításban alkalmazott SINAC környezeti szimulátor programrendszer továbbfejlesztése keretében új tápláléklánc modell került beépítésre. A program figyelembe veszi a radioaktív anyagok légköri terjedésénél a csapadék formáját is. Mindez jelentősen növelte a modell pontosságát.

Az energia környezeti kárbebecslésben a nukleáris energiacyklus esetében a bányásztól származó kollektív dózis adja a legnagyobb járulékot, ezért a mecseki rekultivált uránbánya környezetét vizsgálták. Ezen belül elsősorban a bánya területén gyűjtött kezeletlen uránérc meddőben és zagyban megmaradt urán toxicitását. A mintákból szilárdtest nyomdetektorral azonosított nagy urántartalmú részecskéken az arzén és az urán kémiai állapotát mérték röntgenabszorpciós módszerrel. Megállapították, hogy az arzén a zagy részecskéken a redukáltabb arzenikus pirit formájában és toxikus, mobilis As(III) formában, míg az urán 50–80%-ban a kevésbé mobilis, redukált U(IV) formában volt jelen. Az eredeti érceben az oxidáltabb As(V), illetve U(VI) forma dominált. Ennek az oxidációs állapotváltozásnak az oka az uránérc kémiai kitermelése során felhasznált adalékanyagok hozzáadása következtében létrejövő kémiai redukció. A mecseki technológia esetén tehát nagyobb környezeti kockázatot jelent az arzén, mint az urán.

Az erőművek környezeti külső költségeinek aktualizálása céljából felmérték a magyarországi energiapolitika célkitűzéseit és a villamosenergia-termelés légköri kibocsátásának alakulását, amely az utóbbi két évben jelentősen lecsökkent. Ennek fő okai a földgáz felhasználásának nagy mértékű emelkedése, a szén- és lignittüzelésű erőműveknél kibocsátás-csökkentő technológiák alkalmazása, valamint a biomassa nagyobb mértékű bevonása a villamosenergia-termelésbe. Így a hőerőművekben megtermelt villamos energia 2005-ben jelentősen kisebb külső költséggel járt, mint 2004-ben. Az okozott egészségi kár pontosabb számításához elvégezték a légúti és érrendszeri betegségekre, valamint a halálozási arányra vonatkozó epidemiológiai adatok frissítését.

Átütő eredményt értek el a repülőtér levegőminőségének általános monitorozásában, melyre Ferihegyen először került sor. Kilenc különböző helyszínen gázokat, aeroszolókat, ezen belül kormot, gumi szemcséket és poliaromás szénhidrogéneket mértek aktív és passzív eszközökkel. Távérzékelésen alapuló optikai és infravörös spektroszkópiával határozták meg a 31L futópálya és a taxiút szennyezettségét. A Budapest Airport közreműködésével a forgalom és a mért nitrogénoxid koncentrációk korrelációja különböző időskálákon is kimutatható volt. A forgalom és a levegőminőség összefüggéseinek komplex vizsgálatához óriási adtbázisok szükségesek. Megtörtént a meteorológiai, légiforgalmi és szárazföldi forgalmi adatok gyűjtése és feldolgozása a későbbi repülőtéri diszperziós modell kidolgozásához és validálásához, mely megalapozza a jövőbeni környezetvédelmi mérőhálózat tervezését.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének fő eredményei (7 kutató, 211 M Ft ráfordítás, 67 M Ft pályázat)

A Budapesti Kutatóreaktor nagyberendezéseinek hazai intézetek munkatársai ill. külföldi kutatók végezhetnek kísérleti munkát. Minden kutatónak pályáznia kell a mérési időre. Pályázati felhívás évente kétszer jelenik meg a Budapesti Kutatóreaktor Műszerközpont honlapján és szakmai folyóiratokban. A pályázatokat nemzetközi bíráló bizottság értékeli és rangsorolja. A kiválasztás fő szempontjai a tudományos érték, az új kutatási téma, Ph.D vagy diplomamunka. Az évente beérkező rendkívül nagy mérési idő igény miatt a kiváló és jó pályázatok számára tud a Műszerközpont mérési kapacitást biztosítani.

2004-től a Budapesti Kutatóreaktor Műszerközpont résztvevője az NMI3 –The Integrated Infrastructure Initiative for Neutron Scattering and Muon Spectroscopy – az EU FP6 által támogatott programnak. Az NMI3 programnak 23 résztvevője van 14 országból. A Műszerközpont a Budapesti Kutatóreaktorhoz kapcsolódó nagyberendezéseket ajánlotta fel az európai kutatók számára. A program keretében érkező kutatók utazási támogatást is kapnak. A négy és fél éves program költségvetése 480 000 €. 2006-ban a BKM az EU-s feltételeknek megfelelő pályázatok közül 17 projektet támogatott 79 reaktornappal és 25 kutató számára biztosított mérési lehetőséget berendezéseinek. A 25 kutató közül 19 utazási támogatásban részesült. A projektek többsége, 56 %-a fizikai, 16 %-a kémiai, 12 %-a mérnöki tudományokra vonatkozott, emellett említést érdemelnek a földtudományok és a biotechnológia terén végzett kutatások is. Néhány kutatási téma az elmúlt év témái közül: régészeti tárgyak vizsgálata, növényi membránok, bórszilikát alapú üvegfázisok vizsgálata, a nanokristályos anyagok szerkezetének kutatása vagy az energia-, és nukleáris iparban használt szerkezeti anyagok vizsgálata.

Az eredmények gazdasági-társadalmi haszna

A kutatások és fejlesztések eredményei alapvetően két területen hasznosulnak. Az első terület a magyar atomerőmű, ahol a kutatási eredmények egy része közvetlenül hasznosul. A másik terület a magyar nukleáris hatóság (OAH) ahol az eredmények hasznosulási formája az ellenőrzés, engedélyezés, felügyelet minőségének a javulása. Mindezen területeken azonban jelentős az eredmények nemzetközi hasznosulása is.

Az eredmények hasznosulásának új, valóban nagy jelentőségű területe lehet az új típusú energiatermelési módok kutatása, kifejlesztése. Ezen a területen döntő esemény a 2005-ben az NKTH által kiírt NAP-2005 pályázaton elnyert hároméves támogatás, ami lehetővé teszi, hogy az intézet bekapcsolódjon a negyedik generációs atomerőművek kifejlesztésére irányuló nemzetközi erőfeszítésbe. A NAP-2005 biztosítja az intézet szerény mértékű részvételét a távlatilag legperspektivikusabb energiatermelési mód, a magfűzión alapuló erőmű kutatásában is.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének eredményeként ma Magyarország az EU új tagállamai közül egyedül rendelkezik olyan tudományos nagyberendezéssel, amit az EU működés részbeni finanszírozásával elismer.

Az űrelektronika, űrdozimetria területén elért eredmények a NASA, ESA révén hasznosulnak.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézetben található az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar Kémiai Intézetének és a Pannon Egyetem Vegyészmérnöki Karának kihelyezett laboratóriuma.

Az intézet kutatói mind az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán, mind pedig a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Karán aktívan részt vesznek mind az alapoktatásban mind pedig a posztgraduális képzésben. Az ELTE-n az AEKI kutatói a vegyészet, ezen belül a fizikai kémia oktatásában tevékenykednek, a BME-n pedig a nukleáris technika, ezen belül elsősorban a reaktorfizika területén. Ez utóbbi területen a mérésiértékelés témakörében sikerült iskolát teremteni, aminek eredményei a gyakorlati életben is jelentősek.

Nemzetközi kapcsolataik fontos részét képezi az EU projektekben való részvétel, kiterjedt nemzetközi kapcsolataik vannak számos kutatóintézetrel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

Az intézet kutatási céljainak eléréséhez, a nemzetközi projektekben való részvétel miatt, de egyéb szempontokból is, jelentősen hozzájárultak a kutatók külföldi útjai. Az MTA kétoldalú egyezményes útjai különösen jelentős szerepet játszottak. A TÉT kapcsolatok keretében megvalósult utak a saját finanszírozási utakhoz hasonlóan fontos együttműködésekhez adtak segítséget.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A hazai pályázatok közül a legfontosabb az intézet jövője szempontjából a NAP-2005, amely három évre biztosítja a perspektivikus energiatermelési mód (negyedik generációs atomerőművek, fűzió) kutatásának lehetőségét. Az NKFP és GVOP pályázatok fontos szerepet játszanak az intézet témaválasztékának bővítésében.

Az elnyert nemzetközi pályázatok mintegy fele az EU keretprogramjaiból származik, és ezek jelentősége abban áll, hogy a korszerű atomenergetikához kapcsolódó nemzetközi kutatásokhoz biztosít kapcsolatot. A legnagyobb összegű EU pályázat a kutatóreaktor európai hasznosítását teszi lehetővé. Jelentős a fűziós (EFDA) valamint az ürelektronikai pályázatok szerepe is.

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

1. Hordósy G., Hegyí Gy., Keresztúri A., Maráczy Cs., Vértes P., Zsolnay É: Comparison of the Results of the Calculational and Experimental VVER-440 Pressure Vessel Dosimetry at Paks NPP, Journal of ASTM International, 3, 8 (2006)
2. Hordósy G.: Coupled Neutron-Gamma Calculations for the LR-0 Experimental Benchmark, Journal of ASTM International, 3, 9 (2006)

3. Czibók T, Dezső Z, Horváth Cs, Lipcsei S, Végh J, Pócs I: A modernized and versatile startup reactivity measuring system installed at NPP Paks and its application for subcritical systems, Nuclear Engineering and Design 236, 2356-2364 (2006)
4. Lipcsei S, Kiss S, Kiss G: Evaluation of long-term neutron noise measurements, Proc. of the 5th ANS International Topical Meeting on Nuclear Power Plant Instrumentation, Controls and Human-Machine Interface Technologies (NPIC-HMIT), November 12-16, 2006, Albuquerque, New Mexico, USA.
5. Hózer Z, Maróti L, Windberg P, Matus L, Nagy I, Gyenes Gy, Horváth M, Pintér A, Balaskó M, Czitrovsky A, Jani P, Nagy A, Prokopiev O, Tóth B: Behavior of VVER fuel rods tested under severe accident conditions in the CODEX facility, Nuclear Technology 154, 3, 203-317 (2006)
6. Debarberis L, Acosta B, Zeman A, Gillemot F et al.: Analysis of WWER-440 and PWR RPV welds surveillance data to compare irradiation damage evolution, Journal of Nuclear Materials, 50, 2, 173-181 (2006)
7. Tar D, Baranyai G, Ézsöl Gy, Tóth I: PIV System for Fluid Flow Measurement in Fuel Assembly of Nuclear Reactor, The 13th Event of International Conference Series on Fluid Flow Technologies Held in Budapest, Conf. Proc., 586-590, (2006)
8. Nagy G, Horváth, Á, Kerner Zs, Schiller R, Pintér T, Patek G: Aftermath of a non-nuclear incident: Estimation of the active deposit in the primary circuit of a nuclear reactor, Indian Journal of Radiation Research, 3, 78-82 (2006)
9. Házi G, Kávrán P: On the cubic velocity deviations in lattice Boltzmann methods, Journal of Physics A: Math. and Gen., 39, 3127 (2006) (IF 2005=1,566)
10. Osán J, Kurunczi S, Török Sz, Varga I: Röntgenfluoreszcens spektrometria. Záray Gy (szerk.), Az elemanalitika korszerű módszerei, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006, 353-416. ISBN 963-05-8243-0

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: KFKI Atomenergia Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	192	Ebből kutató ² :	97
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			35
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			95
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			86
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	41	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	4
nemzetközi együttműködés keretében:	19	SCI által regisztrált folyóiratban:	40
összesített impakt faktor:	49,265	összes hivatkozás száma ⁴ :	149
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			109
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	1
<i>idegen</i> nyelven könyv:	1	könyvfejezet:	2
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	0	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	72	poszterek száma:	23
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			7
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			739 MFt
Beruházási támogatás:	8 MFt	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	5
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			6 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			4
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	54 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	7 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			56 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			23
EU forrásból:	11	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	43 MFt
Egyéb:	12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	31 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			5
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			41 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			61
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			867 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			178 MFt

KFKI RÉSZECSEKE- ÉS MAGFIZIKAI KUTATÓINTÉZET

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

Telefon: 392-2512, Fax: 392-2598,

e-mail: sznagy@rmki.kfki.hu, honlap: www.rmki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet a beszámolási időszakban alapító okiratában rögzített feladatainak megfelelően eredményes kísérleti és elméleti tudományos alapkutatást végzett a részecskefizika, a magfizika, a plazmafizika, a hűtött atomok fizikája, az űrfizika, a nukleáris szilárdtestfizika, a nukleáris anyagtudomány és a fizika biológiai alkalmazásai területén. Fejlesztési tevékenységének területei: lézerfizika, nukleáris analitika, plazma diagnosztika, űrtechnika, gyors adatfeldolgozás, spektroszkópia, speciális elektronikus, mechanikai és információ-technológiai eszközök, szoftver-fejlesztés. Működtette és fejlesztette nagyberendezéseit, az EG-2R gyorsítót, a hozzá kapcsolt NIK nehézion-implantert, a molekulanyaláb-epitaxia berendezést, a kutatást és a kapcsolatokat szolgáló GRID rendszerű és más nagykapacitású számítógépes hálózatait. A KFKI telephelyen kialakított megállapodásoknak megfelelően felügyelte a telephelyi számítástechnikai központot, amely fenntartja, működteti és fejleszti a KFKI Telephely számítástechnikai hálózatát, fejleszti annak a biztonságát erősítő eszközöket, és ellátja a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program regionális központi feladatait.

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

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion fizika.

2006-ban az RMKI nagyenergiás kutatóinak tevékenysége a CERN-ben 2007 őszén induló LHC (Large Hadron Collider) gyorsító kísérleteire való felkészülésre koncentrált, amely elsősorban az ALICE és a CMS detektorok építési, kalibrálási és szoftverfejlesztési munkálatait jelentette. Ezzel párhuzamosan folytatódtak azok az adatfeldolgozási munkálatok, amelyek a LEP és a SPS NA49 kísérletnél gyűjtött adatokat használták fel. Előkészületek történtek az SPS gyorsítónál egy új proton-proton és nehézion kísérlet beindítására, amely a kvark-hadron fázisátalakulás kritikus pontját keresi. Ebben a kísérletben a magyar kutatók vezető szerepet játszanak.

A CERN Antiproton-lassítójánál dolgozó, Tokió-Bécs-Budapest-Debrecen együttműködés (ASACUSA-kísérlet) kutatócsoportja rádiófrekvenciás utólassító segítségével keV-es energiájú antiprotonokat fékezett le és fogatott be atomi pályára kisnyomású (0,5-10 hPa), 6 K hőmérsékletű He-3 és He-4 gázban, és frekvenciafésűvel ellátott lézerrendszer segítségével megmérte antiprotonok 12 atomi átmenetének energiáját 10^{-8} relatív pontossággal. Ez a módszer lehetővé teszi az antiproton tömegének rendkívül pontos meghatározását, és egyben az anyag és antianyag szimmetriáját kimondó CPT-invariancia pontos kísérleti ellenőrzését. A 2006-ban elért legújabb eredmény szerint 90%-os konfidencia-szint mellett a proton és az antiproton tömege és töltése $2 \cdot 10^{-9}$ -nél kevésbé különbözik, azaz a CPT-invarianciától való eltérés $2 \cdot 10^{-9}$ -nél kisebb. Ebben a kutatásban a Tokiói Egyetemmel és a bécsi Stefan Meyer

Intézzel együttműködésben 3 RMKI-s kutató vállalt részt 18 MFt intézeti és 2,5 MFt OTKA-támogatással.

A CERN NA49 kísérlet RMKI-s csoportja a proton-proton és proton-atommag ütközésekben létrejövő, nagy transzverzális impulzussal rendelkező töltött részecskék azonosítását végezte el. A kapott eredmények megerősítették az előző évben publikált, ólom-ólom ütközésekben megfigyelt, a részecske-hozam elnyomására utaló jelenségét. Így ezen az alacsony energián is sikerült kimutatniuk a korábban, jóval nagyobb energián, a RHIC gyorsítónál kimutatott effektust, amely a kvark-gluon plazma megjelenésének egyik karakterisztikus jele. Ezzel párhuzamosan sikeresen lezajlott a 2008-2011-es CERN SPS kísérleti periódusra való felkészülést szolgáló tesztmérés, mely egyben egy új detektorkomponens, egy nem sík-geometriájú ún. GEM (Gas-Electron Multiplier) típusú detektor első tesztelése is volt. Az NA49 témán 10 kutató dolgozik, 60 MFt RMKI ráfordítással.

A PHENIX kísérletben új skálaváltozót bevezetve igazolták, hogy a tökéletes folyadék hidrodinamika egzakt megoldásainak jóslata teljesül a RHIC Au+Au és Cu+Cu ütközéseiben. A transzverz kinetikus energiát a hadronokat alkotó vegyérték-kvarkok számával átskálázva olyan új skálaváltozót vezettek be, amelynek segítségével a hidrodinamikai és az átmeneti 2-5 GeV-es transzverz impulzus tartományban közös skálaviselkedés lép fel. Ennek segítségével arra következtettek, hogy a 2005 során felfedezett tökéletes folyadékban a vegyérték kvarkok jelentik az elemi szabadsági fokokat. (1 kutató, 6 MFt RMKI és 1 MFt OTKA támogatás)

A hadronkeltés modelljeit vizsgálva megmutatták, hogy a TeV-es energiakálán megfigyelt multiplicitás eloszlások kétsúcós szerkezete a szokásos kétkomponensű dinamikai leírás helyett egyetlen hadronkeltési komponenssel is leírható. A modellben a korrelálatlan klasztereken belül keltett hadronok száma hatványfarkú eloszlást követ. A hatványtörvény fizikai eredetére két lehetséges magyarázatot is kidolgoztak és jóslatot adtak az LHC-n várható multiplicitás eloszlások alakjára. (1 kutató, 6 MFt RMKI ráfordítás)

A Detektorépítő Csoport elvégezte a CERN ALICE kísérlet adatgyűjtő rendszeréhez tervezett Detector Data Link (DDL) hálózati kártyák gyártás utáni tesztjeit és elkezdték a kártyák installálását. A debreceni ATOMKI és a svédországi Svedberg Laboratory, (Uppsala University) ciklotronjaiban végzett sugárzástűrési tesztek igazolták, hogy a kísérlet követelte sugárzási körülmények között a kártyák jelzik az adatgyűjtő rendszernek, ha sugárzás következtében adathiba fordul elő. A fenti munkához a csoport elnyerte a Nemzeti Fejlesztési Terv (GVOP) támogatását. Ebből a 2006. évi felhasználás 9,5 MFt volt. A témán 4 kutató dolgozott 24 MFt RMKI ráfordítással.

Kiértékelték a pion+mag ütközéseket és meghatározták a ritka részecskék (kaonok és lambdák) keltési hatáskeresztmetszetét. Kiértékelték az esetleges kaonikus klaszterek kimutatására végzett méréseket és ennek alapján pontosították a további mérések paramétereit. A driftkamrák nagyfeszültség-ellátását a ramping alkalmazásának megfelelően átalakították. Az RMKI-ban a darmstadti GSI-ben folyó FOPI kísérlethez legyártották az RGPC detektorok mechanikáját, a GSI-ben összeszerelték és bemérték a detektorokat. Az eredményeket 51 kutató érte el, közöttük 3 RMKI-s munkatárs (18 MFt RMKI ráfordítás és OTKA pályázati forrás).

A molekulanyaláb-epitaxia (MBE) berendezés 2006 januárjától üzemszerűen működik, az év folyamán összesen 65 mintát készítettek. Sikerült előállítani igen jó minőségű antiferrromágnesesen csatolt $^{57}\text{Fe}/\text{Cr}$ multirétegeket, valamint olyan $^{\text{nat}}\text{FePd}/^{57}\text{FePd}$ izotóp multirétegeket, melyekben a rendezett fázis aránya meghaladta az eddig publikált legnagyobb értéket. Saját fejlesztésben megoldották az egyes források pneumatikus fedőlemezei mozgatójának számítógépes vezérlését.

Megállapították, hogy ha 1 μm vastag polyszilíciummal elzárt oxidsziget közepébe héliumot implantálnak, akkor az csak a besugárzott folton mutatható ki. Ezzel a SiO_2 -beli hélium-csapdák létezését bizonyították. Mivel a hélium mélységeloszlása jelentősen különbözik a szilíciumba történő implantáció esetétől, arra következtettek, hogy ezeknek a csapdáknak a mélysége lényegesen kisebb, mint a szilíciumban.

Impulzuslézeres technikával előállított a-C:H, illetve SiC_x vékonyrétegeket ionsugaras analízissel vizsgálva optimalizálták a szerkezeti anyagok felületi tulajdonságait javító bevonatokként használható gyémántszerű szénrétegek előállításási paramétereit. A SiC_x mintáknál megállapították, hogy az összetétel változtatásával a rétegek sűrűsége tendenciájában követi a tömbi módosulatok (tetraéderesen kötött amorf szén, grafitos jellegű szén, szilícium-karbid, és szilícium) jellemző sűrűségeinek változását.

Spanyol együttműködésben optikai és visszaszórásos spektrometriával megállapították, hogy a porózus szilícium rétegek mélységükben homogének voltak; a porozitás és az oxidációs fok csak kismértékben csökkent a felülettől a porózus réteg végéig. A porózus réteg és a szilícium határfelületén egy alacsonyabb porozitású réteg alakul ki, és ez nem függ a porózus réteg előállításánál alkalmazott áramsűrűségtől. Ezen eredményeket 13 kutató érte el, közöttük 4 RMKI-s, 2 MFT intézeti és 2,5 MFT pályázati forrás felhasználásával.

Kimutatták, hogy néhány monorétegnyi vasat tartalmazó Ag-Fe-Ag rétegekben Fe-Fe szemcsés rétegek keletkeznek. MgO felületére MBE-ben 3–25 monoréteg Fe leválasztásával, majd annak ezüsttel történő lefedésével készült vékonyrétegek esetében hasonló kettősrétegek képződést figyeltek meg. Nagyenergiájú Au ionokkal implantált Cr/Fe rétegekben megállapították, hogy még 10^{11} atom/ cm^2 körüli dózis esetén is jelentős Fe-Cr atomi keveredés történik úgy, hogy eközben a mágneses anizotropia még nem változik meg jelentősen. A vassal implantált Si, majd lézerbesugárzás hatására képződő Fe-szilicidok szerkezete $\text{Fe}_x\text{Si}_{(1-x)}$ tércentrált köbös és fluorit típusú szerkezet közötti atomi elrendezésre utalt. Kismennyiségű vasat tartalmazó $\text{PbTi}_{0.4}\text{Zr}_{0.6}\text{O}_3$ piezoelektromos kristályban vakancia- Fe^{3+} ionklasztereket találtak. A piezoelektromos kristályok memóriák, detektorok kialakításában játszanak fontos szerepet. A megfelelő elhelyezkedésű vas szennyező jelentősen javíthatja az eszközök alkalmazhatóságát. A mérések nagy része konverzióelektron-Mössbauer-spektroszkópiával (CEMS), többek között egy új, saját fejlesztésű alacsony hőmérsékleti detektorral történt. A fenti eredményeket 3 kutató érte el (ebből 3 RMKI-s) 18 MFT intézeti forrás felhasználásával.

Új, nagy írássűrűségű tárolóeszközök fejlesztése szempontjából fontos mágneses rétegszerkezeteket vizsgálva polarizált neutronreflektometria és szinkrotron-Mössbauer-reflektometria (SMR) alkalmazásával kimutatták, hogy a csatolt Fe/Cr multirétegekben

korábban megfigyelt túltelítési doménmemória-hatásnak az oka kisszámú, erősen csatolt tartomány jelenléte. Első ízben figyelték meg egy csatolt Fe/Cr multirétegekben a domének hőmérséklet-indukált átalakulását. Kidolgozták a doménérés folyamatának fenomenológikus modelljét, ennek alapján Monte Carlo- szimulációval leírták a mágneses tér és a hőmérséklet változása által keltett doménérést, valamint a túltelítési memóriahatást. Izotópperiodikus FePd multirétegeken az SMR alkalmazásával megállapították, hogy a vas hőmérsékleti diffúziója és ionnyalábos keverése hasonló szerkezeteket eredményez. Jelentősen fejlesztették diffúz reflektometriai mérés kiértékelő programjuk hatékonyságát. Új, igen egyszerű kiértékelési technikát dolgoztak ki az ^{57}Fe Mössbauer-mag elliptikus polarimetriájára. Magyar kis- és középvállalkozások jelentős beszállításával megkezdték egy polarizált neutronreflektométer építését a Budapesti Kutatóreaktor mellett. Fentiek 11 fős kutatócsoport eredményei (ebből 7 RMKI-s) 42 MFt intézeti és 60,4 MFt pályázati forrás felhasználásával.

A katalizátorok fejlesztése és a sugárzó hulladékok hosszútávú tárolása szempontjából fontos zeolitokban lejátszódó pozitronium-képződés és annihiláció mechanizmusára korábban kidolgozott telítési szintű pozitron- és pozitronium-befogódási modell alapján megállapították, hogy a zeolit gélből történő előállítás során latens zeolitszerkezet kialakulása észlelhető, valamint, hogy kerámiák és zeolitok hibaszerkezete nagyfokú hasonlóságot mutat. A fenti eredményeket 6 kutató érte el (ebből 2 RMKI-s) 12 MFt intézeti és 3,2 MFt NKTH pályázati forrás felhasználásával.

Elméleti fizika

A kvarkanyag termodinamikáját a kvázirészecske model folytonos tömegeloszlású változatában tanulmányozták. Analízisük szerint a rács-QCD állapotegyenleti adatok egy tömegugrás jelenlétét mutatják, amely egy nem-zérus kinematikai tömeg létrejöttét jelenti. Eredményük elméleti alátámasztására alkalmazták az általános Markov egyenlőtlenséget a kis tömegek jelenlétének valószínűségi felső korlátot szabva a hőmérséklet – nyomás görbe alapján. A tömegugrás és az állapotegyenlet kapcsolata különösen érdekes a színbezárás és a Yang-Mills elméletekben megjelenő, Witten és Jaffe által javasolt dinamikus tömegugrás lehetséges kapcsolata miatt. (2 kutató, 12 MFt RMKI, 3 MFt EU, 2 MFt OTKA támogatás)

Megvizsgálták a nemlineáris skalárterek elméletében kialakuló hosszú élettartamú, majdnem periodikus oszcillon megoldásokat. Kidolgoztak egy numerikus eljárást, mellyel hosszú ideig megbízhatóan nyomon követhető a gömbszimmetrikus terek időfejlődése, és megmutatták, hogy az oszcillonok nagyon lassan ugyan, de kisugározzák energiájukat, így élettartamuk is szükségképpen véges. Egy spektrál-módszer segítségével megkonstruálták az elmélet pontosan periodikus megoldásait, amelyeket a nem elég gyors térbeli lecsengésük miatt kvázi-breather-eknek neveztek el. Megmutatták, hogy az oszcillon-megoldások a kvázi-breather-ek lokalizált részének felelnek meg. (2 kutató, 12 MFt RMKI, 1.5 MFt OTKA)

Nagy tömegű kettős csillagok a gravitációs hullámok jelentős forrásai lehetnek, melyeknek az észlelése a már méréseket végző gravitációs-hullám obszervatóriumok segítségével a közeljövőben várható. Eredményeiket a kettős rendszerek mozgásának és az általuk keltett gravitációs sugárzás tanulmányozásával érték el. Excentrikus pályán mozgó kettős rendszereket vizsgáltak abban az esetben, amikor egyikük forgása elhanyagolható és tömegarányuk kicsi. Az általánosított valódi anomália paraméter segítségével megadták a

keletkező gravitációs hullámok polarizációs állapotait a poszt-newtoni formalizmus keretein belül a vezető rendű kvadrupól-formulánál magasabb sugárzási momentumok figyelembe vételével. Körpálya határesetben megadták továbbá a polarizációs állapotok explicit időfüggését. A mozgás és a gravitációs hullámok leírását kiterjesztették arra az esetre, amikor a két test tömege összemérhető. (2 kutató, 12 MFt RMKI, 3 MFt OTKA ráfordítás)

Negatív görbületű Riemann szimmetrikus téren mozgó szabad részecske hamiltoni szimmetria redukcióit vizsgálva megmutatták, hogy az izometria csoport maximális kompakt alcsoportját generáló Noether töltések tetszőleges rögzítések egy integrálható egydimenziós sokrészecske rendszer adódik, amely általában spin Calogero típusú. A spin nélküli esetek osztályozásával tisztázták a szimmetrikus tér - Calogero modell megfeleltetés egy 30 éve nyitott kérdését. Eddig csak abban az esetben lehetett a Calogero modelleket ilyen geometriai módszerrel megkapni, ha a csatolási állandók egy speciális tartományba estek. Megtalálták a legáltalánosabb Calogero modellekre vezető redukciót. (1 kutató, 6 MFt RMKI, 1,5 MFt OTKA)

A kvantumelméletet sokáig csak atomi-szubatomai rendszerek statisztikus sokaságán lehetett közvetlenül kísérletileg igazolni. A nanotechnológiák megállíthatatlan fejlődésével egyetlen (akár atomi, akár mikronos méretű) objektum kvantum viselkedése időben folyamatosan mérhetővé válik. Ennek elméletét, egyenleteit dolgozták ki az intézetben. Megalkották az egyedi kvantumrendszerek folyamatos mérésének és állapotbecslésének csatolt egyenlet-rendszerét. Egy tervezés alatt lévő nano-opto-mechanikai kísérletről kimutatták, hogy a kvantumossághoz kellő alacsony hőmérséklet csak egy további nano-technológiai ugrással lesz elérhető. Ezeknek a modern kvantumelméleti kutatásoknak nemzetközileg jegyzett centruma az intézet, együttműködésben magyar és külföldi egyetemekkel. (1 kutató, 6 MFt RMKI, 880 eFt OTKA és 300 eFt Tét ráfordítás)

Plazmafizika

A plazmafizikai kutatások három területen folytak: mágneses összetartott fúziós plazmák vizsgálata, intenzív lézerekkel keltett plazmákban zajló folyamatok tanulmányozása, valamint atomok csapdázása és atomi állapotok manipulálása lézerek segítségével.

A mágnesesen összetartott plazmák kutatásában a KFKI RMKI az EURATOM fúziós program magyarországi koordinátora. 2006-ban tovább folyt az úgynevezett ELM instabilitások pellet belövéssel való keltésének tanulmányozása, a garchingi ASDEX Upgrade tokamakokon meghatározták, hol tartózkodik a pellet, amikor az instabilitás növekedni kezd. Befejeződött egy új típusú pellet-belövő tesztelése, amely 2007-ben kerül felszerelésre az ASDEX Upgrade tokamakokra. A számításokból kapott pellet behatolási mélységeket összevetették az elmúlt években összeállított kísérleti adatbázissal és azokhoz igen hasonló tendenciákat kaptak. Elkészült egy új, lavina fotodiódára alapozott detektorrendszer, amellyel az angliai MAST tokamakokon plazma belső tartományokban fognak plazmaturbulenciát mérni. Tervek készültek a következő generációs fúziós berendezések előkészítésére az ITER tokamak trícium szaporító kazettájának szerelési folyamataira, a DEMO tokamak karbantartási eljárásaira, valamint a Wendelstein 7-X sztellarátor tizkamerás diagnosztika rendszerének mechanikai és elektronikai megoldásaira. A kamera-elektronika gyártása megkezdődött, e berendezésnek ipari hasznosítását is tervezik. Az eddigi magyar mágneses

fúziós plazmafizikai kutatások elismerése, hogy az ITER tokamakhoz kapcsolódó hat európai diagnosztikai konzorciumból négyben magyar kutatók és mérnökök is részt vesznek. A mágneses összetartott szabályozott magfúziós kutatások az RMKI-ban 9 európai kutatóintézetrel együttműködve 20 kutatóval és mérnökkel folytak 120 MFt RMKI, 50 millió Ft EURATOM és 40 millió Ft NKTH támogatással.

Az intenzív lézerekkel keltett plazmák kutatásában az argon gáz atomi rezonanciája lehetővé tette, hogy a KrF lézernek a VUV tartományba eső 3. harmonikusát nagy hatásfokkal, akár 1%-os konverziót elérve gerjesszék. A kísérletekben a gázjet target formájának, hosszának optimalizálásával sikerült az elvileg lehetséges legjobb fázis-illesztést elérniük. Meghatározták az optimális sűrűséget és lézerintenzitást, ahol még a plazmakeltési küszöb alatt maradván az ideális konverzió lehetséges, és így egy $\sim 20\mu\text{J}$ energiájú, 82,8 nm hullámhosszú, 600 fs karakterisztikus impulzus-időtartamú fényforrást hoztak létre.

A prágai PALS lézerrendszeren végzett kísérletek során a varsói IFPILM (Institute of Plasma Physics and Laser Microfusion) intézetrel közösen makrorészecskéket gyorsítottak úgynevezett kettős ablációval. A kísérlet során az RMKI-s kutatók által kifejlesztett transzmissziós rácsos spektrométerrel vizsgálták a Cu-val és Br-mal dópolt polimer targetek sugárzását, amiből a plazma hőmérsékletére kaptak becslést, ami 1 keV körülinek adódott. A lézer-plazma kutatások 3 kutatóval és 18 MFt RMKI támogatással folytak.

Az atomok lézeres manipulálásának témájában frekvencia-modulált lézerfény mechanikai impulzusát hűtött rubidium-atomoknak átadva, az atomfelhő koherens mozgását valószínűsítették meg. Megmutatták, hogy az atomfelhővel való kölcsönhatáskor egymást részlegesen átfedő, szembehaladó lézerimpulzus párral két foton mechanikai impulzusának többszöröse közölhető az atomokkal, a lézer intenzitásának és az impulzusok átfedése mértékének függvényében. Ennek a kölcsönhatásnak a végén az eredetileg alapállapotban lévő atomok visszakerülnek alapállapotba, így a spontán emisszió nem játszik szerepet, nem növeli az atomok sebességszórását. Az atomfelhő együtt marad, nem fűtődik. Ilyen impulzussorozattal atomnyalábok hűthetők, téríthetők el, oszthatók ketté, tehát segítségével olyan atom-optikai elemeket lehet előállítani, melyek atom-interferometriai mérésekben, atomlitográfiában használhatók. A fenti eredményeket 7 kutató érte el, 42 MFt RMKI és 5 MFt OTKA támogatással.

Űrfizika

A külső naprendszer kutatását végző két Voyager űrszonda közül a távolabb tartózkodó Voyager-1 2004. december 16-án haladt keresztül a szuperszonikus napszél határát képező lökéshullámon. Megvizsgálták a töltött részecskék fluxusának anizotrópiáját és azt tapasztalták, hogy az anizotrópia amplitúdója is élesen mutatja a lökéshullámon való áthaladást. A külső, szubszonikus tartományban az anizotrópia jelentősen lecsökken, és meglepő módon az áramlás iránya néhány hónapon keresztül visszafelé, a Nap irányába mutatott. A jelenséget a lökéshullám gyors mozgásával magyarázták. A legújabb méréseket elemezve megmutatták, hogy a Voyager-2 szondával mért részecskefluxusok hasonló ingadozásokat mutatnak, mint amit a Voyager-1 mért a lökéshullámon való áthaladás előtt, így arra a következtetésre jutottak, hogy várhatóan a Voyager-2 is hamarosan át fog haladni a

lökéshullámon. (1 kutató, 6 MFt RMKI, 1 MFt OTKA és 1000 CHF, ez utóbbi az Int. Space Science Institute támogatásaként)

Folytatták a Szaturnusz körül keringő Cassini űrszonda mérési adatainak elemzését. A Titán hold plazmakörnyezete egyedülálló példa egy nem mágnesezett égitest és a szubmagnetoszonikus plazma kölcsönhatására. A Titán vastag atmoszférájának semleges részecskéi egyrészt a magnetoszférikus energikus plazmarészecskék becsapódásainak, másrészt a Nap EUV sugárzásának hatására ionizálódhatnak. Ekkor a környező plazma és az abban befagyott mágneses tér elszállítja az újonnan ionizált ú.n. pickup részecskéket. A Cassini Plasma Spectrometer (CAPS) által észlelt pickup ion-populációk átfogó elemzését végezték el a Titán megközelítések idejére a 2004. október 26-a és 2006. május 20-a között mért adatokból. Az általuk vizsgált populációk mindig a lokális mágneses térre merőleges irányból érkeztek, és éles spektrális csúcs tartozott hozzájuk. Mindezekből arra következtettek, hogy a négy Titán-sugárnyínl (1 $R_T=2575\text{km}$) nagyobb távolságban észlelt pickup ionok nem érkezhettek a hold atmoszférájának exobázisából, hanem lokálisan keletkezettek a Titánt körülvevő semleges koronában, mely nagy valószínűséggel főként hidrogénből áll. Az eredményt 3 intézeti kutató érte el, a 18 MFt RMKI támogatáson kívül 5,5 MFt pályázati forrásból (KVM-MŰI témapályázat).

Mirror típusú lineárisan polarizált mágneses fluktuációk gyakran észlelhetők a bolygók fejhulláma és magnetopauzája közötti tartományban (mágneses burokban), ahol a lelassult, összenyomódott, anizotróp napszélplazma nyomása nagyobb a mágneses tér nyomásánál. Korábbi, az ISEE-1 szonda 10 évet lefedő adataira alapján végzett statisztikai vizsgálatuk szerint ezek a fluktuációk leggyakrabban a mágneses burok legbelső tartományában fordulnak elő, az amplitudójuk is ott a legnagyobb. 2006-ban hasonló céllal tanulmányozták a Cassini szonda Szaturnusz körüli pályáján gyűjtött mágneses tér adatokat és megállapították, hogy a lényegesen eltérő viszonyok ellenére a hullámaktivitás a Szaturnusznál is a mágneses burok belső tartományaira koncentrálódik. Vizsgálták a mirror típusú mágneses fluktuációk amplitudójának változását a Föld fejhulláma és magnetopauzája között is a négy, egyformán felszerelt Cluster szonda mérései alapján. 2006. január-februárban a műholdak közötti távolság majdnem 2 földugár volt, így a mágneses burok egymástól távoli tartományaiban egyszerre észlelt fluktuációkat tudtak összehasonlítani. Mivel a fluktuációk a fejhullámtól a magnetopauza felé áramló plazmával együtt haladnak, az egyidejű mérésekből ki tudták számítani a növekedési rátát. Eredményeik a lineáris modellszámítások alapján korábban publikált értékeknél egy nagyságrenddel kisebb növekedési arányt mutattak, bizonyítva, hogy a mirror típusú hullámok növekedését nem lehet lineáris közelítéssel meghatározni. Az eredményt 2 intézeti kutató érte el, a 12 MFt RMKI ráfordításon kívül 20 kEuro PECS pályázati forrásból.

Az űrtechnikai fejlesztések között változatlanul kiemelkedő fontosságú az ESA Rosetta-Philae programjában való részvétel. Tesztelték a leszállóegység vezérlő és adatkezelő alrendszerét és a korábban nem ismert követelményeknek megfelelően a rádiókapcsolatok során az SGF Kft-vel együttműködve finomították a fedélzeti szoftvert. Megkezdték az ESA 2013-ban a Merkúrhoz induló BepiColombo űrszondára kerülő SERENA/PICAM plazmafizikai kísérlet számára a fedélzeti vezérelt áramátalakító fejlesztését. Kifejlesztették a nemzetközi űrállomásra kerülő plazma hullám-kísérlet 11 érzékelőjének vezérlő és adatgyűjtő három számítógépes rendszerét, a mérnöki példányt rendszerintegráció céljából leszállították

a moszkvai intézetbe. A feladatok megoldásában 12 fő vesz részt, a támogatást részben az ESA PRODEX, részben a Magyar Űrkutatási Iroda biztosította.

Biofizika

Az elmúlt években általuk kifejlesztett új metodológia, a *Computational Neuropharmacology* központi eleme, hogy számítógépes idegrendszeri modelleken vizsgálják, illetve jósolják meg bizonyos vegyületek idegrendszerre gyakorolt hatását, így segítve a gyógyszertervezés folyamatát. Egy már alkalmazásban lévő, és egy még kísérleti stádiumban lévő szorongásoldó gyógyszer hatását vizsgálták az érzelmi és memória folyamatokban is fontos szerepet játszó szepto-hippokampális agyi rendszer aktivitására, oszcillációira, illetve a sejtek szinkronizációjára. A két vegyület eltérő aktivitás-mintázatot eredményezett a számítógépes modellekben, ami eltérő hatásmechanizmusra utal. A modellek alapján további következtetések várhatók a vizsgált gyógyszerek hatékonyságára, illetve specifitására vonatkozóan.

A korábbi években az intra-hippokampális theta ritmus generációjának mechanizmusára vonatkozó munkájuk folytatásaként megmutatták, hogy a theta ritmus generálása során a különféle hippokampális interneuron populációk milyen funkciókat látnak el. Hippokampális modellezéssel arra a következtetésre jutottak, hogy robotikai és komputációs navigációs algoritmusokban a theta oszcilláció előnyösen befolyásolhatja a teljesítményt.

Patkányok entorhinális kérgében, a hippokampusz fő bemenetét és egyben kimenetét alkotó agyterületen ún. grid sejteket fedeztek fel. Olyan neuronhálózati modellt alkottak, amely a grid sejt rendszer aktivitás-mintázatai alapján képes a hippokampális navigációs modellekből mindeddig hiányzó metrikus információk kiszűrésére. Ezzel lehetséges mechanizmust találtak egy több modellben feltételezett és felhasznált, de az idegrendszerben ezideig meg nem talált távolság-sejtek létrejöttére. E témákra fordított erőforrások: 4 kutató, 24 Mft RMKI, és 15,5 Mft EU támogatás.

A Szemerédi lemmán alapuló új „adattányászati” módszerüket alkalmazták AIDS betegek kórtörténetét leíró adatbázisokra. Ehhez AIDS betegek terápiaváltás utáni állapotának és állapotváltozásának számszerűsítésére mérőszámokat definiáltak, meghatározták a terápiaváltások idején domináns HIV vírus génszekvencia fogalmát. Multinomiális valószínűségeloszlásokon műveleteket végző objektum-orientált programmodult valamint nyílt forráskódú függvénykönyvtárat készítettek, több gráf- és hálózatelméleti mérték kiszámításának ma ismert leghatékonyabb algoritmusát alkalmazva. (3 kutató, 18 Mft RMKI, és 12,8 Mft EU támogatás)

A mm átmérőjű proton nyalábot használó PIXE-PAGE módszerüknek, mellyel vékonyréteg elektroforézissel elválasztott fehérjék fémion tartalmát lehet mennyiségileg is meghatározni, kidolgozták a proton mikroszonda mikrométer nagyságrendbe eső nyalábját használó változatát. Alkalmos réteges szerkezetű abszorbenssel minimalizálták a kimutathatósági határokat lerontó háttérsugárzást, és megállapították, hogy citokróm C fehérjésávbán már 0,7 ng Fe kimutatható. (4 kutató, 24 Mft RMKI, 1 Mft NAŰ pályázati forrás).

A fő feladat az MTA telephelyi intézetek számára szolgáltatást nyújtó központi szerverpark felújítása, a központi kapcsolóeszköz bővítése, az RMKI Grid cluster bővítése és a telephelyi számítógéphálózat biztonságos üzemeltetését támogató szoftver és hardver eszközök üzembeállítása volt. Mindezekre az NKTH KFIIF pályázatán "A KFKI RMKI intézeti és a KFKI telephelyi nagy megbízhatóságú, magas rendelkezésre állású és biztonságos információs infrastruktúráért" címmel 2005. évben elnyert 59,200 eFt támogatás adott lehetőséget. A projekt keretében – a közbeszerzés lefolytatása után – 28 új szerverrel frissült a központi géppark.

Az RMKI más főosztályaival együttműködve működtették és továbbfejlesztették az RMKI Grid rendszert (LCG regionális Tier-2 központ) az EGEE II (Enabling Grids for E-science) projekt keretében. A regionális központ gépparkját (BUDAPEST Grid site) a beszámolási időszakban – NKTH KFIIF pályázati támogatással – 20 processzorral és összesen 4,5TB tárolókapacitással bővítették.

Folytatódott a MOBil SegítőTárs fejlesztése kézi számítógépre, vakok és gyengénlátók számára a GVOP-2004-3.1.1 MOST2 pályázata keretében. A fejlesztésben a Veszprémi Egyetem, mint konzorcium-koordinátor vezetésével az RMKI SzHK Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály vesz részt. Feladata az ember-gép kapcsolati tervezés és a tesztelés irányítása. Az év folyamán elkészült (egy része már végleges változatban is): a beszélő Szövegszerkesztő, a Névjegyzék, a Telefon, az Email, a Magnó, a Számológép, a Határidőnapló, a Stopper, az Időzítő, a Magyar Elektronikus Könyvtár kereső-letöltő és a SZTAKI szótár-lekérdező programok. A projekt keretében fejlesztett berendezéseket 18 felhasználó folyamatosan tesztelte, illetve használta.

Olasz, spanyol és holland partnerekkel együttműködve nemzetközi braille kottatárat hoztak létre az eBrass (electronic Braille Services) EU-s program keretén belül. A braille kottatár fejlesztésében az RMKI SzHK Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály vesz részt, feladata a kották minőségi ellenőrzése, és a kottairó program (BME Braille Music Editor) minőségének a javítása. A BME rendszert már több magyarországi felhasználó is megvásárolta.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az RMKI számos MTA kutatóintézettel tart mindennapi szakmai kapcsolatot, a legszorosabbakat a KFKI telephelyi intézetekkel. Tagja az SZFKI, AEKI, MFA és RMKI alkotta KFKI Condensed Matter Research Center-nek és a Budapesti Kutatóreaktor Műszeközpontnak (BNC). Gesztorintézete a Magyar Szinkrotron Bizottságnak, amely a magyar szinkrotronsugárzási kutatóközösséget fogja össze; a témában iskolákat szervez, információs anyagokat továbbít, továbbá a pályázó magyar kutatók között kuratóriumként felosztja azt a mobilitási támogatást, amely lehetővé teszi, hogy kutatóink olyan (pl. Európán kívüli) szinkrotronoknál is végezhessenek méréseket, amelyek a mobilitási költséget nem, vagy csak részben térítik meg. Hagyományosan erős az együttműködés az ATOMKI-val, különösen a részecskefizikában és a magfizikai módszerekkel végzett anyagtudományi

kutatásban, fontosak a munkakapcsolatok a KK, a SZTAKI, a Konkoly Thege Miklós Csillagászati KI és az SZBK kutatóival is.

Az RMKI nagy fontosságot tulajdonít az egyetemekhez fűződő élő kapcsolatoknak. Ebben az évben is 29 munkatársa tartott kötelező és speciális előadásokat, vezetett gyakorlatokat az ELTE, a BME, a Pécsi Tudományegyetem, a Szegedi Tudományegyetem, a Debreceni Egyetem és a Szent István Egyetem tanszékein. A felsorolt egyetemekkel érdemi kutatási együttműködés is folyt. Az RMKI rendszeresen fogadja az ELTE fizikus és biofizikus hallgatóit a tanrendben előírt emelt szintű laboratóriumi gyakorlatok végzésére, témákat és témavezetést biztosít egyetemi szakdolgozatok készítéséhez, munkatársai aktív résztvevői egy sor doktori iskolának. Jelenleg 12 doktori (Ph.D.) értekezés készül RMKI-s témavezető irányításával.

Az RMKI-ban szinte valamennyi téma kutatása nemzetközi keretekben folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez, az ESA-hoz és az EURATOM-hoz kapcsolódnak. Eredményes az együttműködés számos nemzetközi és nemzeti intézménnyel. A nemzetközi trendekkel összhangban egyre nagyobb szerepet kapnak a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellátorok) mellett végzett néhány napos mérések. Az együttműködő partnerek felsorolása meghaladja e beszámoló kereteit, jellemző példa, hogy az RMKI kutatói úrfizikában mintegy 30, az anyagtudományi kutatásokban 25 külföldi intézettel folytatnak közös kutatómunkát, nem is szólva arról, hogy részecskefizikában százát meghaladó számú intézetről van szó.

A részecskefizikusok és nagyenergiás magfizikusok részt vesznek a CERN-nél végzett korábbi mérések adatainak feldolgozásában és az új részecskegyorsító, az LHC, CMS, ALICE és TOTEM kísérleteinek felépítésében és új SPS kísérletek előkészítésében. Az RMKI koordinálja az RMKI, az ELTE és a Debreceni Egyetem részvételével a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjénél (RHIC) működő PHENIX magyar kísérleti együttműködést.

Az RMKI magyar koordinációs szerepet tölt be a magyar EURATOM fúziós programban, számos magyar intézmény az RMKI közvetítésével vesz részt a programban, ezek: KFKI AEKI, Széchenyi Egyetem, ATOMKI, BME, ELTE, Dunaújvárosi Főiskola. E szerepnek megfelelően számos nemzetközi bizottságban is tevékenykednek. Az Európai Közös Tokamakon (JET) végzett munkában a lítium nyaláb diagnosztika felelőse a magyar csoport, melynek kutatói bekapcsolódtak a világ leendő első fúziós reaktora, az ITER tervezési munkáiba is. A tokamak plazma-kutatások mellett az EURATOM a lézerplazmás fúziós kutatásokat is támogatja, itt a Szegedi Egyetem Kísérleti Fizika Tanszéke és az ATOMKI, a félvezető lézerek és röntgen detektorok fejlesztésében pedig az MFA az együttműködő partner. A prágai CASTOR tokamak mellett az RMKI kutatói ebben az évben is vezettek nemzetközi fúziós mérési gyakorlatot.

Az RMKI működteti a Cluster Magyar Adatközpontot, amely pálya- és egyéb kiegészítő adatokat szolgáltat az ESA (Európai Űrügynökség) négy azonos műszerezettségű Cluster holdjának tudományos adatrendszerébe.

Az RMKI tagja az MGKK-nak (Magyar Grid Kompetencia Központ), illetve résztvevője az EGEE projektnek (Enabling Grids for E-science), melyben 5 földrész 220 intézménye vesz részt. Az RMKI SzHK az NIIF program regionális központja.

Az MTA kétoldalú egyezményes és a TÉT megállapodásai kiegészítő mobilitási támogatást jelentettek. Az Európai Unió sok száz fős multilaterális programjai mellett nagy szükség van a néhány főt érintő kétoldalú együttműködésekre, további fenntartásuk fontos érdek.

Az RMKI munkatársai aktívan részt vesznek a hazai és a nemzetközi tudományos közéletben, tisztségviselői, tagjai nemzetközi tudományos szervezeteknek, bizottságoknak. Legfontosabbak ezek közül a CERN Tanácsa és bizottságai, az Európai Fizikai Társulat (EPS), International Astronautical Academy (Board of Trustees, International Space Science Committee), COST Domain Committee for Materials, Physical and Nanosciences, COST Action Management Committees, a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) szakértői bizottságai, European Neural Network Society Executive Committee, EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication). Több nemzetközi szervezetben (COSPAR, European Science Forum on Research Infrastructures) nemzeti képviselői tiszteket töltenek be. Többben tagjai európai nagyberendezések irányító bizottságainak, külföldi kutatóintézetek tudományos tanácsainak, nemzetközi folyóiratok szerkesztő- vagy tanácsadó bizottságának, tudományterületi tanácsadó grémiumnak vagy nemzetközi konferenciák tanácsadó vagy programbizottságának, illetve állandó referensei nemzetközi folyóiratoknak. Az RMKI kutatói tagjai, tisztségviselői az MTA szakmai testületeinek, a MAB Fizikai tudományok tudományági bizottságának, a Bolyai Kuratórium szakmai bizottságának, a hazai űrkutatás irányító testületeinek (Magyar Űrkutatási Tanács, Űrkutatási Tudományos Tanács), a MTESZ tudományos egyesületeinek (ELFT és MANT), az SzHK munkatársai tagjai az NIIF bizottságainak, illetve a Linux kernel netfilter/iptables komponensének fejlesztését végző nemzetközi munkacsoportnak.

Az intézet munkatársai alapító tagjai több egyetemi Doktori Iskolának, valamint rendszeresen felkért tagjai a felsőoktatási habilitációs bizottságoknak és doktori tanácsoknak.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A döntően tudományos alaputatást végző RMKI valamennyi kutatása vegyes támogatottságú, pályázati források nélkül lehetetlen az eredményes kutatómunka. 2006-ben 22 aktív OTKA pályázat segítette a kutatómunkát, melyekhez az MTA-NSF, MTA-DFG, MTA-Dubna és az MTA bilaterális együttműködési szerződésai (pl. japán, lengyel, ukrán, finn, stb.), valamint a TÉT együttműködések (orosz, flamand, német, japán, portugál, horvát, francia, dél-afrikai) kiegészítő mobilitás-támogatást jelentenek. Ismételten nehézséget okozott az a késedelem, amit a 2006-ra is átnyúló takarékosági intézkedések jelentettek, mivel az együttműködés finanszírozására a fedezet nem érkezett meg, így a kitűzött feladatok jelentős részének átütemezése elkerülhetetlen volt. A nehézségek ellenére azonban pl. a porózus anyagok (porózus szilícium, zeolitok) vizsgálatában fontos szerkezetkutatói eredményeket sikerült elérni spanyol, portugál és horvát TÉT együttműködésekben.

Az erősödő kormányzati és társadalmi elvárás az intézet elemi érdekévé tette az egyéb hazai és nemzetközi, ezen belül is kiemelten az EU pályázatokon való sikeres szereplést. A

tematikai megkötések, az adminisztratív és jogi háttér elégtelensége ellenére az intézet pályázóképesége javult, bár az EU pályázati lehetőségek 2006-ban csökkentek, vélhetően a 2007-ben meghirdetésre kerülő FP7 kivárást okozó hatása miatt.

A 2006-ban elnyert nagyösszegű NK062044 OTKA támogatás lehetővé teszi a részvételt a CERN kutatóközpont „Large Hadronic Collider” (LHC) gyorsítója mellett tevékenykedő ALICE együttműködés munkájában, ami nagyban befolyásolja a következő 10 évben végezhető kutatást a nagyenergiás magfizika területén. Az ALICE az ultrarelativisztikus nehézion ütközésekben létrejövő extrém nagy energiasűrűségű anyag tulajdonságait vizsgálja. A magyar csoport bekapcsolódott a nagyimpulzusú részecskék azonosítását végző HMPID detektor adatkiértékelési munkáiba, valamint a még nagyobb impulzusú részecskéket vizsgálni kívánó VHMPID detektor fejlesztésébe.

2006-ban folytatódott az EU FP6 keretprogram keretében elnyert I3HP nemzetközi kutatási projekt („Innovation and Infrastructure for Hadronic Physics”), amely mintegy 20 európai kutatóintézetet fogott össze 15 különböző kutatási témában. Az RMKI Elméleti Főosztály kutatói a „Strongly Interacting Matter” (SIM) témában „Perturbatív QCD magfizikai alkalmazása, erősen kölcsönható anyag termodinamikai leírása és hidrodinamikai módszerek alkalmazása a nehézion-fizikában” tématerületeken értek el nemzetközi szintű eredményeket.

A Nemzeti Fejlesztési Terv (GVOP) keretében elnyert 9,6 Mft támogatással folytatódott a detektorfejlesztés a GSI-ben folyó CBM kísérlethez.

2006-ban fejeződött be az OTKA által támogatott TS44665 Relativitáselméleti Tudományos Iskola. A projekt egyértelműen sikeresen zajlott, nemzetközi szintű publikációk születtek a gravitációs sugárzást kibocsátó kettős neutroncsillagok és feketelyukak témakörében. 2006-ban ezen program folytatására beadásra került egy újabb OTKA Tudományos Iskola pályázat.

Az RMKI a CERN által koordinált EU FP6 EGEE pályázat résztvevőjeként 2003-ban két évre 190 kEUR támogatást nyert el, a projektet lényegében változatlan feltételekkel 2005-ben újabb 2 évre meghosszabbították, így a munka 2006-ban is folytatódott.

Az EU FP6-os, 2004-ben indult, mágneses nanoszerkezetek vizsgálatára és az ehhez szükséges eszközök fejlesztésére irányuló „DYNASYNC” projekt keretében az Európai Szinkrotronsugárzási Központban (ESRF, Grenoble) és a résztvevő kutatócsoportok laboratóriumaiban folytatódott a kutatás, melynek során polarizált neutronreflektometria és szinkrotron-Mössbauer-reflektometria (SMR) alkalmazásával a csatolt Fe/Cr multirétegekre és izotópperiodikus FePd multirétegekre vonatkozóan az ezen beszámolóban és ahhoz csatlakozóan külön is kiemelt eredményeket értek el.

A fúziós témában 2005-ben az RMKI vezetésével alakult NUKENERG konzorcium (tagok: RMKI, AEKI, BME két tanszéke) 450 millió forintos NKTH támogatást nyert új nukleáris energiatermelési módszerek technológiai elemeinek fejlesztésére. Ebből 2006-ra az RMKI-ban létrejött egy 8 fős mérnökcsoport amely már az első évben 5 EURATOM pályázatot nyert el az ITER kísérlet és egy jövőbeli fúziós reaktor előkészítő munkáira. Emellett a fúziós témában még 2 pályázatot nyertek a programhoz kapcsolódó kiegészítő feladatokra. A világ legnagyobb tokamakjánál, a JET-nél RMKI kutatók két 2005-ben indult pályázaton dolgoztak tovább: gyors kamera projekt (résztvevő) és lítium atomnyaláb diagnosztika (projektvezető).

EURATOM fúziós koordinációs tevékenysége során az RMKI szerepet játszott további három Magyarországról benyújtott nyertes EURATOM pályázatban, valamint összesen mintegy 380 ezer Euró mobilitási pályázatban.

Egy másik nyertes NAP pályázatban (NKTH-VENESUS05: "Visegrádi együttműködés neutronspektroszkópiai módszerek fejlesztésére és alkalmazására multidiszciplináris kutatásban") az RMKI konzorciumi tagként működik közre, kutatói - jelentős magyar vállalkozói részvétellel - megkezdték egy polarizált neutronreflektométer építését a Budapesti Kutatóreaktor mellett.

Az űrfizikai kutatások a Magyar Űrkutatási Iroda, az Európai Űrügynökség (ESA), a PRODEX Office és a Tét együttműködéseinek keretében kaptak támogatást. A kutatócsoportnak 2006-ban továbbra is három szerződése volt az ESA PECS (Program for European Cooperating States) hivatalával a Rosetta és a Cluster űrprogramokkal kapcsolatban. A Bernben működő International Space Science Institute pályázatán az RMKI kutatóinak vezetésével létrehozott két nemzetközi kutatócsoport nyert támogatást. Az RMKI résztvevője az FP6 keretprogram támogatásával létrehozott Europlanet konzorciumnak is.

A számítógépes idegtudományi csoport két nyertes EU pályázatnak is részese lett 2005-ben, ezek 2006-ban folytatódtak. Az ICEA „Integrating Cognition Emotion and Autonomy” pályázatban (RMKI-részesedés 4 évre 204 ezer euro) az RMKI kutatóinak feladata a térbeli tájékozódásért felelős agyterület, a hippokampusz modelljének kidolgozása és az általános modellkeretbe integrálása. Az EuResist pályázat (melyben az RMKI-ra eső rész 120000 euró 30 hónapra) célja, egy a HIV vírus fertőzés kezelésében segítséget nyújtó orvosi szakértői rendszer létrehozása, amely az egyéni kórtörténet, vírusgenetikai adatok, korábbi gyógyszeres kezelések eredményei alapján egyéni javaslatot tesz az alkalmazandó terápiás szer illetve szerkombináció összetételére. Az RMKI feladata gráfelméleti és kölcsönös információ alapuló mértékek alapján elemezni a meglévő adatbázisok tartalmát. Folytatódott a gyógyszeriparral való eredményes együttműködés is, a Pfizer nemzetközi gyógyszer gyártó vállalattal folytatott kutatás során az RMKI kutatói olyan idegrendszeri modelleket fejlesztenek ki, melyek alkalmazhatók lesznek egy adott agyi részstruktúrára ható gyógyszerek hatásmechanizmusának vizsgálatára.

A NAÜ a nukleáris bioanalitikai csoport "Micro-PIXE analysis of metallo-proteins" című, IAEA Co-ordinated Research Project pályázatának első évi eredményeit elfogadta és a szerződést egy évre megújította további 4000 EUR támogatást nyújtva.

A telephelyi számítógéphálózat infrastruktúrájának felújítására és biztonságossá tételére, valamint az RMKI Grid cluster bővítésére 2005. évben induló és a beszámolási időszakban befejeződő projekt az NKTH KFIIF pályázatán ("A KFKI RMKI intézeti és a KFKI telephelyi nagy megbízhatóságú, magas rendelkezésre állású és biztonságos információs infrastruktúráért") elnyert 59,200 eFt támogatással valósult meg. A projektnek igen nagy jelentősége van az egész telephely, valamint a hazai és nemzetközi Grid együttműködésekben való részvétel szempontjából. A Grid témában elnyert Marie Curie-pályázat - mely mintegy 440 kEUR teljes támogatást jelent - lehetővé tette külföldi szakemberek hosszú idejű fogadását, ami a hazai háttér kiépítését jelentősen segítette.

Eredményesen folytatódott a MOST2 (GVOP - 2004 - 3.1.1) projekt, melynek keretében vak emberek számára fejlesztettek egy olyan hordozható, egyszerűen használható segédeszközt, amely lehetővé teszi, hogy napi feladataikat (szövegszerkesztés, könyvolvasás, elektronikus levelezés, web böngészés, stb.) elvégezhessék. A fejlesztésben az RMKI SzHK Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály konzorciumi tagként részesül támogatásban.

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

1. Alt C, Barna D, Csató P, Fodor Z, Hegyi S, Lévai P, Pálla G, Sikler F, Szentszéki I, Sziklai J, Vesztegombi Gy, Zimányi J: (NA49 Collaboration) Inclusive production of charged pions in p+p collisions at 158 GeV/c beam momentum. European Physical Journal C 45, 343-381 (2006)
2. László A: A robust iterative unfolding method for signal processing. Journal of Physics A-Mathematical and General 39, 13621-13640 (2006)
3. Hori M, Dax A, Eades J, Gomikawa K, Hayano RS, Ono N, Pirkl W, Widmann E, Torii HA, Juhász B, Barna D, Horváth D: Determination of the antiproton-to-electron mass ratio by precision laser spectroscopy of pbar-He, Physical Review Letters 96, 243401 (2006)
4. Adler SS, ..., Csörgő T, ..., Ster A, et al.: PHENIX Collaboration: Improved measurement of double Helicity asymmetry in inclusive midrapidity π^0 production for polarized p+p collisions at $s^{1/2}=200$ GeV, Physical Review D73, 091102. (2006)
5. Lévai P, Fai G, Papp G: Di-hadron correlations at ISR and RHIC energies. Physics Letters B 634, 383-390 (2006)
6. Manuaba A, Pásztai F, Ramos AR, Khánh NQ, Pécz B, Zolnai Z, Tunyogi A, Szilágyi E: Effect of pre-implanted oxygen in Si on the retention of implanted He, Nuclear Instruments and Methods B 249, 150-152 (2006)
7. Biró TS, Lévai P, Ván P, Zimányi J: Equation of state for distributed mass quark matter, Journal of Physics G32, 205-208 (2006)
8. Fodor G, Forgács P, Grandclément, P, Rácz I: Oscillons and quasibreathers in the ϕ^4 Klein-Gordon model, Phys. Rev. D 74, 124003 (2006)
9. Majár J, Vasúth M: Gravitational waveforms from a Lense-Thirring system, Physical Review D74, 124007 (2006)
10. Fehér L, Pusztai BG: Spin Calogero models associated with Riemannian symmetric spaces of negative curvature, Nuclear Physics B751, 436-458 (2006)
11. Bernád JZ, Diósi L, Geszti T: Quest for quantum superpositions of a mirror: high and moderately low temperatures. Physical Review Letters 97, 250404-(4) (2006)

12. Demeter G, Djotyán GP, Sörlei Zs, Bakos JS: Mechanical effect of retroreflected frequency-chirped laser pulses on two-level atoms. *Phys. Rev. A* 74, 013401 (2006), *Virtual Journal of Ultrafast Science*, 5, (2006) oldalszám
13. Lang PT, Gál K, Hobirk J, Kálvin S, Kocsis G, Mertens V, Neuhauser J, Maraschek M, Suttrop M, Veres G, ASDEX Upgrade Team: Investigations on the ELM cycle by local 3D perturbation experiments, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 48, A141, (2006)
14. Bencze A, Berta M, Zoletnik S, Stöckel J, Adámek J, Hron M: Observation of zonal flowlike structures using the autocorrelation-width technique, *Plasma Phys. Control. Fusion* 48, S137–S153 (2006)
15. Rácz E, Földes IB, Kocsis G, Veres G, Eidmann K, Szatmári S: On the effect of surface rippling on the generation of high harmonics in laser plasmas, *Applied Physics B* 82, 13-18 (2006). DOI: 10.1007/s00340-005-2039-3
16. Szegő K, Young DT, Bagdonat T, Barraclough B, Berthelier J-J, Coates AJ, Crary FJ, Dougherty MK, Erdős G, Gurnett DA, Kurth WS, Opitz A, Rymer A, Thomsen MF: A pre-shock event at Jupiter on 30 January 2001, *Planet. Space Sci.* 54, 200-211 (2006)
17. Németh Z, Facsó G, Erdős G, Balogh A: Plasma mixing as a cause of solar wind magnetic field variations, *Adv. Space Res.* 37, 467-472, DOI: 10.1016/j.asr.2005.11.012 (2006)
18. Kecskeméty K, Erdős G, Facsó G, Tátrallyay M, Dandouras I, Daly P, Kudela K: Distributions of suprathermal ions near hot flow anomalies observed by RAPID aboard Cluster, *Adv. Space Res.*, 38, 1587-1594, DOI: 10.1016/j.asr.2005.09.027 (2006)
19. Aradi I, Érdi P: Computational neuropharmacology: dynamical approaches in drug discovery. *Trends in Pharmacological Sciences* 27(5), 240-243 (2006)
20. Kocsonya A, Szőkefalvi-Nagy Z, Torri A, Rauhala E, Räsänen J: Absolute alpha particle induced gamma-ray yields for Ti-Zn. *Nuclear Instruments and Methods B* 251, 367-370 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet

Átlagléltszám ¹ :	204	Ebből kutató ² :	143
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			54
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			206
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			200
<i>Ebből idegen nyelvű külföldi folyóiratban:</i>	137	<i>idegen nyelvű hazai folyóiratban:</i>	5
<i>nemzetközi együttműködés keretében:</i>	138	<i>SCI által regisztrált folyóiratban:</i>	134
összesített impakt faktor:	341	összes hivatkozás száma ⁴ :	2447
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2178
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	4
<i>idegen</i> nyelven könyv:	4	könyvfejezet:	9
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	5	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	0
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	174	poszterek száma:	87
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			41
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	25	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			978 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	12
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			22
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		73 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			5
NKFP:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	235 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	2 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			28
EU forrásból:	24	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	270 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	3 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			4
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		12 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:		0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			3 MFt

MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

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

Telefon: 392-2225, Fax: 392-2226

e-mail: barsony@mfa.kfki.hu, honlap: www.mfa.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2006-ban is változatlanul a négy főosztályos szervezeti struktúrában működött. 2006-ban is folytatták a „*nanotechnológiai fordulat*” kiteljesítését az intézetben, miközben tovább haladt a témakonzentráció.

2006-ban tovább javult az intézeten belüli kooperáció, a döntés-előkészítés az *Igazgató Tanácsban* a *főosztályvezetők* és a TT elnöke részvételével az igazgató és helyettesei mellett javuló hatékonysággal folyt. Az ötagú *Intézeti Tanács* külső szakértőinek véleménye szintén fontos támogatásul szolgált az igazgatói döntések megalapozásához. A nyolc tagú *Tudományos Tanács* az elmúlt évben jól örködött a kutatómunka szakmai színvonala és az intézetben folyó posztgraduális képzés körülményeinek, a témavezetés színvonalának javítása felett. Folytatták a doktoranduszok félévenkénti beszámoltatását, a rendszeres intézeti tudományos szemináriumokat és az éves kutatói számonkérést, témaértékelést. 2006-ban is megjelentették az *angol nyelvű MFA évkönyvet*, az eredmények megismertetése folyamatos, kiemelt feladat volt. Az intézet munkatársai amellelt, hogy számos hazai szakmai rendezvényen mutatták be kutatási tevékenységüket, több mint tíz alkalommal szerepeltek a hazai audio- és video-médiában tudományos eredményeik népszerűsítésével. *Rendkívüli sikerük 2006-ban*, hogy a *Fríg Kiadó gondozásában* megjelent az MFA főmunkatársa „*A zene ősnyelve*” c. munkája. Az *ISO 9001:2000 minőségbiztosítási rendszer, amely az MFA-ban 2006-ban sikeresen esett át a 3 éves auditon*, jól segítette a szerződések pontos teljesítését és a K+F tevékenység pontos adminisztrációját. Megállapítható, hogy az intézet már lényegében a most tervezett MTA reformmal konform irányítási rendszerben működik.

Az intézetben a három éve sikeresen alkalmazott belső szabályozás szerint *kiemelt feladatként folytatódott a tudományos-, műszaki és adminisztratív területeken a fiatalok bevonása*, beleértve a vezetői feladatok átruházását. Egy 70. évét betöltött tudományos tanácsadó kolléga 2006-ban csatlakozott az MFA eddigi 6 emeritus professzorához. A Kerámiák és Kompozitok Osztály élén személyi változás történt az előző vezető 65. életévének betöltése következtében. Két-három másik esetben – az új vezetési ciklusban várhatóan szükségessé váló szervezeti átalakítások miatt – átmeneti megoldásokhoz folyamodtak. Ebben némi bizonytalanságot okozott az MTA reform előkészítése miatt 2006-ban elhalasztott igazgatói pályázat, ill. az igazgató megbízatásának féléves ideiglenes meghosszabbítása. Sikertelenül érvényesíteniük a minősített nyugdíjas kollégákra a korábbi kedvező belső foglalkoztatási szabályzást, sőt 2006-ban még a nem minősített nyugdíjas kollégák részmunkaidős továbbfoglalkoztatása is megvalósult. Folytatódott a korösszetétel javulása, 2006. folyamán 9 új munkatárs belépésével fiatalodott az intézet személyi állománya. *Az elfogadott, kiszámítható szabályzás fokozta a stabilitást és megalapozta a továbblépést az intézeti foglalkoztatás-politikában.*

A *pályázási kényszer* 2006-ban is fokozódott mind a hazai, mind az EU FP6 keretprogramban. Különösen a 2007-ben induló FP7 pályázatokra tekintettel 2006. szeptemberétől az MFA-ban a nemzetközi és hazai pályázati rendszerben való sikeres szereplést az igazgató irányítása alá rendelt *pályázati menedzser* támogatja.

2006-ban új konkrét feladatként jelentkezett az MFA számára a Nemzeti Fejlesztési Tervhez kapcsolódóan a nanotechnológiai K+F infrastruktúra fejlesztési lehetőségének megteremtése és kiaknázása pályázati úton, ebben közvetlen operatív feladatot lát el az intézet az igazgató alá rendelt *innovációs menedzser* révén.

A költségvetési intézmények gazdálkodásában alapvető, de az *MTA kutatóhálózatban évek óta hiányzó felújítási és beruházási támogatás hiányában saját erőből ill. pályázati források felhasználásával folytatták a jelentős laborfelújításokat, műszerbeszerzéseket.* 2005-ben a fedezet biztosításában még segített a szerződéses bevételekből képzett 15%-os, kötelezően felújításra fordítandó keret, tavaly már ezt is 5%-ra csökkentették. Az általánosan elfogadott intézeti politika szerint ennek ellenére folytatták a laboratóriumok felújítását. Ebben némi segítséget jelentett az MTA Elnöki Keret-re benyújtott erős MFA pályázatok nyomán kapott, bár a vártnál kisebb mértékű 29 MFt támogatás.

Az új kémiai labor és napelem mérőállomás kialakítása mellett felújították a számítógépterem klíma-szolgáltatását és négy dolgozószobát. Új, korszerű kémiai labort építettek és szereltek fel 12 MFt-nyit GVOP pályázat és 7,2 MFt MTA elnöki keret-támogatás segítségével. A telephelyi üzemeltető is több támogató felújítást végzett a laboratóriumokban ill. intézeti létesítményeken. A kutatási eszközpark javításaként - a GVOP műszerpályázatok támogatásával, közbeszerzési eljárás nyomán - új UHV kamrát állítottak üzembe az Auger-laborban; az elméleti kutatások feltételeinek támogatására egy blade-rendszer beszerzésével 32 MFt értékű számítógép-hálózat bővítést hajtottak végre. Egy 15M Ft értékű HeNe lézer beruházással fejlesztették az impulzus-lézeres rétegpreparációt, egy 20 MFt értékű napelem-bemérő állomás felszerelésével támogatták a napelem-szerkezetek kutatás-fejlesztését és egy saját erőből beszerzett Langmuir-Blodgett filmhúzó berendezéssel bővítették a nanopreparációs lehetőségeket.

Sikerrel kezdte el az intézet kutatási eredményeinek, unikális vizsgálati lehetőségeinek a gazdasági hasznosítását a 2005-ben létrehozott első MFA „spin-off” vállalkozás, az *ANTE Innovatív Technológiák Kft.* 2006. kiemelkedő eredménye, hogy a Mikrotechnológiai Főosztály egy innovatív „CMOS-kompatibilis tömbi mikrogépészeti eljárást” fejlesztett ki és szabadalmaztatott. Ennek alkalmazása az integrált tapintásérzékelés területén a PPKE-mel közös vezérlés-fejlesztéssel együtt képezi a második spin-off vállalkozás alapját, a *Tactologic Kft. megalapítását*, melybe alapítóként a Richter Gedeon Rt. is belép.

Intézményes *nemzetközi tudományos kapcsolataik* terén szoros együttműködést alakítottak ki a tajvani Industrial Technology Research Institute munkatársaival Shinchuban, és folytatódott a kapcsolatok elmélyítése a japán NIMS, Tsukuba kutatóival.

Ipari kapcsolataik sikeresen fejlődtek 2006-ban. Folyik a Weszta-T Kft. innovatív gázjelző készülékének a gyártása az MFA integrált pellisztor-chipjének felhasználásával. Új alapokra helyezték 2006-ban a japán Tateyama-Kagaku céggel csaknem 10 éve folyó K+F együttműködést, melynek keretében az MFA-ban MEMS és napelem-fejlesztés területén végzett szerződéses kutatás mellett folyamatosan 4 doktoranduszuk kap ösztöndíj-kiegészítést és dolgozik 2-3 hónapig a cég K+F létesítményében Toyamában.

Az elmúlt évek finanszírozási körülményeinek kényszerítő hatására az MFA működésében az NKTH ill. KPI pályázatok mára csaknem a közvetlen költségvetési ellátmánnyal azonos részarányt képviselnek. Az innovációs pályázatok elszámolásában – a szinte kezelhetetlen bürokrácia mellett – a kifizetéseknek fellépő többhónapos késések és a központi szabályzók instabilitása miatti likviditási gondok *nagyon beszűkítették az intézet mozgásterét.* Az

improvizatív állami szabályzás, a költségvetési megszorítások, a bürokrácia soha nem tapasztalt elburjánzása és az innovációs pályázati finanszírozás átláthatatlan, követhetetlen rendszere nyomán kialakult likviditási zavarok áthidalása – mint már több éve – ismét emberfeletti erőfeszítéseket követelt, amiben a gazdasági vezetés az MTA vezetésének és a társintézeteknek a segítségére támaszkodhatott. Ezzel együtt rendkívüli siker, hogy a tudományos és adminisztratív munkatársak jól koordinált, megfeszített erőfeszítésével az intézet eredményességét mintegy 9%-kal növelte és 1,6 Mrd Ft-os költségvetéssel fennállása óta legsikeresebb gazdasági évét zárta 2006-ban!

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

A négy fő kutatási irányt (vékonyrétegek, nanotechnológia, fotonika és mikrotechnológia) reprezentáló főosztályokon belül a kutatás 12 osztályvezető irányításával önálló témagazdálkodású kutatócsoport ill. laboratórium kereteiben folyt. A beszámoló ezért követi a szervezeti sémát, ami a kutatási irányokat tükrözi.

Mikrotechnológiai Főosztály

A főosztály feladata változatlanul a mikro- és nanorendszerek integrációja; szilícium és vegyületfélvezető alapú struktúrák, érzékelők, fényemittáló és -detektáló eszközök kutatása, preparációja és vizsgálata ionsugaras technikákkal és elektromos mérési módszerekkel.

Mikrotechnológiai Osztály: 20 fő, 146 MFt (kv.:59 MFt, pályázat 51 MFt, K+F és árbevétel: 36 MFt). Alapkutatási szinten 3 OTKA pályázat keretében folyik a Si mikromechanikai megmunkálásában új eljárások kutatása: elektrokémiai eljárások *mikrofluidikai célú struktúraelőállításra*, proton mikronyaláb-roncsolás (ATOMKI), magas hőmérsékletű hidrogénes hőkezelés kombinációja. Nagy porozitás-különbségű pórusos Si multirétegek ultravákuumban, majd hidrogénben történő magas hőmérsékletű hőkezelésével és polikristályos Si leválasztásával mikroméretű, zárt membránszerkezetek és a Si kristály felülete alatti tetszőleges alakú zárt mikroszatomnák állíthatók elő. Folyik *pórusos Si membránok kutatása enantiomer elegyek szétválasztására (PE, Veszprém)*, valamint ifjúsági OTKA támogatással *vékony MEMS membránok aktuálási célú mozgásának elméleti és kísérleti kutatása*.

Ammónia érzékelési célra folytatódott az Al-mal adalékolt ZnO (a továbbiakban ZAO) rétegek kutatása, a ZnO dc magnetronos porlasztásos előállítása 3% Al tartalmú ZnO targetből 10% O₂ tartalmú Ar porlasztógázzal. Kihhasználva a rétegek szerkezetének és összetételének a hordozó plazma alatti pozíciójától való függését, a „*kombinatorikus kémiai szintézis*” lehetőségét valósították meg az érzékelés szempontjából *legkedvezőbb szerkezetű és összetételű rétegek egyszerű kiválasztására*. Megállapították, hogy a réteg érzékenysége jelentősen függ a szerkezettől. A jelenlegi struktúrák válaszadási és visszaállási ideje már elfogadható (kb. 10s), viszonylag kis érzékenységük miatt (válaszadási küszöb kb. 500ppm) még alkalmatlanok gázérzékelési feladatra. Így viszont alkalmazásukra az NKFP AQUANAL projektben sem kerülhet már sor.

A labor kiemelkedő alkalmazott kutatási eredménye a *CMOS kompatibilis pórusos Si tömbi mikrogépészeti eljárás iparjogvédelme*, és a *taktilis érzékelési célra szolgáló 8X8 taxelt tartalmazó, címző és kapcsoló elektronikával ellátott tapintásérzékelő integrálása és*

demonstrációja PPKE együttműködésben. Ennek nyomán kezdődhetett meg a két intézmény közös spin-off vállalkozásának, a Tactologic Kft.-nek a szervezése.

A SZTE-n és a Videoton Elektronika Kft. vezette NKFP TALAJ-projektben az erdők CH_4 forgalmának mérését tervezik fotoakusztikus elven működő gázérzékelő rendszerrel, melynek kulcselemét, a mérőkamrába építendő nagy érzékenységű mikrofon-chipet fejlesztik a MEMS laborban. A mérendő ppm koncentrációk miatt a membránok és felfüggesztésük méretezése (sajátfrekvencia és várható elmozdulás) a végeelem (FEM) modellszámítások alapján technológiai szempontból (geometria és anyagkombináció) kritikus. Megterveztek a műveleti sort és egy 16 chip-változatot tartalmazó maszksorozatot.

A Max Planck Institut für Plasmaphysik számára TOKAMAK körülményeket ill. az ITER neutronfluxusát kibíró plazmasugárzás- mérő *bolométert* fejlesztenek. A vékony SiN_x membrán hátoldalán kialakítandó 4-10 μm W absorber miatt a $\pm 1,5\%$ -os szórású Pt ellenállás hőmérők előállítására komoly technológiai kihívást jelent.

Folytatták a nanokristályokat tartalmazó vékony szigetelő rétegek előállítását az EU FP6-os „SEMINANO” projekt számára, a *SiC nanoszemcsék processzálását*.

A labor az intézet és a kooperáló partnerek (egyetemek, társintézetek) szerteágazó mintapreparációs igényeinek kielégítése mellett szerződéses K+F munkát végzett a Tateyama (Japán) cégnek az Optoelektronikai Osztály vezetésével a plazmaimmerzsiós/szítanyomásos technikával kialakítandó beltéri napelem fejlesztésében.

Kis sorozatú felületi akusztikus hullámszűrő (SAW), nyomásmérő ill. katalitikus gázérzékelő gyártást folytattak és tetemes laborhasználatot járó, de pénzügyi fedezettel nem bíró graduális és posztgraduális oktatási feladatokat vállaltak.

Félvezető Karakterizáció Osztály 9 fő, 57 Mft (Kvt: 40 Mft, pályázat: 17 Mft). Kutatásai alapvetően két témacsoport köré épülnek: az ionsugaras analitika területén a félvezetők implantációs adalékolása során végbemenő alapvető fizikai folyamatok és a kialakuló adalékeloszlás illetve rácsrendezetlenség kísérleti vizsgálata és elméleti leírása ill. a félvezetők és a nanoszemcséket is tartalmazó vékonyrétegek elektromos tulajdonságainak vizsgálata CV, IV, DLTS, SR, stb. módszerekkel.

EU FP6 projekt és OTKA pályázat keretében *Si nanokristályokat tartalmazó MNOS és MNS szerkezeteket* állítottak elő LPCVD-vel és kristályszerkezeti, optikai, elektromos és memória tulajdonságait vizsgálták XTEM, spektrális ellipszometria, valamint IV, CV, memóriaablak, memóriahisterézis és retenció mérések segítségével. Az eddigi legjobb szerkezet +/-15 V, 400 ms-os író/törlő impulzusok esetén 9,7 V-os memóriaablak szélességet mutatott. Ennek extrapolált értéke a retenció mérések alapján 10 év elteltével 1,5 V. +/-10 V, +/-15 V és +/-20 V 100 ms-os impulzusok esetén 2,0 V-os, 7,9 -os, és 13,9 V-os memória ablakot kaptak.

A DLS berendezéshez beszerzett (GVOP) kriosztát segítségével kimutatták, hogy beta vas szilicid kvantum pötty szerkezetek elektromos tulajdonságait a vas reakció által keltett hibák dominálják. Szilíciumban eltemetett félvezető CrSi_2 kvantum pöttyök a vas-szilicidhez képest kisebb, de jelentős ponthiba-koncentrációt mutatnak. *Nanokristályos CdS/InP p-n diódák* elektromos tulajdonságait vizsgálva megállapították, hogy a kapott különleges áramfeszültség karakterisztikák az elektrontranszport dominanciának a következményei. *Nyitó irányban a domináns vezetési mechanizmus a termikus emisszió, záró irányban a téremisszió.* SiO_2 -vel borított Si szeleten párologtatással előállított *Ge nanokristályokat* AFM-mel, SEM-

mel és van der Pauw mérésekkel minősítve *hatványfüggvény szerinti korrelációt találtak a szemcsék mérete és a réteg négyzetes ellenállása között.*

Ar⁺ implantációval amorfizált egykristályos Si és SiC rétegek lézeres hőkezelésének tanulmányozására különböző vastagságú amorfizált rétegekben rövid impulzushosszú (5 ns) Nd:YAG lézerral különböző hullámhosszokon ($\lambda=1064$ nm, 532 nm, 355 nm) hőkezelték. Vizsgálták a lézeres hőkezelések előtt a roncsolatlan, illetve ionimplantációval roncsolt 4H, és 6H-SiC minták optikai tulajdonságait (transzmisszió, abszorpciós együttható) 300–1000 nm hullámhossz tartományban. Azt követően RBS mérésekkel vizsgálták az Ar ionok mélységi eloszlását és a kristályhibák mennyiségét, illetve az amorf réteg vastagságát. Az implantálás után ~150 nm vastagságú amorf rétegeknél $\lambda=532$ nm esetén a hőkezelt SiC minták felülete megolvadni látszik, míg a beimplantált Ar ionok részben diffundálnak, részben távoznak a felületről. $\lambda=355$ nm esetén, ill. vékonyabb amorf rétegeknél kevésbé drasztikus a változás.

SiC ionimplantációja során keletkezett rácshibák TEM, RBS és ellipszometriai vizsgálata szerint az utóhőkezelés akkor hatásos, ha a kiinduló hiba mértéke kritikus szint alatt van, különben a hőkezelés során lokálisan egyidejűleg különböző orientációjú és szerkezetű karbid kristályok keletkeznek. Modellt javasoltak a Si ill. C hibák akkumulációjának különbségére

A széles tiltott sávú félvezető SiC a spintronika ígéretes alapanyagává válhat. Nagy Ni dózissal (mágneses adalék) implantált SiC egykristály RBS/C mérésével az implantáció után, ill. 1100 °C, 1 h, Ar hőkezelése után az EPR és az RBS is hasonló roncsoltságot mutat a különböző dózisos esetén a hőkezeletlen implantált mintákra, ami teljes amorfizációra utal. A hőkezelt mintáknál az RBS nem mutat különbséget a roncsoltságban, az EPR viszont minden esetben a hibacentrumok mennyiségének jelentős csökkenését mutatja. Ez valószínűleg részleges visszakristályosodásra ill. polikristályosodásra utal. Az EPR a T= 4-300 K tartományban nem mutatott ki nikkelhez köthető EPR centrumokat. A SiC spintronikai alkalmazásainak témájában benyújtott fiatal kutatói OTKA pályázatuk elbírálás alatt áll.

Folytatták a *SiC oxidáció vizsgálatát* a poláros hexagonális SiC kristályok szén és szilícium borította oldalán tapasztalt eltérő oxidációs kinetikájának megértésére. Kimutatták különféle parciális oxigén nyomásokon készített SiO₂ rétegek elemzésével, hogy a Deal-Grove oxidnövekedési kinetika dominál ebben az esetben is.

A CO-s hőkezelés során kialakuló *SiC nanokristályok* növekedési mechanizmusának feltárására ¹³C/¹⁸O izotópokkal dúsított gázban szelektíven vizsgálták a beépülő oxigén és szén mennyiségét illetve mélységi eloszlását. A beépülő ¹⁸O mennyisége kb. 5-10-szer nagyobb, mint a mintába kerülő ¹³C mennyisége. A legtöbb ¹⁸O a SiO₂ rétegbe épül be, a ¹⁸O/¹³C arány a SiO₂/Si határfelületen 1/2. SiC nanokristályokat tartalmazó MOS szerkezetek elektromos tulajdonságait vizsgálva CV mérésekkel a flatband eltolódás a SiC nanoszemcsék jelenlétében jelentős (>10V), ekkor a CV görbékben kb. 0,5V-os hiszterézis is mérhető. *Eepitaxiális SiC réteg növesztése* a SiC nanokristályokkal borított Si szeleten eltérő szerkezetű polikristályos SiC réteghez vezet.

Optoelektronikai Osztály: 12 fő, 79 MFt (kv: 33 MFt, pályázat 41 MFt, K+F: 5 MFt). Feladatai a napelemtechnológia-kutatások, a fényemittáló vegyületfélvezető szerkezetek kutatásán kívül a szenzorok zajának vizsgálatára és mikrohullámú mérés technikai alkalmazásokra is kiterjednek.

A „Napelemtechnológiai Innovációs Centrum” NKFP projekt keretében folyó kutatások előrehaladása alapvetően a KPE által késedelmesen szállított berendezés-modulok hozzáférhetővé válásának függvényei. A CIGS vékonyréteg napelemtechnológia

fejlesztésében elért eredmények eddig döntően a porlasztó modulhoz kötődnek. A state-of-the-art-ot meghaladóan sikerült *szobahőmérsékleten*, nagy felületen (300X300 mm²) a látható tartományban transzparens (>85%) és elektromosan vezető (3.10⁻⁴ Ωcm) ZnO kontaktus rétegeket leválasztani. A művelet kézbentartására spektrumanalizátort telepítettek a porlasztó kamrába, és az O és Zn vonalak intenzitásarányának követésével jellemzik a target felületi állapotát. Ugyanebben a rendszerben folytatódott az Al-mal adalékolt ZnO (a továbbiakban ZAO) rétegek kutatása ammónia érzékelési célra. A ZnO dc magnetronos porlasztása 3% Al tartalmú ZnO targetből 10% O₂ tartalmú Ar porlasztógázzal történt. Kihasználva a rétegek szerkezetének és összetételének a hordozó plazma alatti pozíciójától való függését, a „*kombinatorikus kémiai szintézis*” lehetőségét valósították meg az érzékelés szempontjából *legkedvezőbb szerkezetű és összetételű rétegek egyszerű kiválasztására*.

Modellkísérleteket végeztek és értékelték ki a *párolgató modul* lineáris forrásának méretezéséhez. A CIGS napelemkutatás részeként *nanokristályos rétegek kémiai leválasztásával* készítették félvezető CdS/InP, CdS/Si és CdS/PbS heteroszerkezeteket.

Új PVMT-11250 típusjelű *napszimulátort állítottak üzembe* nagyfelületű (max. 1,5 x 0,75 m²) mono- és polikristályos Si napelemek (modulok) vizsgálatára. A műnap a panelek IV méréséből számítja a napelem alapparaméterek értékét (Isc, Vo, Pmax ill. kitöltési tényező), az IEC 904-9 szabvány szerinti hőmérsékletre (T=25°C) korrigált módon. Az 1000W/m² 2%-on belüli homogenitású megvilágítás mellett ipari méretben is használható berendezésre építve egy akkreditált minősítő labor kialakítása a cél. A berendezés alkalmazhatósági körét ki kell bővíteni amorf Si és majd CIGS modulok minősítésére is, a spektrális illesztetlenség meghatározása ill. korrekciója folyamatban van.

A Mikrotechnológiai Osztállyal közösen folytatták a beltéri (indoor) alkalmazásra szánt egykristályos napelem fejlesztést (Tateyama együttműködés) a Plazma Immerziós Ionimplantációs (PIII) sekély adalékolással. A napelemek hatásfoka 700 lux esetén plazma CVD antireflexiós réteggel η=12%-ot ért el, szemben a japán referencia amorf napelemnek η=10%-ával. A napelemet 100 mW/cm² AM1.5 fényel megvilágítva a PIII napelemek hatásfoka η= 7-9% volt - szemben a referencia napelem η=0,14 %-os hatásfokával! A PIII napelemek különösen vegyes üzemben, (együttes neon és napfény megvilágítás esetén) nagyobb hatásfokúak a jelenleg használt amorf Si indoor-napelemeknél. Számos kísérlet történt a vastagréteg szitanyomott kontaktusok kialakítására különböző pasztákkal eddig kevés sikerrel.

A NIR tartományban optimalizált hullámhosszú LED-ek felharmonikusainak mérésére PbS IR detektorok, IR tükrök készítéséhez PbS-CdS rétegszerkezet kifejlesztésével megoldhatóvá vált a szénhidrogének, víz és különböző apoláros oldószerek spektrumának mérése. Vízben oldott szénhidrogének meghatározása infravörös abszorpcióval az AQUANAL NKFP projekt egyik kulcsfeladata. Kiemelendő az 1200 és 1700 nm-en sugárzó InGaAs(P)/InP eszközök alkalmazása szénhidrogének és alkohol mérésére (VTT Finnország) valamint az 1600 nm-es LED-ek használata vízgőz fotoakusztikus mérésére (JATE Szeged) a korábbi fejlesztések kissorozatú gyártása és értékesítése mellett spektroszkópiai sugárforráshoz (Rikola Ltd). *Az SZBK kutatóival APL cikkben publikált szép eredmény az elektrooszmózis optikai vezérlése fotovezető réteg alkalmazásával mikrofluidikai rendszerekben rézzel adalékolt fotoérzékeny CdS rétegekkel.*

Az elektromágneses környezetállóság és környezetszennyezés zártterű vizsgálatának megvalósítása (GVOP projekt, Bonn Elektrik) témában megmintázták a kifejlesztendő

mikrohullámú termérő szonda első verzióját. Az ún. meta-anyag kutatás területén tápvonal-modellekkel végeztek kezdeti kísérleteket. Folytatták az intézetben előállított szenzorok elektronikus zajvizsgálatát, ill. ezen alapuló hibaanalízisét.

Nanotechnológiai Főosztály

Kiemelt feladata természetes és mesterséges nanoszerkezetek kutatása nanoanalitikai (pásztázó szondás, XRD és FESEM) és nanopreparációs (nanomegmunkáló állomás, nanocsőelőállítás, kerámiakompozitok), valamint elméleti szimulációs lehetőségeinek felhasználásával.

Nanoszerkezetek Osztály: 10 fő, 104 MFt. (Kvt: 29 MFt, pályázat 74 MFt, K+F: 1 MFt). Kutatási tevékenysége a szén nanoszerkezetek és azokat tartalmazó összetett anyagok, a természetes fotonikus kristályok és optikailag aktív nanorendszerek vizsgálata valamint a nano-megmunkálás fizikai-kémiai alapjainak tisztázása köré csoportosítható.

A szén nanoszerkezetek terén általánosították a vezetési elektronok szén nanocsövek hibahelyein történő szóródásának STM leképezését leíró elméleti modelljüket. Az általános modell képes a nanocsövek Fermi szintjének tetszőleges pozíciója esetén a szórási folyamatok STM képének pontos leírására, így a hibahelyekhez kapcsolódó funkciók csoportokon történő szóródási folyamatok értelmezésére is.

MWCNT alapú gázérzékelő fejlesztésében értek el jelentős sikereket: az MTA-MEH szerződés feltételeinek megfelelően működő gáz/gőz érzékelő/felismerő prototípusán igazolták, hogy a kifejlesztett szén nanocső alapú érzékelők képesek a szelektív gázérzékelésre, normál szobalevegőben.

CVD jellegű szén nanocső növesztő berendezést állítottak össze, amelyben acetilén bontásával, szilárd ferrocén, mint katalizátor prekursor elpároztatásával lehet szén nanocsöveket és más szén nanoszerkezeteket növeszteni előre elkészített katalizátor nélkül.

SEM és TEM felvételek, valamint FFT analízisre alapozva összevetették a Cyanophrys remus lepke szárnyainak (kék/zöld) színét adó, teljesen egykristályos és polikristályos fotonikus kristály szerkezeteket, valamint az Albulina metallica lepke szárnyainak (kék/zöld) színét adó közel rendezett „pepper-pot” típusú szerkezeteket és megállapították, hogy a közel rendezett szerkezet is fotonikus kristályként viselkedik, továbbá, hogy a kék és a zöld oldal színbeli eltérése a két közel rendezett szerkezetet leíró paraméterek változásához köthető.

Megterveztek és megépítettek egy számítógéppel vezérelt kísérleti berendezést, amelynek segítségével egy lepke szárnyából kivágott darab hőmérséklete mérhető a szárnyra eső fény intenzitásának függvényében. A berendezéssel párhuzamosan mérhető egy lepkeszárny, egy referencia szárny, és két pontban a készülék környezetének hőmérséklete. Tesztelés és kalibrálás után elvégezték több mint 10 lepke termikus jellemzését.

Mo és ZnO rétegeken FIB marási kísérleteket végeztek. A kimart árkokat in situ SEM, és AFM módszerrel vizsgálva ellenőrizték a porlasztó Ga-ionok beépülését TRIM szimulációkkal összevetve 5 – 50 pA tartományban és azt tapasztalták, hogy a porlasztó ionáram növekedésével a porlódási hozam csak kismértékben nő, valószínűleg melegedési effektusok miatt.

Kerámiák és Kompozitok Osztály: 5 fő, 35 MFt. (Kvt: 15 MFt, pályázat: 1 MFt, árbevétel: 19 MFt). Kutatási tematikája új tulajdonságú kerámiák és keramikus kompozitok előállítása a mikro- és nanostruktúra módosításával. Az osztály nagy sikere, hogy a világon elsőként

állítottak elő szén nanocső-szilíciumnitrid kompozitot. Leobeni együttműködéssel meghatározták a kompozitok termikus emisszióját, elektromos vezetőképességét.

Kimutatták, hogy az általuk előállított nanokompozitok esetében a szén nanocső magas hőmérsékletű degradációja elkerülhető, a mechanikai igénybevétel és az elektromos töltés közvetítéséhez szükséges karbon nanocső és a mátrix közötti kontaktus pedig szabályozható. Eredményesen vizsgálták a kompozitok erősítési mechanizmusait, mechanikai és elektromos tulajdonságait, és tovább fejlesztették a szén nanocsővel erősített kerámia mátrixú nanokompozitok előállítási módszereit. Eredményeiket két könyvfejezetben foglalták össze.

Lágy kémiai módszerekkel és magashőmérsékleti szinterelési eljárások optimalizálásával, biokompatibilis hidroxí-apatit tartalmú nano- és mikroszemcsés kompozitokat fejlesztettek ki, első lépésként tojásbél felhasználásával. Sikerült kidolgozni egy egyszerű, telített gőzfázisból történő rétegleválasztási eljárást, amely alkalmas hidroxí-apatit hordozók kalciumfoszfát nano- és mikrorétegekkel, szálakkal való bevonására. A rétegek létrehozásával lényegesen megnövelhető a kompozit szilárdsága. Szintén új téma a polimer alapú biokompatibilis kompozitok előállítása és vizsgálata, amely egy jelenleg is futó MTA-OTKA-NSF projekt keretében indult el. Az új típusú polimer alapú protézisek jó mechanikai tulajdonságokkal, nagy porozitással, a célnak megfelelő pórus mérettel és eloszlással, valamint nagy fajlagos felülettel kell, hogy rendelkezzenek. Egy új eljárással, ún. „electrospinning”, elektromos fonás segítségével, mikro- és nanoszálak morfológiájú, így nagy porozitású, nagy fajlagos felülettel rendelkező, biodegradábilis polimer – hidroxíapatit kompozitokat állítottak elő.

Komplex Rendszerek Osztály: 5 fő, 31 MFt, (Kvt: 26 MFt, pályázat: 5 MFt). Az osztály kutatói által végzett elméleti kutatómunka a korábbi évek témáira koncentrálódott, azaz tanulmányozták a nem-egyensúlyi fázisátalakulásokat, az evolúciós játékelméleti modellek különböző változatait, és a népzenei dallamokban megőrzött összefüggéseket.

Az evolúciós játékelmélet keretein belül vizsgálták, hogy a fogolydilemma helyzetekben a kapcsolatrendszer milyen topológiai tulajdonságai segítik az együttműködés kialakulását, ha az evolúciós folyamat irracionális elemeket (zajt) is tartalmaz. Megmutatták, hogy az együttműködés mértéke növekszik, ha két játékos között a stratégia átadásában figyelembe vesszük a mester-tanítvány szerepkör lehetséges aszimmetriáit is. Találtak egy olyan (reális) ragadozó-zsákmány modellt, amiben a kő-papír-olló játékokra jellemző ciklikus dominancia a védelmi szövetségek (azaz sikeres stratégia- vagy fajtársulások) között alakul ki.

A nem-egyensúlyi fázisátalakulásokat különböző elágazó-megsemmisülő bolyongási modelleken is tanulmányozták, ahol a diffúzióra képes részecskék keletkezése és kihalása közötti versengés eredményezi a fázisátmenetet.

A népdalok dallamtérbeli elhelyezkedésének strukturális elemzését ismerteti a Zene ösnyelve c. könyv, és egyúttal objektív módon vizsgálja a különböző népek népzenejében fellelhető hasonlóságokat, rokonságokat, ill. különbségeket. Jelenleg, a Zenetudományi Intézet kutatóival közös (OTKA) programban keretein belül bővítik az adathalmazt és az értékelést, illetve a nemzetközi együttműködést.

Szerkezetkutatási Főosztály

A főosztály feladata korszerű speciális vékony és nanorétegek, bevonatok ill. nanokompozit rétegek szerkezeti és morfológiai kutatása, önszervező nanorendszerek létrehozása, a felületközeli elektron- és ion-szilárdtest kölcsönhatások felderítése, kísérleti (AES mélységi profil) és elméleti vizsgálata (MD szimuláció).

Vékonyrétegfizikai Osztály: 21 fő, 158 Mft. (Kvt: 65 Mft, pályázat: 93 Mft). Az osztály kutatásai a polikristályos vékonyrétegek, új fullerénszerű bevonatok, félvezető rétegszerkezetek és ionsugaras metodikák terén folynak elsősorban transzmissziós elektronmikroszkópiai analitika felhasználásával. 2006-ban négy EU FP6 projekt, 6 OTKA pályázat, valamint egy NKFP pályázat támogatásával folytak kutatások.

Polikristályos (nanokristályos) vékonyrétegek épülésének modellezése során meghatározták a CrAlN alapréteg és CrAlYN/CrN multiréteg felépítésű védő-bevonatok szerkezet átalakulásának alapfolyamatait és a fázisképződést magas-hőmérsékletű (1000°C) hőkezelés után. Megállapították, hogy: az epitaxiális CrAlN alapréteg a hőkezelés során stabil marad; az oszlopos CrAlYN/CrN multiréteg rendszer átalakul 3D szemcsékké, megtarva az eredeti orientációt. A többségi h-AlN és Cr₂N fázisok mellett egyéb kisebbségi (pl: fémes Cr) fázisok is keletkeznek; a szilárdfázisú reakciókhoz kötődő szegregáció záró alumíniumoxid réteget hoz létre a felületen, s csak a szemcsehatárokon hatol be a tömbi szerkezetbe.

Új fullerén-típusú anyagok kutatása során szén-nikkel nanokompozit rétegeket állítottak elő. A rétegekben kialakuló kristályos fázis 400°C alatt hexagonális oszlopos Ni₃C, 400°C fölött globuláris fcc Ni. A szén mátrix szerkezete változik a növesztési hőmérséklettel. $25 - 200^{\circ}\text{C}$ -on 1-2 nm vastag rendezetlen szén, $400 - 800^{\circ}\text{C}$ -on 2-15 nm vastag rendezett grafit típusú amorf szén. Az oszlopos szerkezetű C-Ni minták elektromos vezetőképessége alagút effektust mutat, mivel a szén mátrix nagyobb része rendezetlen. A mért maximális keménység 11-14 GPa és a legnagyobb rugalmasági modulusz 120-130 GPa a 200°C előállítású oszlopos szerkezetű mintán mérhető.

Légkörből gyűjtött koromszemcsék legközelebbi atomtávolságait határozták meg. Megmutatták, hogy a legközelebbi atomtávolságok rövidüléséért legvalószínűbben hidrogén jelenléte a felelős. A C-H és C-C távolságok egymással átlapoló halmaza a kiszélesedett eloszlás maximumának szisztematikus eltolódását okozza. Értelmezésüket ismert hidrogéntartalmú szenek (kerogén) vizsgálatával támasztották alá. Módszerükkel a vegyészek által pontosan jellemzett hidrogéntartalmú, illetve hidrogént nem tartalmazó szeneket mértek és értékelték ki. A tapasztalt szisztematikus változásba pontosan beillett a korom mintán mért, fentebb ismertetett eredmény, alátámasztva az értelmezés helyességét. A korom hidrogéntartalmát másik, független (ám ugyancsak indirekt) módszerrel, az EELS-szel mért plazmon-eltolódással is alátámasztották.

Széles tiltott-sávú félvezetők kutatása során smart-cut eljárással polikristályos SiC hordozóra átvitt vékony egykristály Si és SiC szerkezeteket, azaz kompozit hordozókat vizsgáltak. A smart-cut folyamattal leválasztott Si és SiC egykristály rétegben hibák nem találhatóak, de a kompozit hordozó felülete a smart-cut miatt enyhén hullámos. Igazolták, hogy a kompozit hordozóra növesztett rétegek minden szempontból ugyanolyan jók, mint a klasszikus szeletre növesztett rétegek.

Ionsugaras technológiák területén új eredményük, hogy a 20kV-os ionágyút tartalmazó, teljesen számítógép vezérelt ionsugaras vékonyító prototípusa elkészült.

Felületfizikai Osztály: 4 fő, 49 Mft. (Kvt: 24 Mft, pályázat: 24 Mft, K+F: 1 Mft). Fő feladata az Auger spektroszkópia alkalmazása volt felület- és mélységi profilvizsgálatra.

Javaslatukra az ISO bevezette „Rugalmas csúcs elektronspektroszkópia módszer”-nek standard jelölésül az EPES definíciót. EPES: ISO 18115/7.26: 2001/ PDAM 2. Kezdeményezésükre az ISO definiálta a Surface excitation parameter (SEP) paramétert: ISO 18117/7.60: 2001/PDAM 1. Lényeges előrehaladást értek el a kvantitatív EPES kifejlesztése

terén, végleges formába öntötték a vékony szigetelő rétegek (SiO_2 , Al_2O_3 , MgO) SEP paramétereinek meghatározására korábban indított vizsgálataikat.

Pt/Ti-ban az Auger mélységi feltárás meglepő eredményt adott: az alacsony energiás *határfelületi keveredés erős asszimetriát mutat*. Pt/Ti/Si multirétegben erős keveredést, míg Ta/Ti/Pt/Si-ban gyenge ion-keveredést találtak. A jelenséget a létező modellek (ütközési modellek, "thermal spike", radiation enhanced diffusion, stb.) nem magyarázzák. Molekula dinamikai szimulációval sikerült reprodukálni a kísérleti eredményeket: a film/hordozó sorrendjének felcserélésére nézve az ionbombázott rendszer eltérő választ ad. Az egyik esetben a határfelületi keveredést jellemző mélység négyzete (ami arányos a kiszélesedéssel) időben lineárisan míg a másik esetben nemlineárisan skálázódik. A nemlineáris skálázódás anomális diffúzióra (szuperdiffúzió) utal. Ez azért érdekes, mert ilyen jelenségeket eddig csak szilárdtestek felületén találtak. Animációk: www.mfa.kfki.hu/~sule/animations/ptti.htm.

A 2005-ben GVOP pályázat keretében beszerzett UHV kamra beüzemelése nyáron megtörtént. Ezután folytatódott az Auger berendezés felújítása. A minta manipulátorok és a vezérlő szoftverek elkészültek.

Vékonyréteg-Nanorendszerek Osztály: 5 fő, 31 Mft. (Kvt: 20 MFT, pályázat: 11 Mft). Kutatásai vékonyréteg és felülettechnológiai módszerekkel alacsony dimenziós (0D-2D) szilárdtest nanorendszerek előállítására koncentrálnak. Vizsgálják ezek méretfüggő tulajdonságait, (szerkezet, átalakulások és elektronszerkezet), valamint biológiai és kémiai környezettel való kölcsönhatásaikat.

CeO_2 rétegeket alakítottak ki lézeres ablációval modell katalizátor céljára. Magas hőmérsékletű Si(001) hordozóra vas-szilicid nanoszerkezeteket készítettek. Az epitaxiális szilicid kvantum pöttyök potenciálisan hasznosak lehetnek „kvantum sejt automaták” (quantum cellular automata) és egyéb kvantum „dot” eszközök előállítására. Az indirekt félvezető Si felületére növeszhető $\beta\text{-FeSi}_2$ pöttyök vékonyréteg formában direkt sávátmenettel rendelkeznek. Így ez a rendszer alkalmas lehet szilícium alapú optoelektronika céljára is. A kísérletekben befolyásolni tudják a kialakuló α és $\beta\text{-FeSi}_2$ arányát. Germánium nanoszerkezeteket alakítottak ki SiO_2 -vel borított Si hordozón, amelyet mint lehetséges memória elemeket a SEMINANO FP6 projektben hasznosítanak.

Arany és egyéb fém nanorendszereket alakítottak ki. Az arany nanorészecskék valenciasávját a gerjesztő foton energiájának függvényében vizsgálták és megállapították, hogy az arany nanorészecskék 5d atomi nívóktól eredő valencia állapotai hasonló méretfüggést mutatnak a különböző foton energiáknál.

A Ruder Boskovich Institute-tal együttműködésben különleges tulajdonságokkal rendelkező felületeket alakítottak ki lézerrel indukált önszerveződés felhasználásával. Különböző fémekből készült mintákon tanulmányozták a lézer-anyag kölcsönhatás következtében kialakuló mikro és nanomorfológiákat. Megmutatták, hogy a nanoszekundum időtartamú lézer-anyag kölcsönhatás eredményeként, ha a nyaláb felülettel bezárt szöge bizonyos kritikus érték alatt van, nemlineáris mikronos méretű hullámok és lokális szerkezetek alakulnak ki fémek felületén, amelyek hasonlítanak a gravitáció által lejtős felületeken kialakított mintázatokhoz (homok barázdák). A kísérletek és a numerikus szimulációk megerősítették a szerkezetek fejlődésének a lézerimpulzus energiájától, a besugárzási szögtől, és a felületi összetételtől függését. A hosszú távú rendezett szerkezetek kaotikussá válnak a beesési merőlegessel 20 fokot bezáró lézer besugárzás hatására.

Fotonikai Főosztály

A főosztály feladata roncsolásmentes optikai és mágneses anyagvizsgálati módszerek fejlesztése és alkalmazása, fotonikus kristályok és integrált fotonikai eszközök, optikai-fotonikai elven működő érzékelők kutatása, valamint biomérnöki kutatások folytatása.

Félvezető Fotonikai Osztály: 11 fő, 50 Mft. (Kvt: 37 Mft, pályázat: 13 Mft). Feladataik a félvezető anyagok optikai módszerekkel történő minősítése, új típusú integrált-optikai szerkezetek kutatása, valamint optikai elven működő – ideértve a bioreceptorokat alkalmazó – érzékelő rendszerek fejlesztése.

Újjonnan összeállított, kromatikus hibáktól mentes tükrös lumineszcencia-leképezési rendszerű, hőmérsékletfüggő (4 K – 300 K) fotolumineszcencia, valamint transzmissziós és abszorpciós mérésekkel félvezető nanoszerkezetek minősítése folyt PbS - GaAs, PbSe - GaAs és PbS – PbSe - GaAs nanoszerkezeteken és párologtatott Ge nanokristályos szerkezeteken.

Bakteriorodopszin alapú optoelektronikai eszközök fejlesztése (NATO Sfp) során az egymódusú szálhoz csatlakoztatható RIB szerkezetű integrált optikai Mach – Zehnder interferométert állítottak elő és hullámvezetőnek alkalmas vékonyrétegeket növesztettek (Nb_2O_5 , Ta_2O_5).

Az NKFP AQUANAL projekt egyik alapkutatásnak indult részfeladata a *vízben oldott nehézfémek detektálása optikai elven fehérje receptorok alkalmazásával*. Megépítették a szabadalmaztatott, többcsatornás időosztásos mérések elvégzésére alkalmas mérőberendezést planáris, rácsosított, egymódusú hullámvezetők abszolút ill. differenciális módus-spektrumának felvételére.

A génebsészeti eljárással kifejlesztett flagelláris receptorok (Pannon Egy-MFA közös tanszék) nehézfém-kötő képességét izotermális titrációs kalorimetriával jellemezték, a nehézfémkötési folyamat optikai érzékeléséhez szükséges törésmutató-változást felületi plazmonrezonancia spektroszkópia (Biacore) alkalmazásával igazolták. Kidolgozták a nehézfém felismerő fehérje-receptorrétegek megkötését a tantál-pentoxid optikai hullámvezető struktúrák felületén 40 % felületi borítottság mellett (ellipszometria, SEM képanalízis).

Az AQUANAL projekt másik részfeladata vizsgáló kutakban a vízfelszínen úszó szénhidrogének kimutatása a teljes visszaverődés szögének megváltozására szolgáló optikai mérőfejjel. Ebben egy plexi kúp két monitorozó felületének egyikén a szennyezés által megváltozik a határszög, a detektorra kerülő intenzitásváltozás-különbséget „lock in” módszerrel mérve használják riasztásra.

OTKA támogatással kutatták az elektromágneses hullámok viselkedését mesterséges periodikus szerkezetekben (fotonikus kristályokban). A kétdimenziós fotonikus szerkezetekhez a hullámhosszal összemérhető periodicitású felületi mintázatra van szükség. A kolloidkémiai eljárással (BME TTK) készült Stöber szilika nanogolyókat (40-400nm) Langmuir-Blodgett (LB) technikával vitték fel a szilícium hordozóra. A szoros illeszkedésű, monodiszperz SiO_2 nanogömbökből készült egy- illetve kétrétegű filmeket ionimplantációs maszkként használták (100) orientációjú p- és n-típusú Si bór-, illetve foszfor-adalékolásához. Elektrokémiai porózus marással, és a réteg kioldásával jön létre a kívánt domborzati struktúra.

Roncsolásmentes Anyagvizsgálati Osztály: 12 fő, 95 Mft. (Kvt: 42 Mft, pályázat: 48 Mft, K+F: 5 Mft). Anyagvizsgálati módszerek kutatásával és alkalmazásaival foglalkozik optikai és mágneses elven, beleértve a kvantitatív mikroszkópiát.

Spektroellipszometriai területen OTKA támogatással folyt az optikai modellek fejlesztése sokösszetevős anyagrendszerek ellipszometriai vizsgálatához: könnyű ionok (He, N)

implantációjának hatására létrejövő roncsolás (elsősorban ponthibák) optikai választ mértek szilíciumban, francia együttműködésben. Az ehhez kapcsolódóan elnyert nemzetközi együttműködést támogató kiegészítő OTKA támogatással a Toledo University-vel (Ohio, USA) napelem célra növesztett CdTe és CdS optikai tulajdonságait vizsgálták az ion bombázás módosító hatásának ellipszometriai kimutatására. Folytatták a SEMINANO projektben és orosz együttműködésben a dielektrikumba ágyazott szilícium nanokristályok spektroellipszometriai vizsgálatát.

Langmuir-Blodgett (LB) technikával szilícium hordozóra nagy felületen, szoros illeszkedésben felvitt Stöber szilika nanogömbök (20 nm - 2 μ m) kítűnő modellrendszert alkotnak az effektív közeg közelítések (EMA) kísérleti vizsgálata szempontjából. Meghatározták erre a rendszerre az EMA érvényességi határait és az ideálistól eltérő porozitás-értékek alapján becslést adtak a nanorészecskék átlagos távolságára (lefedettségre) egyrétegű filmben, ill. több réteg esetén a mért effektív vastagság értékének ideálistól való eltérésére a polidiszperzitás alapján. Eredményeiket a Langmuir című folyóiratban ismertették.

GVOP pályázat keretében elkészült a pontforrásból pin-hole kamerába képező szélesszögű ellipszométerük prototípusa (Halo Laser) és folytatták a készülék adaptálását MOCVD klaszter-kamrára az FHG-IISB erlangeni intézetében, valamint ZnO ill. CIGS rétegminősítésre az NKFP projektben a Napelemtechnológiai innovációs központ egységein.

Befejezték a nemzetközi szabadalommal védett parabolikus tükör alapú *Makyoh-topográfias berendezés* építését, kalibrációját. Makyoh-topográfias mérési összeállítást építettek az erlangeni FhG IISB megbízásából. Elméleti eredményként kis felületi görbületek esetén keletkező Makyoh-kép leírására alternatív levezetést publikáltak és igazolták, hogy a Makyoh kép kifejezése ebben a közelítésben nem tartalmazza a felület gaussi görbületét. A módszert számos alkalmazásban és együttműködésben tesztelték, többek között két FP6 projektben is sikerrel (HYPHEN, ANNA).

A mágneses hiszterézis alhurkok mérésén alapuló roncsolásmentes mérés technika fejlesztése hideghengerléssel kialakított, különböző ferrit tartalmú ausztenites mintákon valamint öntöttvas mintákból álló sorozatokon folyt annak igazolására, hogy a módszer a mérési körülményektől függetlenül megbízhatóan alkalmazható a ferromágneses anyagból készült minták roncsolásmentes vizsgálatára.

A "Logimarker" GVOP AKF projekt keretében vizsgálták a *lézerrel kezelendő széntartalmú acélok anyagi tulajdonságait* a jelek kiolvasására szolgáló mérés technika optimalizálására (kódolástechnika, jelfelismerésdekonvolúciós eljárással). A cél Suzuki szgk. nyers karosszériaelemeinek azonosítása. Elkészült egy sorozat-gyártható, hordozható kiolvasófej prototípus is. Új eljárást teszteltek és publikáltak a *konstans mágneses tér analgetikus hatásainak vizsgálatára*. Állandó neodymium mágnesekkel végzett állatkísérletek alapján a szignifikáns analgetikus hatású elrendezés mágneses téreloszlását tanulmányozták kísérleti eszközökkel.

Folytatták a kvantitatív mikroszkópia fejlesztését orvosi, távközlési, és gyártástechnológiai feladatok megoldására. NKFP projekt keretében elkészítették az INANALRG forgalmazható (a Diagnosticum Zrt.) allergiavizsgáló morfometriai berendezés prototípusát mononukleáris sejtmagok kromatin tartalmának detektálására önszervező osztályozó eljárás alapján. *Az új eljárás 93 %-os találati valószínűséggel állapítja meg allergia mértékét!* Egy Jedlik Á. pályázat keretében Időkódolásos Aszinkron Mobil Távközlés Integrált Monitorozási Rendszer fejlesztését kezdték el, és az ImanQC automata program keretében az AXON Kft részére automatikus kábel minősítő eljárást és szoftvert fejlesztettek ki.

Biomérnöki Osztály: 4 fő, 19 Mft. (Kvt: 9 Mft, pályázat: 10 Mft). Feladatai nagy külső kooperációt igénylő, az MFA hagyományos kutatásaihoz csak részben kötődő területen található. Az „Intelligens fiziológiai állapotmonitorozó és távfelügyeleti rendszer” kutatása GVOP támogatással folyik, célja a vizsgált személyek fontosabb fiziológiai paramétereinek, emocionális állapotának, környezeti terhelésének valós idejű felügyeletét megvalósító rendszer (légzés-, hőmérséklet-, oxigén szaturáció mérés, EKG annotáció mozgó páciens esetén, mozgásérzékelés) kifejlesztése. A rendszer biztosítja a mérési adatok teljes, vagy lényegkiemelt továbbítását, előzetes feldolgozás esetében a kiértékelt (szűrt), „riasztási” adatok továbbítását és kapcsolódik majd egy autonóm helymeghatározó (GPRS) berendezéshez is.

A „Nagyfelbontású bioelektromos képalkotó eljárás” (BEM) az agyi bioelektromos források tér- és időbeli változásainak nagy pontosságú meghatározása fontos az agyműködés (így pl. a plaszticitás) lényegének a megértéséhez, a diagnosztikai és terápiás eljárások kidolgozásában. Az NKFP projekt célja, eszköz és metodika kidolgozása, pl. nagy idő-felbontású EEG jelek és a pontos fej és agy geometriát felhasználó forrás-meghatározása. Feladatuk az EEG és a szükséges kísérő jelek mérésének, feldolgozásának és megjelenítésének megoldása, amiből a geometriai adatok reprodukálhatósági vizsgálata, kísérleti BEM mérések és adatfeldolgozások valósultak meg.

Az intézet termelési-vállalkozási tevékenysége

- Saját fejlesztésű szilícium nitrid kerámia szerszámok kis sorozatú gyártása és értékesítése
- Speciális felületi akusztikus hullámszűrők (SAW) tervezése és kissorozatú gyártása

Infrastruktúra

Célzott központi támogatás híján 2006-ban is jobbra *saját erőből kényszerült az intézet jelentős felújításokat végrehajtani*. A sikeres GVOP műszer-felújítási és műszerbeszerzési pályázatokhoz kapcsolódóan, és az új témaindítások kapcsán két új labor (kémiai és napelem minősítő) kialakítását, emellett 4 dolgozószoba felújítását végezték el.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége: Az MFA-ban három emeritus és négy kinevezett egyetemi tanár (két tanszékvezető), egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozik. Vezető munkatársaik zöme oktatott az ELTE, BME, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTEK, BMF különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, és doktori és habilitációs tanácsának. Az intézetben működik a veszprémi Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar Nanotechnológia Tanszék Nanoszenzorika Professzori Laboratóriuma és az MFA-ELTE elektronmikroszkópiai közös labor. Külső támogatás nélkül rendszeres gyakorlatokat tartanak preparatív és analitikai laborjaikban a graduális és posztgraduális képzés számára. Intézetükben 2006-ban 21 hallgató folytatta PhD kutatásait.

Részvétel a hazai tudományos közéletben: Az MFA adta az MTA Műszaki Osztály elnökét, a MAB egy albizottsági tagját, a Széchenyi Díj egyik albizottságának egy tagját, az NKTH "Anyagok és nanotechnológia" EU-tanácsadóját, a Bay Z AKA kuratóriumi tagját. Két fő MTA doktorképviselőt, egy fő AKT tagot, egy tagot az Élettelen Természettudományi Kuratóriumban; az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság újrávalasztott

elnökét és 7 tagját, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság öt tagját, az MTA Anyagtudományi Komplex Biz. négy tagját, az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Bizottság egy tagját, az MTA Orvosi Informatikai Munkabizottság egy tagját, a VEAB Egészségügyi Informatikai Munkabizottság elnökét, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagját, az OTKA Elektrotechnikai és Elektronikai Zsűri egy tagját, az ELFT tiszteletbeli elnökét, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport titkárát, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport vezetőség egy tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat 3 vezetőségi tagját, az OM IST zsűri egy tagját, az EÜ Telematikai Munkacsoport egy tagját.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok: Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca szerkesztőbizottsági tag, MICRON, valamint a "The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy" szerkesztőbizottsági tag, „IEEE Sensors Journal”, szerkesztőbizottsági tag, EPS Council tag, E-MRS Council tag, IUPAP C13 Biz. tag, Bohmische Phys. Soc. (USA) Councillor, International Society of Electrocardiology vezetőségi tag, IUUSTA hazai képviselő, IUUSTA Nemz. Bizottság elnök, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, IUUSTA MNB titkár, EUROSENSORS International Steering Committee tag.

A nemzetközi kapcsolatok

Az intézet egy munkatársa tagja az EU Priority 3 (Nano and Materials) Programbizottságának és többen rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál.

Az intézményekkel való szervezett kapcsolatok teljes felsorolásától el kell tekinteni, hiszen több mint kétszáz intézmény szerepel, az EU keretprogramokban. A rangos egyetemek (Cambridge, NIMS -Tsukuba, Osaka, Tokyo, Tohoku-Sendai, Linköping, Erlangen, Namur, SUNY Stony Brook, Barcelona, Thessaloniki, Istanbul, TU Helsinki, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center, stb.) mellett 2006-ban is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Peugeot-Citroen, Mahle, Rolls-Royce, Renault, GE Hungary, Tateyama, Electronics Oy, VIDEOTON, Weszta-T, stb. Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár), és a Sapientia Egyetemmel.

Az intézet a beszámolási évben három orosz, két-két belga, cseh, szlovák, bolgár, lengyel, és egy-egy ukrán, olasz, román MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápolt. TÉT támogatással öt görög, két-két spanyol, szlovén és horvát, egy-egy japán, dél-afrikai, francia és osztrák kapcsolatuk volt, valamint két DAAD-MÖB cserét működtettek. Az egyezményes együttműködés zökkenőmentesen, a KPI által kezelt TÉT iszonyatos adminisztrációval, igazoláshalmazzal működik.

A kétoldalú kapcsolatok szinte kivétel nélkül közös publikációkat eredményeznek, és nagy segítséget nyújtanak nemzetközi pályázatok előkészítésénél is, tehát feltétlenül hasznosak.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

A tárgyévben nyolc új OTKA pályázatuk nyert támogatást. Bár új NKFP program nem indult, a 2004-ben és 2005-ben indult NKFP projektek a 2005 legvégén indult Jedlik Ányos projektekkel együtt folyamatos munkát adtak a kutatói gárdának.

Nemzetközi pályázatok

EU FP6: ANNA; European Integrated Activity of Excellence and Networking for Nano and Micro- Electronics Analysis, Electromagnetic response properties of carbon onions and carbon onion-based composites.

Természetesen a korábbi években nyert másik 7 EU FP6-os projekt is folyamatos munkát adott 2006-ban. Valamennyi fenti pályázat szorosan kötődik az eddig művelt kutatási területekhez, ill. saját kezdeményezésű kutatásokhoz (MTA-OTKA-NSF). Az EU és NKFP pályázatok kifejezetten a gazdasági hasznosulást célzó, ipari partnerekkel folyó, sőt általuk koordinált kutatás-fejlesztések. *Az MFA részvétele valamennyi esetben saját indítású alapkutatási eredményeinek a hasznosítására épül!*

Díjak, címek, fokozatok:

Magyar Köztársasági Érdemrend Tisztikeresztje, Magyar Köztársasági Érdemrend Lovagkeresztje, ELFT Gyulai Zoltán díj, Mikroszkópos Társaság díja, EPS fellow cím, Academia Europea Burgen Scholar kitüntető oklevele, Ferenczi György Emlékalapítvány Díja, MFA Kutatói Díj, MFA Ifjúsági Díj.

2006-ban egy fő a BME TTK habilitált doktora lett, egy fő kapott egyetemi tanári kinevezést és az MFA négy fiatal kutatója védte meg értekezését.

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

Publikációk

1. Balázs Cs, Fényi B, Hegman N, Kövér Zs, Wéber F, Vértesy Z, Kónya Z, Kiricsi I, Biró LP, Arató P: Development of CNT/Si₃N₄ composites with improved mechanical and electrical properties, Composites B 37, 418-424 (2006)
2. Zolnai Z, Ster A, Khánh NQ, Kótai E, Posselt M, Battistig G, Lohner T, Gyulai J: Damage accumulation in nitrogen implantad 6H-SiC: Dependence on the direction of ion incidence and on the ion fluence, Journal of Applied Physics 101, 023502 (2007) IF: 2,498
3. Gonzalez-Silveira M, Rodriguez-Viejo J, Garcia G, Pi FF, Ager J, Lábár JL, Barna A, Menyhárd M, Kótis L: Influence of layer microstructure on the double nucleation process in Cu/Mg multilayers, J. Appl. Phys. 100, 113522 (2006) 1-9. IF:2,498
4. Nagy N, Pap AE, Deák A, Horváth E, Volk J, Hórvölgyi Z, Bársony I: Large area self-assembled masking for photonics applications, Applied Physics Letters 89, 063104 (2006) IF: 4,127

5. Juhász Z: A zene ősnyelve. A magyar népzene rendszerének és eurázsiai kapcsolatainak vizsgálata mesterséges intelligenciákkal és matematikai módszerekkel. Magyar nyelvű könyv, 255 o, Frig Kiadó, Budapest, 2006. ISBN/ISSN: 963869257X
6. Vukov J, Szabó Gy, Szolnoki A: Cooperation in noisy case: Prisoner's Dilemma game on two types of regular random graphs, Phys. Rev. E 73, 067103/1-4 (2006) IF: 2.418
7. Vasarhelyi G, Adam M, Vazsonyi E, Vizvary Z, Kis A, Barsony I, Ducso C: Characterization of an integrable single-crystalline 3-D tactile sensor, IEEE SENS J 6, 928-934 (2006) IF: 1.100
8. Vértesy Z, Bálint Zs, Kertész K, Vigneron JP, Lousse V, Biró LP: Wing scale microstructures and nanostructures in butterflies - natural photonic crystals, J. Microscopy, 224 108 – 110 (2006) IF: 2.095
9. Tapasztó L, Nemes-Incze P, Osváth Z, Darabont AI, Lambin Ph, Biró LP: Electron scattering in a multi-wall carbon nanotube bend junction studied by scanning tunneling microscopy, Phys. Rev. B 74, 235422-1 - 235422-6 (2006) IF: 3.185
10. Pető G, Khanh NQ, Horváth ZE, Molnár G, Gyulai J, Kótai E, Gucci L, Frey L: Nanoscale morphology and photoemission of arsenic implanted germanium films, Journal of Applied Physics 99 (8), Art. No. 084304 (2006) IF: 2.498
11. Kovács Kis V, Pósfai M, Lábár JL: Nanostructure of atmospheric soot particles, Atmospheric Environment, 40(29), 5533-5542 (2006) IF: 2.724

Szabadalmak:

"Változtatható fókusz távolságú többszörös lencse"

Lajstromszám: 224 577

Bejelentés napja: 2000. február 1

Megadása: 2005. október 3.

„Apparatus and measurement procedure for the fast, quantitative, non-contact topographic investigation of semiconductor wafers and other mirror like surfaces”

Európai szabadalom (a Fraunhofer Gesellschaft-tal közösen).

Lajstromszám: 02785145.0

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	143	Ebből kutató ² :	87
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			15
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			192
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			190
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	137	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	1
nemzetközi együttműködés keretében:	95	SCI által regisztrált folyóiratban:	125
összesített impakt faktor:	185,8	összes hivatkozás száma ⁴ :	2224
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2015
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	1	könyvfejezet:	1
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	15
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	4	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	2	Megadott szabadalmak száma:	2
<i>ebből</i> külföldön:	1	<i>ebből</i> külföldön:	1
Értékesített szabadalmak száma:			1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	36	poszterek száma:	71
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			30
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			629 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	14
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			22
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	54 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			26
NKFP:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	84 MFt
Egyéb:	16	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	16 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			18
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	142 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			14
EU forrásból:	12	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	108 MFt
Egyéb:	2	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	4 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			6
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	11 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			25
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	114 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			4 MFt

RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET

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

Telefon: 483-8300, Fax: 483-8333

e-mail: math@renyi.hu, honlap: URL: <http://www.renyi.hu>

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az alapítása óta eltelt több mint fél évszázadban az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központjává vált. 2006-ben is a fő feladat ennek a pozíciónak a megőrzése, megerősítése volt.

Az intézet tevékenysége már tíz tudományos osztály keretei között folyik, ugyanis a közelmúltban létrehozták az Algebrai Geometria és Differenciátopológia osztályt, amivel egy újabb fontos terület került az intézet kutatási palettájára. Valamennyi osztály a legszorosabb személyes és információs kapcsolatban áll az általuk művelt kutatási területek más vezető központjaival. Ennek köszönhetően kutatási programjukat folyamatosan képesek a matematika fejlődése által felvetett legújabb kérdésekhez igazítani.

Az intézet munkatársai közül 2006-ban egy kutató szerzett PhD fokozatot, három kutató pedig akadémiai doktori címet. Jelenleg 11 akadémikus, 27 akadémiai doktor, 34 kandidátus, illetve PhD címmel rendelkező kutató alkotja a törzsállományt. Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD tanulmányaikat folytató vagy azt éppen befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2006 folyamán további 4 új fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémiától kapott külön keret terhére. Az intézet kutatói a Közép-Európai Egyetemen közösen folytatott PhD képzés keretében 2 tanulmányait kezdő és 7 disszertációját író doktorandusz munkáját irányították. Ennek keretében megtörtént az első sikeres védés is, a PhD fokozatot szerző a végzés után az intézet fiatal kutatója lett. Az utóbbi években kinevezéssel felvett fiatalok mellett, a korábbi években odaitélt, de még le nem járt fiatal kutatói ösztöndíjakat is beszámítva, 2006-ban is mintegy 20 fő ígéretes tudományos kutatói utánpótlás nevelésére volt az intézetnek lehetősége.

Az intézet munkatársai - a megelőző évekhez hasonló számban - 2006 során 186 dolgozatot publikáltak, amelyből 184 tudományos publikáció, 2 pedig ismeretterjesztő. A tudományos publikációk közül 2 szerkesztett mű, 1 PhD értekezés, 3 akadémiai doktori értekezés, 3 könyv, 16 tudományos könyvekben megjelent könyvfejezet, 25 referált konferenciakiadványban (11 konferenciakötetben, 14 folyóirat-különszámban), 134 pedig folyóiratban jelent meg. 133 cikk világnyelveken jelent meg, 120 külföldi folyóiratban, 13 hazaiában, de a hazai kiadású tudományos folyóiratok is nemzetközileg elismert angol nyelvű kiadványok.

Az intézet kutatói aktívan részt vettek az egyetemi oktatásban, egyebek között 24 PhD hallgató, 14 szakdolgozó és 2 tudományos ösztöndíjas témavezetését látták el, vezetésükkel 6 TDK dolgozatot írtak.

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

További kézzelfogható gazdasági haszonnal járt a már korábban elkezdődött szakmai kapcsolat a Morgan Stanley pénzügyi befektetési tanácsadó céggel. Miután a Morgan Stanley New Yorkot és Londont követően Budapesten hozta létre következő pénzügyi-matematikai kutatócsoportját, annyira meg volt elégedve az itt létrehozott tudásbázissal, hogy 400-450 fős pénzügyi központját is Budapestre telepíti, munkalehetőséget teremtve ezzel közgazdászok és informatikusok jelentős táborának.

Számos sikert hoztak az intézet épp csak elkezdődő bioinformatikai kutatásai. Hungarian Bioinformatics című pályázatukat támogatásra méltónak ítélte az Európai Unió, ami részint az eddigi eredmények elismerését jelenti, részint lehetőséget ad a vizsgálatok folytatására és kiterjesztésére. Emellett az intézet munkatársai hathatós részvételével megalakult a Magyar Bioinformatikai Társaság, melynek alelnöke és főtitkára is a Rényi Intézet munkatársa.

A „tisztán matematikai” sikerek is számos gazdasági-társadalmi vonatkozással bírnak. A közelmúlt egyik robbanásszerű fejlődésnek indult területe a regularitási lemma általánosításainak és különböző matematikai diszciplínákra való kiterjesztéseinek vizsgálata. Ezek a kutatások a Microsoft (Seattle), az ELTE és a Rényi Intézet kutatóinak részvételével a téma vezető kutatócsoportját hívták életre, és az együttműködések további eredményekkel kecsegtetnek.

A konkrét matematikai eredményeken túl az intézet kutatásainak sikerességét fémjelzi, hogy az Európai Matematikai Társulat az elkövetkezendő három évben támogató 11 legfontosabb európai matematikai konferencia közé válogatta a diszkrét matematika területén szervezett Horizon of Combinatorics című kéthetes konferenciát és nyári iskolát, és a 11 konferencia együttesen elnyerte az Európai Unió támogatását is.

Algebra Osztály

Teljesen algebrai, konstruktív új bizonyítást adtak arra a híres, C^* -algebrákra vonatkozó eredményre, miszerint a Cuntz-algebrákat teljesen meghatározza a K -elméletük.

Meghatározták a multiszimmetrikus polinomok algebrájának egy véges prezentációját generátorokkal és relációkkal.

Több egyszerű komplex Lie-algebra adjungált reprezentációja feletti tenzorok modulusában meghatározták azt a részmodulust, amelyet egy Cartan-részalgebra feletti tenzorok generálnak.

Jelentősen tovább szűkítették azoknak a csoportoknak a körét, amelyekre teljesülhet a gráfelméletben vizsgált Cayley-izomorfizmus tulajdonság.

Algebrai algoritmusokhoz jól használható becsléseket adtak az egyszerű csoportokban lévő p -reguláris elemek arányszámára.

Megmutatták, hogy ha egy véges csoport Frattini-részcsoportja triviális, akkor a csoport centrumának az indexe legfeljebb akkora, mint a kommutátor részcsoport rendjének a négyzete, és ez a becslés éles.

Kombinatorikai módszerekkel leírták a tangens és a szekáns deriváltpolinomok zérushelyeinek eloszlását.

Algebrai Geometria és Differenciál Topológia Osztály

Jelentős előrehaladást értek el a racionális irreducibilis komplex algebrai görbék osztályozásában.

Osztályozták azt az esetet, amikor a görbének egyetlen szinguláris pontja van, amely irreducibilis, és egy Puiseux-párral jellemezhető. Megfogalmaztak egy sejtést arra az esetre, amikor egyetlen irreducibilis szinguláris pont van, és a sejtést bizonyos esetekben be is bizonyították.

Megmutatták, hogy a normális felület-singularitások csomóin indukált kontakt struktúrát egyértelműen meghatározza a csomó topológiája.

Belátták, hogy bizonyos nemizolált komplex felület-singularitások Milnor-fibrumának határa megadható műtéti diagram formájában, ami a határ teljes topológiai leírását adja.

A minimális modell program segítségével tanulmányozták projektív varietásokon az effektív divizorok kúpjának belső szerkezetét.

Kimutatták, hogy léteznek olyan nemtriviális lokálisan p -adikus analitikus függvények, amelyek eltűnnek egy legalább 4-edfokú racionális együtthatós síkgörbe komplementumának minden egész pontjában.

Konstruáltak egy Cassels-Tate típusú duális egzakt sorozatot számtestek felett definiált 1-motívumokra, a Tate-Safarevics csoport végességének feltevése mellett. Ennek felhasználásával új bizonyítást adtak arra a tényre, hogy a Manin-obstrukció a gyenge approximáció egyetlen obstrukciója szemi-Abel-varietásokon.

Folytatták a racionális lefűjással kapcsolatos kutatásokat. Amerikai matematikusokkal közösen több új konfigurációt találtak, melyek lefűjhatók, és egy erős szükséges feltételt találtak azon gráfokra, melyek szimplektikusan lefűjhatók.

Osztályozták az elliptikus fibrálások szinguláris fibrumait.

Végtelen dimenziós analízis segítségével a hurokterek geometriáját kutatták. Kiderült, hogy a huroktér is racionálisan összefüggő, és rajta minden globálisan értelmezett holomorf függvény konstans.

Motivikus módszerekkel általánosították a véges csoportok karakter táblázatát, és a Fourier transzformációt.

A kobordizmus elmélet nemrég megfogalmazott sejtéseit oldották meg. Egyik fő eredmény egy tisztán algebrai konstrukciót ad a kobordizmusok klasszifikáló terére.

Algebrai Logika Osztály

Az elmúlt években kidolgozott, gyorsuló megfigyelőket is kezelni tudó, elsőrendű logikán belül maradó Specrel+IND nevű elméletben a gravitációt gyorsulással „szimulálták”, és így a gravitációnak az idő lelassulását előidéző általános relativisztikus hatásáról precíz, matematikai tételeket bizonyítottak.

Az általános relativitáselmélet számára adtak egy Genrel nevű axiómarendszert, és bizonyították ennek teljességét a Lorenz-sokaságokra nézve. Genrel természetes folytatása a korábbi Specrel+IND elméletnek. Ez a teljességi tétel megnyitja az utat afelé, hogy az ún. reverz matematikai módszereket az általános relativitáselméletben is alkalmazni lehessen.

Bizonyították, hogy a Beth definiálhatósági tulajdonsága pontosan akkor van meg egy csak véges sok változójelet használó elsőrendű logikának, ha a logika összes relációjele legfeljebb egyargumentumú. A bizonyításban egy véges, merev, k -random gráfot használtak.

Analízis Osztály

A számegeyenesen Fourier sorokkal és Lagrange interpolációval való közelítéseket vizsgáltak.

Eredményeket értek el a súlyozott közelítésben Szász-Mirakjan operátor felhasználásával.

Folytatták az évekkel ezelőtt elkezdett kutatásokat többdimenziós polinomok viselkedésére vonatkozóan konvex testeken.

Olyan háromdimenziós halmazt konstruáltak, amely parkettáz, de nem spektrális, és így ellenpéldát szolgáltat egy ismert sejtésre. Ezután kihasználták a parkettázó, illetve spektrális halmazok kapcsolatát a komplex Hadamard mátrixokkal, és új, paraméteres Hadamard mátrix családokat adtak meg.

Diszkrét Matematika Osztály

Eredményes kutatásokat végeztek a hipergráfokban található hosszú köröket biztosító feltételekkel kapcsolatban, az idevonatkozó hipergráf Ramsey kérdésekről, ezekben a hipergráf regularitási lemma felhasználásáról.

A hipergráfelméleti problémákkal kapcsolatban a háromuniform hipergráfok rövidebb és hosszabb körök biztosítására szolgáló feltételek melletti extrémális típusú eredmények emelkednek ki.

Számos eredményt értek el gráf és hipergráfelméleti Ramsey és extrém problémák kapcsolatára vonatkozóan, illetve Ramsey-Turán típusú hipergráf problémákban.

Kiemelendő, hogy sok évig a téma nehézsége miatt hipergráfok extrémális, ill. Ramsey tulajdonságaira csak nagyon kevés eredményt sikerült bizonyítani. Ezzel szemben az utóbbi kutatások áttörést jeleznek, és ebből az intézet kutatói alaposan kivették részüket.

Jelentős eredményeket értek el a kvázivételten struktúrák elemzésében, illetve, ennek kiterjesztéseként gráfsorozat metrikus terére vonatkozóan, valamint annak teljessé tételével kapcsolatban.

Kutatásokat folytattak kombinatorikai szempontból véletlen geometriai alakzatok vizsgálatára vonatkozóan, illetve konvexitási problémákban.

Extremális jellegű csoportelméleti kérdéseket vizsgáltak kombinatorikus módszerek segítségével.

Kombinatorikus módszerek alkalmazásával adatstruktúrákra vonatkozó eredményeket bizonyítottak.

Újabb eredményeket bizonyítottak, megjavították a korábbi becsléseket gráfok speciális elszínezéseivel kapcsolatban.

Geometria Osztály

Középpontosan szimmetrikus konvex sokszögek eltoltjaiból álló fedések egyszeres fedésekre bontásáról szóló korlátokat radikálisan megjavították.

Egy gráf metszési száma a legkevesebb él-metszés száma, amivel G lerajzolható. Ismert volt, hogy ha egy gráf lerajzolható a tóruszra metszés nélkül, akkor a sík-metszési száma a csúcsok számának lineáris függvénye. Erősebb és általánosabb változatot is bizonyítottak, ahol a tórusz helyett tetszőleges irányítható felület szerepelhet. Ezeket az eredményeket sikerült általánosítani nem irányítható felületekre.

Vizsgálták, hogy hogyan változhat egy gráf metszési száma, ha éleket veszünk el és bebizonyították, hogy a metszési szám "folytonos módon" csökken.

Belátták, hogy egy kettő átlagszélességű konvex test köré írt szimplex átlagszélessége legalább akkora, mint az egységgömb köré írt szabályos szimplexé.

Legalább kétdimenziós euklideszi térben leírást adtak azokról a konvex testekről, amelyek bármely kongruens példányainak metszete, vagy pedig uniójuk konvex burka centrálisan szimmetrikus.

Egy korábban euklideszi terekbeli konvex testek esetében ismert centrálszimmetria karakterizációt kiterjesztettek Minkowski terekbeli konvex testekre.

Tovább folytatták a különböző geometriai alakzatok metszetgráfjainak tulajdonságaira vonatkozó szisztematikus vizsgálatokat.

Halmazelmélet és Topológia Osztály

Vizsgálták monoton normális terek felbonthatósági tulajdonságait, és nagy számosságok létezése esetén meglepő negatív eredményeket bizonyítottak.

Bizonyították a nevezetes Cech-Pospisil-tétel egy messzemenő élesítését.

Megmutatták, hogy ha λ egy ω -elérhetetlen szinguláris számosság, akkor az alapmodell egy alkalmas MAF-os (s így kofinalitást megőrző) generikus bővítésében van λ sűrűségű, öröklődően Lindelöf, reguláris tér. Ezt korábban csak reguláris λ -ra sikerült belátni.

Teljesen tisztázták azt a kérdést, hogy mely lokálisan kompakt csoportokat lehet konzisztensen lefedni egy alkalmas kompakt Haar-nullhalmaz kontinuumnál kevesebb eltoltjával.

Meghatározták a leíró halmazelméleti szempontból optimális ellenpéldákat a Banach fixpont-tétel megfordítására.

Megvizsgálták, hogy egy majdnem diszjunkt halmazrendszer maximálisan majdnem diszjunkt bővítéséhez minimálisan hány halmazt kell a rendszerhez hozzáadni.

Vizsgálták, hogy minden végtelen gráf felbontható-e két részre úgy, hogy az egyik tartalmaz kvázi-forrást, a másik pedig kvázi-nyelöt. Számos érdekes és természetes gráfostályra sikerült ezt belátni.

Véges struktúrák ideáljait vizsgálva elégséges feltételeket adtak az ilyen ideálok reprezentálhatóságára.

Információelmélet Osztály

A Shannon-elméleti titkosság területén a többfelhasználós csatornák titkossági kapacitását vizsgálták.

Újabb eredményeket értek el információelméleti módszerek segítségével a statisztikában. Az exponenciális eloszláscsaládokra vonatkozó általánosított maximum likelihood becsléseket bizonyították be. A probléma végtelen dimenziós általánosításáról nemzetközi konferencián előadást tartottak, a konferencia kötetében teljes cikk formájában publikálva.

Folytatták a mértékkoncentráció probléma vizsgálatát információelméleti módszerekkel, a logaritmikus Szoboljev egyenlőtlenségekre vonatkozó korábbi munkát, elsősorban nem független valószínűségi változók esetére.

Folytatták a gráfok színezésével és a gráfentrópiákkal kapcsolatos vizsgálataikat. Különböző gráfostályokra bebizonyították, hogy optimális színezés esetén minden olyan „teljesen tarka” páros gráf megjelenik, melynek csúcsszáma az adott gráf kromatikus számával egyenlő.

Számelmélet Osztály

Prímszámelméleti kérdéseket vizsgáltak. Jelenleg a prímszámok hézagaira adott becslés finomítása, egyszerűsítése, a módszer általánosítása és korlátainak felderítése folyik.

Kombinatorikus-additív kérdésekkel is foglalkoztak. Vizsgálták, hogy ha egy halmaz kéttagú összegeinek száma ismert, mi mondható a különbségek és a háromtagú összegek számáról, mindkettőben javítva az eddigi korlátokat. Tanulmányozták az additív viselkedés kapcsolatát a halmaz geometriai szerkezetével.

Tranziens bolyongás lokális idejére bizonyítottak „1” valószínűségű határérték tételeket, különös tekintettel a sokszor meglátogatott pontokra, ill. azok környezetére.

Bebizonyították, hogy a háromdimenziós Wiener folyamat trajektóriájának környezete, az ún. Wiener-sausage térfogata erősen approximálható egy egy-dimenziós Wiener folyamattal.

Normalizált empirikus eloszlásfüggvények nem lineáris funkcionáljainak vizsgálatához kiterjesztették Hoeffding klasszikus egyenlőtlenségét tetszés szerinti függvényosztályra.

Részletesen foglalkoztak bootstrap eljárásokkal abban az esetben, amikor a vizsgált sokaság eloszlása végtelen szórású, pl. stabilis. Ilyen esetekben a szereplő statisztikák határeloszlása egy véletlen eloszlás, melyet sikerült pontosan meghatározni.

Meghatározták néhány, a közgazdasági matematikában fontos szerepet játszó idősor empirikus folyamatának aszimptotikus viselkedését.

Meghatározták a permutációkon értelmezett eloszlások két nagy osztálya metszetének a dimenzióját.

Módszereket dolgoztak ki véletlen partíciók statisztikai vizsgálatára.

Alkalmazások

A korábbi évekhez hasonlóan, a Rényi Intézetben továbbra is elsősorban elméleti alap kutatások folynak; az egyre szűkülő költségvetési támogatás e hagyományosan magas szintű kutatások fedezetére is csak szűkös keretet biztosít. Az év folyamán az akadémiai ún. elnöki kereten (kriptológia) és egy, az év végén kezdődő európai uniós, bioinformatikai (mobilitási) pályázat forrásain kívül más anyagi keret nem is állt rendelkezésre. Az utóbbi, 4 évre összesen kb. 550 ezer eurós Transfer of Knowledge támogatás egyrészt elismerése az intézetben már folyó bioinformatikai kutatásoknak, másrészt az általa lehetségessé váló munkakapcsolatok nagy segítséget adnak a kutatások kiterjesztéséhez.

Bioinformatikában elsősorban a filogenetikus fákat létrehozó, és génszekvenciákat illesztő algoritmusokat vizsgálták, illetve sztochasztikus módszerekkel a fehérjék és az RNS-ek szerkezetének predikálására vonatkozó módszereket fejlesztettek ki. Kriptológiában továbbra is a fizikai dokumentumok egyediségének igazolására használható ún. digitális ujjlenyomatokat ill. az e mögött álló geometriai titkosítások elméletét vizsgálták.

Egyre fontosabb a hálózatok (fizikai, biológiai, szociális és egyéb hálózatok) elméletének matematikai megalapozása. E kutatási irány elismerése, hogy 2006 folyamán elsősorban az amerikai National Science Foundation, kisebb mértékben az MTA támogatásával az intézetben és az intézet társszervezésében került sor a “Large-Scale Random Graph Methods for Modelling Mesoscopic Behavior in Biological and Physical Systems” nemzetközi konferenciára, amely az elsők között volt a téma különböző diszciplínákból való művelőinek összehozásában.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Kapcsolatok felsőoktatási intézményekkel

Az intézet kutatói számos budapesti és néhány vidéki felsőoktatási intézmény (pl. ELTE, BME, DE) munkájában vettek részt állandó oktatóként, különösen nagy részt vállaltak a felsőbb éves matematikus, illetve fizikus hallgatók és doktoranduszok részére tartott előadások tartásában. Az intézet és a Közép-Európai Egyetem (CEU) közös, angol nyelvű matematikus PhD programja (PhD in Mathematics and its Applications) negyedik évébe lépett. Jelenleg 5 PhD tanulmányait kezdő és 14 disszertáció írásán dolgozó hallgatója van a tanszéknek. A program tanárait, azaz a CEU Matematika Tanszékének tagjait az együttműködés keretében továbbra is nagyobb részt az intézet adja, tagjai a két fél év folyamán 19 kurzust adtak. A CEU és az egyéb egyetemek hallgatóit számba véve 2006-ban intézeti témavezető irányításával 24 PhD hallgató, 14 szakdolgozó és 2 tudományos ösztöndíjas dolgozott, négyen pedig TDK dolgozatot írtak. Az intézet dolgozói közül kerül ki a Budapest Semesters in Mathematics (főleg amerikai diákok részére) angol nyelvű matematikus részképzési program tanárainak többsége is. 2006-ban az intézet 40 munkatársa, a kutatók 50 %-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben. Az intézet kutatói által 2006-ban tartott egyetemi tanórák száma meghaladja a 3800-at.

Az intézet a korábbi hagyományokat folytatva 2006-ban is fogadott egyetemi kollégákat – az év folyamán összesen kettőt – vendégkutatóként. Kiválasztásukban jelentős szerepet játszott, hogy témájuk kapcsolódjon az intézet kutatási profiljához.

Hazai kapcsolatok

Folytatódtak az intézeti kutatócsoportok heti rendszerességű szakmai szemináriumai, melyek többsége túlmutat az intézet keretein, ezek az egész hazai matematikai kutatás fő irányaira igen jelentős hatással vannak.

Az intézet kutatói a matematikai közéleti feladatok vállalásából hagyományosan jóval számarányukon felül veszik ki részüket. A jelentősebb bizottságok közé tartoznak az MTA Matematikai Osztályában, ennek bizottságaiban, az AKT-ban és a Matematikai és Természettudományi Kuratóriumban, az OTKA bizottságaiban, a Magyar Akkreditációs Bizottságban, a Bolyai János Matematikai Társulat választmányában és ezen keresztül a MTESZ-ben való részvétel. A Bolyai János Matematikai Társulat elnöke az intézet kutatója.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet kutatói hagyományosan nagyon széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Az együttműködés elsősorban kétirányú látogatásokban, közös projektekben, konferenciák közös szervezésében nyilvánult meg. Az intézet munkatársai 2006-ban 14 nemzetközi konferencia vagy workshop szervezésében vettek részt, melyek közül ötnek maga a Rényi Intézet adott helyet. Ezek az együttműködések általában nem igényeltek intézményes formát, és eredményességüket mutatja például a nagy számú közös cikk.

Az intézet kutatói 2006-ban 8 nemzetközi tudományos bizottsági tagságot, 91 nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagságot mondhatnak magukénak, 173 előadást tartottak nemzetközi konferenciákon, sokat közülük meghívott, illetve plenáris előadóként.

2006-ban az intézet a hét EU-s pályázat keretében 22 vendégkutatót látott vendégül, összesen 50 hónapra. Ugyanakkor az Európán kívüli országokból, de részben Európából is érkeztek vendégeik más forrásokból (Fulbright, TÉT, OTKA, akadémiai csere, és egyre nagyobb mértékben az intézettől független, a látogató által szervezett forrásból) finanszírozott látogatások keretében is. Az intézet matematikus látogatóinak száma 2006-ban – még a konferencián résztvevőket nem is számítva– meghaladta a félszázat.

Az intézet által szervezett nemzetközi tudományos találkozók időrendi sorrendben az alábbiak voltak:

- FoIKS 2006 Foundations of Information and Knowledge Systems, 2006. február 14-17 között, 30 külföldi és 10 hazai résztvevővel
- Characteristic Classes of Singular Spaces 2006. május 27-31 között, 20 külföldi és 20 hazai résztvevővel
- Conference on Lattice Theory (In honour of the 70th birthday of George Grätzer and E. Tamás Schmidt) 2006. június 6-9. között, 69 külföldi és 24 hazai résztvevővel
- Horizon of Combinatorics EMS Summer School and Conference 2006. július 10-22 között budapesti és balatonalmádi helyszíneken, 100 külföldi és 42 hazai résztvevővel, az Európai Matematikai Társulat támogatásával
- Large-Scale Random Graph Methods for Modelling Mesoscopic Behavior in Biological and Physical Systems, 2006. augusztus 28-tól szeptember 4-ig, 20 külföldi és 46 hazai résztvevővel, az NSF (Nemzeti Kutatási Alap, USA) támogatásával.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

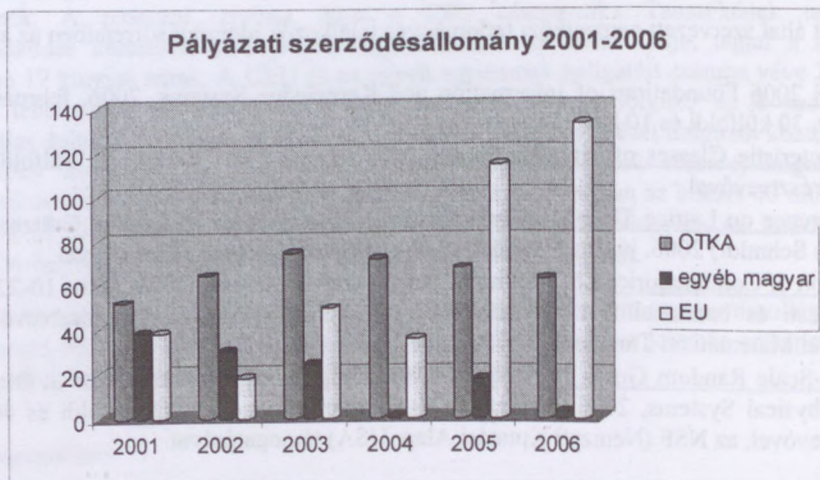
Az intézet kutatócsoportjai továbbra is jól szerepelnek az OTKA pályázatokon. Minden kutató legalább egy, de többnyire két, olykor három projekt résztvevője. A 2006-ban kiírt pályázatok eredménye különböző okoknál fogva még mindig nem ismeretes, de az előzetes információk szerint várhatóan három pályázat részesül támogatásban.

Nemzetközi pályázatok

Az intézet változatlanul jól szerepel az európai uniós pályázatokon. Az EU 6. Kutás-Fejlesztési Keretprogramjában a „Transfer of Knowledge” típusú mobilitási pályázatok között immár négy intézeti nyertes volt, melyek közül a diszkrét matematika és az algebrai geometriai projektek már 2004 végén elindultak, a diszkrét és konvex geometriai 2005-ben, a legújabb bioinformatikai pedig 2006-ban. Ez nem csak a kutatások finanszírozása szempontjából fontos – 2006-ban összesen 50 hónapra tette lehetővé elsősorban, de nem kizárólag európai kutatók fogadását, meghívását – hanem az intézetben folyó kutatómunka nemzetközi elismertségét is bizonyítja.

Ezenkívül, bár viszonylag kisebb összegű volt a támogatás, de nagy szakmai elismerés a Horizon of Combinatorics kéthetes konferencia támogatása: az Európai Matematikai Társulat három év 11 legfontosabb eseménye közé válogatta, melyek együttes pályázaton nyerték el az Európai Unió támogatását.

Bár nyilvánvalóan az évek között természetes a számottevő ingadozás, de mindenképpen figyelemre méltó, hogy mint az alábbi diagramon is látható, az intézet 2005-ös európai uniós pályázati szerződésállománya az előző évek 3-4-szeresére nőtt. Ez 2006-ban további, mintegy 20%-kal, több mint 130 millió forintra emelkedett.



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

1. Bárány I., Prodromou M: On maximal convex lattice polygons inscribed in a plane convex set, *Israel Journal of Mathematics* 154: 337-360 (2006)
2. Berkes I., Weber M: Moment convergence and the law of iterated logarithm for additive functions, *Acta Arithmetica* 123(1): 43-55 (2006)
3. Csiszár I., Talata Zs: Context tree estimation for not necessarily finite memory processes, via BIC and MDL, *IEEE Transactions on Information Theory* 52(3): 1007-1016 (2006)
4. Csiszár I., Talata Zs: Consistent estimation of the basic neighborhood of Markov random fields, *Annals of Statistics* 34(1): 123-145 (2006)
5. Elek G: The strong approximation conjecture holds for amenable groups, *Journal of Functional Analysis* 239(1): 345-355 (2006)
6. Györi E: Triangle-free hypergraphs, *Combinatorics Probability & Computing* 15(1-2): 185-191 (2006)

7. Harcos G, Michel P: The subconvexity problem for Rankin-Selberg L -functions and equidistribution of Heegner points II, *Inventiones Mathematicae* 163(3): 581-655 (2006)
8. Kroó A, Saff EB, Yattselev M: A Remez-type theorem for homogeneous polynomials, *Journal of the London Mathematical Society* 73(3): 783-796 (2006)
9. Major P: An estimate on the supremum of a nice class of stochastic integrals and U -statistics, *Probability Theory and Related Fields* 134(3): 489-537 (2006)
10. Fernández de Bobadilla J, Luengo-Valesco I, Melle-Hernández A, Némethi A: On rational cuspidal projective plane curves, *Proceedings of the London Mathematical Society* 92(1): 99-138 (2006)
11. Caubel C, Némethi A, Popescu-Pampu P: Milnor open books and Milnor fillable contact 3-manifolds, *Topology* 45(3): 673-689 (2006)
12. Pach J, Tóth G: How many ways can one draw a graph?, *Combinatorica* 26(5): 559-576 (2006)
13. Pérez-García D, Wolf MM, Petz D, Ruskai MB: Contractivity of positive and trace-preserving maps under L_p norms, *Journal of Mathematical Physics* 47(8): 083506, 5 pp. (2006)
14. Kolountzakis MN, Révész SzGy: Turán's extremal problem for positive definite functions on groups, *Journal of the London Mathematical Society* 74(2): 475-496 (2006)
15. Elekes Gy, Ruzsa IZ: The structure of sets with few sums along a graph, *Journal of Combinatorial Theory Series A* 113(7): 1476-1500 (2006)
16. Haxell PE, Luczak T, Peng Y, Rödl V, Rucinski A, Simonovits M et.al.: The Ramsey number for hypergraph cycles I, *Journal of Combinatorial Theory Series A* 113(1): 67-83 (2006)
17. Stipsicz AI, Szabó Z: Small exotic 4-manifolds with $b_2^+ = 3$, *Bulletin of the London Mathematical Society* 38(3): 501-506 (2006)
18. Szemerédi E, Vu V: Long arithmetic progressions in sumsets: thresholds and bounds, *Journal of the American Mathematical Society* 19(1): 119-169 (2006)
19. Szemerédi E, Vu V: Finite and infinite arithmetic progressions in sumsets, *Annals of Mathematics* 163(1): 1-35 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	90	Ebből kutató ² :	67
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			11
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			186
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			184
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	134	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	13
nemzetközi együttműködés keretében:	72	SCI által regisztrált folyóiratban:	118
összesített impakt faktor:	70,417	összes hivatkozás száma ⁴ :	1678
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1283
Megjelent könyv magyarul:	0	könyvfejezet:	0
idegen nyelven könyv:	3	könyvfejezet:	27
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	1	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	3
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	171	posztterek száma:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			40
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	91
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			496,6 MFt
Beruházási támogatás:	4,6 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	11
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			20
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			79 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			1
NKFP:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb:	1	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0,4 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			10
EU forrásból:	10	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	127,8 MFt
Egyéb:	0	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	0 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			3,3 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			0 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			0 MFt

SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

H-1111 Budapest, Kende u. 13-17.

Telefon: 279-6000, Fax: 466-7503,

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az MTA SZTAKI a tágan értelmezett informatika tudományának műhelye, az információtechnológia, számítástudomány és rokonterületei nemzeti kutatóbázisa. Elsősorban az informatika műszaki-tudományos és matematikai kérdéseivel foglalkozik, de figyelmébe kiterjed mindazon területre, amelyek ezekkel az alapkérdésekkel kapcsolatban állnak, azoknak ösztönzést, diszciplináris alapokat kölcsönözhetnek. Az alap- és alkalmazott kutatás széleskörű művelése mellett fontos feladat a megszerzett speciális ismeretek hasznosítása a kutatás-fejlesztés, rendszertervezés és rendszerintegrálás, tanácsadás, szoftverfejlesztés területén.

Az informatikai forradalom minden, az intézetben művelt témakör számára szinte naponta hoz új kihívásokat. Csak néhányat kiemelve: érzékelő számítógépek és távjelenlét, új típusú ember-gép kapcsolatok, bio-computing, molekuláris számítástudomány, komplex rendszerek modellezése, irányítása, felügyelete és diagnosztikája, elosztott számítási architektúrák, Grid-rendszerek, nagysebességű hálózatok és biztonsági kérdések, mobil kommunikáció, új WWW-technológiák, mérnöki visszafejtés, globalizált vállalatok informatikája, elektronikus kereskedelem, ágens-alapú struktúrák, minőségbiztosítás, pénzügyi menedzsment és kockázatanalízis, környezeti modellezés, eGovernment, de a sort folytathatnánk tovább. A felgyorsult világ bizonyos területeken a múltban megszokottól sokszor eltérő kutatási attitűdöt, szervezethez és ezek kapcsán az eredmények másfajta értékelését követeli meg.

Alapelvük a nemzetközi mércével mérhető alapkutatás, az eredményeket alkalmazó, az itthon és külföldön hasznosítható informatikai fejlesztések és magas szintű tanácsadási tevékenység egymásra épülésének megteremtése, a tágabb tématerületen egy kiválósági központ megvalósítása, mely vonzó témákat és körülményeket biztosít a tehetséges fiatalok Ph.D. tanulmányához, alkotó tevékenységük megkezdéséhez.

2006-ra kutatási portfóliójuk áttekintését, a szükségessé váló módosítások elvégzését (beleértve új kutatócsoportok megalakítását), valamint a hazai és nemzetközi jelenlétük és kisugárzásuk további növelését irányozták elő, különös tekintettel az eredmények hasznosíthatóságára, hasznosítására. A magas szintű tudományos eredmények elérése és publikálása, mint alapkövetelmény mellett a következőkre kívántak különös súlyt fektetni:

- Az NKFP, Regionális tudásközpontok, Jedlik, IKTA, GVOP programok keretében elnyert jelentős számú projekt magas szintű folytatása, elméleti eredményeken alapuló, további felhasználásokat ígérő megoldások, rendszerek kifejlesztése.
- A nagyobb méretű, interdiszciplináris K+F projektek végzéséhez szükséges kapacitás elérése érdekében, virtuális intézetek, virtuális laboratóriumok kialakítása és működtetése, mind hazai, mind nemzetközi téren.
- A hazai és külföldi graduális és posztgraduális oktatásban betöltött eddigi jelentős szerepük fenntartása, fejlesztése, részben multimédiás, távoktatási módszerekkel.

- Jelenlétük erősítése, új partnerek megnyerése kutatás-fejlesztési, tanácsadási munkák végzésére olyan kiemelt hazai cégekkel, mint a Paksi Atomerőmű Rt, General Electric, IBM, Knorr Bremse, MOL, Magyar Telekom, és sikeres, feltörekvő vállalkozásokkal.

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

Matematika és számítástudomány

Kombinatorikus számítástudomány, gráfelmélet: meghatározták az út Ramsey számát három szín esetén, illetve javították az r színnel színezett teljes gráfok egyszínű körökkel való fedési számát. Mind a két probléma régóta megoldatlan, és hosszú ideje ezek az első meghatározó eredmények. Hipergráfok színezési kérdéseire is sikeresen alkalmazták a módszert. Megvizsgálták, hogy milyen hosszú egyszínű kört lehet találni egy r színnel színezett teljes hipergráfban. A vegyes hipergráfok elméletén belül a véges síkok felső kromatikus számára aszimptotikusan pontos becsléseket adtak, megválaszolva így egy 10 év óta megoldatlan problémát. Általános becslést nyertek a gráfok ún. költségkromatikus számára, oly módon, hogy a vizsgálatokhoz a véges halmazrendszereknek egy új paraméterét vezették be. Alacsony fokszámú gráfok legnagyobb vágásainak approximációjára az eddig ismerteknél hatékonyabb algoritmust adtak.

Hálózatelméleti kutatások terén erős eredményeket értek el - a Yahoo Faculty Research Grant támogatásával - a Web gráf és hasonló, nagyméretű hálózatok közelítő módszerekkel történő, személyre szabott rangsorolásával, hasonlóság keresésével és spektrálfelbontásával kapcsolatban. A felmerülő feladatok közös jellemzője, hogy a hasonlósági mátrix kvadratikus méretű, amelynek tárolása külső tárban sem megoldható gyakorlati feladatméret (százmillió vagy egymilliárd csúcs és tízszer ennyi él) esetén. A kimenet méretében szublineáris - és ezért valós méretekben is működő - algoritmusokat adtak a feladatok megoldására.

Adatbányászat terén elsősorban telekommunikációs ügyfelek viselkedés-modellezésével foglalkoztak. Rangos konferenciához kapcsolódó workshopon mutatták be az elemzéseik alapját képező szoftverarchitektúrát, amely extrém nagy mennyiségű adatok rugalmas feldolgozására alkalmas, az oszlop-orientált adatbázisok, illetve a nearline megoldások ötvöztetésével. Több új módszert dolgoztak ki a szövegállományok tematizálására. Bemutatták, hogyan lehet külső információt (lexikonokat, enciklopédiát) alkalmazva javítani a dokumentumok automatizált téma-meghatározását.

Az univerzális adattömörítés területén - predikciós módszerek felhasználásával - hatékony algoritmusokat fejlesztettek ki, többek között időben változó viselkedést mutató sorozatok kódolására, illetve elkészítették e módszerek hálózati adattömbbítésre optimalizált változatát is. Blokk-Markov-források tömörítésével kapcsolatban megmutatták, hogy a bitalapú tömörítés aszimptotikusan optimális bájtos források esetén is, azaz a gyakran lényegesen egyszerűbb bitalapú implementációk hatékony alternatívát jelentenek a ma elterjedt bájtalapú kódolókkal szemben.

Algebrai kutatásaik során több fontos részeredményt értek el a véges ponthalmazok Gröbner-bázisainak és kapcsolódó struktúráinak (normális halmaz, Hilbert-függvény) vizsgálatában. Az eredmények kombinatorikai és reprezentációelméleti alkalmazásokra vezettek. Nemzetközi együttműködés keretében közös axiómatikus jellemzését adták a klasszikus Lie-algebrák

hosszú gyökei geometriájának, valamint a Timmesfeld által tárgyalt gyökrészcsoporthoz geometriáknak.

A biológiai motivációjú számítástudományi kutatásaik során megmutatták, hogy a Turing gépekkel egyenlő erejű osztott számítási eszköz építhető a DNS rekombinációs elvét utánozó, az ún. sodrás műveletén alapuló, már egészen kisszámú számítási processzorból is, ha a processzorok közötti kommunikáció a közvetített szavak hossza szerinti osztályozásának elvén nyugszik. Ez a modell a gél-elektroforézis egy matematikai megközelítése. Rámutattak arra, hogy a végtelen ábécé feletti reguláris nyelvek (bizonyos reguláris viselkedést mutató eseménysorozatok, amelyek során végtelen különböző esemény fordulhat elő) természetes módon leírhatók membrán automatákkal, amellyel újabb bizonyítékát adták ezen, a hagyományostól eltérő elveken alapuló számítási eszközök létjogosultságának. Csillós egysejtűek véges közösségeinek matematikai leírását adták azok önfelepítő mechanizmusai különbözőségének alapján, valamint matematikai eszközökkel modellezték fejlődő rendszerek viselkedését olyan esetekben, amikor dinamikusan alakul a rendszer egyidejűleg változó alkotórészeinek egy hányada.

Pénzügyi matematikai kutatások: A széles körben használt hasznosság - közömbös ár aszimptotikus viselkedését tanulmányozták, amikor a befektetők kockázatkerülési tényezője végtelenhez tart. Diszkrét idejű piacmodellek egy széles osztályára bizonyították ezen ár konvergenciáját, és megmutatták, hogy a határérték éppen az adott termék ún. felülfedezési ára. Igazolták optimális portfóliók létezését az eddig ismert leggyengébb feltételek mellett, olyan befektetők számára, akik helyzetértékelését egy a pozitív félegyenesen értelmezett hasznossági függvény írja le. Kidolgoztak egy zárthurkú tőzsdemodellt, amelyben a tőzsdéi szereplők saját stratégiájukat egyrészt a jövőbeli árakra vonatkozó becsléseik, másrészt saját viselkedési jellemzőik alapján határozzák meg. Elméletileg és empirikusan elemeztek olyan szekvenciális befektetési stratégiákat, amelyek a piac viselkedésére tett minimális feltevések mellett garantálják a tőke optimális növekedési rátáját. Ha a piac stacionárius és ergodikus, a stratégia aszimptotikus növekedési rátája megegyezik az optimálissal, amit egyébként csak a piacot generáló mögöttes folyamat statisztikai tulajdonságainak teljes ismeretével érhetnénk el.

A sztochasztikus rendszerek terén rejtett Markov modellek exponenciális stabilitását vizsgálták primitív átmeneti valószínűségmátrixok esetén. Megmutatták, hogy a stabilitást leíró egyenlőtlenségben szereplő véletlen konstans választható úgy, hogy annak tetszőleges momentuma létezik. Az eredmény rekurzív paraméterbecslések matematikailag korrekt elemzését teszi lehetővé.

A gépi tanulás témakörben vizsgálták a folytonos állapotterű Markov döntési problémák adaptív megoldásának lehetőségét abban az esetben, amikor a tanítóadat valamely politika egyetlen trajektóriájából áll (azaz a tanulás során a környezet generatív modellje nem hozzáférhető). Bellman-reziduál típusú hiba minimalizálásával egy új politika-iterációs algoritmust készítettek, és polinomiális korlátokat vezettek le a közel optimális teljesítmény garantálásához szükséges mintaszámra. Egy új algoritmust dolgoztak ki *keresési problémák* megoldására, amely alkalmazkodik a keresési fa tényleges méretéhez. Az algoritmus Monte Carlo-módszerek mintavételezését javítja a sztochasztikus bandita-problémáknál szokásos konfidencia-intervallumok segítségével. A módszer hatékonyságát mutatja, hogy azóta a legjobb 9x9-es goprogramok motorjának alapja lett.

Elemezték a sztochasztikus bandita-problémának folytonos idejű, segédinformációt felhasználó kiterjesztését, amelyhez sikerrel általánosították a felső konfidenciakorlátok módszerét. Az

ellenséges - nem-sztochasztikus - bandita-problémák (illetve még általánosabb hiányos információs univerzális predikciós problémák) területén a korábbiaknál jobb teljesítményű és kisebb komplexitású módszereket dolgoztak ki abban az esetben, ha a szakértők osztályának megfelelő struktúrája van. A kapott eredményeket alkalmazták az adaptív útvonalválasztás területén.

Operációkutatás: A mikroökonómia fogyasztás elméletének feltételes volumenmaximum-feladatát és az abban szereplő közvetlen és közvetett hasznossági függvényeket vizsgálták Marshall-féle keresleti függvény létezése esetén. A lineáris parciális differenciál egyenletek megoldhatóságát jellemző Frobenius tétel továbbfejlesztésével differenciálható pszeudomonoton leképzések integrabilitására adtak feltételt, aminek segítségével megoldották a kinyilvánított preferencia problémát folytonosan differenciálható keresleti függvény esetén, majd az eredmény közgazdasági következményeit vizsgálták. A kvadratikus optimalizálás terén azt a kérdést vizsgálták, hogyan viselkedik strukturálisan a nemszeparábilis kvadratikus feladatok ritkássága belső pontos algoritmusokban. Megmutatták, hogy a lineáris programozásra kifejlesztett, ritkásságot kezelő heurisztikák hogyan vihetőek át a kvadratikus programozás esetére belső pontos algoritmusokban. A módszerek hasznosságát numerikus példákon keresztül igazolták.

Az egyes főbb területek mind tematikai, mind személyi szempontból átlapolódnak, de többékevésbé kimondható, hogy a matematika-számítástudomány témakörben 39 kutató dolgozik az intézetben. A becsült intézeti ráfordítás mintegy 323 millió Forint volt, melynek 39%-a pályázati forrás. Kutatás-fejlesztési feladataikat többek között a T-Online, a Fornax ZRt., BÉT Rt., az Econet.hu, a Magyar Telekom NyRt., az AEGON Magyarország Általános Biztosító ZRt, az Emitel ZRt., a Richter Gedeon NyRt. és hazai kis- és középvállalkozások (Pont Rendszerház és Omega Consulting) együttműködésével végzik. Részt vesznek a budapesti 4. számú metróvonal II. szakaszának környezeti hatásvizsgálatában, ahol az építési változatok összehasonlítása a feladatuk, ami térbeli, többszemponú, csoportos döntési problémák megoldását teszi szükségessé, amit az általuk kifejlesztett WINGDSS módszertan és szoftver, és a szintén általuk kifejlesztett BPVM1.0 Budapest vertikális térkép- és adatbázisrendszer segítségével oldanak meg.

Informatika

A celluláris hullámszámítások és érzékelő számítási rendszerek témakörében 2006-ban a legfontosabb eredményeik az alábbiak voltak:

- Az alap kutatási problémákban kiemelendők a PDE reprezentációk, szinkronizációk és a fúziós analogikai CNN algoritmusok, valamint a téridőbeli detekció szemantikus beágyazásának kérdései. Megkezdtek a sok ezer processzoros chipekre épülő alapalgoritmusok elméleti megalapozását.
- Az IBM Cell processzorára épülő CNN modellt valósítottak meg, és segítségével implementáltak néhány PDE típust. Megkezdtek az előkészületeket a Cell processzor alapú Cell Blade Q80 (16 cell processzort tartalmazó) rendszer használatára.
- Az alkalmazások terén elindították az áttérést a Bi-i kamera-számítógép rendszer új verzióira, amelyben fontos a benne levő több ezer processzoros chip-ek szerepe. Nevezetesen, mind az FPGA, mind a 3 új CNN típusú celluláris hullámszámítógép chip: a Q-Eye (AnaFocus) a 175x144 és QCIF felbontással max. 100 mW fogyasztással, a CACE 2 a lokális adaptációval és 3 rétegű dinamikával, és a XENON új verziója az emulált

digitális implementációval. Ugyancsak fontos irány az új programozható optikai eszközök elemzése és konstrukciója.

- Elemezték a különböző szenzorok legújabb változatait és a celluláris érzékelő számítógépek integrált konstrukcióit.
- Az on-chip hullámfront-érzékelést és processzálást párhuzamos módon implementálták.

Elosztott események elemzésére olyan kalibrációs eljárásokat dolgoztak ki, amelyekkel a videokamerák képei összerendelhetőek mindenféle a priori tudás, struktúra vagy rendszerezett mozgás nélkül is. Az egyezés alapja lehet a véletlen mozgás, az árnyékos területek és a járóképek lába is. Ami a korábbi eljárásokban zaj volt, az náluk részben információforrás. Igazolták, hogy a tükröződés és az árnyék is jellemezhető a ferdén szimmetrikus, az úgynevezett auto-epipole fundamentális mátrixszal. Globális statisztikai optimalással megoldották a tárgy/árnyék felismerést akadozó videó-forrásokra is. Közterületi videó-megfigyelő rendszerek pásztázó képsorozatainak összefűzésével és a mozgások jellegének detektálásával lehetővé tették az eseménydetektálás automatizálhatóságát. Megoldották a mozgóképeken a fókuszált tárgyak követését egy új vak-dekonvolúciós távolságbecsléssel.

A Grid-rendszerek kutatása terén továbbfejlesztették a SZTAKI Desktop Grid (SZDG) rendszert. Kidolgozták a DC-API programozói interfész egy olyan általános verzióját, ami képes az alkalmazások futtatására, mind BOINC típusú desktop Grideken, mind Condor típusú klasztereken. Az SZDG és általában a Desktop Grid technológia még szélesebb körű alkalmazhatósága érdekében kidolgozták a hierarchikus Desktop Grid rendszerek koncepcióját és ennek kapcsán megoldottak olyan fontos problémákat, mint az adatsomagok szétosztása hierarchikus szintek között, illetve a megfelelő biztonság garantálása a hierarchikusan kapcsolt Desktop gridek esetén.

Nemzetközileg is elismert eredményt értek el a P-GRADE Grid Portál kidolgozásával és a kapcsolódó tudományos kutatásokkal, melyek Grid rendszerek használatát támogató alkalmazásfejlesztő és futtató rendszerek kialakítására vonatkoznak. Megoldották a workflow alkalmazások paramétervizsgálat jellegű végrehajtásának támogatását, beleértve az input paraméter-halmazok generálását és output halmazok feldolgozását támogató speciális workflow komponensek definiálását és kidolgozását is.

Az egyenletes és optimális erőforrás kihasználás érdekében a GT2 alapú Grid technológiára épülő rendszerek számára kidolgoztak egy Grid brókert (GTBroker), mellyel a feladatok végrehajtása - az összehasonlító mérések alapján - még az EGEE Gridben is jelentősen felgyorsítható. Felvetették és kidolgozták az ún. meta-brókereknek az első architektúra-modelljét, melyek standard módon képesek együttműködni a különböző Grid brókereivel (EGEE Broker, GTBroker, stb.), és ezáltal lehetővé teszik felhasználók hozzáférését bármely Grid erőforrásaihoz.

Az emberi látás kognitív folyamatainak vizsgálata során egységes geometriai rendszerbe foglalták a VI látóközpont irány szelektív modelljeit. Az így kidolgozott új modell egyszerű projekciók alkalmazásával lehetővé teszi további objektumok felismerése számára fontos kontúrtulajdonságok gyors meghatározását. A modellt úgy építették fel, hogy párhuzamos számítási algoritmusokban is megfogalmazható, és hardver eszközökben implementálható legyen. A szakirodalom szerint a tremoros szemmozgások szerepe elsősorban a biológiai aktivációs szintek fenntartása. Ezzel szemben kimutatták és modellekkel alátámasztották, hogy jelentős informatikai szerepe is van.

A Virtuális Ember Interfész csoport az ember-gép kapcsolat új formáit kutatja, a számítógéppel animált, virtuális emberek és a virtuális valóság eszközeinek segítségével. Kutatási eredményeik között szerepel a nem-verbális kommunikáció virtuális arcokra épülő kidolgozása és a virtuális valóság eszköztárának bevezetése az oktatásban. Ezen eredmények mellett kidolgoztak egy orvosi vizualizációs programot, amely hordozható ultrahang és MRI/CT volumetrikus adatokból szegmentált anatómiai modellek segítségével támogatja az ultrahang helyes használatának elsajátítását.

Virtuális rekonstrukció: a korábban önálló szabadalom alapján kifejlesztett *kronoszkóp* újabb felhasználásaként 2006 júniusában a diósgyőri várba telepítettek két kronoszkópot, melyekbe betekintve a látogató előtt a látható romok helyén megjelenik a vár Mátyás korabeli, rekonstruált képe.

Távközlési és térinformatika: sikeresen befejezték a nemzetközi VERT projektet, mely keretében a műholdas szolgáltatásokra épülő közlekedési információs rendszereket vizsgáltak, és pilot-rendszert készítettek a GPS+EGNOS hálózatra a műholdas útdíj-beszedés, segélyhívás és parkolási szolgáltatások demonstrálására. A Mobil Innovációs Központ (MIK) keretében elvégezték az első mérésorozatot arra vonatkozóan, miként lehetne a rövid hatótávolságú RFID eszközöket a helymeghatározásban felhasználni. Tematikailag részben ide tartozik, hogy sikeresen befejezték a Városkalauz GVOP projektet, melyben a városnézést segítő, műholdas navigációval támogatott információs rendszert készítettek kézben hordozható számítógépre (PDA). A készülék a látogatót városnéző programon vagy múzeumlátogatási útvonalon vezeti végig előre beállítható preferenciák alapján, és az egyes látnivalókról képi, szöveges vagy hangbemondásos információt kínál.

Ágens-alapú szoftvertechnológiák: Keretrendszert dolgoztak ki tématerképek szemi-automatikus generálására. Összegezték az ágens technológia alkalmazhatóságát az intelligens szervezetekben. Módszertant dolgoztak ki eredetkezelés megvalósítására egészségügyi ágens rendszerekben, különös tekintettel a szervátültetés informatikai támogatására.

Elektronikus Kormányzati Módszertani Központ (EKMK) néven új egységet alapítottak 2006-ban. Az *eGovernment* kérdései közül két témával foglalkoztak: egy új személy (ügyfél)azonosító rendszer létrehozásának feltételeivel, beleértve egy új alkotmányossági alpra helyezett adatvédelmi törvény előkészítését, továbbá egy közigazgatási közmű elvi alapjainak a kimunkálásával, amely lehetővé tenné az elektronikus ügyintézés és elektronikus aláírás tömeges elterjesztését Magyarországon. Bekapcsolódtak az NFT II. előkészítési folyamatába, és részt vettek az Államreform, valamint az e-közigazgatás operatív programok előkészítésében.

eLearning téren a multimédia keretrendszerek egyik fontos kihívása a tartalom adaptálása, mely segítségével különböző erőforrás-korlátok, terminál képességek és felhasználói preferenciák mellett is biztosítható az igényelt tartalom. Egy újszerű, szemantikus információt is tartalmazó modellt vizsgáltak meg, amely az audiovizuális tartalom különböző változatait értékeli ki az adaptáció számára. Négy olyan optimalizáló algoritmust elemeztek, amelyek feladata adott körülmények közt a lehető legjobb adaptációs döntés elvégzése.

Szintén kiemelt tevékenységi területük a hálózatbiztonsági rendszerek és felületek fejlesztése. Sikeresen befejezték az MTA és az Informatikai és Hírközlési Minisztérium együttműködése keretében kialakított, E4 jelű *Internet védelmi rendszer struktúrájának kidolgozása* című projektet. Az Internet Szolgáltatók Tanácsa által anyagilag is támogatott

munka során – *Hun-CERT* néven – hálózatbiztonsági feladatokat látnak el. A T-Mobile cég számára RFID témakörbe eső fejlesztéseket végeztek.

A könyvtári informatika terén továbbfejlesztették két könyvtár-automatizálási program-csomagjukat: a *KisTékát* a kisebb, a *HunTékát* pedig közepes és nagyobb méretű könyvtárak számára. Az előzőnek létrehozták a *Köztéka* változatát, mely elsősorban a kistéleplési könyvtárak számára ajánlott, hiszen a SZTAKI egy szerverén fut, így megszünteti a helyi üzemeltetési gondokat. 2006 végén már 140 könyvtár használja a rendszereket, mind határainkon belül, mind kívül.

Web-technológiák gyakorlatba ültetése terén folyamatosan együttműködnek az amerikai Global Market Insite céggel, és fejlesztik a kifinomult matematikai módszereket és algoritmusokat használó WEB alapú NET-MR programrendszert, amelyet ma már több száz piackutató cég használ 5 kontinensen. A fejlesztésen túlmenően feladatot vállalnak az amerikai szervereken működő programrendszer felügyeletében, illetve on-line felhasználói támogatást is nyújtanak a program alkalmazóinak. Ide kapcsolódik, hogy a Szonda Ipsos Média-, Vélemény és Piackutató Intézet megbízásából elkészítették a Longitudinális kutatások szoftverének rendszertervét.

Az intézet ad otthont a *World Wide Web Consortium Magyar Irodájának* 2002. szeptemberétől kezdve. A W3C Magyar Iroda az Internet Web kommunikációs szabványainak magyar elterjesztését és a témakörrel kapcsolatos tudományos konferenciák és workshopok szervezését végzi.

Az elosztott rendszerek témakörben 2006-ban Web-alapú szoftver technológia kutatásokra és kísérleti fejlesztésekre, így digitális könyvtári rendszerek és szolgáltatások kialakítására, valamint csoportszoftver (groupware) fejlesztésekre koncentráltak:

- *DELOS NoE: Network of Excellence on Digital Libraries* EU FP6 digitális könyvtári kutatási kiválósági hálózat keretében digitális könyvtárak evaluációja és architektúrális kutatása a feladatuk. Létrehozták a loggolás új, többrétegű absztrakt modelljét.
- Az *INFRAWEBS* EU FP6 nemzetközi projektjük keretében új szemantikus webszolgáltatás discovery algoritmusának második, javított verzióját dolgozták ki és elkészítették a kidolgozott algoritmus alapján működő szoftverrendszer kísérleti implementációját.
- A *Nemzeti Rákregiszter GRID* GVOP projekt keretében magyar rákbetegek rákbetegségeire vonatkozó, törvény által szabályozott országos adatgyűjtési és központi statisztikai rendszer teljes, számítógéphálózati architektúrán alapuló újratervezése és újjáépítése valósul meg.
- A *PROMOCIO* GVOP projekt során a céljuk a konzorciális projekt együttműködést támogató csoportszoftver (groupware) infrastruktúra kifejlesztése. A tervezett rendszer számos informatikai technológia újdonságot vonultat fel a CSCW, a multimodalitás és a proaktív folyamat vezérlés témaköreiből.
- Az *ABILITIES* EU FP6-os projekt célja kis- és középvállalkozások federatív elektronikus kommunikációs architektúrájának és az ezen alapuló interoperabilitási szolgáltatásrendszer kutatása és megvalósítása. A projekt során elkészült az UBL 2.0 nemzetközi szabvány multimédia kiterjesztésének és az „order-to-invoice“ folyamatokba ékelődött kollaboratív tevékenységek absztrakt modellje. A modell alapján algoritmust dolgoztak ki, majd elkészítették a szoftver-prototípus implementációját.

A 2006. év folyamán a RICOH japán nagyvállalattal – teljes egészében a RICOH által finanszírozott – 3 éves szerződést írtak alá közös kutatás-fejlesztési projekt megvalósítására. A közös projektszervezet létrehozása után a projekt elindult.

A tágabb értelemben vett informatikai témakörben mintegy 116 kutató dolgozik az intézetben. A becsült intézeti ráfordítás 998 millió Forint volt, melynek 40%-a pályázati forrás. A gazdasági haszonszerzés, illetve haszonszerzési képesség tágabb tématerületenként a következőképpen összegezhető:

- *Analogikai és neurális számítógépek:* a potenciális felhasználási területek (orvosi, ipari, úrkutatási, hadi, stb.) szinte beláthatatlanok. A hasznosítást részben az intézet, részben az Analogic Kft végzi.
- *Elosztott események elemzése:* A lakott környezet biztonságának növeléséhez és kényelmesebbé tételéhez járul hozzá az automatizálható videó megfigyelő és visszakereső rendszer kifejlesztése
- *Grid rendszerek:* Az intézet rész vesz a különböző irányultságú, legfontosabb európai és hazai kutatási, felhasználási projekteken. A kapcsolódó szaktanácsadás, szolgáltatásnyújtás terén jelentős bevétel várható.
- *Virtuális rekonstrukció:* megkezdődött a kronoszóp kulturális, idegenforgalmi hasznosítása.
- *Ágens-alapú szoftvertechnológiák:* A hazai partnerek és felhasználók közül itt a MediSmart Kft-t, a Magyar Orvosi Kamarát és több egészségpénztárt emelünk ki.
- *eLearning:* Kifejlesztésre kerültek azok a technológiák, melyekkel a siker eséllyel lehet folytatni a várhatóan növekvő piacért folyó versenyt. Az elektronikus oktatás hozzájárul a hazai munkaerő versenyképességének fokozásához és az esélyegyenlőség javításához.
- *Hálózatbiztonsági rendszerek:* eredményeiket számos hazai internetszolgáltató mellett – többek között – az Alkotmánybíróság, a Hadtörténeti Múzeum, az Onkológiai Intézet és a T-Mobile alkalmazza.
- *eGovernment:* Az eredmények elsődleges felhasználói között elsősorban a Miniszterelnöki Hivatal és a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség említhető. E téren együttműködnek az IBM-mel és a Microsoft-tal. Az elektronikus közigazgatással kapcsolatos e-learning sorozat nagyszámú felhasználóval számolhat.
- *Könyvtári informatika, Web-alkalmazások:* jelentős gazdasági értékesítésről (140 könyvtár) tudnak már ma is számot adni. Többek között a Szerencsjáték Rt és a Szonda Ipsos Média-, Vélemény és Piackutató Intézet, valamint az amerikai Global Market Insite cég is alkalmazza az intézetben kifejlesztett web-es alkalmazásokat.
- *Elosztott rendszerek:* nagymértékű bevételt tudnak felmutatni. A felhasználások körére korábban kitértünk, érdemes azonban a 2006-ban indult, 3 éves, MTA SZTAKI – RICOH kutatási-fejlesztési szerződést itt is kiemelni.

A hasznosításokat részben az intézet látja el, részben – szerződések alapján – informatikai kisvállalatok végzik. Az informatikai megoldások bevezetése a bővebb leírásban szereplő összes területen a versenyképesség erősítésével és az életminőség növelésével jár együtt.

Automatizált irányítási rendszerek

Az automatizált irányítási rendszerek elméleti és módszertani hátterét a *rendszer és irányításelmélet* adja. E területen a kiemelendő eredmények a következők:

- Az időinvariáns geometriai rendszerelmélet eszközeit kiterjesztették időben változó paraméterű lineáris modellstruktúrákra, az ún. LPV modellekre és így sikerült módszert

- adni bizonyos LPV rendszerosztályok hibadetektáló szűrőinek tervezésére, dinamikus rendszer-invertáláson alapuló szabályozók valamint átkonfiguráló szabályozók tervezésére. Az eredményeket járműirányítási feladatok megoldására alkalmazták.
- A szakaszonként lineáris kapcsolt hibrid rendszerek (switching linear hybrid systems) a hibrid nemlineáris rendszerek egy széles, a gyakorlati alkalmazások szempontjából fontos osztályának leírására alkalmasak. A bimodális rendszerek irányíthatóságára és stabilitás vizsgálatára új módszereket adtak, ebből kiindulva egy irányítás-tervezési módszer került kidolgozásra és kísérleti alkalmazásra a University of Minnesota Aerospace and Mechanics tanszékén.

A *Paksi Atomerőműben* a nemlineáris folyamatrendszerek modellezése és irányítása területén elért elméleti eredmények alkalmazásával kidolgozták az Atomerőmű primerkörének egyszerűsített dinamikus modelljét, és a valós rendszeren normál üzemi körülmények között mért adatok segítségével megbecsülték a modell valós fizikai tartalommal bíró paramétereit. Ez a modell az alapja a primerkörü szabályozók együttes újratervezésének (rekonstrukciójának).

Az Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpontban (EJTT) végzett tevékenység az intelligens gépjármű-irányítási kutatásokban hoz új eredményeket. A korszerű járműfedélzeti irányítórendszerek hibátűrő kialakításának tervezési kérdései, a jármű flották felügyelete és koordinált irányítása, az intelligens vezető nélküli járműirányítási problémák, a szenzorfüziós módszerek alkalmazása (pozíció, mozgásadat és videó információk kombinálása), az elektronikus fék, kormány és menetstabilizátor alkalmazásának kombinált módszerei adják a kutatás fő irányait.

Bevezették LPV modellek n -ed rendű szinguláris érték alapú kanonikus alakjának fogalmát, és bebizonyították, hogy a TP modell-transzformáció numerikusan képes ezt az alakot rekonstruálni. Több benchmark példán és valós alkalmazásokban is megmutatták, hogy a TP modell-transzformáció képes az LPV modelleket uniform módon a szakirodalomban elterjedten használt tervezőeljárások által igényelt politóp alakra hozni, számos új és jól tervezhető tulajdonság (pl. analitikusan nem elérhető magasabb rendű szinguláris értékszerinti és ortonormált rendezettség, különböző konvexitási kritériumok) teljesítésével, és így hatékonyan segíti a modern numerikus (pl. LMI alapú) tervező eljárásokat. Megmutatták, hogy a TP modell-transzformáció felváltja az eddig ismert heurisztikus és egyéb közelítő jellegű politóp felbontásokra alkalmazott módszereket.

A folyamatrendszerek és irányításuk témakörben 2006-ban született eredmények közül kiemelendők a következők.

- A kvázipolinom alakú nemlineáris rendszerek minimális modelljeinek algoritmikusan hatékony előállítására érdekében kidolgoztak egy polinomiális módszert ezen rendszerosztály invariánsainak kiszámítására. Ezen túlmenően hatékony algoritmust dolgoztak ki kvázipolinom rendszerek globálisan stabilizáló statikus visszacsatolási paramétereinek és struktúrájának tervezésére egy, a bilineáris mártix egyenlőtlenségek speciális osztályának iteratív lineáris mártix-egyenlőtlenségek segítségével történő eljárását felhasználva.
- A komplex, nagyméretű folyamatrendszerek dinamikus modellezésére használatos többléptékű (multi-scale) modellezési módszerre alapozva kifejlesztettek egy olyan keretrendszert, amellyel bio-mechanikai csont-izom rendszerek (végtagok) modelljei készíthetők el irodalomból ismert rész-modellek felhasználásával. Kidolgoztak egy, a többléptékű modell skálaterképének analízisén alapuló modell-egyszerűsítő módszert, amelyet az emberi kar különböző részeinek modelljén verifikáltak.

A geometriai modellezés és számítógépes látás területén elért eredmények közül kiemelendők:

- Kidolgoztak egy újszerű, robusztus eljárást több, tetszőleges orientációjú mért háromdimenziós részfelület automatikus összeillesztésére, regisztrációjára.
- Új algoritmust adtak felület-érdesség reprezentációjára lézeres mérések és a felületről változó megvilágítással készített képek alapján.
- Új módszert fejlesztettek ki optikai áramlás meghatározására, amely lehetővé teszi dinamikus textúrák videóban történő detektálását.
- Számítógépes navigációs rendszert dolgoztak ki térdízületi műtétek (elsősorban keresztzalag műtét – ACL) előzetes tervezésére és műtét alatti kontroljára.

A mérnöki és üzleti intelligencia téren folytatott kutatások fő célja olyan technikák kutatása és felhasználása, melyek alkalmasak a *változó, bizonytalansággal terhelt* környezetben működő, *összetett* műszaki és gazdasági rendszerek *valósídejű* kezelésére, különös tekintettel az *informatika, az operációkutatás és a tudásalapú módszerek* legújabb irányzataira, egyensúlyt teremtve az *optimálás, autonómia és kooperáció* terén. 2006-os főbb eredményeik:

- Az igény szerinti tömegtermelést folytató gyárak rövidtávú *ütemezési* feladatának elemzése, az itt alkalmazható ún. *job shop* ütemezési modell kiterjesztése és megoldó eljárásainak kidolgozása. Az új modell lehetővé teszi alternatív gyártási folyamatok, erőforráskorlátok (gépsorok, munkások), valamint a gyártáshoz szükséges anyagok és raktárkészletek leírását. Az eddig kidolgozott megoldó módszer néhány napos időhorizonton képes újraütemezni a gyártási tételeket úgy, hogy ne lépjen fel anyagihiány. Hosszabb távon pedig beütemezi az új gyártási tételeket, illetve módosítja a már beütemezett sorrendjét annak érdekében, hogy a döntéshozók különféle célokat (pl. megrendelések határidőre való elkészítése, vagy a raktárkészletek töltése) érthessenek el. Az ütemező algoritmus képes arra is, hogy a kapott megoldás jóságára becslést adjon, mivel egy alsó korlátot is meghatároz az optimális megoldás értékére. Az algoritmus ipari méretű, rendkívül nagyméretű problémákat is hatékonyan megold.
- Termelési hálózatok vizsgálata, modellezése és a hatékony működtetésükhöz szükséges matematikai és informatikai háttér kidolgozása. A kifejlesztett kooperációs mechanizmusok bizonytalan piaci kereslet mellett is lehetővé teszik autonóm felek között a beszerzési csatornák összehangolt működtetését, minimális várható összköltség mellett. A költségekben megjelennek a gyártási, logisztikai és piaci kockázatból adódó esetleges túlermelés költségei is. Az autonóm partnerek aszimmetrikus információval rendelkeznek a várható igény és a különféle költségtényezők tekintetében. Egy új kooperációs mechanizmusnak köszönhetően a felek akkor járnak a legjobban, ha az általuk ismert valós, torzításmentes adatokat osztják meg egymással. Jól meghatározható feltételek mellett tehát az együttműködés önrédekké tehető.
- Elemezték a termelési rendszerekben bekövetkezett *változások és zavarok* kezelésével kapcsolatos problémakört és olyan, szimulációval támogatott újraütemezési algoritmusokat fejlesztettek ki, melyek hatékony támogatást nyújtanak az operatív gyártáskorrekcióhoz, a zavarok megszüntetéséhez, esetleges megelőzéséhez.
- Nemzetközi együttműködés keretében olyan informatikai megoldásokat fejlesztenek, melyek kis- és közép méretű vállalkozások részére is lehetővé teszik *aktív azonosítók* (pl. RFID-k) használatát termelési-logisztikai rendszerekben.

- *Neurodinamikus programozáson* alapuló, sztochasztikus, dinamikus ütemezési eljárásokat fejlesztettek ki mind centralizált, mint elosztott (ágens-alapú) termelési struktúrákra, az utóbbiakat komplex adaptív (CAS) rendszereknek tekintve.

A számítógéppel integrált gyártás terén kutatásaik súlypontját a kiterjesztett/virtuális vállalatok kapcsolata képezte a „kiterjesztett termékek”-kel, valamint a „lifecycle engineering”-gel és a „service engineering”-gel, figyelembe véve a környezeti szempontokat és a társadalmi elvárásokat is. Alkalmazott kutatási eredményeik fontos projektekhez kapcsolódnak:

- Jelentős eredményeket értek el a Paksi Atomerőmű RT. részére fejlesztett alállomási, intelligens döntéstámogató rendszerükkel a biztonság és egyúttal a mérnöki/kezelői sebesség növelése terén. A 400/120 kV-os alállomás tréning-szimulátora a SZTAKI vezetésével készült el számos alvállalkozó segítségével.
- Az EU FOKSai projektjének célja egy kis- és középvállalkozás (KKV) orientált tudáskezelő rendszer kifejlesztése, amely az ún. kiterjesztett termékeket támogatja a környezeti (ambient) intelligencia területén.
- Az e-BEP Leonardo projektben gépjármű-szétzerelést és használt-alkatrész kereskedést támogató e-learning megoldásokat és tananyagokat készítettek.
- Az eMULT EU projekt kapcsán elkezdték egy ágens-alapú, tudásbázisú rendszer kidolgozását a szétzerelő és alkatrész-kereskedő KKV-k támogatására.
- A SCULPTOR nevű EU projektben újfajta, prészerszám nélküli lemez-megmunkálási technológiák irányítási problémáival foglalkoznak.

Az automatizált irányítási rendszerek témakörben mintegy 57 kutató dolgozik az intézetben. Az intézeti ráfordítás 427 millió Forintra tehető, melynek 35%-a pályázati forrás. A gazdasági haszonszerzés, illetve haszonszerzési képesség az alábbiakkal jellemezhető:

- *Rendszer- és irányításelmélet:* Kiemelkedő partnerként a Paksi Atomerőmű említhető. Vitális fontossággal bír, hogy a területen magas szintű elméleti munkán alapuló hazai alkalmazási eredmények jönnek létre, és rendelkezésre áll az a szükséges know-how, mely hozzájárul ahhoz, hogy az Atomerőmű biztonságosabban és hatékonyabban tudjon működni, és kevésbé legyen kiszolgáltatott helyzetben külföldi partnereivel szemben. Az intelligens gépjármű-irányítási kutatás mind a hazai autóipar, mind az egyre fontosabbá váló logisztika szempontjából kiemelkedő fontosságú téma.
- *Mérnöki és üzleti intelligencia, számítógéppel integrált gyártás, digitális vállalatok, termelési hálózatok informatikája:* Európai kutatási projektek keretében kiemelkedő ipari cégekkel dolgoznak együtt (Bosch, BMW, Siemens, Finn posta, stb.). A GE-Hungary nagykanizsai fényforrásgyárában (mely a maga nemében a legnagyobb a világon) 2006 májusa óta a termelésstervezést és ütemezést az MTA SZTAKI-ban a VITAL NKFP-projekt keretében kifejlesztett szoftver végzi. A termeléskövetést és a beszállítói láncok koordinált működését támogató több más rendszerük egy részét is már bevezették, más részüket pedig már tesztelik a nagykanizsai gyárban és több beszállítójánál (Zalai Nyomda, Petőfi Nyomda, Dunapack ZRt). A megoldások várhatóan sikerrel alkalmazhatóak más - esetleg jóval kisebb - cégeknél is, részben web-es szolgáltatások formájában. Pakson üzembe helyezték alállomási intelligens döntéstámogató és tréning-szimulációs rendszereiket.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Nemzetközi kapcsolatok

Nemzetközi kapcsolataik közül elsőként az EU kitüntető *Centre of Excellence* címét kell említenünk. A címhez méltóan szerepeltek az EU V. Keretprogramjában, ahol mintegy 30 projektben, illetve kiválósági hálózatban vettek részt. Az EU VI. Keretprogramja keretében 37 támogatást nyert projektben résztvevők, sőt már konzorciumvezetői szerepet is játszanak.

A SZTAKI - elsőként a régióból - 13 éve tagja az *ERCIM-nek* (*European Research Consortium for Informatics and Mathematics*), az információtechnológia területén történő európai tudományos együttműködés elősegítésére alakult szervezetnek. Az ERCIM vette át a világméretű *WWW konzorcium európai irodáját*, a SZTAKI pedig a *WWW konzorcium magyar irodájának* ad otthont.

Összhangban az európai kutatási térség kialakítását célzó törekvésekkel, folytatják *nemzetközi virtuális intézetek és laboratóriumok* kialakítását és működtetését. A Fraunhofer Társasághoz tartozó stuttgarti székhelyű Gyártástechnológia és Automatizálási Intézettel (IPA) budapesti székhellyel már 2002-ben létrehozott Termelés és Üzleti Menedzsment Virtuális Intézet után az elmúlt években több nemzetközi virtuális laboratóriumot alapítottak, többek között a CIM Kutató Központtal (Lugano), az Ipari Technológia-Transfer Központtal (Seibersdorf), a Szófiai Műegyetemmel, az INSA Rennes Egyetemmel és a Bécsi Műszaki Egyetemmel. Az intézet egyik kulcsszereplője az EU VI. Keretprogramba tartozó, a gyártás területén talán legjelentősebb kiválósági hálózatnak (*Virtual Research Laboratory on Knowledge Community in Production*) is. A SZTAKI volt a kezdeményezője a *Central European Grid Consortium* létrehozásának is, melynek célja a Közép-Európai országok Grid kutatásainak és infrastruktúra fejlesztéseinek összehangolása.

Az intézet munkatársai eredményesen működnek a témakör legjelentősebb nemzetközi tudományos szervezetek (CIRP, IEEE, IFAC, IFIP, stb.) vezetésében és munkabizottságaiban. Számos munkatársuk tagja vezető nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának.

Az intézet több kutatóját kérték fel közreműködésre a VII. Keretprogram fő irányainak kialakítása, valamint részvételre az EU és az USA (National Science Foundation) közti együttműködési témák kidolgozása során. Az MTA kétoldalú egyezményes és a TÉT kapcsolatok keretében megvalósult utazások különösen az alapkutatási fázisban igen hasznosak, a kutatók élnek is a lehetőséggel.

Részvétel a hazai felsőoktatásban

Az *egyetemi graduális és posztgraduális oktatást* az intézet továbbra is a kutatási tevékenység fontos velejárójaként és a jövőépítés elengedhetetlen feltételeként kezeli. Rendszeres oktatási tevékenységet folytatnak a következő hazai felsőoktatási intézményekben: BME, ELTE, BKÁE, VE, PTE, ME, PPKE. Az együttműködési formák sokrétűek: kutatók teljes, vagy részállású egyetemi foglalkoztatása, kihelyezett tanszékek, egyetemi tanszékek vezetése, közreműködés informatikai karok létrehozásában.

A *Magyar Info-Bionikai Központot* az elektronika-informatika és a biológiai tudományok területén (különös tekintettel a neurobiológiára) a Magyar Tudományos Akadémia 6 kutatóhelye és 6 egyetemi kutatólaboratórium hozta létre. Szintén a SZTAKI kezdeményezésével jött létre a *Magyar Grid Kompetencia Központ* (MGKK) a BME, ELTE és NIIFI részvételével, később csatlakozott az RMKI is.

Sokéves együttműködés újabb jeleként, a *Regionális Egyetemi Tudásközpontok* keretében, a SZTAKI részt vesz a BME által vezetett *Elektronikus jármű és járműirányítási tudásközpont*

projektben. Szintén kiemelendő az intézet szerepe a *Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum* című, a BME-vezetésű NKTH projektben.

Átlagosan mintegy 30 Ph.D. hallgató végzi kutatómunkáját az intézetben, vezető kutatók témavezetése mellett. A hazai doktori iskolákban munkatársaik 25 esetben szerepelnek külső, és 5 ízben belső alapító tagként.

A tradicionális oktatási módszerek mellett léptek mind a *multimédia eszközök* felhasználása, mind a *távoktatás* felé.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2006-ban 12 EU-VI-os projektjük indult, melyek keretében többségében kiemelkedő egyetemekkel, kutatóintézetekkel és több esetben világhírű cégekkel dolgoznak együtt. Belőlük most négyet emelünk ki, három futó, hazai támogatású projekttel együtt.

– *AC/DC Five Days Car projekt*

A projekt célja az európai autógyártók versenyképességének növelése olyan beszállítói hálózat létrehozása és működtetése révén, amely igen rövid, akár 5 napos határidővel képes kielégíteni az aktuális vevőigényeket a személygépkocsik piacán. Az ezzel kapcsolatos feladatok felölelik a termelésinformatika szinte valamennyi kulcsproblémáját: a terméktervezéstől a beszállítói hálózatok szervezéséig. A négyéves futamidejű projekt fő ipari partnerei vezető német autógyártók (BMW, Volkswagen), valamint olyan autóiipari beszállítók, akik maguk is világméretű hálózattal rendelkeznek (Continental, Siemens VDO, ZF Friedrichshafen). A kutatás-fejlesztés egyik iránya olyan moduláris termékstruktúra kialakítása, amely lehetővé teszi a gépjárművek minél későbbi, egyedi igényeknek megfelelő konfigurálását. Az MTA SZTAKI jelenleg a másik témában vesz részt, amelynek célja olyan, kooperáción alapuló hálózat menedzselési módszerek és kommunikációs infrastruktúra kidolgozása, melyek alacsony raktárkészletek mellett is biztosítják a hálózat minden rétegében a végtermék-gyártóktól elvárt igen magas, közel 100%-os kiszolgálási szintet.

– *CancerGrid*

A CancerGrid 3 éves, multidiszciplináris kutatási projekt. A 10 tagú, AMRI Hungary (korábban: ComGenex) vezette konzorcium célja fókuszált, rákellenes molekulákat nagy eséllyel tartalmazó kémiai könyvtárak kifejlesztése, a betegséggel összefüggő citotoxicitás előrejelzésére alkalmas modellek kialakítása, a kináz / HDAC / MMP és egyéb enzim inhibíciós folyamatok és receptor antagonizmusok modellezése a HTS eredmények felhasználásával, végül olyan Grid technológián alapuló számítógépes rendszer kifejlesztése, amelynek segítségével felgyorsítható és automatizálható a gyógyszertervezés *in silico* fázisa. E rendszerhez az MTA SZTAKI által kifejlesztett DesktopGrid infrastruktúra és P-GRADE portál integrációja adja az alapot, mely a projekt során továbbfejlesztésre kerül adatbázisok, klaszterek, speciális vegyszeti alkalmazások kezelésének és végrehajtásának irányába.

– *BREIN: Üzleti célvezérelt, megbízható és intelligens Grid*

A BREIN integrált EU projekt célja egy olyan, a szükséges informatikai alaputatási és alkalmazott kutatási feladatokkal megalapozott szoftver keretrendszer kifejlesztése, amely ellátási láncok, üzleti célok, folyamatmodellek, folyamattervezési és folyamatindítási

minták, belső és külső szervezeti együttműködések formális leírásain alapul. Ide tartoznak a kívánságok, képességek, emberi és műszaki erőforrások tevékenységeinek formális leírásai is, kiegészítve egy olyan szimulációs rendszerrel, amely komplex döntések támogatásához nyújt segítséget, akár nem standard ipari és tudományos döntési folyamatok esetében is. Mindehhez a BREIN a GRID technológiák kínálta rugalmasságot és megbízhatóságot kívánja ötvözni az üzleti folyamatok modellezésének erejével, valamint az adaptív mesterséges intelligencia technológiák alkalmazásának segítségével, az ágens technológiák, a tervezési és optimalási stratégiák, a kollaboratív technológiák és a szemantikus web felhasználásával.

- *TRASER, Azonosító-alapú termékkövetési- és web-szolgáltatások KKV-k számára*
Az MTA SZTAKI által koordinált EU-VI-os projekt partnerei a változó termelési hálózatokban, beszállítói láncokban résztvevő vállalatok számára fejleszt, tesztel és dokumentál újszerű, nyílt forráskódú megoldásokat a termékek és adataik nyomon követésére. A projekt eredményeként olyan nyílt forrású szoftver-platform jön létre a termékek és adataik nyomon követésére, amely nem igényel költséges kezdeti beruházást, együtt használható a már meglévő, elterjedt, de kevésbé fejlett rendszerekkel, kicsi fejlesztés- és karbantartásigénye pedig nem követeli meg nagy szakembergárda állandó foglalkoztatását. Továbbá a KKV-knak lehetőséget ad arra, hogy hozzáférjenek a szállítmányozó cégek árukövető infrastruktúrájához és RFID-olvasóihoz.
- *CORNEA: A szaruhártya új, nagy pontosságú, a klinikai szemészeti gyakorlatban alkalmazható topográfiai vizsgálati módszereinek kidolgozása*
A CORNEA projekt NKTH támogatással, a Semmelweis Egyetem Szemészeti Klinikájával, az ELTE Numerikus Analízis tanszékével valamint egy kisvállalkozással együttműködésben, a szemészeti vizsgálatokban és a látásjavító műtétek előkészítésénél nagy jelentőséggel bíró szaruhártya topográfias módszerek pontosságának javítását tűzte ki célul. Két év elméleti és kísérleti munka után a projekt eljutott arra a szintre, hogy a következő munkaszakaszban elkészíti a mérőberendezés klinikai tesztelésre alkalmas kísérleti példányát, amellyel bizonyítást nyer a kidolgozott módszerek pontossága és hatékonysága.
- *Újgenerációs vasúti csúszás- és perdülegátló berendezés a fékhatásosság és a biztonság növelése érdekében*
A GVOP támogatással a Knorr-Bremse és a BME Vasúti Járművek Tanszékkel együttműködésben folyó projekt keretében a vasúti fékek hatásosságának növelését célzó szabályozási módszerek kutatása folyik. A projekt első két évében a fékezés fizikai folyamatainak megértése, a modellépítés, valamint a szabályozás elvi lehetőségeinek kutatása folyt. Kidolgozásra került a csúszásmentes fékezés modell alapú szabályozási algoritmus, melyben fontos szerepet kapott a kerék-sín kapcsolatot jellemző tapadási együttható becslése megfigyelő alapú identifikációs módszerrel. Az algoritmust vasúti szimulációs környezetben tesztelték. A projekt harmadik évében kerül sor a módszer implementálására és tesztelésére valóságos környezetben.
- *EJIT: Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont*
Igen fontosnak tartják, hogy a 2004-ben első ízben kiírt *Regionális Egyetemi Tudásközpontok* pályázatban a SZTAKI részt vesz a BME által vezetett *Elektronikus jármű és járműirányítási tudásközpont* projektben. A projekt célja, hogy a Magyarországon az elektronikusan irányított jármű és járműrendszerek területén az elmúlt közel 20 év alatt akadémiai és egyetemi környezetben felhalmozott tudást, és a jelen pillanatban már rendelkezésre álló ipari háttérrel - amely a gyártáson túl kutatás-fejlesztéssel is rendelkezik -

összekapcsolja, és az így létrejött tudásbázist rendszerezve és továbbfejlesztve az iparág más résztvevői, elsősorban a hazai beszállítók rendelkezésére bocsátva kutatás-fejlesztési szolgáltatás formájában. Az EJTT Tudásközpontban a Rendszer és Irányításméleti Kutató Laboratórium a kutatások során szoros együttműködést alakított ki a konzorciumi partnerekkel, így ipari vállalkozásokkal és egyetemi tanszékekkel. Különösen fontos az alábbi projektek eredményességét megemlíteni.

- a) A kommunikációs hálózaton alapuló rendszerirányítás témában nagy hangsúlyt kapott a kereszteződésen történő áthaladás és az autópályán való közlekedés. Megtervezésre került egy vezeték nélküli irányítási hálózat is, amely a kooperatív járműirányítási kísérleteket támogatja.
- b) Gépjárművek aktív komponenseinek funkcionális integrálási lehetőségeit kutatják az aktív fékezés, kormányzás és felfüggesztés komponensek integrálása útján. A kutatás célja a járművekben lévő aktív irányítórendszerek működésének összehangolása, ami az erőforrások jobb kihasználását és a közöttük lévő kedvezőtlen kölcsönhatások kiküszöbölését eredményezi.

A hibátűrő fedélzeti elektronikus C-By-Wire típusú rendszerarchitektúrák megvalósításának vizsgálata során vizsgálták a lehetséges specifikációs, tervezési, és kivitelezési módszereit. Cél egy nagy-megbízhatóságú járműirányítási architektúrát demonstráló prototípus létrehozása.

Szintén az intézet és a BME közötti jó együttműködést jelzi, hogy az intézet szerepel a *Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum* szervezetben.

A fenti felsorolásból is kiderül, hogy az informatika és más tudományágak (anyag-, élet- és társadalomtudomány, matematika, mesterséges intelligencia, rendszer- és irányítástechnika, automatizálás, operációkutatás) és felhasználási területek (érzékelő számítógépek, járműipar, közlekedés, gyártásautomatizálás, gyártásszervezés, kulturális örökség, egészségügy, információs társadalom, adatbiztonság, gyógyászat) olyan interdiszciplináris kutatására, fejlesztésére koncentrálnak, melyek hosszabb távon alapozhatják meg az intézet jövőjét.

Kapcsolataik ezúton is erősödnek olyan kiemelkedő szerepet betöltő nagyvállalatokkal, mint a GE, Magyar Telekom, MOL, Paksi Atomerőmű, Knorr Bremse, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékokat jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el.

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

1. Török L, Zarándy Á: Analog VLSI, array-processor-based, Bayesian, multi-scale optical flow estimation., International Journal of Circuit Theory and Applications 34, 49-75 (2006)
2. Cserey G, Falus A, Roska T: Immune response inspired spatial-temporal target detection algorithms with CNN-UM, International Journal of Circuit Theory and Applications, 34, 21-47 (2006)
3. Gyárfás A, Ruszinkó M, Sárközy G, Szemerédi E: An improved bound for the monochromatic cycle partition number, Journal of Combinatorial Theory Series B, 96 (6), 855-873 (2006)

4. Csuhaj Varjú E, Dassow J, Holzer M: CD grammar systems with competence based entry conditions in their cooperation protocols, *International Journal of Computer Mathematics*, 83 (2), 159-169 (2006)
5. Havasi L, Szlávik Z, Szirányi T: Higher order symmetry for non-linear classification of human walk detection, *Pattern Recognition Letters*, 27 (5), 822-829 (2006)
6. Havasi L, Szirányi T: Estimation of the vanishing point in camera-mirror scenes using from video, *Optics Letters* 31 (10), 1411-1413 (2006)
7. Petz D, Hangos K, Szántó A, Szöllösi F: State tomography for two qubits using reduced densities, *Journal of Physics A-Mathematical and General*, (39), 10901-10907 (2006)
8. Pongrácz B, Szederkényi G, Hangos K: An algorithm for determining a class of invariants in quasi-polynomial systems, *Computer Physics Communications*, 175, 204-211 (2006)
9. Floater M, Hormann K, Kós G: A general construction of barycentric coordinates over convex polygons, *Advances in Computational Mathematics*, 24 (1-4), 311-331 (2006)
10. Hajder L, Csetverikov D: Weak-perspective structure from motion for stongly contaminated data, *Pattern Recognition Letters*, 27, 1581-1589 (2006)
11. Jankó Z, Csetverikov D, Ekárt A: Using a genetic algorithm to register an uncalibrated image pair to a 3D surface model, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 19, 269-276 (2006)
12. Kocsis L, Szepesvári C: Universal parameter Optimisation in games based on SPSA, *Machine Learning*, 63 (3), 249-286 (2006)
13. Nagy D, György A, Linder T: Symbol-based modeling and coding of block Markov sources, *IEEE Transactions on Information Theory*, 52 (12), 5570-5578 (2006)
14. Dezső Z, Almaas E, Lukács A, Rácz B, Szakadát I, Barabási A: Dynamics of information access on the web, *Physical Review E*, 73 (066132), 066132-1-066132-6 (2006)
15. Györfi L, Lugosi G, Udina F: Nonparametric kernel-based sequential investment strategies, *Mathematical Finance*, 16 (2), 337-357 (2006)
16. Baddeley R, Praeger C, Schneider C: Innately transitive subgroups of wreath products in product action, *Transactions of the American Mathematical Society*, 358 (4), (2006)
17. Yam Y, Wong M, Baranyi P: Interpolation with function space representation of membership functions, *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, 14 (3), 398-411 (2006)
18. Baranyi P: Output feedback control of two-dimensional aeroelastic system, *Journal of Guidance Control and Dynamics*, 29 (3), 762-767 (2006)
19. Baranyi P: Tensor-product model-based control of two-dimensional aeroelastic system, *Journal of Guidance Control and Dynamics*, 29 (2), 391-400 (2006)
20. Angelelli E, Speranza M, Tuza Z: New bounds and algorithms for on-line scheduling: two identical processors, known sum and upper bound on the tasks, *Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*, 8, 1-16 (2006)
21. Bazgan C, Tuza Z, Vanderpooten D: The satisfactory partition problem, *Discrete Applied Mathematics*, 154, 1236-1245 (2006)

22. Monostori L, Csáji B: Stochastic dynamic production control by neurodynamic programming, *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 55 (1), 473-478 (2006)
23. Váncza J, Egri P: Coordinating supply networks in customized mass production - a contract-based approach, *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 55 (1), 489-492 (2006)
24. Monostori L, Váncza J, Kumara S: Agent-based systems for manufacturing *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 55 (2), 697-720 (2006)
25. Markót M, Csendes T: A reliable area reduction technique for solving circle packing problems, *Computing*, 77, 147-162 (2006)
26. Markót M, Fernández J, Casado L, Csendes T: New interval methods for constrained global optimization, *Mathematical Programming*, 106, 287-318 (2006)
27. Crouzeix J, Rapcsák T: Integrability of pseudomonotone differentiable maps and the revealed preference problem, *Journal of Convex Analysis*, 12 (2), 431-446 (2005)
28. Gáspár P, Kuti I: The dynamic modelling of road vehicles for the numerical verification of active suspensions, *International Journal of Vehicle Design*, 42 (1-2-3), 36-51 (2006)
29. Gáspár P, Bokor J: A fault-tolerant rollover prevention system based on an LPV method, *International Journal of Vehicle Design*, 42 (3-4), 392-412 (2006.)
30. Erdélyi B, Csákány B, Rödönyi G, Soumelidis A, Lang Z, Németh J: Dynamics of ocular surface topography in healthy subjects, *Ophthalmic and Physiological Optics*, 26, 419-425 (2006)
31. Kifor T, Varga L, Vázquez-Salceda J, Álvarez S, Willmott S, Miles S: Provenance in agent-mediated healthcare systems, *IEEE Intelligent Systems*, 21 (6), 38-46 (2006)
32. Kovács G, Kopácsi S, Haidegger G, Michellini R: Ambient intelligence in product life-cycle management, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 19, 953-965 (2006)
33. Gerencsér L: A representation theorem for the error of recursive estimators, *SIAM Journal on Control and Optimization*, 44 (6), 2123-2188 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

Átlagléttség ¹ :	291	Ebből kutató ² :	212
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			114
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			348
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			348
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	101	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	8
nemzetközi együttműködés keretében:	113	SCI által regisztrált folyóiratban:	83
összesített impakt faktor:	63,382	összes hivatkozás száma ⁴ :	1486
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			1486
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	0
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	16
		jegyzet:	0
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	5	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	0	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	165	poszterek száma:	0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			56
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	58	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	48
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			1390 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatalkutatói álláshelyek száma ⁹ :	19
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			20
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	48 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			9
NKFP:	6	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	64 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	57 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			14
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	227 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			33
EU forrásból:	30	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	213 MFt
Egyéb:	3	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	46 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			6
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	134 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			46
		A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	705 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			63 MFt

SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly-Thege M. út 29-33

Levélcím: 1525 Budapest, Pf. 49

Telefon: 392-2212, Fax: 392-2215

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Alapkutatások végzése az elméleti és kísérleti szilárdtestfizika (kondenzált anyagok fizikája, nanoszerkezetek, vékonyrétegek és felületek fizikája), továbbá az elméleti és kísérleti optika (optikai kristályok fizikája, nemlineáris és kvantumoptika, lézerfizika) területén. *Alkalmazott kutatások* végzése (új anyagok előállítása és vizsgálata, új anyagvizsgáló módszerek fejlesztése, optikai kristályok és vékonyréteg eszközök előállítása és alkalmazása, valamint a lézerek fejlesztése és alkalmazása). Az alaptevékenységhez illeszkedő új *metodikák* fejlesztése. Graduális és posztgraduális *szakemberképzés*.

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

Erősen korrelált rendszerek

Az olyan alacsony dimenziós rendszerek vizsgálatára, ahol egy térben homogén állapotból egy térben inhomogén állapotba – mint például a dimerizált, trimerizált vagy nemkommutatív fázisokba – történő kvantum fázisátalakulás lép fel, egy új, az entrópián alapuló közelítést javasoltak. Ez az alapállapot és az első gerjesztett állapot Neumann entrópiájának illetve a megfelelő Fourier spektrumnak a lánc hosszától való függésének a vizsgálatán alapul. A nem zérus hullámszámnál megjelenő csúcsok jelzik az egyébként lecsengő korrelációs függvényekben megjelenő oszcillációkat.

Numerikus és analitikus módszerekkel megvizsgálták az $S=1$ spinű háromszögács bilineáris-bikvadratikus Heisenberg modell fázisdiagramját. A szokásos ferromágneses és antiferromágneses fázisokat ferro- ill. antiferrokvadrupoláris fázis választja el egymástól. A rendezett fázisokban $SU(3)$ spinhullám elmélettel kiszámolták a dinamikus spin-spin korrelációs függvényt.

Résztevők: 9 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 44,5 M Ft költségvetési támogatás, 10,6 M Ft hazai szerződések.

Komplex rendszerek

Rendezetlen rendszerekben fellépő ún. erős Griffiths-féle szingularitások tulajdonságait vizsgálták és megmutatták, hogy a relaxációs idők eloszlása az extrém érték statisztika tulajdonságait követi.

Komplex hálózatokon létrejövő nemegyensúlyi fázisátalakulások tulajdonságait vizsgálták. A kinetikus Ising sejtautomata modell kritikus tulajdonságait rendezetlenség jelenlétében tanulmányozták.

Klasszikus párkölcsönhatású rendszerek alapállapotának periodikus és aperiodikus jellegére vonatkozóan egzakt eredményeket értek el. Spin-1 Bose-Einstein kondenzátumú gáz poláris fázisából származó fázisok spin és részecske dinamikáját tanulmányozták.

Résztevők: 6 kutató, valamennyi az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 33,3 M Ft költségvetési támogatás, 14,3 M Ft hazai szerződések.

Elektronállapotok fémekben

Egy eljárást dolgoztak ki a véletlen ötvözetek rugalmassági állandója hőmérsékletfüggésének első elvekből való meghatározására. Módszerükkel a Nb-Zr ötvözetre a kísérleti adatokkal nagyon jó egyezést kaptak.

Kifejlesztettek egy technikát a rendezetlen ötvözetek felületi szegregációs profiljának, azaz a felületi rétegek koncentráció-függésének a kiszámítására. A módszerben első elvekből határozták meg a felületi és bulk teljes energiát, valamint a kémiai potenciálok koncentráció-függését. A módszert AgPd ötvözetre alkalmazva azt találták, hogy alacsony hőmérsékleten az ezüst teljes egészében a felületre szegregálódik, a koncentrációs profil pedig erősen függ a hőmérséklettől.

A berillium tércentrált köbös fázisa stabilitásának vizsgálatával megállapították, hogy a hcp és a bcc struktúrák anizotrópia különbsége következtében a nagy nyomáson egy hcp \rightarrow bcc fázisátalakulás lép fel.

Résztevők: 9 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 44,5 M Ft költségvetési támogatás, 7,1 M Ft hazai szerződések.

Nem-egyensúlyi ötvözetek

Ultravékony Fe rétegeket tartalmazó mágneses multirétegeket vizsgáltak. A Fe/Al és Fe/Ag multirétegeken végzett mágneses és Mössbauer spektroszkópiai mérések célja annak megválaszolása volt, hogy a különleges mágneses tulajdonságok megjelenésében milyen szerepet játszik a nem mágneses rétegekkel történő keveredés a határfelületeken.

Fe/Al multirétegekben az egyes rétegek közötti határfelületen egy nem-mágneses ötvözet réteg képződését figyelték meg. A hőmérséklet és a külső mágneses tér függvényében végzett Mössbauer mérésekből meghatározták ennek összetételét és átlagos vastagságát (0,3 nm). Ennél vastagabb Fe rétegek esetén megfigyelhető volt a mágnesség megjelenése, de a mágneses tulajdonságok nagyon erősen függenek a kialakuló mágneses Fe réteg vastagságától. Azt találták, hogy a tömbi Fe-hoz közelítő mágneses viselkedés kialakulása a legalább 3 atomi síkot tartalmazó mágneses Fe tartományok megjelenéséhez köthető. Kisebb vastagságoknál az ún. szuperparamágneses viselkedést és igen nagy mágneses anizotrópiát tapasztaltak.

A Fe és az Ag egymással nem keveredő elemek. Ultra vékony Fe rétegek esetén a határfelületi folyamatok nano-méretű Fe klaszterek kialakulását eredményezik. A klaszterek méretére a szuperparamágneses tulajdonságokból és a Mössbauer spektrumok sajátosságaiból következtettek.

Résztevők: 6 kutató, valamennyi az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 33,3 M Ft költségvetési támogatás, 6,8 M Ft hazai szerződések.

A csoport három területen ért el kiemelkedő eredményeket:

- Kiterjesztették a C_{60} és kubán (C_8H_8) molekulákon alapuló vegyületek családját magasabb fullerén-molekulákra mint pl. C_{76} C_{84} C_{88} . Meghatározták a magasabb fullerén származékok alkotta vegyületek fázisdiagramját: a C_{88} -tól kisebb fullerén molekulák rotor-sztator míg az ettől magasabb fullerén molekulák "host-guest" rendszert alkotnak.
- Az előző években kifejlesztett, kristályok szerkezetének *ab initio* meghatározására alkalmas iteratív algoritmust ("charge flipping": CF) kiterjesztették kvázikristályos és pszeudoszimmetrikus szerkezetek megoldására. Ezen túl megmutatták, hogy neutron diffrakciós adatokból is lehetséges *ab initio* szerkezetmegoldás, ami lehetőséget ad a módszer szélesebb körű jövőbeli alkalmazására.
- Az alacsonyabb dimenziós polikristályos növekedés leírására kidolgozott fázismező modelljüket kiterjesztették háromdimenziós kristálynövekedés leírására. Ennek segítségével tanulmányozták Al-Ti és Cu-Ni ötvözetek polikristályos növekedési mintázatait. A modellszámolások polidendrites növekedést is leírtak. Ezen kívül sikeresen modellezték vékony rétegekben a megszilárdulási folyamatot.

A felsorolt eredmények közül eddig még egyik sem hozott közvetlen gazdasági hasznot, de a jövőben mindegyik nagy haszonnal kecsegtet.

Résztvevők: összesen 65 fő, ebből 15 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 83,3 M Ft költségvetési támogatás, 24,2 M Ft hazai szerződések, 56,2 M Ft nemzetközi szerződések.

Fémfizika, fémtechnológia és mágnesség

Elektron kristályok: Tanulmányozták a magas kritikus hőmérsékletű szupravezetőkben mágneses térben kialakuló örvényrendszer szerkezetét, kölcsönhatásait és mozgását, mind az elektromos ellenállás, mind a mágneses szuszceptibilitás mérésének segítségével. Kimutatták egy metastabilitási vonal létezését az örvényrendszer hőmérséklet-mágneses tér fázisdiagramjában mind optimális, mind az optimálisnál kisebb elektronkoncentrációjú szupravezetőkben. Megmutatták, hogy nagy áramok hatására a metastabil fázis átalakul a stabil fázisba. Mivel az ilyen szupravezetőkben az energiavesztés az örvények mozgásával kapcsolatos, ezeknek a vizsgálatoknak nagy a jelentősége nem csak elméleti szempontból, hanem a szupravezetők szinte minden gyakorlati alkalmazásával kapcsolatban is.

Résztvevők: 6 kutató, valamennyi az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 33,3 M Ft költségvetési támogatás, 4,6 M Ft hazai szerződések.

Fémfizika: $Pd_{0,90}Ag_{0,10}-H$ és $Pd_{0,80}Ag_{0,20}-H$ rendszereken szimultán hidrogén tartalom és spin-spin relaxációs idő méréseket végeztek NMR metodika felhasználásával, széles hidrogén koncentráció tartományban. Kétkomponensű spin-spin relaxációt tapasztaltak minden H tartalom mellett, ami az α - és β - fázisban lévő H relaxációjának tulajdonítható. Az elfogadott modellek alapján β - fázisban lévő hidrogén csak nagyobb hidrogén tartalmú ötvözetekben lehet(ne). A relaxáció a hidrogén 10^5 - 10^6 lépést tartalmazó lokális mozgásának tulajdonítható, és a két fázis között nincs hidrogén csere.

Eredetileg rendezetlen (nem feltekeredett) fehérjék vizes oldatai hidratációjának vizsgálatában az itt kidolgozott új NMR és DSC módszerek alapján a hidrátburok nagyságának kvantitatív meghatározását folytatták ubiquitin és cascin szegmensek vizes oldatain, továbbá a méréseket kiterjesztették a fehérjék alkotóelemeit jelentő tripeptidekre, valamint NaCl és KCl vizes oldatokra is. Az NMR relaxációs idő mérések a hidrát burokokban lévő víz mozgásának kinetikai jellemzőit tárták fel.

Az óriás mágneses ellenállást (GMR) mutató elektrolitikus Co-Cu/Cu multirétegek előállításánál – a korábbi durva felületű Ti hordozó helyett – a további vizsgálatokhoz most már igen kis felületi durvaságú szilícium egykristály lapra párologtatással felvitt fémek alaprétgen hordozóra történik a leválasztás. A keresztmetszeti transzmissziós elektronmikroszkópiai vizsgálatok tökéletesebb multiréteg szerkezetet mutattak a simább hordozó esetében. Azonos körülmények között leválasztott multirétegeket összehasonlítva a durvább felületen a GMR szuperparamágneses tartományoktól eredő járuléka egyértelműen nagyobb volt, jelezve a felületi durvaság szerepét ezen tartományok kialakulásában.

Többféle rétegvastagsággal rendelkező Co-Ni-Cu/Cu multiréteg mintasorozatok bruttó összetételének analízisével megállapították, hogy a több komponenst tartalmazó mágneses rétegekben a rétegnövekedés irányában számottevő koncentráció-gradiensnek kell kialakulnia a 0,5-15 nm-es rétegvastagság-tartományban. A bruttó összetétel alapján tett megállapításokat direkt mélységi kémiai elemzéssel is bizonyították.

Résztevők: 6 kutató, valamennyi az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 33,3 M Ft költségvetési támogatás, 6,0 M Ft hazai szerződések.

Fémtechnológia és mágnesség: A fémtechnológiai kutatások keretében új Al-U-alapú amorf binér, ternér, és quaternér ötvözetet fejlesztettek ki, ahol Al > 85 at%.

A Cu-Zr-Ti alapú tömbi amorf ötvözet üvegeképző hajlamát tovább növelték a Cu Ag által való részleges helyettesítésével és így 4 mm-es tömbi amorf öntecset sikerült előállítani.

A mágneses kutatások keretében módszert dolgoztak ki a kvázi-DC hiszterézis paraméterek mérésére. A koercitív tér frekvenciafüggését mérve ultralágymágneses anyagokon megmutatták, hogy a sztatikus koercitív tér nem minden esetben határozható meg a nulla frekvenciához való extrapolációból. Módszert dolgoztak ki, amellyel felbontható a kísérleti hiszterézisgörbe reverzibilis és irreverzibilis komponensekre. Továbbá módszert dolgoztak ki az ún. inverz hiszterézis transzformációra is.

A termomágneses és DTA technika egyidejű alkalmazásával a visszacsatolással vezérelt felfűtési sebességet 2500 K/min-ra terjesztették ki, szobahőmérséklet és 1200 K között. Azt találták, hogy a Kissinger-féle ábrázolásban megszokott lineáris összefüggés csak viszonylag alacsony felfűtési sebességeknél érvényes.

Résztevők: 5 kutató, ebből 4 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 22,2 M Ft költségvetési támogatás, 1,1 M Ft hazai szerződések.

Folyadékkristályok

Nematikus ill. szmektikus A fázissal rendelkező új, hajlott törzsű folyadékkristály molekulákat állítottak elő, melyek a ChemPhysChem folyóirat címlapjára kerültek. – Érzékeny optikai módszert dolgoztak ki, mellyel kimutatták a folyadékkristály direktorának

elfordulását azo festékekkel dópolt polimer határfelületeken. – Elméletileg és kísérlettel igazolták a kezdeti feltételek lényeges szerepét a nematikus folyadékkristályokban keltett elektrokonvekciós mintázatok lebomlásában. – Új eljárást dolgoztak ki folyadékkristályok flexoelektromos válaszána k mérésére. – Megmutatták, hogy a hajlott törzsu nematikusok flexoelektromos egyúthathatja ezerszerese a hagyománvos, rúd alakú folyadékkristályokénak. – Analizálták a folyadékkristály dielektromos és vezetőképesség anizotrópiáinak, valamint a felületi orientációjának az elektrokonvekció megjelenésére és morfológiájára gyakorolt hatását. – Megmérték különböző szögű lejtőn lefolyó szemcsés anyagok folyási sebességét és rétegvastagságát, ebből megállapították a kialakuló instabilitás küszöbét.

A fenti kutatások a jelenségek mélyebb megértését szolgálják, az új anyagok előállításával kapcsolatos eredmények potenciális alkalmazási lehetőséget hordozhatnak.

Résztvevők 51 kutató, ebből 7 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 38,9 M Ft költségvetési támogatás, 6,6 M Ft hazai szerződések, 35,8 M Ft nemzetközi szerződések.

Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban

Neutronszórás alkalmazásával számos komplex anyag, többek között a keményítő szerkezetét tanulmányozták. A növényekből szemcse formájában kivonható keményítő jelentősége a táplálék- és energiataralékolásban áll. Ezen szemcsék alakja, mérete valamint összetétele nagyban függ növényi eredetüktől. Az élelmiszeripar fejlődésének fontos tényezője a keményítőknek az emésztés során bekövetkező szerkezeti átalakulásainak ismerete. Ehhez szükség van a keményítőnek oldatban, szuszpenzió vagy gél formában való vizsgálatára is. A kisszögű neutronszórás hasznos módszernek bizonyult a keményítőszemcsék szerkezetének tanulmányozására, mert a szemcséket alkotó amorf és félkristályos gyűrűk rétegtávolságai a kisszögű szórás által tanulmányozható mérettartományba esnek. A burgonyából, kukoricából és búzából nyert keményítő eltérő körülmények közötti vizsgálata lehetővé tette a különböző eredetű keményítőszemcsék szerkezetének összehasonlítását, a szemcsék felületi tulajdonságainak, a rétegtávolságok kiszámítását valamint a szemcse szerkezet változásának nyomon követését (duzzadás, felhasadás, roncsolódás) víz jelenlétében.

Résztvevők: 45 kutató, ebből 17 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 94,5 M Ft költségvetési támogatás, 46,2 M Ft hazai szerződések, 17,4 M Ft nemzetközi szerződések.

Neutronszórás

Neutron- és nagyenergiás röntgendiffrakciós adatok alapján, a Reverse Monte Carlo (RMC) módszer segítségével meghatározták a $0,7\text{SiO}_2 - 0,3\text{Na}_2\text{O}$ kovalens üveg parciális párkorrelációs függvényeit. A $\text{Ge}_{15}\text{Te}_{85}$ amorf ötvözet szerkezetét a fent említett diffrakciós módszerek mellett EXAFS-szal is vizsgálták és mindezen adatokat egyúttesen modellezték RMC szimulációval; a Ge-Te és Te-Te parciális párkorrelációs függvényeket így sikerült szeparálni. Az említett kísérleti technikák és a RMC modellezés kombinációjával meghatározták az $\text{Al}_{89}\text{La}_6\text{Ni}_5$ fémüveg azon parciális párkorrelációs függvényeit is, amelyekben La és Ni szerepel. Az SbCl_5 és WCl_6 folyadékok szerkezetét neutroindiffrakciós méréseken alapuló RMC számítások segítségével írták le: úgy találták, hogy a molekulaszimmetria növekedésével az intermolekuláris kölcsönhatásoknak az orientációs korrelációkra

gyakorolt hatása csökken. A közönséges jég (Ih fázis) lokális szerkezetét tanulmányozták neutron-pordiffrakció, valamint a teljes szórási képet értelmezni képes RMCPOW eljárással; kimutatták, hogy a mért diffúz szórási képet nem lehetséges kizárólag a proton-rendezetlenséggel magyarázni. A polikristályos FeAl_2 alacsony hőmérsékletű (<30K) neutrontdiffrakciós mérése alapján megállapították, hogy a mágneses szerkezet inkommenzurábilis, a periódushosszra 11Å adódott. Nagyfelbontású neutrontdiffrakció, mint roncsolásmentes vizsgálati módszer segítségével elvégezték a Magyar Nemzeti Múzeum néhány régészeti leletének textúra-analízisét.

A textúra-analízis a későbbiekben esetleg gazdasági hasznot hozhat.

Résztvevők: 13 kutató, ebből 9 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 50,0 M Ft költségvetési támogatás, 7,5 M Ft hazai szerződések, 6,3 M Ft nemzetközi szerződések.

Lézerfény és szilárd anyag – főként nemlineáris – kölcsönhatásai

Kísérletek: Analizálták fémek sokfotonos emissziójának a lézercikluson belüli dinamikáját a lézerimpulzus ún. hordozó-burkoló fázisának meghatározására irányuló kísérletekhez. A fotoemisszióknak ezen abszolút fázistól való váratlanul alacsony kísérleti hozam függésének megértésére további kísérleteket végeztek Ti-zafir lézerimpulzusokkal arany felületén, kimutatva, hogy ezen alacsony értéket a keltett forró elektronok okozzák. E jelenség egyszerű, gyors és ígéretes módszert nyújt az abszolút fázis mérésére szilárdtest alapú detektorok megvalósításával. Részt vettek olyan Ti-zafir lézeroszillátor megépítésében, melyből elegendő energia és intenzitás nyerhető magasrendű kölcsönhatási folyamatok keltésére.

Elméletek: Új felismeréssel röntgentartományba eső frekvenciájú, attosekundumos időtartamú fényimpulzusokat szolgáltató fényforrás elvet fogalmaztak meg az ún. Sommerfeld-féle optikai előfutár-jelenség alapján. A klasszikus mechanika egzakt modellje alapján meghatározták Ti-zafir lézer néhány ciklusos impulzusai segítségével magasrendű harmonikusok keltését plazma-rétegen; a kapott spektrumok az abszolút fázistól függően különböznek. A kapott számításokat mágneses térben relativisztikus esetre általánosítva a kapott spektrumokkal az abszolút fázis mérhető. Kvantumoptikai számításokkal leírták különböző fajta radiális hullámsomagok evolúciójának dinamikáját hirtelen kikapcsolt kötésű potenciál esetén.

Résztvevők: 3 kutató, valamennyi az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 16,7 M Ft költségvetési támogatás, 10,9 M Ft hazai szerződések.

Gázlézerek és gázkisülések

A számítógépes plazmaszimulációk területén kifejlesztettek egy részecske-szimulációs programot, amellyel (mikroelektronikában és egyes felület-megmunkálási módszereknél alkalmazott) reaktív plazmákban vizsgálható az ionok energia-eloszlása. Tanulmányozták kétdimenziós, erősen csatolt plazmák viszkozitásának változását a nyírási feszültség függvényében. Részecske-szimulációs módszert dolgoztak ki a kvark-gluon plazma leírására a hadronizációs hőmérséklet környezetében. – Elméleti modellezéssel és képfeldolgozási módszerek alkalmazásával vizsgálták elektrolit-katódos (folyadékfelületen létrehozott) gázkisülés tulajdonságait. A kisüléssel analizálható a víz nehézfém-tartalma, így környezetvédelmi szempontból jelentős alkalmazás lehet. – Képkalkotó, több spektrális

tartományban működő reflektométert építettek. A berendezés lehetővé teszi nagyméretű mintákra leválasztott vékonyrétegek jellemzőinek a minta teljes felületén történő egyidejű ellenőrzését. – Távoli ultrabolya tartományban működő ezüstion-lézer építettek és alkalmaztak lézerindukált fluoreszcencia vizsgálatokra. A lézer a Raman spektroszkópia területén kerülhet további felhasználásra.

Résztvevők: 11 kutató, ebből 9 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 50,0 M Ft költségvetési támogatás, 11,8 M Ft hazai szerződések, 12,1 M Ft nemzetközi szerződések.

Lézeralkalmazások

Optikai mérés technika: Létrehoztak egy új elven működő kvantum-optikai fényforrást, amellyel 100%-os valószínűséggel generálható előre programozott számú és tulajdonságú foton. A berendezéshez 2 gyors elektronikai blokkot és egy vezérlő egységet építettek. Ezzel az új rendszerrel számos olyan kalibrációs feladat oldható meg, amely hagyományos "fény etalonokkal" nem volt megvalósítható.

Berendezést építettek a felületi plazmonok statisztikai tulajdonságainak mérésére, amellyel tanulmányozták azok generálásának és rekombinációjának lineáris és nemlineáris tulajdonságait. Megmutatták, hogy a felületi plazmonok rekombinációja során keletkező fotonok időbeli statisztikája, alacsony gerjesztési teljesítmények esetén, megegyezik a gerjesztő lézertény foton-statisztikájával.

Új, általuk fejlesztett műszerekkel bővítették a mobil környezetvédelmi laboratóriumot, amellyel számos környezet- és egészségvédelmi mérési kampányt szerveztek. Meghatározták Budapest egyes részeinek levegőszennyezettségét és felmérték az ott jelenlévő források intenzitását.

Továbbfejlesztették a kéthullámhosszú, négy detektoros aeroszol spektrométert, amellyel *in situ real time* méréssel egyidejűleg meg tudják határozni a lebegő aeroszol részecskék koncentrációját, méreteloszlását, optikai törésmutatóját és extinkcióját.

Új elven működő gyors (25 ps-os) fotonkorrelátort hoztak létre és alkalmaztak nanorészecskék detektálására. A részecskesokaságon tanulmányozták a szórt fény statisztikai tulajdonságait.

Továbbfejlesztették a felületi topológia vizsgálatára alkalmas nagyfelbontású lézeres intrerferométert, amellyel nanométeres felbontással megvizsgálták számos optikai felületet.

Amorf szén vékonyrétegek: Az amorf szén vékonyrétegek iránti tudományos érdeklődés az utóbbi évtizedben jelentősen erősödött a modern technológia területein lehetséges ígéretes alkalmazásaiak folytán. A gyémánszerű vékonyrétegek mellett a kis ionenergiáknál előállított lágy, amorf szén rétegek is fontossá váltak, különösen optoelektronikai eszközök aktív anyagaként.

Kutatásaik a benzolból készült lágy, amorf szén filmekre, különösen ezen filmeknél a rétegvastagságnak az optikai tulajdonságokra, fény emisszióra, valamint az atomi kötésszerkezetre gyakorolt hatására koncentráltak. A szilícium atomoknak az amorf szén mátrixba való beépülését ugyancsak tanulmányozták. A gyémánszerű szén vékonyrétegek alkalmazásaként kutatásokat végeztek a koszorúér tágító sztenteknek e réteggel történő bevonására. Kísérletileg igazolták, hogy a lumineszcencia hatások az ultrabolya tartományban a

rétegvastagság növelésével jelentősen csökken, továbbá, hogy a széles lumineszcencia sáv és gerjesztési spektrum egyaránt a kisebb fotonenergiák irányába tolódik. Raman szórási vizsgálatokkal felderítették az atomi kötésszerkezet változását a rétegvastagsággal, megmutatták az sp^2 hibridizációjú szén atomok térbeli elrendeződésének a módosulását.

Folytatták a koszorúér-tágító sztentek bio-, és haemokompatibilis védőréteggel történő bevonására korábban megkezdett kutatásaikat. Kialakítottak egy olyan elrendezést, amelyben plazmaerősítéses kémiai gőzfázisú leválasztással gyémántszerű (DLC) védőréteget készítenek párhuzamosan több sztent hordozóra. A sztentre leválasztott DLC védőrétegek kiváló minőségűek.

Résztevők: 13 kutató, valamennyi az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 72,2 M Ft költségvetési támogatás, 73,3 M Ft hazai szerződések.

Femtoszekundumos lézertechnika és optikai vékonyrétegek

Hosszú rezonátoros Ti-zafir lézer nagyenergiájú ($E \sim 200$ nJ) lézerimpulzusainak terjedését vizsgálták LMA (Large Mode Area) fotonikus kristály szerkezetű és hagyományos, egymódusú optikai szálakban 800 nm körül. A szál végén előállított önfázis modulált spektrum akár 10 fs-nál rövidebb impulzusok előállítását is lehetővé teszi. – A véges elem módszer segítségével megvizsgálták a kvarcüvegből készült üreges, fotonikus kristály (Bragg) szerkezetű optikai szálak diszperziós és veszteségi tulajdonságait. Elméletileg kimutatták, hogy ezen optikai szálak anomális diszperzióval rendelkeznek a vezetési sáv túlnyomó részén, ezért ezek alkalmasak nagyenergiájú ($E > 100$ nJ) lézerimpulzusok diszperziójának kompenzálására. Elméleti számításaik azt mutatják, hogy akár 5 fs-nál rövidebb, nagyenergiájú impulzusok is előállíthatók kizárólag száloptikai elemekből álló fs-os lézerezősítő kimenetén. – Sikerült 12 fs-os kompresszált lézerimpulzusokat előállítani kisenergiájú ($E < 1$ nJ) femtoszekundumos lézerezoscillátorok és kismagátmérőjű fotonikus kristály szerkezetű optikai szálak felhasználásával. Elméleti számítások azt mutatják, hogy akár 6 fs-nál rövidebb fényimpulzusok előállítása is lehetséges ilyen kis impulzusenergiák esetén.

Együttműködésben a MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézet Gyógyszerkutató Osztályának kutatóival, új típusú, két foton abszorpciós fluoreszcencia mikroszkópot fejlesztettek ki, mely alkalmas idegsejt hálózatok, vagy az egyes idegsejtek kis részleteinek valós idejű, 3D vizsgálatára. Kísérletileg kimutatták, hogy lehetséges a mikroszkópban lévő optikai elemek pozitív anyagi diszperziójának kompenzálása megfelelően megválasztott, üreges fotonikus kristály szerkezetű optikai szálak alkalmazásával.

Nanoszkópikus fém- és/vagy dielektrikum-rétegeket tartalmazó nagy sáv szélességű és kis diszperziójú antireflexiós bevonatokat, nyalábosztó bevonatokat, dikroikus tükröket, kicsatoló tükröket és spektrális szűrőket állítottak elő femtomásodperces időtartományú lézeroptikai alkalmazásokhoz. Nanooptikai vastagságú vékony fémrétegeket tartalmazó többüreges interferenciaszűrő szerkezeteket dolgoztak ki elsősorban analitikai és orvosi biológiai alkalmazásokhoz. Reaktív elektronsugaras párolgatási technológiával növesztett indium-oxid (ITO) vékonyrétegeket tartalmazó sokréteges antireflexiós bevonatokat fejlesztettek ki infravörös és mikrohullámú alkalmazásokra. Si-rétegeket alkalmazva fejlesztettek ki igen nagy sáv szélességű, kis diszperziójú, nagy reflexióképeségű bevonatokat a 600 – 1200 nm tartományra. Kis optikai veszteségű Al_2O_3 -rétegeket tartalmazó integrált optikai Mach – Zehnder interferométereket állítottak elő – együttműködve az MTA MFA és MTA SZBK Biofizikai Intézet kutatóival. Az új integrált optikai eszközök fényvel vezérelhető

kapcsolóként és szenzorként alkalmazhatók a gyakorlatban. Optikai bevonatos szenzort fejlesztettek ki természetes vizek felszínén úszó igen kis mennyiségű olajszennyeződés kimutatására.

Résztvevők: 12 kutató, ebből 4 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 22,2 M Ft költségvetési támogatás, 12,9 M Ft hazai szerződések.

Optikai egykristályok növesztése és minősítése

A LiNbO_3 kristályok összetételének követésére roncsolásmentes infravörös és Raman spektroszkópiai módszereket fejlesztettek ki. – $\text{LiNbO}_3:\text{Eu}$ nagyfelbontású lumineszcencia színeképekben 14 eltérő környezetű Eu-helyet azonosítottak. A $\text{LiNbO}_3:\text{Tb},\text{Eu}$ kettősen adalékolt kristály lumineszcencia színeképeiben sugárzásos energiaátadást mutattak ki a Tb ionokról az Eu ionokra, amit a Tb- ϵ misszió és Eu-abszorpció átfedése eredményezett.

$\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_3:\text{Er}$ (YAB) kristályokat magvezérelt flux módszerrel növesztettek, amelyekben különböző Er^{3+} szintekre gerjesztve nagyszámú lumineszcencia átmenetet azonosítottak, köztük gerjesztett állapotban végződöket. A ${}^4\text{S}_{3/2}-{}^5\text{I}_{15/2}$ lumineszcencia átmenetben meghatározott Stark szintek az abszorpciós adatokkal és kristálytér számításokkal jól egyeztek. A ${}^4\text{S}_{3/2}$ szint élettartamának hőmérsékletfüggését elektron-fonon csatoláson alapuló sugárzásmenetes relaxációval értelmezték, és Er-Er kölcsönhatásra is következtettek. YAB:Er kristályokban elektron-fonon kombinációs sávokat azonosítottak, amelyek pozíciói a más úton meghatározott rácsrezgési frekvenciákkal jó egyezésben voltak, beleértve a bór izotóphatást. Meghatározták a rendszer elektron-fonon csatolási paramétereit.

Czochralski módszerrel $\text{Bi}_2\text{TeO}_5:\text{Ho}$ kristályokat növesztettek, és az abszorpciós színeképeikből meghatározták a Ho^{3+} ionok teljes termdiagramját a Stark komponensekkel együtt. A kristálytér számítások szerint a Ho-ionok Bi helyekre épültek be. A lumineszcencia átmenetek közül a Judd-Ofelt számítások szerint két esetben várható lézerhatás.

Az optikai kristályok alapkutatásában a témaválasztást az alkalmazás lehetőségei motiválták. A LiNbO_3 kristályok sokoldalú felhasználását befolyásoló kristályösszetétel módosítása került előtérbe. A belső frekvenciakétszerező lézerek kialakítására alkalmas YAB lézeraktív adalékaival foglalkoztak. A holografikus tárolásra alkalmas önfixáló fotorefraktív Bi_2TeO_5 kristályoknál is az adalékok szerepét vizsgálták. Kristályaikat hazai és külföldi partnereik jelenleg is használják eszközfejlesztésekre, ami 2006-ban 5,2 M Ft kutatási támogatást eredményezett.

Résztvevők: 30 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 44,5 M Ft költségvetési támogatás, 5,0 M Ft hazai szerződések.

Optikai kristályok karakterizációja és hibahelyeinek vizsgálata

Optikai és pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatokkal belső mikrorepedésektől származó felületi vonalas képződményeket mutattak ki tiszta és adalékolt YAB kristályokban. A fotorefraktív küszöbkoncentráció felett Mg-mal adalékolt LiNbO_3 kristályokban Raman spektrumokon alapuló módszert dolgoztak ki a Mg és a Li/Nb arány meghatározására. A kristály új potenciálmodelljének felhasználásával kiszámították a 2- és 3-vegyértékű adalékok beépülési energiáit. Meghatározták LiNbO_3 -ban a hidroxidion koncentrációt a fotorefraktív holografikus szórás irányfüggő szórási képeinek termikus sötétle bomlási idejéből. Kimutatták

a hidroxidionok jelenlétét és részletesen vizsgálták azok rezgési tulajdonságait a nemlineáris optikai alkalmazásokkal is rendelkező scheelite szerkezetű molibdátokban és volfrámátokban. A kálium-lítium niobát összetételének jellemzésére a kristályok UV abszorpciós éle, a hidroxidionok rezgési sávja, illetve a ferroelektromos Curie-hőmérséklet mérését együttesen alkalmazták. Optikai spektroszkópiai módszerekkel jellemezték a Ce és Ca adalékok szerepét a fényindukált töltésátadással járó fotorefraktív jelenségekben TGG kristályokban, elősegítve a nagy fényintenzitású magneto-optikai alkalmazások optimalizálását. Fotorefraktív és abszorpciós rácsot is megfigyeltek a Ca-mal adalékolt centroszimmetrikus GGG kristályban, és itt is kimutatták a töltésátviteli folyamatok jelentőségét. A neutrondetektorként és szövet-ekvivalens doziméterként alkalmazható $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ -ban EPR és optikai spektroszkópiai módszerekkel jellemezték a Cu aktivátor beépülését és elektronszerkezetét. Megmutatták, hogy a $\text{BaBr}_2\text{:Ce}$ a röntgenkép tárolási és szcintillációs funkció szempontjából is előnyös tulajdonságokkal rendelkezik és az alkalmazások céljára nanokristályos fázisként fluorid-bromid-cirkonát üvegkerámiába is beépíthető. Bebizonyították, hogy az erbiummal adalékolt TeO_2 üveg mintákba nagy energiájú nitrogén ionok implantálásával írt csatorna-hullámvezetők mind a látható, mind a közeli infravörös hullámhossztartományban működnek. Hasonló módszerrel készítették eltemetett csatorna-hullámvezetőket $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ kristályban is.

Résztvevők: 18 kutató, ebből 8 az SZFKI munkatársa

Anyagi ráfordítás: 44,5 M Ft költségvetési támogatás, 5,3 M Ft hazai szerződések.

Nemlineáris és kvantumoptika

Továbbfejlesztették a molekuladinamikai számításokhoz használt véges bázis és a diszkrét változós reprezentációkat. Kiterjesztették a Gauss-kvadratúra fogalmát általános, többváltozós bázisfüggvényekre. Végtelen, egydimenziós "qubitekből", illetve feles spinű részecskékből álló láncra meghatározták a maximális első szomszéd összefonódást transláció-invariáns állapotokra. Detektálási módszereket dolgoztak ki többrésű összefonódás meghatározására napjainkban kísérletileg vizsgált fizikai rendszerekben, például a négy-qubites szimmetrikus Dicke-állapotot megvalósító fotonrendszerben. Kvantumtrajektória módszeren alapuló közvetlen eljárást dolgoztak ki nyílt kvantumrendszerek időfejlesztő operátorának meghatározására. Megadták egy általános feltételét annak, hogy egy torzításmentes távoli állapot-előállítási séma feledékeny legyen. Mérések által indukált feltételes iteratív dinamika tulajdonságait tanulmányozták egy és két qubites rendszerekben, amelyek kvantuminformaticai protokollokban is használatosak. Kimutatták, hogy olyan kaotikus viselkedés jelenik meg, amely különbözik a szokásos kvantumkáosztól és pozitív Ljapunov exponenssel rendelkezik.

Résztvevők: 32 kutató, ebből 14 az SZFKI munkatársa.

Anyagi ráfordítás: 77,8 M Ft költségvetési támogatás, 16,4 M Ft hazai szerződések, 9,9 M Ft nemzetközi szerződések.

Az eredmények hasznosulása

Az elméleti (szilárdtestfizikai és optikai) kutatások nem hoznak ugyan közvetlen anyagi hasznot, de – elsősorban a graduális és posztgraduális képzés révén – jelentősen hozzájárulnak a legújabb eredmények hazai megismertetéséhez s ezzel az ország jövőbeli fejlődéséhez. A kísérleti kutatások mindegyike jövőbeli haszonnal kecsegtet; ezek közül

külön is kiemelhetők a röntgen diffrakciós kutatások, a nanokristályos anyagok előállítása és vizsgálata, a lézerek mérés technikai alkalmazásai valamint az optikai kristályok előállítása és vizsgálata. Perspektivikus hasznukat jelzi a számos EU-, ill. NKFP projektben való részvétel. Néhány intézeti fejlesztésű eszköz, ill. anyag (speciális lézertükrök, lézeres részecskeszámlálók, nemlineáris optikai kristályok, lágymágneses anyagok) már jelenleg is számos hazai területen felhasználásra került.

A kutatási eredmények gazdasági, ill. társadalmi hasznosulását különösen a Nemzeti Kutatási-Fejlesztési Programok segítik. Az eredmények gazdasági – társadalmi haszna ez esetben a felhasználóknál jelentkezik. Az intézet közvetett haszna az intézeti infrastruktúra fejlesztése.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Legfontosabb a KFKI utódintézetekkel való együttműködés. Az intézet tagja a Budapesti Neutron Központnak, melyet a telephelyen levő kutatóreaktor sokoldalú felhasználására hozott létre három akadémiai intézet. Az SZFKI koordinálja a *KFKI Kondenzált Anyag Kutató Központ (KFKI-CMRC)* keretében végzett kutatásokat, melyben további három intézet (MFA, AEKI és RMKI) e területen dolgozó kutatócsoportjai vesznek részt. Az intézet kapcsolatban áll más akadémiai és egyetemi intézetekkel is (pl. a BME és az ELTE Fizikai Intézetével, továbbá a Debreceni Egyetem, a Pécsi és a Szegedi Tudományegyetem fizikai intézeteivel). A Nemzeti Kutatási Fejlesztési Program keretében végzett munka során jó kapcsolat alakult ki több kis és közép vállalattal, valamint közintézménnyel (ANTSZ).

Nemzetközi kapcsolatok

Az SZFKI-nak a kutatás minden területén élő és szoros kapcsolatai vannak, főként európai és USA-beli egyetemekkel és kutatóintézetekkel. Ezt az is mutatja, hogy a *2006-ban megjelent publikációiknak több mint 65 %-ánál legalább az egyik társszerző külföldi*. A nemzetközi tudományos életben való részvételt jól jellemzi az is, hogy az SZFKI kutatói nemzetközi rendezvényeken 2006-ban *168 tudományos előadást tartottak és 88 posztert mutattak be*.

A kapcsolattartás formái: rövid idejű kölcsönös látogatások, hosszabb idejű külföldi munkavégzés illetve meghívás.

A rövid idejű látogatások fő célja egy-egy konkrét tudományos kérdés megvitatása, részvétel konferenciákon vagy egyéb tudományos tanácskozáson, illetve az aktuális nemzetközi projektekhez kapcsolódó megbeszélések.

A hosszabb idejű külföldi tartózkodások (munkavállalások illetve ösztöndíjak) a fiatal kutatók szakmai fejlődése, nemzetközi kapcsolataik építése szempontjából fontosak. Az intézet kutatóinak tartós (3 hónapot meghaladó) külföldi munkavállalása az előző évhez viszonyítva lényegesen csökkent. Míg 2005-ben 15 kutató töltött összesen 107 hónapot külföldön (közülük öten több mint egy évet), addig 2006-ban 8 kutató töltött összesen 75 hónapot (közülük hárman több mint egy évet) külföldön.

Az intézetben több mint egy hónapot dolgozó vendégkutatók száma alig változott, tartózkodásuk ideje kis mértékben nőtt (2005-ben: 5 vendégkutató, összesen 14 hónapot, 2006-ban: 6 vendégkutató 21 hónapot dolgozott az intézetben).

Az intézet kutatói számos mobilitás típusú tematikus nemzetközi együttműködésben vettek részt. Az MTA egyezményen alapuló kétoldalú tematikus együttműködések elsősorban az akadémiai intézettekkel való kapcsolattartást teszik lehetővé. Ezek keretében 10 európai és 2 ázsiai ország 17 *kutatócsoportjával* folytattak közös kutatásokat. A témák nagy része a korábbi közös munkák folytatása. Az intézet munkatársai a mágnesség és a folyadékkristályok kutatása terén elért eredményekről számoltak be azon a tanácskozáson, melyet az MTA – Indiai Tudományos Akadémia közötti egyezmény fennállásának 25 éves évfordulóján tartottak Indiában.

A Tét együttműködések elsősorban a külföldi egyetemekkel közösen folytatott kutatásokat segítették elő, de hasznosnak bizonyultak a felsőoktatási tevékenység szempontjából is. 2006-ban Tét megállapodások keretében 7 ország 9 *kutatócsoportjával* folytak közös kutatások. Az intézet kutatói több esetben “társ” témavezetőként vettek részt külföldi posztgraduális képzésében.

Felsőoktatás

Az SZFKI munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtestfizika és - kisebb mértékben - az optika témakörében (ELTE, BME, SZTE, PTE). Legszorosabb a kapcsolat az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME-n folyó mérnök-fizikus képzéssel. 2006-ban az intézet 38 kutatója (a kutatók egy harmada) vett részt az egyetemi oktatásban, rendes és speciális előadások tartása, továbbá szemináriumok és laborgyakorlatok vezetése formájában. Az intézetben 6 diplomamunka készült el, 1 akadémiai doktori és 11 doktori (Ph.D.) disszertációt védtek meg, 32 doktori ösztöndíjas dolgozott disszertációja elkészítésén.

Az intézet rendszeresen fogad külföldi egyetemi hallgatókat és doktoranduszokat rövidebb időre, különösen a folyadékkristályok, az optikai egykristályok és a neutronspektroszkópiai kutatások területén.

Az intézet regionális jelentőségű szerepet játszik a neutronfizikai kutatásokkal foglalkozó fiatal kutatók képzésében. 2006-ban az intézet Neutronspektroszkópiai Osztálya a dubnai Egyesített Magfizikai Intézet neutronfizikai laboratóriumával közösen szervezett iskolát az IBR-2 impulzusreaktornál folyó mérések megismertetése céljából. Az iskolán hat magyar intézmény 15 fiatal munkatársa vett részt. Egy másik rendezvényen (3rd Reverse Monte Carlo Conference) 44 résztvevő (köztük 28 külföldi vendég) tanácskozott a módszer alkalmazásának aktuális kérdéseiről.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatások anyagi fedezetét - az alapellátáson túlmenően - 2006-ban is lényegében az elnyert hazai és külföldi pályázatok biztosították.

Az intézet által 2006-ban elnyert hazai pályázatok száma és összege jelentősen csökkent az előző évekhez képest. Míg 2005-ben az intézet 5 NKFP és 4 GVOP pályázatot nyert el

összesen 284 Mft értékben (a pályázat teljes időtartamára), addig 2006-ban egyetlen új NKFP pályázatban volt eredményes, 25 Mft-os összeggel. Az OTKA pályázatoknál a csökkenés kisebb mértékű volt: az intézet kutatói a 2005. évben 14 pályázaton 152 Mft támogatást nyertek el, 2006-ban 12 pályázaton 119 Mft-ot. 2006-ban viszont új lehetőségként indult az Öveges József program, ennek keretében 5 kutató nyert el 11,7 Mft támogatást.

A nemzetközi pályázatok közül a legfontosabbak az EU keretprogramok által nyújtott lehetőségek voltak. A 2006-ban záródó 6. keretprogram első négy évében az intézet 6 projektre összesen 873 ezer€ támogatás kapott. Legnagyobb összeggel (413 ezer€) egy Marie-Curie akció szerepel, mely 3 év alatt 3 nemzetközi iskola megszervezését teszi lehetővé (*Interactive training and research in nonlinear science from physics to biology /PHYSBIO-2/*).

A közvetlen kutatási projektek közül kiemelt érdemel egy 41 tagból álló konzorcium keretében végzett integrált projekt (*Intermetallic materials processing in relation to earth and space solidification /IMPRESS/ 131 ezer€*). Az intézeti kutatócsoport sokoldalúan alkalmazható elméleti eljárást dolgozott ki a göcképződés és a növekedés kvantitatív leírására, a kialakuló mikroszerkezet jellemzésére. Több cikkük ábrája kerül a témával foglalkozó nemzetközi folyóirat címlapjára és a témavezetőnek állandó professzori állást ajánlott fel egy angol egyetem. – Az NMI3 elnevezésű projekt (*Integrated infrastructure initiative for neutron scattering and muon spectroscopy*, 250 ezer€ támogatás) keretében különleges detektorok és neutronoptikai eszközök fejlesztése valósult meg és több felhasználó részére végeztek méréseket. Az összességében 21 M€-s projekt féldíós teljesítményét (a magyar hozzájárulást is beleértve) az EU Bizottság „kimagaslóan eredményesnek” ítélte.

2006-ban - nagy részben az elnöki különkeretből kapott többlettámogatásnak köszönhetően - az intézet további 4 projektre összesen 700 ezer€ további támogatáshoz jutott az EU 6. keretprogramban. Közülük különösen fontos két nanotechnológiai projekt (*Towards new generation of neuro-implantable devices /NEURONANO/* összesen 197 ezer€) és a *Supramolecular hierarchical self-assembly of organic molecules onto surfaces towards bottom-up nanodevices: an host-driven action /PRAIRIES/ 155 ezer€*) projekt, mivel ezen a területen különösen éles verseny folyik világszerte. Úgyszintén jelentős eredménynek számít egy plazmafizikai témájú pályázat elnyerése, mely összesen 285 ezer€ támogatást eredményezett (*Analytical glow discharge network /GLADNET/*). Az utóbbi 3 projektben a munka 2006 második felében indult.

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

1. Legeza Ö, Sólyom J: Two-site entropy and quantum phase transitions in low-dimensional models, *Phys Rev Lett*, 96, 116401/1–4 (2006)
2. Läuchli A, Mila F, Penc K: Quadrupolar phases of the $S=1$ bilinear-biquadratic Heisenberg model on the triangular lattice, *Phys Rev Lett*, 97, 087205/1–4 (2006)
3. Juhász R, Lin Y-C, Iglói F: Strong Griffiths singularities in random systems and their relation to extreme value statistics, *Phys Rev B*, 73, 224206/1-10 (2006)

4. Ropo M, Kokko K, Vitos L, Kollár J, Johansson B: The chemical potential in surface segregation calculations: AgPd alloys, *Surf Sci*, 600, 904-913 (2006)
5. Kaptás D, Sváb E, Somogyvári Z, André G, Kiss LF, Balogh J, Bujdosó L, Kemény T, Vincze I: Incommensurate antiferromagnetism in FeAl₂: magnetic, Mössbauer and neutron diffraction measurements, *Phys Rev B*, 73, 012401/1-4 (2006)
6. Csontos M, Balogh J, Kaptás D, Kiss LF, Kovács A, Mihály G: Magnetic and transport properties of Fe-Ag granular multilayers, *Phys Rev B*, 73, 184412/1-9 (2006)
7. Itkis ME, Borondics F, Yu A, Haddon RC: Bolometric infrared photoresponse of suspended single-walled carbon nanotube films, *Science*, 312, 413-416 (2006)
8. Harden J, Mbanga B, Éber N, Fodor-Csorba K, Sprunt S, Gleeson J T, Jákli A: Giant flexoelectricity of bent-core nematic liquid crystals, *Phys Rev Lett*, 97, 157802/1-4 (2006)
9. Buka Á, Éber N, Pesch W, Kramer L: Convective patterns in liquid crystals driven by electric field, In: *Self-Assembly, Pattern Formation and Growth Phenomena in Nano-Systems*, Eds.: Golovin AA, Nepomnyashchy AA, NATO Science Series II, Mathematica, Physics and Chemistry, Vol. 218, Springer, Dordrecht, pp. 55-82 (2006)
10. Matus P, Alloul H, Kriza G, Brouet V, Singer PM, S. Garaj S, Forró L: Influence on local C₆₀ orientation on the electronic properties of A₃C₆₀ compounds, *Phys Rev B*, 74, 214509/1-11 (2006)
11. Péter L, Rolik Z, Kiss LF, Tóth J, Weihnacht V, Schneider CM, Bakonyi I: Temperature dependence of the giant magnetoresistance and magnetic properties in electrodeposited Co-Cu/Cu multilayers: the role of superparamagnetic regions, *Phys Rev B*, 73, 174410/1-10 (2006)
12. Tompa P, Bánki P, Bokor M, Kamasa P, Kovács D, Lasanda G, Tompa K: Protein-water and protein-buffer interactions in the aqueous solution of an intrinsically unstructured plant dehydrin: NMR intensity and DSC aspects, *Biophysical Journal*, 91, 2243-2249 (2006)
13. Zamponi M, Wischnewski A, Monkenbusch M, Willner L, Richter D, Likhtman AE, Kali G, Farago B: Molecular observation of constraint release in polymer melts, *Phys Rev Letters*, 96, 238302/1-4 (2006)
14. Cser L, Török Gy, Krexner G, Markó M, Sharkov I: Direct observation of local distortion of crystal lattice with picometer accuracy using atomic resolution neutron holography, *Phys Rev Letters*, 97, 255501/1-4 (2006)
15. Pusztai L, McGreevy RL: On the structure of simple molecular liquids SbCl₃ and WCl₆, *J Chem Phys*, 125, 044508/1-7 (2006)

16. Irvine SE, Dombi P, Farkas Gy, Elezzabi AZ: Influence of the carrier-envelope phase of few-cycle pulses on ponderomotive surface-plasmon electron acceleration, *Phys Rev Lett*, 97, 146801 (2006)
17. Donkó Z, Goree J, Hartmann P, Kutasi K: Shear viscosity and shear thinning in two-dimensional Yukawa liquids, *Phys Rev Lett*, 96, 145003/1-4 (2006)
18. Gustavsson T, Bányász Á, Lazzarotto E, Markovitsi D, Scalmani G, Frisch MJ, Barone V, Improta R: Singlet excited-state behavior of uracil and thymine in aqueous solution: A combined experimental and computational study of 11 uracil derivatives, *J Am Chem. Soc*, 128, 607-619 (2006)
19. Zhang Y, Guilbert L, Bourson P, Polgár K, Fontana MD: Characterization of short range heterogeneities in sub-congruent lithium niobate by micro-Raman spectroscopy, *J Phys Condens Matter*, 18, 957-963 (2006)
20. Dachraoui H, Rupp RA, Lengyel K, Ellabban MA, Fally M, Corradi G, Kovács L, Ackermann L: Photochromism of doped terbium gallium garnet, *Phys Rev B*, 74, 144104/1-11 (2006)
21. Ellabban MA, Fally M, Rupp RA, Kovács L: Light-induced phase and amplitude gratings in centrosymmetric gadolinium gallium garnet doped with calcium, *Optics Express*, 14, 593-602 (2006)
22. Kárpáti A, Ádám P, Kis Z, Janszky J: Stochastic unraveling of the time-evolution operator of open quantum systems, *Europhys Lett*, 75, 209-215 (2006)
23. Kiss T, Jex I, Alber G, Vymetal S: Complex chaos in the conditional dynamics of qubits, *Phys Rev A*, 74, 040301R/1-4 (2006)

VI. A kutatóhely 2006. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Átlaglétszám ¹ :	165	Ebből kutató ² :	115
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:			47
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma:			221
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma ³ :			212
<i>Ebből</i> idegen nyelvű külföldi folyóiratban:	183	idegen nyelvű hazai folyóiratban:	0
nemzetközi együttműködés keretében:	124	SCJ által regisztrált folyóiratban:	179
összesített impakt faktor:	435,44	összes hivatkozás száma ⁴ :	2480
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:			2177
Megjelent könyv <i>magyarul</i> :	0	könyvfejezet:	8
<i>idegen</i> nyelven könyv:	0	könyvfejezet:	7
		jegyzet:	1
		jegyzet:	0
Megvédett PhD értekezés:	11	Megvédett MTA doktori értekezés ⁵ :	1
Bejelentett találmányok száma:	1	Megadott szabadalmak száma:	0
<i>ebből</i> külföldön:	0	<i>ebből</i> külföldön:	0
Értékesített szabadalmak száma:			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma ⁶ :	168	posztterek száma:	88
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma ⁷ :			38
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	25	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	9
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege ⁸ :			839 MFt
Beruházási támogatás:	0 MFt	Fiatal kutatói álláshelyek száma ⁹ :	4
Az év folyamán művelt OTKA témák száma:			45
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			124,1 MFt
Az év folyamán művelt NKTH pályázat témáinak száma:			12
NKFP:	5	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	69,7 MFt
Egyéb:	7	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	57,8 MFt
Az év folyamán művelt NFT témák száma ¹⁰ :			4
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			12,1 MFt
Külföldi vagy nemzetközi forrásból művelt témák száma ¹¹ :			12
EU forrásból:	8	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	116,2 MFt
Egyéb:	4	A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:	21,9 MFt
Egyéb pályázatok keretében művelt témák száma ¹² :			3
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			5,3 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében művelt témák száma:			10
A tárgyévre vonatkozó szerződésállomány:			28,2 MFt
Külső alvállalkozókkal kötött szerződésállomány ¹³ :			3,6 MFt

THE UNIVERSITY OF CHICAGO PRESS