A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA KUTATÓHELYEINEK 2009. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

I.

Matematika és természettudományok

Budapest
2010

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

Banczerowski Januszné főosztályvezető

Hegedűs Krisztina
Herczeg György
Horváth Csaba
Kern Boglárka
Redler László

Idei Miklós

TARTALOMJEGYZÉK

A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések 5

Matematikai és természettudományi kutatóintézetek

Atommagkutató Intézet 8
Földrajztudományi Kutatóintézet 24
Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet 32
Geokémiai Kutatóintézet 42
Izotópkutató Intézet 51
Kémiai Kutatóközpont összesen 60
Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet 63
Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet 74
Kémiai Kutatóközpont Nanokémiai és Katalízis Intézet 84
Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézet 95
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet 106
KFKI Atomenergia Kutatóintézet 116
KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet 127
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet 143
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet 156
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet 168
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet 188

Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok

BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport 203
BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport 208
BME Fémtechnológiai Kutatócsoport 212
BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport 215
BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport 219
BME Irányítástechnológiai Kutatóintézet 223
BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport 227
BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport 231
BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport 235
BME Sztochasztika Kutatócsoport 239
BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport 243
DE Homogén Katalízis Kutatócsoport 247
DE Számelméleti Kutatócsoport 251
DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport 255
ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport 259
ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport 263
ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport 267

ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport 271
ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport 275
ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport 279
ME Anyagtudományi Kutatócsoport 283
ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport 287
MTM Paleontológiai Kutatócsoport 291
PE Levegőkémiai Kutatócsoport 296
PPKE-SE Neurobiológiai és Infobionikai Plaszticitás Kutatócsoport 300
SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport 304
SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport 309
SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport 313
SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport 317
SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport 321

SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag) 325
SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag) 329

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

A legtöbb táblázatban szereplő adatot az intézetek vagy a csoportok adták meg. Az intézetek pénzügyi és létszámadatait a Pénzügyi Főosztály adta meg a pénzügyi beszámolók alapján. Többéves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg lett feltüntetve forintban.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

[1] Az éves gazdasági beszámolóban szereplő átlagos statisztikai állományi létszám.

[2] A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2009. évi tényleges átlaglétszáma. Az átlaglétszámba beletartoznak a részmunkaidőben foglalkoztatottak is. Ezekben az esetekben a részmunkaidősök létszáma a ledolgozott órák alapján lett teljes munkaidős létszámra átszámítva.

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

[4] Mindazon publikációk száma, amelyeket az illető kutatóhely második indexszel megjelölt helyen számbavett szerzője jelentetett meg (tehát azok és csak azok cikkei, akik 2009-ben az intézet állományában voltak). A publikációkba beletartoznak: a tudományos és ismeret-terjesztő munkák, tanulmány, cikk, könyv, könyvfejezet, jegyzet, atlasz, tematikus térkép.

[5] Mindazon tudományos publikációk száma, amelyeket az illető kutatóhely második indexszel megjelölt helyen számbavett szerzője jelentetett meg, és amelyek megfelelnek a TPA (MTMT) ajánlásában megadott feltételeknek és a publikáción a szerző kutatóhelyeként szerepel a kutatóhely neve.

[6] A folyóiratok 2008. évi impakt faktorait használtuk.

[7] A tárgyévben a kutatóhely állományában lévő kutatóknak az adott kutatóhelyen vagy jogelődjében az utolsó 15 évben (1994–2009 között) született cikkeire való 2009-ben történt hivatkozások száma (az egyszerű hivatkozás, valamint egy tudományos munkáról szóló recenzió tartozik ide), az MTA TPA (MTMT) számára leadott listák alapján. A bibliográfiai adatként szereplő művek száma itt nem szerepel.

[8] Ide csak a tudományos könyveket vagy atlaszokat soroljuk.

[9] A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

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

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

[12] Külön az előadások és külön a poszterek száma, abban az esetben is, ha a konferencia kiadványban nem jelentek meg, de dokumentált formában ellenőrizhetők.

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

[14] Mindazon személyek száma, akik hazai felsőoktatási intézményben rendszeresen (nem feltétlen heti rendszerességgel), tantervi keretek között oktatnak. A külföldi egyetem számára végzett oktatási tevékenységet, a felkérésre tartott előadásokat és a szakdolgozat, diplomamunka, PhD-téma vezetését a beszámoló III., illetve IV. pontjában találjuk. Az adatok a 2008/2009-es tanév második és a 2009/2010-es tanév elő szemeszterére vonatkoznak.

[15] A kutatóhely állományában lévő kutatók által felsőfokú oktatási intézményben tartott, hivatalosan bejegyzett reguláris és speciális előadások valamint gyakorlatok 2008/2009-es tanév *második* és a 2009/2010-es tanév *első* szemeszteri együttes óraszáma. Itt nem tüntettük fel az intézményben TDK, diploma illetve PhD-hallgatók által eltöltött, vagy rájuk fordított óraszámot.

[16] A 2009 évben a kutatóhely részére a Magyar Államkincstár által kiutalt összes költségvetési támogatást csökkentettük a következő tételekkel:
– központi beruházási támogatás,
– felújítási támogatás,
– más tárcáktól bármilyen céllal átadott támogatás,
– pályázati programok támogatása
összegével.

[17] 2009-ben az MTA keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyek száma.

[18] A teljes saját bevétel megegyezik a pályázati, szabadalmi és a nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevételek összegével.

[19] Az utolsó három év átlaga.

[20] Az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében (pl. GOP) elnyert támogatások.

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZETEK

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZET
4026 Debrecen, Bem tér 18/c, 4001 Debrecen, Pf. 51.
Telefon: 06-52-509200, Fax: 06-52-416181
e-mail: director@atomki.hu; honlap: http://www.atomki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

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

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

Kvantummechanika

Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásait eredményező hatékony módszert kiterjesztették a helyfüggő effektív tömeggel jellemezhető problémákra. Szemben az e területen eddig született egzaktul megoldható feladatokkal a módszer garantálja, hogy az effektív tömegnek sem zérushelyei, sem szingularitásai nincsenek, továbbá speciális esetként tartalmazza a konstans tömeg esetét is. Példaként egy olyan potenciált tekintettek, amely magán viseli mind a harmonikus oszcillátor, mind pedig a Morse-potenciál jellegzetességeit, és egzakt formában megadták az energia-sajátértékeit és a megfelelő normált hullámfüggvényeket.

Ismeretes, hogy egy maximálisan összefont állapotú fizikai rendszer két távoli részén két-kimenetelű méréseket végrehajtva a rendszer bármely kvantumkorrelációja reprodukálható klasszikus modell keretein belül, ha a két távoli alrendszer között megengedünk 2 bit kommunikációt. Az intézet kutatói megmutatták, hogy ezen 2 bit szükséges is.

Bevezették a korrelációk zárt halmaza fogalmat. Információelméleti elveken alapuló, de tágabb értelemben véve bármely konzisztens fizikai elméletnek bizonyos lokális műveletekre nézve zártnak kell maradnia. Korrelációk ezen zárt halmazát vizsgálva megállapítható, hogy mely információelméleti elvek azonosak (ekvivalensek) és melyek különböznek ténylegesen egymástól. Ezen módszer segítségével leszűkíthető a szóba jöhető poszt-kvantummechanikai alternatív fizikai elméletek száma.

Végezzünk méréseket egy fizikai rendszer két, egymástól elváló részén. Tekintsük azt a halmazt, amelyet a részrendszereken végrehajtott mérések kimeneteleinek együttes valószínűségei alkotnak. Klasszikus fizikai rendszer esetén ez a halmaz egy sík lapokkal határolt konvex alakzat. A határoló lapokat az úgynevezett szoros Bell-egyenlőtlenségek jelölik ki. A kvantumelmélet szerint a Bell-egyenlőtlenségek sérülhetnek, ily módon kvantumrendszereken történő mérésekkel kaphatunk olyan pontokat is, amelyek a klasszikus halmazon kívül esnek. Ha bármilyen kvantumrendszert megengedünk, a teljes halmaz, az úgynevezett kvantumtest szintén egy konvex alakzat, amely nagyobb, mint a klasszikus

halmaz, és magában foglalja azt. Az intézet kutatói megmutatták, hogy az általános várakozásokkal szemben arra a kvantumtestre, amelyet úgy kapunk, hogy véges számú állapottal rendelkező kvantumrendszerekre korlátozzuk magunkat, ezen állítások nem igazak, azaz a halmaz nem konvex, és nem tartalmazza a teljes klasszikus halmazt.

Részecskefizika

Az Atomki munkatársai a korábbi években a CMS müondetektorainak pozicionálásával kapcsolatban jelentős fejlesztést végeztek el. Az elmúlt évben is alapvető szerepet játszottak; üzemeltették a kiépített rendszert és további fejlesztésekben vettek részt.

A CERN-CMS együttműködés keretében folytatták a második kvantumszíndinamikai sugárzási korrekciók számítására alkalmas általános módszer kifejlesztését. Sikerült megadni az egyszeresen feloldatlan partonsugárzást leíró közelítő mátrixelemek integráljainak analitikus alakját.

Magfizika

Elsőként figyeltek meg rezonanciákat az ^{232}U hasadási valószínűségében a 4,8 MeV alatti gerjesztési energiatartományban. A megfigyelt hasadási rezonanciákat olyan rotációs sávokkal írták le, melyek közös tehetetlenségi nyomatékkal rendelkeznek, és a sávok tagjainak relatív intenzitása állandó. Az illesztés során kapott rotációs paraméter értéke: $\hbar^2 / 2\theta$ = (1,96 ± 0,11) keV, amely a hiperdeformált magalakra jellemző rotációsparaméter-értéknek felel meg. A hasadványok szögeloszlásának mérése lehetővé tette az egyes rotációs sávokhoz tartozó K-érték meghatározását.

A neutronban gazdag szén atommagok valencianeutronjai gyengén kötöttek, és glória-szerűen veszik körül a mag törzsét. Ez az elrendezés szokatlan magfizikai jelenségek létrejöttét teszi lehetővé. A nehéz szén atommagok kvadrupólus viselkedésének tanulmányozására a ^{20}C atommagot ólom és folyékony hidrogén céltárgyon szórátták a japán nemzeti laboratóriumban, a RIKEN-ben. Megállapították, hogy a Coulomb-gerjesztés hatáskeresztmetszete anomálisan kicsi a nukleáris gerjesztéséhez képest. Ezt a jelenséget csak úgy lehetett értelmezni, ha feltételezték, hogy a valencianeutronok kvadrupólus mozgása sokkal gyengébben csatolódik a törzs mozgásához, mint ahogy az a stabilitási sáv közelében megszokott.

Korábbi vizsgálataikban megmutatták, hogy a könnyű, erősen neutrongazdag atommagokban a neutronegyrészecske-energiák a protonszámmal erősen változnak, ami pl. az N=8 és az N=20 héjzáródások megszűnéséhez vezet. Azért, hogy információt kapjanak az egyrészecske-állapotok más magtartományokban mutatott viselkedéséről, az N=82 héjzáródás erősségét vizsgálták a ^{131}In hosszú élettartamú állapotainak a tanulmányozásával (GSI, Németország, RISING együttműködés). Ebben az atommagban meghatározták a $17/2^+$ impulzusmomentumú állapot energiáját, aminek héjmodell-analízisével kimutatták, hogy ha 2 protont elveszünk a ^{132}Sn atommagból, akkor az N=82 héjzáródás erőssége 600 keV-vel csökken. Ez az érték arra enged következtetni, hogy az N=82 héjzáródás Z=40-nél, a ^{122}Zr atommagban megszűnik.

A páratlan neutronszámú ^{127}Ce és ^{129}Ce atommagok forgási sávjait vizsgálták az Euroball és Eurogam γ-detektor-rendszerrel. Számos új forgási sávot találtak a két izotópban, a már ismerteket pedig nagyobb spinértékekig terjesztették ki. A kísérleti eredményeket forgatott Woods-Saxon-potenciált használó modellszámolásokkal összevetve az új sávokra egyrészecske-konfigurációkat határoztak meg. Azt találták, hogy a könnyű, páratlan neutronszámú cérium izotópok negatív paritású forgási sávjai rendellenesen nagy szignatúra-

felhasadást mutatnak, ami az atommag alakjának a tengelyszimmetriától való eltérése esetén várható. Ezen eltérés oka valószínűleg az, hogy a γ-puha magtörzset a $h_{11/2}$-alhéj közepéről származó nagy impulzusmomentumú neutronok polarizálják. Ezek az eredmények újabb bizonyítékot szolgáltatnak a statikus háromtengelyű atommagalakok létezésére.

A detektálási technika fejlesztési területére eső vizsgálataik során meghatározták egy 2”x2” méretű $LaBr_3$:Ce γ-detektor teljesenergia-hatásfokát és energiafeloldását a 700 keV – 17,6 MeV-es γ-energiatartományban. A detektor abszolút hatásfokának meghatározására γ-forrásokat és az intézet 5 MV-os Van de Graaff gyorsítójával kiváltott (p,γ)-reakciókat használtak. A kristály kísérletileg meghatározott relatív energiafeloldása a más típusú szcintillációs detektoroké közül a legjobbnak bizonyult.

A könnyű töltött részecskék detektálására szolgáló, Atomkiban kifejlesztett DIAMANT segéddetektort sikeresen alkalmazták az EXOGAM (GANIL, Franciaország) és az AFRODITE (iThemba LABS, Dél-Afrikai Köztársaság) gamma-spektrométerekkel végzett mérésekben. A detektorrendszer segítségével a protonstabilitási vonal közelébe eső egyes A~130 atommagokra jósolt nagy alapállapoti deformációt kívánják kimutatni.

Új módszert, tömegszeparátort alkalmazva meghatározták az ősrobbanás és a csillagok energiatermelése szempontjából fontos $^{3}He(\alpha,\gamma)^{7}Be$ reakció hatáskeresztmetszetét széles energiatartományban.

Alfa-indukált magreakciók hatáskeresztmetszetét határozták meg a ^{113}In magon, és levonták az asztrofizikai konzekvenciákat.

A ^{89}Y magon végzett nagy pontosságú rugalmas alfa-szórási mérésekből az alfa−mag optikai potenciálra, illetve annak neutronszám-függésére vontak le következtetéseket.

A ^{74}As atommag bomlásának széles hőmérséklettartományban történő vizsgálatával cáfolták azt a jóslatot, hogy a bomlás felezési ideje függhet a hőmérséklettől.

Nagy pontossággal meghatározták a ^{154}Tb mag m1 izomer állapotának felezési idejét.

Megmérték a ^{12}Be első gerjesztett állapotának élettartamát, és megerősítették az N=8-as mágikusság megszűnését a stabilitástól távol.

A ^{20}O tükörmagjának, a ^{20}Mg izotópnak a vizsgálatával megerősítették a ^{20}O-nál kimutatott valencianeutron-lecsatolódás jelenségét.

Az ^{36}Ar atommaggal kapcsolatos elméleti klasztermodell-vizsgálataik azt mutatták, hogy ebben a magban hiperdeformált sávok is kialakulhatnak, és az ezekhez tartozó állapotok legkönnyebben a $^{24}Mg + ^{12}C$ és $^{20}Ne + ^{16}O$ reakciók segítségével gerjeszthetők. Intézeten kívüli független kísérleti vizsgálatok a megjelölt reakciókat használva megerősítették a hiperdeformált sáv létezését az ^{36}Ar-ban.

Az intézet kutatóinak meghatározó szerepük volt a komplex energiájú Gamow-állapotokat tartalmazó egyrészecske-bázis (Berggren-reprezentáció) fejlesztésében. 2009-ben a korábbi évtizedek eredményeit is összegző cikket jelentettek meg. Ez a munka összefoglalja a Berggren-reprezentációval kapcsolatos ismereteket és a héjmodellben történő alkalmazásokat, amelyek a különféle típusú óriásrezonanciáktól az egzotikus könnyű atommagok szerkezetének számolásáig sok magfizikai problémára kiterjednek.

Protonnyalábokkal Mo, Er, Tm, Hf, Zr és Cd céltárgyakon, deuteronnyalábokkal Hf, Co, Fe és Zr céltárgyakon, alfa-részecskékkel Ho és Hf céltárgyakon, míg ^{3}He-részecskékkel Zn, Pd, Cd, Ta és Pt céltárgyakon előidézett reakciók gerjesztési függvényét mérték és számították ki

elméletileg a NAÜ orvosi és ipari alkalmazások szempontjából nagy jelentőségű nukleáris adatbázisának bővítése érdekében.

Atomfizika

Víz céltárgyon szóratott pozitronok energiaeloszlását vizsgálták 100 eV és 153 eV ütközési energiákon. Koincidenciavizsgálattal állapították meg, hogy egy adott pozitronszóródás során a visszamaradt rendszer H_2O^+ ion-e, vagy az OH^+ és H^+ fragmentumok valamelyike. Az energialeoszlás maximális értéke OH^+ és H^+ esetén 5-10-szer kisebb volt, mint H_2O^+ esetében.

Kis molekulák (H_2O, H_2S, CH_4, C_6H_6) nagy töltésű ionokkal történő besugárzásánál az elektronbefogás és a molekula azt követő széttörésének folyamatát vizsgálták. A méréssorozat három jelentős megfigyelést eredményezett: az azonos sebességű és azonos elektronszerkezetű, de kismértékben eltérő töltésű lövedékionok (N^{6+}, O^{7+}) minden céltárgy esetén jelentősen eltérő domináns fragmentációs csatornákat eredményeztek; a nagyon hasonló szerkezetű H_2O és H_2S molekulák esetén az egymásnak megfeleltethető fragmentációs utak ugyancsak jelentősen eltérő valószínűséggel valósultak meg; a vízmolekula fragmentációjában olyan anomális fragmentum-szögeloszlásokat találtak, amelyeket elméletileg egyelőre nem tudtak értelmezni. Az eredmények elméleti értelmezése nemzetközi együttműködésben folyik.

Egy új méréssorozatot indítottak a többszörös befogással létrehozott, legalább kétszeresen gerjesztett semleges molekulák és molekulaionok állapotainak vizsgálatára az autoionoizációs folyamatban kilépő elektronok mérésével. Az első eredmények, némi meglepetésre, nagy negatívion-hozamokat mutattak, melyek az alkalmazott mérési módszer mellett megjelennek az elektronspektrumokban. Ennek a megfigyelésnek nagy jelentősége lehet sugárkárosodási folyamatok vizsgálatában.

A DORIS III (Hamburg, Németország) szinkrotronon végzett mérések eredményei igazolták a korábban a MAX-II-n (Lund, Svédország) megfigyelt bal-jobb aszimmetria létezését a fotoelektronok szögeloszlásában. Méréseiket az előzőtől teljesen eltérő berendezéseken végezték ugyan, de a kísérleti aszimmetriaparaméterek nagyon jó egyezést mutattak egymással. Ebből arra következtettek, hogy a fotoelektronok szögeloszlásának paritássértő viselkedése magából a foton−atom kölcsönhatásból ered.

Kr 4p fotoelektronok szögeloszlásának a DORIS III (Hamburg, Németország) szinkrotronon végzett méréséből kimutatták, hogy a Kr 3d-héj rezonáns gerjesztése jelentősen módosítja a 4p fotoelektronok szögeloszlását. A dipólkölcsönhatás mellett jelentős járulék származik a magasabb multipólusokból is (elektromos kvadrupól, mágneses dipól). Továbbá, a kísérleti és az általuk kidolgozott elméleti modell adatainak összehasonlítása egyértelműen mutatja, hogy a függetlenrészecske-modell nem alkalmas a direkt és a nem direkt ionizációs folyamatok leírására.

Félklasszikus leírásban kiszámították azon legerjesztődés és annihiláció hatáskereszt-metszeteit, melyek a kezdetben nagy pályaimpulzusnyomatékú antiprotonnak egy nehéz részecskével történő ütközésekor következnek be. Kimutatták a dipol és sudden ütközési mechanizmusok jelentőségét kis és nagy bombázó energiáknál, és főkvantumszám szerinti skálázási szabályokat állapítottak meg.

Igen kis energiájú antiprotonok és He-atomok ütközésében elsőként határozták meg kísérletileg a kétszeres ionizációs hatáskeresztmetszeteket. Az antiproton energiája 3-tól 25 keV-es energiatartományba esett.

Pozitrónium ionizációját vizsgálták klasszikus, lineárisan polarizált lézertérben klasszikus és kvantummechanikai közelítéseket alkalmazva. Számításaikat az időfüggő Schrödinger egyenlet egzakt megoldásával kapott eredményekkel is összevetették.

A 100 keV He^{2+} - He ütközésében vizsgálták a két elektron emisszióját. A folytonosan torzított hullámú közelítésben elvégzett számításaik azt mutatták, hogy a kilökődött elektronok energia- és szögeloszlása alakjának kialakításában a végállapoti elektronkorreláció játssza a meghatározó szerepet. Részletesen vizsgálták a lövedékion folytonos energiájú állapotaiba történő elektronbefogódás folyamatát is. Ez az ún. kételektronos cusp, amelyet korábban kísérletileg mutattak ki az intézetben a He^0 – He ütközésben. A számítási eredményeik összhangban vannak a megfigyelések főbb adataival.

Kifejlesztették a helyzetérzékeny MCP detektorral történő kétdimenziós szögeloszlás-mérések módszerét a nanométeres kapillárisokból kilépő ultraibolya fotonokra és néhány keV energiájú ionokra és atomokra. A részecskék azonosítását is lehetővé tevő módszerben a töltésállapotok szétválasztására elektrosztatikus eltérítést alkalmaztak, a semleges részecskék detektálásában és azonosításában pedig az amplitúdó-eloszlások különbözőségét használták ki.

Szilárdtest- és felületfizika, anyagtudomány és statisztikus fizika

Polietilén tereftalát és polikarbonát anyagú szigetelő kapillárismintákban vizsgálták az ionterelődés mechanizmusát nemzetközi együttműködésben: Debrecenben az Atomki elektron-ciklotronrezonanciás ionforrásánál és a hollandiai Groningenben a KVI Zernike LEIF laboratóriumában. Részleteiben tanulmányozták a kapilláris belsejében kialakuló töltésszigetek egymást követő felépülését, valamint az azt kísérő, az ionok egy részénél bekövetkező semlegesítődés folyamatát. Az utóbbi vizsgálatokat Debrecenben végezték 3 keV energiájú Ar^{7+} nyalábbal. A kapillárisminták 10-50 μm vastagságú fóliákból készültek ionnyom-maratásos technikával 50, 200 és 400 nm kapillárisátmérővel. A különböző töltésállapotú ionokat elektromos térrel szétválasztották, majd intenzitásukat helyzetérzékeny MCP detektorral mérve azt tapasztalták, hogy a kapillárisokból kilépő ionok többsége megőrizte eredeti töltésállapotát, de néhány százalékban teljesen semlegesítődtek. Az alacsonyabb töltésállapotú ionok száma az észlelési küszöb alatt volt. A különböző dőlésszögekben elhelyezett kapillárismintákon való áthaladás után a helyzetérzékeny detektorral megmérték az ionok és az azokból keletkezett atomok szögszórását is az idő függvényében. Az ionok átlagos eltérülési szöge, a korábbi kísérleteknek megfelelően, erősen oszcilláló viselkedést mutat, míg az atomokra ez alig volt jellemző. Az atomok intenzitása viszont erősen dinamikus viselkedést mutatott: kis értékről indulva az ionok intenzitásánál lényegesen gyorsabban növekedett. Ezek a megfigyelések a szigetelő kapillárisokban történő semlegesítődés folyamatának új modelljéhez vezettek, mely az ionterelődés alapjelenségének megértését is nagyban előmozdíthatja.

Monte Carlo szimuláció segítségével elsőként mutatták meg, hogy az elektronok szigetelő nano-kapillárison történő átvezetése teljes mértékben eltér a nagytöltésű ionok esetéhez képest. Míg ionok esetében a kapilláris belső felületének feltöltődése miatt az ionok a felülettel történő közvetlen ütközés nélkül jutnak át, az elektronok átvezetésében jelentős szerepet kap a kapillárisfelülettel történő közvetlen kölcsönhatás, mely rugalmas és rugalmatlan ütközések sorozatában jelenik meg.

Szilárd Si-mintáról visszaszóródott elektronok energiaveszteségi spektrumainak szimulációja során az interferenciaeffektusok elhanyagolásából, illetve a rugalmas szórási folyamatok pontatlan figyelembevételéből adódó hiba nagyságára adtak becslést. A különböző primer

energiájú (800 eV és 2000 eV) elektronok és szórási geometriai konfigurációk esetében az elektronok energiaveszteségi folyamatainak leírására különböző elméleti modelleket alkalmaztak. A számított adatokat összehasonlítva a meglévő kísérleti eredményekkel megmutatták, hogy az interferenciaeffektusok elhanyagolásából származó hiba jelentősen kisebb, mint a rugalmas szórás hatásának pontatlan figyelembevételéből adódó hiba, még viszonylag kis (800 eV) primer elektron energiánál is. A minta dielektromos függvényének és a rugalmas elektronszórási hatáskeresztmetszeteknek mint bemenő paramétereknek a felhasználásával számított eredmények sokkal jobban egyeznek a kísérleti adatokkal, mint a korábbi munkák eredményei.

Rugalmascsúcs-elektronspektroszkópia és az elektronszórás Monte Carlo szimulációja segítségével a 4−8 keV primer elektronenergia-tartományban meghatározták a rugalmatlan elektronszórás közepes szabad úthosszát (IMFP) 3d átmeneti fémekre (Mn, Cr, Co és Fe) és különböző összetételű NiFe ötvözetekre. A Co kivételével a 3d átmeneti fémekre meghatározott IMFP értékek jól egyeznek a közelítő formulákból kapott, illetve az optikai adatokból számított értékekkel. Ezek az elektrontranszport-paraméterek szükségesek a kemény röntgensugárzással keltett fotoelektron- és Auger-spektrumok rugalmatlan elektronszórási hátterének pontos figyelembevételéhez.

Különböző összetételű NiFe ötvözetekre meghatározták a kemény röntgensugárzással keltett elektronok spektrumaiból az ötvözet-fém Auger-paraméter-eltolódásokat, és sűrűségfunkcionál-elmélet segítségével (a Wien 2K programcsomagot használva) kiszámították a komponensek közötti töltésátadást. A Fe komponensre vonatkozóan az átadott töltések és a megfelelő ötvözet-fém Auger-paraméter eltolódások között lineáris összefüggést találtak, amely lehetővé teszi ismert összetételű ötvözetek esetében az ötvözetek stabilitását meghatározó átadott töltések nagyságának becslését az Auger-paraméterek analíziséből.

3d átmeneti fémek (Cu, Ni, Mn, Co, Cr, Fe) elektronállapotainak sűrűségeit határozták meg a sűrűségfunkcionál-elmélet és a Wien 2K programcsomag segítségével, alapállapotban és 1s héj vakancia jelenlétében. A betöltött és a be nem töltött állapotok sűrűségeiből meghatározták az együttes állapotsűrűségeket, valamint a fémek kísérleti REELS spektrumaiból a Werner által javasolt modell és algoritmus alkalmazásával a fémek elektron-energiaveszteségi függvényeit származtatták. A meghatározott eloszlások szükségesek az adott fémek törzs-fotoelektron spektrumvonalainak alakjában tükröződő elektronszerkezeti hatások pontos leírásához.

Wolfram felület környezetében egyidejű XUV és NIR sugárzás hatására indukált elektron-gerjesztéseket és transzportfolyamatokat vizsgáltak. Először az XUV foton hatására a szilárd mintában keltett elektronok sebességeloszlását írták le, majd az elektronok bolyongását a szilárdtestben (figyelembe véve mind a rugalmas, mind pedig a rugalmatlan szórásokat), amíg azok kilépnek a mintából. Meghatározták az emittált elektronok energia- és keletkezési helye szerinti eloszlásait. Attoszekundumos időskálán azt kapták, hogy a törzselektronok a vezetési elektronokhoz képest késleltetve lépnek ki a felületből.

Megmutatták, hogy a H és D csúcsok könnyen azonosíthatók a jég felületéről visszaszórt elektronok spektrumaiban. Kísérleti megfigyeléseik jó egyezésben vannak a Monte Carlo számításaikkal.

Különböző hordozókba beágyazott szuperionikus kristály nanoporkompozitok és kerámiák fizikai tulajdonságainak szemcseméretfüggését határozták meg az Ungvári Egyetemmel együttműködésben.

Anomális röntgendiffrakciós mérések értelmezéséhez modellezéssel meghatározták a rétegszerkezetek paramétereinek (a rendszámkontrasztnak, a rétegvastagság-aránynak, a határfelületek alakjának, a rétegek keveredésének) és a szórási energiának a hatását a diffrakciós intenzitáseloszlásra.

Az elektron-ciklotronrezonanciás ionforrásnál (ECR) a plazma szisztematikus megfigyelése és tanulmányozása céljából nagyszámú nagyfelbontású plazmafotót és -filmet készítettek a látható fény tartományában. Vizsgálták a fő külső beállító paraméterek (gáznyomás, gázösszetétel, mágneses tér, mikrohullámú teljesítmény és frekvencia) hatását a plazma alakjára, színére és szerkezetére. Megvalósították a kétfrekvenciás üzemmódot (9+14 GHz), és fotókat készítettek e speciális, „csillag a csillagban" plazmáról. Részletes tanulmány készült az ECR-plazmák színének elemzésére és megértésére. A fotósorozatok analizálása összességében rengeteg kvalitatív és számos értékes fizikai információt adott az ECR-plazmák természetéről. A kutatók tudomása szerint a látható fény tartományában ez az első ilyen részletes, szisztematikus vizsgálat.

A kétdimenziós sine-Gordon kvantumtérelméleti modellen végzett vizsgálatokkal megmutatták, hogy a vékonyréteg-szupravezetők, ezen belül a magas átmeneti hőmérsékletű réteges szupravezetők áramvezetési tulajdonságainak értelmezésében kulcsfontosságú Kosterlitz-Thouless-Berezinskii-fázisátalakulás a fázisdiagram két vonzó tartománya között fellépő átmenetként fogható fel. Megvizsgálták továbbá a kétdimenziós sine-Gordon modellek renormálásának a sémafüggését, vagyis azt, hogy az eredmények milyen mértékben függnek a különböző renormálásicsoport-módszerektől.

Szekunder semleges részecskéket felhasználó tömegspektrométerrel (SNMS-sel) vizsgáltak elektrokémiai módszerrel előállított nanométeres vastagságú mágneses vékonyfilm-szerkezeteket. FeCoNi-ötvözetek mélységprofil-analíziséből megállapították, hogy a jól ismert preferenciális leválás hogyan módosítja a film hordozóhoz közeli 150 nm-es rétegvastagságban az elemösszetételt. Az SNMS alkalmazása ezen a területen teljesen újnak számít. Az így nyert információk jelen pillanatban úttörő jellegűeknek tekinthetők.

Az Elektronikai Anyagok és Mágnesség Intézetével (Parma) folytatott együttműködésben kémiai rétegpárologtatással előállított Ge és GaAS félvezető rétegszerkezetek határfelületeinek mélységprofil-vizsgálatát végezték el. A termikus stabilitásra kapott eredményeknek a félvezető szerkezetek előállításában van jelentősége.

A hidrogénezett amorf Si/Ge rétegrendszerek termikus stabilitásának SNMS-vizsgálata során alacsonyszögű röntgendiffrakció és transzmissziós mikroszkópia segítségével követték nyomon a különböző ideig tartó hőkezelések hatására fellépő szerkezeti változásokat. E jelenségek vizsgálata a napelemek egyik fejlesztései irányvonalában játszik fontos szerepet.

Egy új izotópkigyűjtő-kamra üzembe helyezésének és első tesztméréseinek kivitelezését követően szelén izotópokból vékonyfilm-mintákat készítettek. Ezt követte a minta további kémiai eljárásokban való feldolgozása. Ezáltal lehetőség nyílt az izotopikusan jelölt nanorészecskék előállítására bioszintetikus módszerekkel stabil-izotópos nyomjelzésen alapuló kutatások számára.

Detektálási és jelfeldolgozási technika

Si, Ge, gyémánt és CdTe félvezető, valamint GSO, LSO, LYSO, BaF_2 és CsI szcintillátorok esetében vizsgálták az elektronok karakterisztikus energiavesztési folyamatait visszaszórt elektronok energiaveszteségi spektroszkópiájával (REELS). Megállapították, hogy a különböző energiavesztési folyamatok (plazmonok, sávközi átmenetek, óriásrezonanciák

keltése stb.) valószínűségeinek megoszlása detektoronként különböző. Általában létezik egy domináns folyamat (pl. a plazmonkeltés Si és Ge esetén, az óriásrezonancia keltése több szcintillátorban), amely a primer energiapartíció révén behatárolja az elvileg elérhető energiafelbontást. Ez alapvető felismerés a jelenlegi detektorok teljesítőképességének magyarázata és az új detektoranyagok kutatása szempontjából.

Az elektron-energiaveszteségi folyamatok valószínűség-sűrűségfüggvényének kísérleti REELS-spektrumokból történő meghatározására kidolgozott legfejlettebb modellek és algoritmusok alkalmazására és az eredmények összehasonlítására eljárást és felhasználóbarát programcsomagot fejlesztettek ki. A felületi és tömbi elektrongerjesztések differenciális valószínűségeinek az ismerete rendkívül fontos mind a felület közelében zajló elektrontranszport folyamatok jobb megértése, mind pedig a kísérleti elektronspektrumok pontos kiértékelése, illetve az anyag komplex dielektromos függvényének meghatározása szempontjából.

CdTe félvezető (gamma) detektorral kapcsolatban tanulmányozták a spektrális csúcsok kiszélesedéséért felelős két tényezőt, a sugárzás által keltett, majd az elektródokon begyűjtött töltések szórását, valamint az elektromos zajokat. Mindkettő tényezőt a hőmérséklet, a feszültség és a formáló erősítő időállandójának függvényében vizsgálták. Megállapították, hogy létezik a fenti paramétereknek olyan, az adott rendszerre jellemző kombinációja, amely a legjobb energiafelbontást biztosítja.

Három dimenzióban érzékeny monolit szcintillációs detektor detektálási mechanizmusának elméletét dolgozták ki. A térkoordináták standard deviációját több különböző fotodetektor-szcintillátor elrendezésre kiszámították. Külön-külön megvizsgálták az elektronikus zaj és a szcintilláció során keletkező fotonszám statisztikus ingadozásának a hatását a pozíciófelbontásra.

$LaBr_3$ szcintill. detektor energia- és időfelbontó, továbbá részecskediszkriminációs képességét vizsgálták kombinált, részecske−gamma magfizikai detektorrendszer kifejlesztése céljából.

LYSO szcintillátor és gyors fotoelektronsokszorozó felhasználásával felépítendő repülési-idő pozitronemissziós tomográf (TOF PET) kifejlesztése kapcsán vizsgálták az elérhető időfelbontást, különös tekintettel a elektronsokszorozók példányonként eltérő átlagos futási időire és az egyetlen csövön belül tapasztalható, az elektronpályák szórásából származó futásiidő-szórásra.

A Stockholmi Királyi Műszaki Egyetem számára modernizálták - korszerű elektronikát és új adatgyűjtő, képrekonstrukciós és megjelenítő szoftvert alkalmazva - a meglévő Cardiotom Mark1 mobil tomográfiás gamma kamerát, amelyet jelenleg egyetemi oktatási célokra használnak. A hardver és szoftver komponensek az oktatási céloknak megfelelően átláthatóak és egymástól jól szeparáltak a működés jobb megértése érdekében.

Az Atomki ECR-laboratóriumában alkalmazott helyzetérzékeny detektorhoz korszerű nagy teljesítményű adatgyűjtő és OpenGL alapú képmegjelenítő szoftvert készítettek, amely a nagysebességű FPGA alapú adatgyűjtő elektronikával együtt Ethernet hálózaton keresztül képes a mérési adatok tárolására és megjelenítésére.

A korábban kifejlesztett PalmtopMCA sokcsatornás analizátor adatgyűjtő és kiértékelő szoftverét továbbfejlesztették oly módon, hogy egy PC nemcsak egy, hanem több analizátort is képes egyidejűleg egymástól függetlenül kezelni.

Sikerrel alkalmazták a PET-detektorok jeleinek feldolgozására kifejlesztett digitális jelfeldolgozót $LaBr_3$ szcintillációs detektorok jeleinek a feldolgozására.

Ionnyaláb-analitika

Tovább bővítették a régió légköri aeroszolterhelését jelző, 15 évre visszatekintő adatbázist. Feltérképezték a debreceni aeroszol forrásait órás feloldást adó mintavételi technika, nukleáris analitika és statisztikai módszerek alkalmazásával. Nukleáris mikroszondán végzett egyedi szemcseanalízis segítségével meghatározták számos, a keletkezés (szaharai homok) vagy egészség (nehézfémmel szennyezett munkahelyi aeroszol) szempontjából érdekes aeroszolrészecske kémiai összetételét és eredetét.

A Barringer meteor kráternél gyűjtött impakt anyagokat vizsgáltak szinkrotronra, pásztázó nukleáris mikroszondára és elektronmikroszondára alapozott mikroanalitikai eljárásokkal (micro-XANES, micro-PIXE és ED-SEM). A vizsgálat eredményeiből információt kaptak a kozmikus ütközés okozta geológiai metamorfózisról.

Nagy laterális feloldású RBS-vizsgálatokat végeztek a nukleáris asztrofizikai csoport számára az asztrofizikai p-folyamat vizsgálatához előállított céltárgyak összetételére, vastagságára és homogenitására vonatkozóan.

Si/Cr multirétegekben vizsgálták az ionbeam-milling hatására létrejövő strukturális változásokat. Nagy laterális feloldással meghatározták az elemösszetételt, felületi topográfiát és a rétegek közötti diffúziót. Összehasonlító elemzéseket végeztek a mikro-RBS, Spektroszkópiai Ellipszometria és AES mélységi profilozás módszerek között.

Kidolgoztak egy új kiértékelési módszert a Si pin fotodióda spektrális tulajdonságainak területszelektív implantációval történő módosításával nyert adathalmaz feldolgozására.

Nagy laterális feloldással a hidrogéntartalom meghatározását végezték el biológiai mintákon, polimer fóliákon és H-nel telített Si/Ge multirétegek termikus diffúziója során.

Szilícium mikroturbinát készítettek MTA-ATOMKI – MTA-MFA együttműködésben. Ez az első mozgó alkatrészt tartalmazó eszköz, amely protonnyalábos mikromegmunkálással (PBW) és szelektív porózus szilícium (PorSi) maratással készült. A munka nemzetközi visszhangját jelzi, hogy a PBW témában vezető szerepet betöltő szingapúri csoport által üzemeltetett pbeam.com weboldalon már hivatkoznak rá.

Poly-(dimethylsiloxane) (PDMS) polimerben – melyet mások eddig öntőanyagként (replicating material) használtak – direkt írásos mikromegmunkálással elsőként hoztak létre optikai struktúrákat (pl. optikai rácsok, Fresnel-lencsék stb.). A munka érdekességét jelzi, hogy a 2009-ben megjelent cikkre már két esetben érkezett külföldi érdeklődés.

A PBW-módszer alkalmazásaként egy működőképes mikroreaktort készítettek, és a működését demonstrálták.

Környezetanalitika és kormeghatározás

Továbbfejlesztették és ipari raktárépületek esetében a gyakorlatban is alkalmazták az építési területek radonveszélyességének meghatározására szolgáló mérési eljárást.

Gázföldtani modellszámításokat végeztek a mofettagázok felszínközeli transzportjának a leírására. Eredményeiket alkalmazták a parádfürdői Erzsébet Park Hotel száraz szén-dioxid-fürdő gyógygázellátását szolgáló gáznyerő hely kialakítási koncepciójának kidolgozására.

A Meteorológiai Világszervezet háttérlevegő-szennyezettséget mérő hálózatában az alapállomások kötelező feladatává tették a légköri CO_2-koncentráció folyamatos mérését. A mérésekből kiderült, hogy a légköri CO_2-szint növekedési üteme széles sávban ingadozik, lényegesen nagyobb mértékben, mint az antropogén kibocsátás. Az okokról a vegetációval

borított kontinentális területeken végzett mérések, valamint a CO_2 izotópösszetételének (^{14}C, $^{13}C/^{12}C$, $^{18}O/^{16}O$) mérése mondhat többet. Az izotópanalitikai vizsgálatokhoz az Atomki munkatársai két folyamatosan üzemelő $^{14}CO_2$-mintavevőt telepítettek a Hegyhátsálon üzemelő meteorológiai állomás mérőtornyára 10 m és 115 m magasságban, és az OMSz munkatársaival közösen OTKA-támogatással (CK77550) bekapcsolódtak a kontinentális szintű háttérértékek havi mérésébe. Európában ez az első állomás, ahol egyidejűleg két magassági szinten mérik a légköri szén-dioxid biogén és fosszilis összetevőinek arányát. Kimutatták, hogy a kontinens belsejében a fűtési szezonban a nagyvárosokban tapasztalt kb. 20 ppm fosszilis CO_2-hozzájárulással szemben vidéki környezetben, téli időszakban mindössze kb. 5 ppm fosszilis szén-dioxid-többlet jelentkezik a kb. 380 ppm háttér értékhez képest. Magyarország ICOS projekthez való csatlakozása esetén az állomás, ezzel együtt az Atomki a program fontos szereplőjévé válhat, hozzájárulhat a kontinentális szén-dioxid-háttér eredetének tisztázásához.

Az NSF arizonai ^{14}C AMS-laboratóriumával együttműködve radiokarbonmérésekkel kimutatták, hogy az eddigi feltételezésekkel ellentétben a romániai Csomád vulkán az utolsó 50 ezer évben nem egy, hanem két alkalommal is aktív volt: a korábbi mintegy 40 ezer évvel, az utolsó kitörés kb. 27 ezer évvel ezelőtt következett be.

A romániai Porcika barlangból származó 2 m mélységű jég fúrómagban a tríciumtartalom alapján meghatározták a jégképződés sebességének változását az utolsó 60 évben. Míg 1958 és 1963 között mintegy 6,74 cm vastag jégréteg képződött évente, ennek üteme folyamatosan lassult, az utolsó évtizedben évente mindössze 0,54 cm jég rakódott le a barlangban. Ezt valószínűleg a felmelegedés és a csapadék időbeli eloszlásának megváltozása okozza. A jelenség felhívja a figyelmet mind a klíma gyors változására, mind annak drasztikus következményeire. A munkában az Atomki, az ELTE Természetföldrajzi Tanszék, az MTA GKL és a román Emil Racovita Institue of Speleology munkatársai vettek részt.

Rutinszerűen használható méréstechnikává fejlesztették a 2005-ben az intézet Hertelendi Ede Környezetanalitikai Laboratóriumában kifejlesztett Carbo-Sorb reagens alapú direkt abszorpciós elven működő LSC ^{14}C méréstechnikai újítást. Az új módszer akár évi 500-600 alternatív ^{14}C analízisre adhat lehetőséget, mely jelentős mérési kapacitásbővülést jelent az Atomki laboratóriuma számára, és rendkívül költséghatékony megoldás lehet más laboratóriumok számára is.

A nemesgáz-tömegspektrométerek érzékenysége általában függ az ionforrásban uralkodó nyomástól. Környezeti vízminták tríciumtartalmának meghatározását a trícium bomlása során keletkező ^{3}He-tömegspektrométeres mérésére vezetik vissza. Az ionforrásban tríciummintából eredő ^{3}He és a beeresztő rendszer hátterében lévő hélium nyomása nagyságrendekkel kisebb, mint a kalibráció során alkalmazható legkisebb mennyiségű levegőből elválasztott hélium nyomása. Ez szisztematikus hibát okoz, amit korábban standardminták mérésével korrigáltak. Ezen szisztematikus eltérés kiküszöbölése céljából bevezettek egy új izotóphígításos eljárást: ismert mennyiségű tiszta ^{4}He-et adnak a beeresztendő mintához, ezáltal a tömegspektrométerben lévő összhélium parciális nyomása hasonló lesz a kalibráló hélium nyomásához. A 2009-ben mért több mint 50 ismert tríciumkoncentrációjú vízminta mérése megmutatta, hogy a korábbi szisztematikus hiba teljesen eltűnt, továbbá az 1 TU fölötti tríciumtartalmak esetén a mérési pontosság 2,3 %. Ezen izotóphígításos eljárás természetesen alkalmazható más tudományterületen előforduló héliumminták mérésekor is, ahol a mintagáz nyomása és izotóp-összetétele jelentősen eltér a kalibráló mintagáz paramétereitől.

Elfogadott tény, hogy az atomerőművek tríciumkibocsátása befolyásolja a csapadék tríciumkoncentrációját. Azt vizsgálták, hogy a 3 TBq/év tríciumkibocsátású paksi atomerőmű környékén mennyire változik meg a csapadék tríciumtartalma. 56 csapadékmintázót telepítettek az erőmű kéményeinek környékére, majd egy alkalmas esőesemény után összegyűjtötték azon vízmintákat, amelyek a kéményekből kiáramló, tríciumot tartalmazó csóván hullottak át. A csóvától távolabb hullott esővízmintát is gyűjtöttek. Méréseikkel és modellszámításokkal kimutatták, hogy a lehulló csapadék tríciumtartalma csak az erőmű szűkebb környezetében növekszik meg a kimosódás hatására. Az erőműtől 5 km-nél messzebb hulló csapadék tríciumtartalmát az erőmű kibocsátása már nem befolyásolja.

A fákban végbemenő nedváramlás vizsgálatára két újabb, az intézetben kifejlesztett 4-csatornás termometriás nedváramlásmérő berendezést telepítettek a Debreceni Egyetem Síkfőkút Project területén. Ezáltal már összesen 20 fa nedváramlását tudták monitorozni a teljes tenyészidőszakban 1−5 perces időfeloldásokkal a meteorológiai és talajtani mennyiségek, valamint a törzsek radiális növekedési sebességének mérése mellett. Néhány hetes időközönként levélfiziológiai paraméterek mérése is történt. Újabb egyedülálló idősorokat kaptak a kocsánytalan (*Quercus petraea*) és cser (*Quercus cerris*) tölgyek, valamint különböző hibrideik egyedeinek vízforgalmára vonatkozóan. Az eredmények sokparaméteres analízisei a tölgyfajok és hibrideik klímaváltozásra adott válaszainak jobb megértését teszik lehetővé.

Agyagásványok kormeghatározásából megállapították, hogy a Tisia déli részén (Papuk-hg., Szlavónia) a kisfokú és nagyon kisfokú metamorfózis a kréta korban játszódott le, az ausztriai és/vagy szubherciniai fázisokban. Az Aggtelek-Rudabányai hg.-ben a Telekesoldal kőzeteit érintő nagyon kisfokú metamorfózis idősebb volt, a belső-Nyugati-Kárpátok több akkréciós jellegű sorozatához hasonlóan az alsó-krétában (140-120 Ma) játszódott le.

Bazaltok vizsgálatával kimutatták, hogy a Hegyestű leucitja az alacsony hőmérsékletű előmelegítés során megváltoztatja szerkezetét, és emiatt adja le radiogén argontartalmának jelentős részét.

Elkülönítették a Cseh-Szász Érchegység Ti-tartalmú bazaltjai kitörésének fázisait.

Nemzetközi antarktiszi expedíció keretében 2009. január-február hónapokban King George Island vulkáni területén analitikai munkákhoz szükséges mintagyűjtést végeztek.

Elvégezték a Nyugati-Kárpátok neogén riolitos vulkanizmusának részletes kronológiai vizsgálatát. Adatbázis összeállítása és a fontos eredmények publikálása folyamatban van.

Radiokémia

Dél-afrikai együttműködésben sikerült a ^{103}Pd elválasztását ródium céltárgyból termo-kromatográfiásan megoldani. Ugyancsak az együttműködés keretében, valamint a dubnai EAI munkatársaival sikerült módszert kidolgozni nagy fajlagos aktivitású ^{117m}Sn előállítására dúsított ^{116}Cd céltárgyból. Mindkét radioizotóp ígéretes a radionuklidos tumorterápia számára.

A paksi atomerőmű radioaktív hulladékaiban előforduló, nehezen mérhető béta- és gamma-sugárzó radioizotópok (mint az ^{108}Ag, ^{79}Se és ^{107}Pd) radiokémiai elválasztására és mérésére dolgoztak ki új módszereket.

A ^{11}C-radioizotóppal jelzett gázok szilárd katalizátoron végbemenő adszorpciójának tanulmányozására az Atomkiban kifejlesztett mini PET kamerát használták. Az előkísérletek

eredményei igazolták, hogy a mini PET képalkotó módszer a heterogén katalízis vizsgálata során kiválóan alkalmas a katalitikus aktív helyek feltérképezésében.

A ^{75}Br ($T_{1/2}$=1,6 h, PET), ^{76}Br ($T_{1/2}$=16,2 h, PET), radioizotópok előállítási körülményeit vizsgálták természetes és dúsított (^{77,78,80}Se) izotóp összetételű szelénen protonok által keltett magreakciók segítségével. A radioizotópokat előállító magreakciók hatáskeresztmetszet-adatainak mérését az E_p<66 MeV energiatartományban nemzetközi együttműködés keretében végezték (iThemba LABS, Dél-Afrika, NIRS, Japán). Kompilálták és evaluálták az elérhető irodalmi gerjesztésifüggvény-adatokat. Az illesztett adatokkal hozamszámolásokat végeztek a fenti izotópokra. Meghatározták a különböző céltárgyakra vonatkozó optimális termelési paramétereket és az elérhető hozamokat is.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kutatási kapcsolatok

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

- A részecske- és magfizika és alkalmazásai területén: az MTA RMKI, a Debreceni Egyetem (DE) Kísérleti Fizikai Tanszéke és Elméleti Fizikai Tanszéke, Növénytani Tanszéke, az MTA AEKI, a BME Nukleáris Technikai Intézete, a Szegedi TE, a DE Nukleáris Medicina Központja, NUKENRG Konzorcium.
- Az atomfizika és alkalmazásai területén: a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke, Szilárdtestfizikai Tanszéke, Alkalmazott Kémiai Tanszéke, Fizikai Kémia Tanszéke és Fogpótlástani Tanszéke, a BME Kísérleti Fizikai Tanszéke, a Miskolci Egyetem Fizikai Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, az Alkaloida Kutató és Fejlesztő Kft, az MTA MFA és RMKI.
- A kondenzált rendszerek fizikájának területén: az MTA MFA, az MTA SZFKI, az MTA RMKI, az MTA SZTE Lézerfizikai Kutatócsoportja, a DE Szilárdtestfizikai Tanszéke és Fizikai Kémia Tanszéke, a Veszprémi Egyetem Radiokémiai Tanszéke, az ELTE Magkémiai Intézete, TKI Ferrit Kft, az MTA Kémiai Kutatóközpont, a Kraft Projekt Zrt., a Szegedi TE, a Paksi Atomerőmű Zrt..
- A detektálási és jelfeldolgozási technika területén: a DE Nukleáris Medicina Központja, a Mediso Kft. (Budapest), a DE Kísérleti Fizikai Tanszéke.
- Ionnyaláb-analitika területén: a DE több tanszéke és klinikája, az MTA MFA, az MTA SZFKI, az MTA RMKI, az MTA AEKI, az MTA Pannon Egyetemi Levegőkémiai Kutatócsoportja, a Szegedi TE Régészeti Tanszéke, az Országos Környezet-egészségügyi Intézet, az Országos Meteorológiai Szolgálat, DEOEC Bőrgyógyászati Klinika.
- Környezetanalitika és kormeghatározás területén: az ISOTOPTECH ZRt., a DE, az ELTE, a Szegedi Tudományegyetem, a Pécsi Tudományegyetem és a Miskolci Egyetem több tanszéke, az MTA GKI, a MÁFI, az ELGI, az OKK-OSSKI, a VITUKI, a Paksi Atomerőmű Zrt., a püspökszilágyi RHKT Kht., a MECSEKÉRC Környezetvédelmi ZRt., a MecsekÖKO Környezetvédelmi ZRt., az MTA Régészeti Intézete, a Magyar Nemzeti Múzeum, a Budapesti Történeti Múzeum, a Természettudományi Múzeum, a Fácies Bt., az Envicom 2000 Kft., a Hydrosys Kft., a Smaragd GSH Kft., az Enviroinvest Kft., a VIZITERV Environ Kft, Nyíregyháza, a BME Nukleáris Technikai Intézete, az ISOTOPTECH ZRt., az Országos Meteorológiai Szolgálat, a Scopia Bt., az AktAnal Bt., a RadAnal Bt.

– A régészeti kutatások területén: az MTA Régészeti Intézete, a Budapesti Történeti Múzeum, a Magyar Nemzeti Múzeum és a hazai múzeumi hálózat több más intézménye.
– Radiokémia területén: a DE Nukleáris Medicina Központja.

Részvétel a felsőoktatásban

Az intézet 2009-ban megtartotta korábban is betöltött szerepét a felsőoktatásban, a Debreceni Egyetemmel fenntartott hagyományos kapcsolatait. Az Atomki kutatói a beszámolási időszakban meghirdetett 44 kurzus keretében 756 tantervi óra megtartásával járultak hozzá a Debreceni Egyetemen (DE) folyó oktatáshoz. Két kutató a Szegedi Tudományegyetemen tartott egy 28 órás kurzust. A gyakorlati órák száma a DE-n 2009-ben 509 volt, 18 kurzus keretében. Az oktatásban összesen 39 kutató vett részt. A pregraduális képzésben elsősorban fizikus, fizika tanári, informatikus, programtervező matematikus, környezettan, környezettudományi, valamint környezetgazdálkodási agrármérnök szakos hallgatóknak oktattak (előadások, speciális laboratóriumi gyakorlatok, diplomamunkák). A beszámolási időszak folyamán 9 PhD-, 12 diplomamunkás és 4 TDK-hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 1822 volt.

A Nukleáris képalkotás című tárgyat az intézet a DE Fizikai Intézetével és Informatikai Karával közösen hirdette meg. A kurzus célja, hogy áttekintést adjon a nukleáris fizika számos gyakorlati alkalmazásában fontos szerephez jutó különböző képalkotó eljárásokról.

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 rész.

Nemzetközi kapcsolatok

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

– a magfizika és alkalmazásai körében 22 ország kutatóhelyeivel 36 témában;
– az atomfizika és alkalmazásai területén 21 ország kutatóhelyeivel 39 témában;
– a detektálási és jelfeldolgozási technika területén 5 ország kutatóhelyeivel 6 témában;
– ionnyaláb-analitika területén 6 ország kutatóhelyeivel 7 témában;
– környezetanalitika és kormeghatározás területén 11 ország kutatóhelyeivel 13 témában.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az Atomkiban a 2009 folyamán művelt OTKA-pályázati témák száma 12, az NKTH-pályázatiaké 3 volt. Az intézet 13 EU-projektumban, valamint nemzetközi összehasonlító programokban és gyakorlatokban (ESIR, VIRI, EURATOM, TRI-TOFFY, TRIC2008) vett részt. Fontos szerepe van az intézet működésében annak, hogy egy kutatója révén elnyerte az Európai Kutatási Tanács egyik (2008-2013 évekre vonatkozó) Starting Grant pályázatát.

Államközi (TéT) egyezményeken alapuló, pályázati rendszerben támogatott együttműködési kapcsolatok voltak 14 témában argentin, cseh, dél-afrikai, francia, horvát, indiai, osztrák, szlovák kutatóhelyekkel.

A MTA által kötött egyezményeken alapuló kétoldalú együttműködési kapcsolatok 20 témában belga, bolgár, cseh, finn, lengyel, mexikói, német, portugal, román, spanyol, valamint szerbiai kutatóintézetekkel és egyetemi kutatóhelyekkel folytatott együttműködésekre terjedtek ki.

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

1. Csige L, Csatlós M, Faestermann T, Gácsi Z, Gulyás J, Habs D, et al. (12), Krasznahorkay A: *Hyperdeformed sub-barrier fission resonances observed in ^{232}U.* Physical Review C 80 (2009)1:R1301(5)
2. Elekes Z, Dombrádi Zs, Aiba T, Aoi N, Baba H, Bemmerer D, et al. (26), Fülöp Zs, Sohler D.: *Persistent decoupling of valence neutrons toward the dripline: Study of ^{20}C by gamma spectroscopy.* Physical Review C 79 (2009)1302(5)
3. Górska M, Caceres L, Grawe H, Pfützner M, Jungclaus A, Pietri S, et al. (51), Podolyák Zs, Dombrádi Zs, Sohler D: *Evolution of the N=82 shell gap below ^{132}Sn inferred from core excited states in ^{131}In.* Physics Letters B 672 (2009)4:313-316
4. Paul ES, Revill JP, Mustafa M, Rigby SV, Boston AJ, Foin C, et al. (20), Nyakó BM, Timár J, Zolnai L: *High-spin states in ^{127}Ce and ^{129}Ce: Further evidence for triaxial nuclear shapes.* Physical Review C 80 (2009)5:4312(13)
5. Di Leva A, Gialanella L, Kunz R, Rogalla D, Schürmann D, Strieder F, et al. (19), Fülöp Zs, Gyürky Gy, Somorjai E: *Stellar and primordial nucleosynthesis of ^{7}Be: Measurement of $^{3}He(alpha, gamma)^{7}Be$.* Physical Review Letters 102 (2009)23:2502(4)
6. Yalcin C, Güray RT, Özkan N, Kutlu S, Gyürky Gy, Farkas J, et al. (11), Kiss GGy, Fülöp Zs, Simon A, Somorjai E: *Odd p isotope ^{113}In: Measurement of alpha-induced reactions.* Physical Review C 79 (2009)5801(9)
7. Kiss GGy, Mohr P, Fülöp Zs, Galavíz D, Gyürky Gy, Elekes Z, et al. (11), Somorjai E: *High precision $^{89}Y(alpha, alpha)^{89}Y$ scattering at low energies.* Physical Review C 80 (2009)4:5807(15)
8. Farkas J, Gyürky Gy, Yalcin C, Elekes Z, Kiss GGy, Fülöp Zs, Somorjai E, Vad K, Hakl J, Mészáros S: *Measurement of embedded ^{74}As decay branching ratio at low temperatures.* Journal of Physics G Nuclear and Particle Physics 36 (2009)10:5101(8)
9. Imai N, Aoi N, Ong HJ, Sakurai H, Demichi K, Kawasaki H, et al. (39), Dombrádi Zs, Elekes Z, Fülöp Zs,: *First lifetime measurement of 2+1 state in ^{12}Be.* Physics Letters B 673 (2009)3:179-182
10. Cseh J, Darai J, Sciani W, Otani Y, Lépine-Szily A, Benjamim EA, et al. (8): *Elongated shape isomers in the ^{36}Ar nucleus.* Physical Review C 80 (2009)3:4320(5)
11. Pál KF, Vértesi T: *Concavity of the set of quantum probabilities for any given dimension.* Physical Review A 80 (2009)4:2114(5)
12. Lévai G, Magyari E: *The PT-symmetric Rosen-Morse II potential: effects of the asympt. non-vanishing imaginary potential component.* J. of Physics A 42 (2009)19:5302(12)
13. Tárkányi F, Hermanne A, Takács S, Ditrói F, Király B, Yamazaki H, et al. (9): *Activation cross sections of the natYb(p,xn)^{169}Lu reaction for indirect production of the therapeutic radionuclide ^{169}Yb.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 267 (2009)17

14. Szelecsényi F, Steyn GF, Dolley SG, Kovács Z, Vermeulen Ch, van der Walt T. N.: *Investigation of the $^{68}Zn(p,2p)^{67}Cu$ nuclear reaction: New measurements up to 40 MeV and compilation up to 100 MeV.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B 267 (2009)1877-1881
15. Juhász Z, Sulik B, Frémont F, Hajaji A, Chesnel JY: *Anisotropic ion emission in the fragmentation of small molecules by highly charged ion impact*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 267 (2009) 326–329.
16. Stolterfoht N, Hellhammer R, Fink D, Sulik B, Juhász Z, Bodewits E, et al. (8): *Dynamic properties of ion guiding through nanocapillaries in an insulating polymer.* Phys. Rev. A 79 (2009) 022901
17. Igarashi A and Gulyás L: *Annihilation cross section of protonium by electron impact*. Journal of Physics B 42 (2009) 033501
18. Schiessl K, Tőkési K, Solleder B, Lemell C and J Burgdörfer, *Electron Guiding through Insulating Nanocapillaries,* Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 163201
19. Novák M: *Local versus nonlocal description of the energy loss of electrons via plasmon excitation backscattering from solid surfaces,* Phys. Rev. B 80 (2009) 045406.
20. Lemell C, Solleder B, Tőkési K and J Burgdörfer, *Simulation of attosecond streaking of electrons emitted from a tungsten surface*, Phys. Rev. A 79(2009) 06290-1
21. Hunyadi M, Hashimoto H, Li T, Akimune H, Fujimura H, Fujiwara M, Gácsi Z, et al. (20): *Proton decay from the isoscalar giant dipole resonance in 58Ni.* Physical Review C 80 (2009)4:4317(7)
22. Kertész Zs, Szikszai Z, Szoboszlai Z, Simon A, Huszánk R, Uzonyi I: *Study of individual atmospheric aerosol particles at the Debrecen ion microprobe.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 267 (2009) 2236-2240
23. Szikszai Z, Uzonyi I, Kiss ÁZ, Szíki GÁ, Vantelon D, Rózsa P: *Investigation of impact materials from the Barringer Meteor Crater by micro-XANES and micro-PIXE techniques*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 267 (2009) 2229-2232
24. Rajta I, Szilasi SZ, Fürjes P, Fekete Z, Dücső Cs: *Si micro-turbine by proton beam writing and porous silicon micromachining*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 267 (2009) 2292-2295.
25. Nagy S, Nándori I, Polonyi J, Sailer K: *Functional renormalization group approach to the sine-Gordon model.* Physical Review Letters 102 (2009)24:1603(4)
26. Vodila G, Molnár M, Veres M, Svingor É, Futó I, Barnabás I, Kapitány S: *Mapping of tritium emissions using absorption vapour samplers.* Journal of Environmental Radioactivity 100 (2009)120-124
27. Gál J, Kalinka G, Nyakó BM: *Theoretical study of three-dimensionally position-sensitive scintillation detector based on continuous crystal.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 607 (2009)3:607-615
28. Anticic T, Gál J, Molnár J, et al. (90 - NA49 collaboration) : *Energy dependnence of transverse momentum fluctuations in Pb+Pb collisions at the CERN Super Proton Synchrotron (SPS) at 20A to 158A GeV.* Physical Review C 79 (2009)4:4904(18)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Atommagkutató Intézet

Átlaglétszám[1]:	195		Ebből kutató[2]:		101
PhD, kandidátus:	63	MTA doktora: 13	levelező tag: 2	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					35
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					277
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					259
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		164
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	8		idegen nyelven:		83
összesített impakt faktor[6]:	341		összes hivatkozás száma[7]:		1870
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					1870
Magyarul könyv[8]/atlasz:	1	könyvfejezet: 4		jegyzet:	1
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 2		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 2		MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	94	poszterek száma[12]:			59
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	25	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					39
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4	Diplomamunkát (BSc):			0
Diplomamunkát (MSc):	12	PhD-t:			9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					1265
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				792,29	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	16	Teljes saját bevétel[18]:		336,16	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				31,41	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				12,306	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				27,504	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				23,378	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				241,56	MFt

FÖLDRAJZTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET
1112 Budapest, Budaörsi út 45. 1388 Budapest, Pf. 64.
Telefon: 309-2628, Fax: 309-2690
e-mail: kocsisk@mtafki.hu; honlap: www.mtafki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2009-ben is a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának tagjaként végezte tudományos tevékenységét. A kutatóhely kiemelt tudományos feladata az ország természeti környezetében rövid és hosszú távon várható változások kutatása, továbbá a társadalmi-gazdasági térszerkezet átalakulási folyamatainak vizsgálata. Ezek egyaránt kapcsolódtak nemzetközi pályázatok során a tárgyévben (Margins, MTA-DFG), illetve korábban elnyert kutatási projektekhez (SeFoNe, EU-LIFE SOWAP, EU-6 BORASSUS, ACRE, UNESCO-MOST stb.), valamint a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (OTKA, OFA stb.). Kiemelt feladat volt a Magyarország mai területére vonatkozó etnikai viszonyok változását 1495-től 2001-ig bemutató térképsorozat elkészítése, továbbá az széleskörű együttműködésben készült „Hungary in Maps" tematikus atlaszmű kiadása.

Az intézet természetföldrajzi kutatásainak fő feladatait 2009-ben a korábban megkezdett projektek folytatása, az eredmények hazai és nemzetközi fórumokon való bemutatása jelentette. Az alábbi kutatási programok önálló, illetve együttműködésben való művelése zajlott: A BORASSUS című projekt keretében a „Geotextíliák környezeti és társadalmi-gazdasági hatása a fenntartható fejlődésre és a talajvédelemre; a SOWAP keretében folyó, Syngenta által támogatott „Talaj- és felszíni vízvédelem minimum talajművelés alkalmazásával Észak- és Közép-Európában" című projekt; a „Táji mintázatok hatása vizes élőhelyek makro- és mikroelem háztartására" című projekt; „Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében" című OTKA projekt; a „Margins" projekt megkezdése; a „Minta előkészítési eljárás kidolgozása szemcsevizsgálathoz" című témában minta előkészítési eljárások tesztelése.

2009-ben is komplex tudományos feladatot jelentettek a nukleáris energiatermelés során keletkező kis és közepes radioaktívitású hulladékok lerakására és biztonságos elhelyezésére alkalmas területeken végzendő kutatások. Ehhez kapcsolódóan széleskörű környezet-monitoringozási, hidrogeográfiai és talajeróziós vizsgálatokra került sor a Bátaapáti NRHT, továbbá Püspökszilágyi RHFT hatásterületén.

Az alapkutatások keretében 2009-ben is a kiemelt feladatok között szerepelt a tárgyévben futó négy (Negyedidőszaki üledékek korrelációja; Magyarország etnikai földrajza és recens etnikai folyamatok a szomszédos országokban; Egészségturizmus és életminőség Magyarországon; A városrehabilitációs programok hatása a nagyvárosi népesség életminőségére, „Spatial structural impacts of industrial investments and their transport connections"), valamint egy új („Ethnic geography and cartography of the countries in the Carpatho-Pannonian area") OTKA téma művelése.

2009-ben fontos cél volt a több éves EU-s keretprogramhoz kapcsolódó nemzetközi pályázaton elnyert kutatási feladatok időarányos teljesítése. Többek között: az ACRE

(„Accommodating Creative Knowledge: competitiveness of European metropolitan regions within the enlarged Union") projekt keretében „A kreatív tudásszint növelésének szerepe az európai nagyvárosi régiók versenyképességének javításában", az EU-FP6 keretében megvalósuló SeFoNe (Searching for Neighbours: dynamics of physical and mental borders in the New Europe"). Az MTA-DFG közös finanszírozásban két projekt futott 2009-ben: a „Revitalisierung von gründerzeitlichen Altbauwohnquartieren in Budapest – Prozesse, Strategien, Perspektiven", illetve a „Zwischen Gentrification und Abwärtsspirale" című kutatás. Az MTA Elnökség megbízása keretében kiadásra került a „Hungary in Maps" című tematikus angol nyelvű atlaszmű, mely egyesíti az ország-ismertető könyvek és atlaszok erényeit, ezáltal mintegy Magyarország „névjegykártyája"-ként szolgál. Fontos feladat volt a „Magyarország kistájkatasztere" c. 800 oldalas szakkiadvány kiadásra való előkészítése, a kézirat szakmai frissítése, a szöveges részek szakmai és nyelvi korrektúrázása, nyomdakész előkészítése.

Kiemelt feladat volt a tárgyévben a IV. Tájföldrajzi konferencia előkészítése, szervezése, illetve a SefoNe projekt Kárpát-medencei zárórendezvényének (konferencia és kulturális koncert) szervezése és lebonyolítása.

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

– Az EU LIFE és a Syngenta támogatásával zajló SOWAP, a tájdegradáció alakulását vizsgáló projekt során kimutatták, hogy Magyarország területén a legfontosabb tájdegradációs folyamat a talajerózió. 2009-ben Magyarországon is speciális talajművelési kísérletek beállítását készítették elő, melynek célja annak megállapítása, hogy az általános talajforgatásos talajműveléshez képest az ún. talajkímélő talajművelés hazai alkalmazása milyen technológiai, agronómiai és gazdasági igényekkel és következményekkel jár. 2009-ben a folytonos eróziós vizsgálatok mellett elsősorban a növényvédőszerek lemosódását, azok felszíni vizekben való megjelenését vizsgálták. Megállapítható volt, hogy a csapadék következtében 125-ször több talaj mosódott le a hagyományos szántásos, mint a talajkímélő parcellákról, vagyis a kiülepedő talajveszteség sokszorosan felülmúlja a kímélő gazdálkodás során felmerülő veszteség mértékét.

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

  Becsült intézeti ráfordítás: 27 mFt, ebből pályázati forrás: 27 mFt

  Eredmény hasznosíthatósága: a projekt közvetlen társadalmi-gazdasági haszna a környezetkímélő mezőgazdaság előnyeinek bemutatása, bizonyítása. A környezetkímélő mezőgazdaság nagyban hozzájárul a táj, a természeti környezet védelméhez, elősegíti a biológiai sokféleség megőrzését. A helyszíni bemutatók, amelyeken esetenként 40-50 gazda és döntéshozó is részt vesz, a módszer megismerését és elterjesztését szolgálják.

– A BORASSUS projekt 2009-ben lezárult. A projekt eredményei közül kiemeledő annak megállapítása, hogy a mérsékelt övben valamennyi geotextil fajta kedvező hatást gyakorolt a feltalaj nedvesség viszonyaira, továbbá, hogy a szerves geotextilek mesterséges tereptárgyak lejtőin, rézsűkön is jól alkalmazható, kedvező feltételeket kínálnak gyeptakaró telepítéséhez. A szerves geotextilek új telepítésű ültetvényekben is

jól használhatók, mivel itt a növények fejlődésük kezdeti stádiumában elsősorban a feltalajból kapják a vizet (pl. új telepítésű csonthéjas gyümölcsösök.

A BORASSUS projekt eredményei az erózió elleni védelemben közvetlenül hasznosíthatók. A projektben különböző éghajlati (trópusi, szubtrópusi és mérsékelt övi) területekre meghatározták, hogy a geotextilek milyen pozitív tulajdonságokkal bírnak az erózió elleni védekezésben. Ezen belül a magyar kutatói csapat a geotextilek által biztosított talajnedvesség többlet mértékét határozta meg a projektben résztvevő valamennyi mintaterületre.

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

Becsült intézeti ráfordítás: 12 mFt, ebből pályázati forrás: 12 mFt

Eredmény hasznosíthatósága: A geotextilek előnyösen befolyásolják a talajnedvességet, ezáltal hatékonyan segítik az erózió elleni védekezést, illetve pozitívan befolyásolják új telepítésű ültetvények kezdeti fejlődését.

– A SeFoNe című EU projekt keretében vizsgálták a Schengeni határőrizeti és vízumrendszer fogadtatását és hatásait a magyar-magyar, illetve az interetnikus viszonyokra. Kimutatták, hogy a szigorítás következményeként a magyar-ukrán határszakaszon a korábban jelentős mértékű csempészés nehezebbé vált, mely kiegészülve a korábban széles körben elterjedt magyarországi alkalmi munkavállalás kereteinek beszűkülésével a helyi népességet életstratégia váltásra késztette. A román-magyar határszakaszon a vizsgálat fő iránya a helyi interetnikus viszonyok kutatása volt Nagyváradon. A kutatás főleg a szimbolikus térfoglalásra, konfliktusokra, a mentális terekre és az egyes nemzetiségek eltérő térhasználatára irányult. Megállapították, hogy Nagyváradon az interetnikus együttélést időnként lényegesen befolyásolja a helyi politika, továbbá a város térhasználatában nemzetiség szerinti sajátosságok is felfedezhetők.

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

  Becsült intézeti ráfordítás: 70 mFt, ebből pályázati forrás: 70 mFt

  Eredmény hasznosíthatósága: A kutatás eredményei az EU bővítés és a Schengeni határőrizeti rendszer bevezetésének társadalmi és gazdasági folyamatokra gyakorolt hatásának feltárásával hozzájárulnak az ezekkel kapcsolatos konfliktusok megfogalmazásához, illetve a szomszédos országok közti gazdasági-kulturális lehetőségek eredményesebb kihasználásához.

– „A városrehabilitáció és a bérlakásprogramok hatása a lakásmobilitásra és a társadalom mozgásfolyamataira” című OTKA projekt keretében sikerült feltárni a városrehabilitáció és az életminőség összefüggéseit, a nagyvárosainkban folyó városfelújítási tevékenységek legfontosabb társadalmi hatásait. A kutatási eredmények három nagyobb témakörbe sorolhatók: az eredmények első csoportjába tartoznak az életminőség-kutatások nemzetközi és hazai eredményeinek áttekintése és értékelése, az eredmények második csoportját a városrehabilitáció hazai és külföldi elméleti és gyakorlati tapasztalatainak, valamint társadalmi hatásainak összefoglalása adják, míg a harmadik csoportba az OTKA-kutatás keretében végzett empirikus vizsgálatok eredményeinek tudományos elemzéséből származó új információk sorolhatók. A kutatási eredmények könyv formájában kerültek összefoglalásra. A városfelújítással és életminőséggel kapcsolatos eredményeket bemutató és népszerűsítő internetes honlap továbbra is elérhető.

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

Becsült intézeti ráfordítás: 3,8 mFt, ebből pályázati forrás: 3,8 mFt

Eredmény hasznosíthatósága: A kutatás amellett, hogy összefoglaló képet nyújtott a hazai és nemzetközi városi életminőség-kutatásokról, kvalitatív és kvantitatív adatgyűjtés eredményeképpen gyakorlati szakemberek és a döntéshozók számára olyan ténylegesen és interdiszciplinálisan alkalmazható eredményeket produkált és modellt dolgozott ki, amelyek megkönnyítik és elősegítik a városfejlesztési és tervezési tevékenységet.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatóintézet 2009-ben is széles körű együttműködést folytatott az MTA földtudományi intézeteivel, emellett az MTA egyéb rokontudományi intézetei közül a Regionális Kutatások Központjával, az Etnikai-nemzeti Kisebbségkutató Intézettel, a Történettudományi Intézettel, a Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézettel, a Szociológiai Kutatóintézettel, valamint különféle szaktárcák kutatóhelyeivel (KVM, FM, OMSZ, KTI, stb.).

Több országos horderejű kutatásban vettek részt, amelyet a MEH Nemzeti Területfejlesztési Hivatala, továbbá különböző minisztériumok, (GTM, KVM, OM, KüM), ill. más országos hatáskörű szervek (ÁNTSZ, HTMH, KSH), alapítványok indítottak, ill. koordináltak.

Tudományos kutatóik közül 13-an 2009-ben is szerteágazó felsőoktatási tevékenységet folytattak. Számos felsőoktatási intézményben végeztek oktatást (BSc, MSc, PhD szinteken) részfoglalkozású oktatóként, ill. óraadóként. A legszorosabb kapcsolata az intézet kutatóinak az egyetemekkel volt (ELTE, PTE, SZTE, NYME, ME, Pannon Egyetem, Budapesti Corvinus Egyetem, CEU, Andrássy Gyula Német Nyelvű Egyetem, Selye János Egyetem, Babeş-Bolyai Egyetem), de a főiskolák (KJF, BGF, KVIF) geográfus, ill. terület- és településfejlesztő szakember képzésében is tevékenyen részt vettek.

2009-ben is aktív oktatási tevékenység folyt az ELTE-nek az intézethez kihelyezett Alkalmazott Földrajzi Tanszéki Csoportjában, amelynek több mint egy évtizede ad otthont az FKI. Ennek keretében kutatóik az ELTE-n rendszeresen oktatnak, illetve az ELTE oktatói közreműködnek az intézeti tudományos projektek megvalósításában. A beszámolási évben 9 kutatójuk kapcsolódott be a hazai geográfus hallgatók PhD képzésébe. 11 munkatársuk vezetett BSc, illetve MSc diplomamunkákat, 13 kutatójuk véleményezett felsőoktatási és akadémiai pályázatokat, PhD dolgozatokat, diplomamunkákat. 3 fiatal kutató (MTA álláshelyen) végezte az ELTE, illetve a PTE doktoriskoláját. Egy tudományos tanácsadójuk az MTA X. Osztály Földtudományi Komplex Tudományos Bizottság elnöke, egy másik az MTA X. Osztály Társadalomföldrajzi Tudományos Bizottság illetve az UNESCO MOST Nemzeti Bizottság elnöke. Az intézet igazgatóhelyettese az OTKA Földtudomány I. zsűri elnöke, a HUNGEO-TOP Operatív Bizottság elnöke. Az intézet kutatói a Magyar Földrajzi Társaság magas tisztségeit töltik be (alelnök, főtitkár, választmányi tag).

A beszámolási évben 17 kutatójuk összesen 86 előadást tartott, ebből 49-et nemzetközi tudományos rendezvényeken. A hazai tudományos események közül kiemelkednek a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának februári akadémiai beszámoló ülésén, a X. Osztály májusi ülésén elhangzott előadások, továbbá az IUSS (International Union of Soil Sciences) nemzetközi konferenciáján tartott előadás (Budapest, szeptember).

Az intézet 2009-ben is kiemelt figyelmet fordított meglévő sokoldalú *nemzetközi kapcsolatainak* ápolására és bővítésére. Ennek keretében törekedett minél több EU projektbe (köztük az EU-7 keretprogramba) való bekapcsolódásra és a nemzetközi pályázatokon való sikeres szereplésre, kihasználva kutatógárdája széles nemzetközi kapcsolatait. Egy főmunkatársuk a révkomáromi Selye János Egyetemen, egy pedig a kolozsvári Babeş-Bolyai Egyetemen lát el felsőoktatási feladatokat.

A beszámolási év tudományos szakmai rendezvényei közül kiemelkedik a „Creating economic and social neighbourhoods across political borders" címmel, az intézet és a Berni Egyetem közös szervezésében, Révkomáromban megrendezett tudományos konferencia, illetve az intézet egyik tudományos tanácsadója, az UNESCO MOST Nemzeti Bizottságának elnöke által Szegeden szervezett „Challenges of ageing in villages and cities: The Central European Experience" című konferencia.

A külföldi tudományos rendezvények közül az intézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, poszterekkel, korreferátumokkal, illetve konzulensként: 2nd International Multidisciplinary Conference on Hydrology and Ecology (Bécs, Ausztria), International Conference on Land and Water Degradation – Processes and Management (Magdeburg, Németország), Ancient Landscapes–Modern Perspectives (Melbourne, Ausztrália), 2nd EUGEO Congress „Challenges for the European Geography in the 21st Century" (Pozsony, Szlovákia), 3rd International Conference Advences in Tourism Economics (Lisszabon, Portugália), ICA Symposium on Cartography for Central and Eastern Europe (Bécs, Ausztria), Géopolitique et Démographie, Colloque International (Genf, Svájc).

2009-ben az intézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak a román, az ukrán, a horvát, valamint a szlovák tudományos akadémiák földrajzi intézeteivel, a németországi Institut für Länderkunde-val (Lipcse), a kijevi Sevcsenko Egyetemmel, a hannoveri Akademie für Raumordnung und Landesplanung-gal továbbá az ungvári, a nagyváradi, a zágrábi, a lipcsei, a kolozsvári, a berni, és a berlini egyetemekkel, valamint a Beregszászi Főiskolával. E kapcsolatok számos vonatkozásban kötődnek az említett nemzetközi együttműködésben folyó kutatásokhoz, illetve különféle kétoldalú tudományos együttműködésekhez. 2009-ben is bővültek az intézet nemzetközi kapcsolatai az újvidéki és a kanpuri (India) egyetemekkel.

2009-ben is fogadtak külföldi kutatókat, akiknek magyarországi szakmai programját szervezték elsősorban Romániából, Szlovákiából, Svájcból, Ausztriából, Olaszországból, valamint a Kárpát-medence határainkon túli felsőoktatási intézményeiből (Újvidék, Belgrád, Nagyvárad, Kolozsvár, Zágráb, Beregszász).

Munkatársaik közül hatan vesznek részt hosszabb ideje bizottsági tagként nemzetközi tudományos szervezetek munkájában, öt fő nemzetközi földrajzi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja. Egy tudományos tanácsadó az ESSC (European Society for Soil Conservation) alelnöke, egyben az IGU (International Geographical Union) Magyar Nemzeti Bizottságának elnöke. Az intézet kutatóinak 11 idegen nyelvű tanulmánya jelent meg külföldi szakfolyóiratokban és további 11 konferencia kiadványban, tanulmánykötetben.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2009-ben az intézet kutatói két OTKA pályázatot („Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében", „Ethnic geography in the Carpatho-Pannonian Area") nyertek el. A korábban elnyert hazai pályázatok között jelentős arányban voltak jelen 2009-ben is az OTKA pályázatok (a művelt témák száma: 5).

Folytatták az EU 6-os keretprogram alá tartozó, 2006-ban indult ACRE pályázathoz (Kreatív tudásalapú gazdaság fejlődési folyamatai az európai nagyvárosi régiókban) kapcsolódó kutatásokat. A főbb eredményeket „Comparing paths of creative knowledge regions" címen jelentették meg. A szintén EU 6-os keretprogramba tartozó SefoNe projekt Kárpát-medencei határon átnyúló és lokális interetnikus szomszédságkutatási projektje is folytatódott, az eredmények összegzésére került sor.

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

A 2003-ban kezdődött SOWAP projekt 2009-re tervezett kísérleteit végrehajtották, az eredmények kiértékelése folyamatosan, a tervezett időkorlátok betartásával zajlik. A 2005-ben indult BORASSUS projekt tárgyévben lezárult, az eredmények publikálása folyamatban van.

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

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

1. Dövényi Z: A belső vándormozgalom Magyarországon: folyamatok és struktúrák, Statisztikai Szemlet 87(7-8): 748-762 (2009)

2. Egedy T: Városrehabilitáció és életminőség, MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, Budapest, 2009, p. 152

3. Jakab G I, Madarász B, Szalai Z: Gully- or sheet erosion? A case study at catchment scale, Hungarian Geographical Bulletin 58(3): 151-161 (2009)

4. Kertész Á: The global problem of land degradation and desertification, Hungarian Geographical Bulletin 58(1): 19-31 (2009)

5. Kiss E É: Major trends in the development of industrial areas of Budapest in the early 21st century, Hungarian Geographical Bulletin 58(3): 163-180 (2009)

6. Kocsis K, Bottlik Zs: Magyarország etnikai térképe, 2001: M.a. 1:500 000 = Ethnic map of Hungary, 2001, MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, Budapest, 2009

7. Kocsis K, Schweitzer F (eds.): Hungary in Maps, Geographical Research Institute of H.A.S., Budapest, 2009, p. 211

8. Kocsis K, Tiner T: Geopolitics of pipelines and Eastern Europe with especial regard to Hungary, Hungarian Geographical Bulletin 58(1): 49-67 (2009)

9. Kovács Z: Hinterland Development In: The International Encyclopedia of Human Geography, Volume 5 (Ed. Kitchin R, Thrift N), Elsevier, Oxford, 2009, pp 128-135

10. Kovács Z: Social and economic transformation of historical neighbourhoods in Budapest, Tijdschrift Voor Economische en Sociale Geografie 100(4): 399-416 (2009)

11. Lóczy D, Kis É, Schweitzer F: Local flood hazards assessed from channel morphometry along the Tisza River in Hungary, Geomorphology 113(3-4): 200-209 (2009)

12. Michalkó G, Rátz T, Illés S: The gate of happiness: Budapest in the focus of European mobility In: Migration and citizenship : the role of the metropolis in the European Union process of enlargement (Ed. Morri R, Pesaresi C), Societa Geografica Italiana, Roma, 2009, pp 143-152

13. Schweitzer F: Strategy or disaster : flood prevention related issues and actions in the Tisza River basin, Hungarian Geographical Bulletin 58(1): 3-17 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Földrajztudományi Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	49		Ebből kutató[2]:		23
PhD, kandidátus:	7	MTA doktora: 7	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					9
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					130
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					108
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	5		idegen nyelven:		11
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	13		idegen nyelven:		13
összesített impakt faktor[6]:	4,08		összes hivatkozás száma[7]:		435
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					435
Magyarul könyv[8]/atlasz:	4	könyvfejezet: 5		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	2	könyvfejezet: 9		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 5	MTA doktora: 1	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	49	poszterek száma[12]:			5
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					13
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát (BSc):			44
Diplomamunkát (MSc):	22	PhD-t:			33
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					430
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				166,36	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	2	Teljes saját bevétel[18]:		83,531	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				13,04	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				1,245	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				20,85	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				13,461	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				34,94	MFt

GEODÉZIAI ÉS GEOFIZIKAI KUTATÓINTÉZET
9400 Sopron, Csatkai u. 6-8. 9401 Sopron, Pf. 5.
Telefon: 99-508-350; Fax: 99-508-355
e-mail: zavoti@ggki.hu; honlap: www.ggki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A fő feladatokat 2009-ben is geodéziai, geofizikai és szeizmológiai alapkutatások, az ezekhez szorosan kapcsolódó terepi és laboratóriumi munkák, a megfigyelési adatok tudományos feldolgozása, értelmezése és közzététele jelentették. Az intézet elméleti és gyakorlati módszerfejlesztéseket végzett, működtette az országos szeizmológiai hálózatot és ügyeletet, valamint a geo-elektromágneses és a geodinamikai obszervatóriumot. Mindemellett az intézet rendezője volt az IAGA 11. Tudományos Világkongresszusának (11th Scientific Assembly of International Association of Geomagnetism and Aeronomy, Sopron, 2009. augusztus 23-30., www.iaga2009sopron.hu), amelynek 52 országból csaknem ezer résztvevője volt.

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

Az intézet által megrendezett IAGA 11. Tudományos Világkongresszus jelentős tudományos és társadalmi haszonnal és némi nyereséggel zárult. Minőségi ugrást, áttörést jelentett a régió kongresszusi turizmusában.

Geodézia

A) A Dunaföldváron 2002 és 2007 között mért dőlésmérési és hidrológiai (csapadék, talajvízszint, Duna vízállás) adatsorok elemzéséből megállapították, hogy a 10-20 évenként ismétlődő földcsuszamlások kialakulásában a hosszúidejű hidrológiai és geomorfológiai folyamatok (Duna eróziója, esetleges tektonikai mozgások jelenléte) mellett a rövididejű hidrológiai folyamatoknak is jelentős szerepe van. B) A dunaföldvári partfal szakasz mozgásaiban nagy hatása van az északi és déli irányokból történő talajvíz hozzáfolyásoknak, amelyek kedvezőtlen aránya jelentősen hozzájárulhat a partfal csúszásának kialakulásához. C) Kimutatták, hogy a talajvízszint változásának hatását a Duna vízszint ingadozásai jelentősen felerősíthetik, valamint a korábbi hidrogeológiai vizsgálatok adatai alapján megállapították, hogy a hidrológiai folyamatok csak fúrólyuk dőlésmérések segítségével is megbízhatóan nyomon követhetők. D) Megállapították, hogy a fúrólyuk dőlésmérés eredményei alapján a talajvíz-megfigyelő kutak helye optimálisan tervezhető, ezáltal költségmegtakarítás érhető el. E) A dunaszekcsői partfalmozgások tanulmányozása során megállapították, hogy a 2008-ban megcsúszott területtől délre fekvő partfalszakasz mozgásai jelentősen megnövekedtek. Egy itteni csuszamlás már a község lakóházait is veszélyeztetné. Az itteni mozgások mérésére a GPS mozgásvizsgálati hálózatot jelentősen bővítették és újabb fúrólyuk dőlésmérőket helyeztek el a mozgások folyamatos nyomon követésére. A mérési adatokat az önkormányzat és az Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság rendelkezésére bocsátották a hathatós védelem megszervezése céljából. F) OTKA támogatással új hálózatkiegyenlítési eljárást fejlesztettek ki a dunaszekcsői partmozgás vizsgálatokhoz, mivel a leszakadt részeken a pontok egy részét GPS technikával már nem lehetett megmérni és szintezéssel sem lehetett összekapcsolni. G) A Nyugat-magyarországi Egyetem Környezettudományi Intézetével együttműködve a vegetáció és a földcsuszamlások kapcsolatát tanulmányozták. A vizsgálatok

eredményei hozzájárulhatnak a földcsuszamlások elleni védekezéshez. *(Katasztrófa-védelem, életminőség-javítás, hozzájárulás a geodézia és az általános méréstechnika fejlődéséhez)*

H) Az elméleti és az extenzométerrel mért árapály adatok koherencia, valamint árapály analízisével kimutatták, hogy a napos hullámok amplitúdója kb. 80 százaléka az elméleti értéknek, ami a mért árapály adatsorok hőmérsékleti és légnyomás korrekciójával sem javítható számottevő mértékben. Hasonló eredményeket kaptak a Finn Geodéziai Intézetben dőlésmérési adatokból a félnapos hullámokra. A jelenség okának tisztázását finn-magyar együttműködés keretében kezdték el kutatni. *(Katasztrófa-védelem, földrengés előrejelzés)*

I) A magyarországi felsőrendű szintezési hálózat újraméréséhez kapcsolódóan a hálózat korszerű kiegyenlítésére vonatkozó tervezetet készítettek, amely a recens kéregmozgás figyelembevételét is lehetővé teszi. J) Egy új, háromdimenziós geodéziai hálózatkiegyenlítési eljárást (GPS+NET) dolgoztak ki, amely a GNSS (GPS) technológiával mért térbeli vektorok, geometriai (vagy trigonometriai) szintezéssel mért magasságkülönbségek, valamint geodéziai mérőállomással mért térbeli távolságok, zenitszögek és irányértékek (azimutok) szabatos kiegyenlítését teszi lehetővé geocentrikus ETRS89/WGS89 koordinátarendszerben. K) A robusztus becslési módszerek nemlineáris egyenletekre vezetnek, amelyeket általában linearizálva, iterációval szokás megoldani. Megmutatták, hogy néhány geodéziai alapfeladat (távolságmérések, 2D és 3D transzformációk) esetén a nemlineáris egyenletek direkt megoldása is előállítható. L) Vizsgálták a nemlineáris Gauss-Helmert Modell szigorú kiegyenlítési algoritmusát, és Taylor-sorfejtéssel levezették a kiegyenlítő egyenes becslésének összefüggéseit. M) Elemi levezetést adtak a kiegyenlítő egyenes, u. n. totális legkisebb négyzetek módszere szerinti megoldására, és igazolták, hogy a megoldás a szakirodalomban tárgyalt eseteknél pontosabb eredményt szolgáltat. N) Megalkották a 2D Helmert transzformáció totális legkisebb négyzetek módszere szerinti kiegyenlítési modellt, amely nemlineáris problémára vezetett. O) Kiegyenlítő számítási modellek esetén megmutatták, hogy a totális legkisebb négyzetek módszere a nemlineáris Gauss-Helmert-Modellek szigorú megoldásával azonos eredményt szolgáltat. P) Kimutatták, hogy a totális legkisebb négyzetek módszere egy olyan kiegyenlítő számítási modell, amelyet a geodéziai kiegyenlítőszámítási módszerek speciális eseteként lehet tárgyalni. Q) Összehasonlították a totális legkisebb négyzetek módszerét (TLNM) a Huber-féle robusztus becslési modellel, és az adatok kovariánciájától függő nagyobb érzékenységet kaptak a TLNM javára. R) Monte-Carlo szimulációval további vizsgálatok végeztek a 3D, 7 paraméteres dátum transzformációs probléma nemlineáris megoldásának, és a linearizált legkisebb négyzetek módszerrel előállított megoldásának az összehasonlítására. Megmutatták, hogy a nemlineáris direkt megoldás pontosabb eredményeket szolgáltat, mint a hagyományos, linearizált megoldás. S) A pólusmozgás idősor analízisének kutatását tovább folytatták. Lineáris- és trigonometrikus interpolációval adott frekvenciával rendelkező periódusokat választottak le. A maradék folyamatot ARMA folyamattal modellezték. Számításokkal igazolták, hogy a maradék folyamatban bizonyos, 10 év fölötti periódusidők a zajszint fölé emelkednek. T) A „Nemlineáris modellek a geodéziában” témakörön belül tanulmányozták a térbeli előmetszés direkt megoldási módszereit. Kimutatták, hogy az általános esetben a megoldás első lépésében a redukált Gröbner-bázist alkalmazó módszer a skalár-tényezőtől eltekintve ugyanazokat a negyedfokú egyenleteket szolgáltatja, mint amikor az alapfeladat egyenletrendszerét a rezultánsok Sylvester-féle alakjának alkalmazásával oldják meg. *(Az intézet geodéziai mérési feladatainak támogatása, hozzájárulás a matematika tudományok fejlődéséhez)*

Geofizika

A) A három nagy trópusi zivatarrégió maximális aktivitásának megfelelő régióban meghatározták a nagycenki elektromos és mágneses SR megfigyelések alapján az évszakos frekvenciaváltozást. Megállapították, hogy Nagycenk viszonylatában az ázsiai zivatarrégió évszakos migrációja játszik döntő szerepet az éves frekvencia-változás kialakításában. B) A forrás-észlelő geometria megváltozásából eredő SR frekvencia-változás alkalmazható a klimatikus trendekhez köthető globális zivatareloszlás megváltozásának a kimutatására. Az északi féltekére jellemző 1998-as nagy hőmérséklet-anomália például rendhagyó SR frekvenciaváltozásban nyilvánult meg. C) Összefüggést találtak az SR frekvenciák napi ingadozásának a mértéke és a zivatarok területe között, és azt sejtik, hogy a galaktikus kozmikus sugárzásnak szerepe lehet a zivatarok területi modulációjában. *(elméleti, gazdaság, biztonsági, életminőségi, természeti kockázatok: éghajlat-kutatás, villám-védelem)*

D) A FORMOSAT-2 műhold által észlelt 185 „lidérc udvar" (sprite halo) típusú felsőlégköri optikai emissziókhoz (Transient Luminous Events - TLEs) tartozó, saját regisztrálású Schumann rezonancia tranziensből megállapítást nyert, hogy a lidérc udvarok nagyobb részét negatív polaritású, jellemzően impulzív villámok keltik életre. A halo-k fényessége és a keltő villám töltésmomentuma között pozitív korrelációt mutattak ki. E) Saját közép-európai TLE megfigyeléseiket és egy szlovák állomás regisztrátumait feldolgozva összesen 64 vörös lidérc helyét és magasságát sikerült pontosabban meghatározniuk háromszögeléssel. Kiderült, hogy a répa alakú lidércek nagyjából ugyanabban a magasságtartományban jelennek meg, az oszlop formájú lidérceknek azonban mind a hossza, mind a megjelenési magassága változó. A vizsgálatok alapján a lidércek többsége a kiváltó villámkisüléshez képest 10-15 km-rel eltolódva jelenik meg. 2009-ben összesen 264 optikai emissziót regisztráltak, közötte egy eddig nem dokumentált típusút is. *(elméleti, gazdaság, biztonsági, életminőségi, természeti kockázatok: éghajlat-kutatás, villám-védelem)*

F) Azáltal, hogy az északi és a déli félgömb szárazföldi energia transzportjai közötti különbséget az eltérő atomos oxigén-koncentráció és egy ion-elektron pár keletkezéséhez szükséges energia alapul vételével átszámították elektronsűrűség-többletté, sikerült kvantitatív magyarázatot adni az északi és déli félgömb között télen mérhető felsőlégköri elektronsűrűség-eltérésre, azaz az ún. F2 téli anomáliára. G) Napi átlagos GPS koordináta-reziduálok spektrális elemzéséből a normal Rossby modusoknak felelő 5, 10, 16 napos periódusokat mutattak ki. A planetáris hullám-eredetet a 10 mbar-os hőmérséklet-spektrum igazolta. *(elméleti, éghajlat-kutatás, életminőség)*

H) Cluster műhold-adatok felhasználásával bizonyították a diffúziós elmélet helyességét és vizsgálták annak részleteit a magasabb energiájú (30-160 keV) ionok esetében is. Ezáltal bizonyították, hogy a magas és az alacsony energiaszinteken lezajló folyamatokat ugyanazon fizikai mechanizmus irányítja. I) Úgy tapasztalták, hogy a diffúziós folyamatot befolyásolja a napszél sebessége, valamint, hogy a diffúz ionok sebességtérbeli szóródását nem csak az ionok által generált mágneses hullámok határozzák meg (amint azt eddig vélték), hanem figyelembe kell venni azokat a hullámokat is, amelyeket a lökéshullám merőleges oldaláról visszaverődött ionsugár generál. *(Elméleti: a földi lökéshullám az egyetlen olyan természetes fizikai laboratórium, amelyben az ütközésmentes mágnesezett plazma fizikai folyamatai in-situ mérésekkel tanulmányozhatók pl. az ipari plazmatechnológia számára)*

J) Numerikus modellezéseik szerint a napszélnyomás lényegében egy csöpögő csaphoz hasonlóan szabályozza a plazmoidok képződését a Szaturnusz csóvájában. A plazmoidok ismétlődési periódusát azonban nem csak a napszélnyomás, hanem a Szaturnusz

forgástengelyének dőlésszöge és a plazmaforrás intenzitása is befolyásolja. *(elméleti: plazmafizika, bolygókutatás)*

K) A magnetotellurikus tenzor-komponensek hosszú-periódusú változásának irányfüggetlensége igazolása végett több rotációs invariáns hosszú-periódusú variációját is megvizsgálták, és ennek eredményeként bizonyították, hogy a korábban demonstrált forráshatás független a mérőrendszer orientációjától. Kimutatták több, rotációs invariáns alapú fajlagos ellenállás 27-napos, szezonális, féléves és éves modulációját. L) Numerikus modellezéssel igazolták, hogy az ún. lokális 1D leképezést nyújtó alapinvariánsok lényegében mindegyike valósághű és robusztus leképezést nyújt. Dimenzió-vizsgálatokkal igazolták az invariánsok szerkezetfüggő jellemzőit (alak-, oldal- és sarokleképezését); zajérzékenység-vizsgálat alapján kísérletileg kimutatták, hogy a leginkább zajérzékeny invariáns paraméterek a 2D-, de különösen a 3D-jellemzők. A fázistenzor alapján meghatározható volt a vizsgált Ny-dunántúli szerkezetek maximális mélysége. M) A magnetotellurikus invariáns-leképezés terén megteremtették az alapját a területi magnetotellurikus térképek ábrázolási módjának. N) A mágneses fázisátalakulás témakörében kimutatták, hogy a nagy mágneses permeabilitású és a nagy vezetőképességű rétegek fölötti magnetotellurikus fajlagos ellenállás- és fázisgörbék csak nullához közeli rétegvastagság esetén vannak egymással reciprok viszonyban. Terepi adatokon keresték a Curie-mélységtartományban a rugalmassági paraméterek, a sűrűség és a hullámterjedési sebesség mágneses szuszceptibilitáshoz hasonló változásának bizonyítékait. O) Elkészítették a Pannon-medence elektromos jólvezető anomáliáinak legújabb szintézisét és összefoglalták az elektromágneses analóg modellezés eredményeit, lehetőségeit. *(Elméleti: mélyszerkezet-kutatás; gazdasági: erőforrás-kutatás; földtani kockázatok: veszélyzóna-kutatás. Együttműködő partnerek: ELGI, MÁFI)*

P) Analóg modellmérésekkel, paraméterérzékenységi térképek használatával, terepi vizsgálatokkal és zajvizsgálatokkal keresték a terepi követelményeknek lehető legjobban megfelelő egyenáramú elrendezést, és sikerült szemléltetően bemutatni a zajérzékenység és a kutatási mélység ellentmondó követelmény-rendszerét. Q) Terepi tesztmérések a szúrópróba (SZP) módszer verifikálása, az anizotrópia paradoxon vizsgálata és mészkőaljzat feltérképezési lehetőségeinek vizsgálata céljából. *(elméleti, módszertani, gyakorlati: felszínközeli kutatás, környezetvédelem; potenciális gazdasági hasznosulás leghamarabb itt remélhető)*

Szeizmológia

A) A szélessávú földrengésjelző hálózat fejlesztése: a Budapesti Földrengési Obszervatóriumban működő országos szeizmológiai hálózati központban a SeisComP komplex adatgyűjtő szoftver 3-as verziójának 2008 év végi telepítése után 2009-ben biztosították annak rendszeres működését. E programcsomag fogadja a magyar és külföldi állomásokról valós időben érkező adatokat, megjelenít, automatikus földrengés-paraméter meghatározást végez, riaszt földrengések esetén. 2009-ban átlagosan havi 1 500 földrengést, összesen mintegy 18 000 eseményt detektáltak és 4680 szeizmogramjait dolgozták fel a hat szélessávú állomás esetében. 217 földrengés volt az ML=0.4-3.5 magnitúdó tartományba eső helyi, illetve közeli rengés. Mikroszeizmikus adatfeldolgozásaik eredményeit megküldték a nemzetközi adatközpontoknak és az együttműködő nemzetközi és nemzeti szeizmológiai szolgálatoknak. 2009 elejétől megváltoztatták a magnitúdó meghatározás gyakorlatát. A rengések egyéb paramétereinek (hely, idő) megállapításához továbbra is a HYPO71 nevű programot használják, míg a magnitúdó érték számításához az Európában általánosan elterjedt

Seismic Handler szoftvert. A különféle adatkonverziókhoz több programot készítettek. A váltás oka az volt, hogy így több állomás mérési adatából lehet megbízhatóbb magnitúdót számolni. *(A szeizmológiai hálózat működtetése társadalmi igényt elégít ki és a Föld belső megismerés eszköze)*

B) 2009-ben Magyarország területén két földrengés keletkezett melyek megfigyelt makroszeizmikus adatfeldolgozást (intenzitásbecslést) tettek lehetővé: október 5. – Tiszabezdéd térsége I=IV EMS; november 25. – Berhida térsége I=III-IV EMS. Az elmúlt évtizedben több földrengési forrászónában sikerült a történelmi rengések forrásparamétereit pontosítani. Ezen eredmények birtokában, a rendelkezésre álló, legteljesebb földrengés-adatbázis alapján meghatározták a Magyarország területén 250, 350 és 500 év visszatérési periódussal várható maximális földrengés-intenzitás eloszlást. A 2009-ban feldolgozott mikro- és makroszeizmikus adatokból állították össze Magyarországi földrengések évkönyve, a Hungarian Earthquake Bulletin 2009 anyagát. *(Földrengés károk felmérése, csökkentése)*

C) Megvizsgálták a HVSR (Horizontal-to-Vertical Spectral Ratio, H/V) módszer pontosságát és felhasználhatóságát a rezonanciafrekvencia, valamint a geológiai felépítés laterális változékonysága miatt a módosítás irányfüggésének meghatározására. Megállapították: ha egy adott helyen jelentősebb irányfüggés figyelhető meg, akkor az jelentkezik a különböző irányokra számított H/V arányokban is. Az Allianz Hungária Zrt.-vel, „A földrengésveszély mértéke és kiterjedtsége Magyarországon” című szerződés keretében foglalkoztak a magyarországi földrengések területi hatásának vizsgálatával, a fontosabb földrengés forrásterületek jellemzésével és a biztosító által kért kiemelt területek szeizmológiai jellemzésével. Vizsgálták a magyarországi földrengések "egyidejű" kipattanásának valószínűségét. *(Földrengés kockázat)*

D) Földrengés fészekparaméter és fészekmechanizmus meghatározáshoz olyan sebességmodellre van szükség, amely tükrözi a földkéreg és felsőköpeny sebességviszonyait a Kárpát-medence belső területein. Bebizonyosodott, hogy a korábban használt program a számítási paraméterek finomítása után sem ad jobb eredményt. Ezért új eljárás kifejlesztése mellett döntöttek. A programfuttatások eredményeként számos különböző, közel azonos menetidő reziduált szolgáltató modellt kaptak, amelyek már jól megfelelnek az a priori ismereteknek. A végső modell(ek) kiválasztásához 2010-ben meg kell keresni azokat a sebességeloszlásokat, amelyek robbantási adatokra vonatkozó reziduálja a legalacsonyabb. Folytatódott a hazai digitálisan regisztrált földrengések hipocentrumának és fészekmechanizmusának (momentum tenzorának) meghatározásával kapcsolatos munka Ezúttal a Jászságban kipattant rengések vizsgálata volt a cél. Új algoritmus alkalmazására is sor került, melynek folyamán - ismert forrásfüggvényt feltételezve - közvetlenül a momentum tenzor meghatározására kerül sor. A megoldás bizonytalanságát Monte Carlo szimulációval becsülték meg. Az MTRF-ek (moment tensor rate functions) felbontásához egy időben állandó momentum tenzor és egy ún. forrásfüggvény szorzatára eljárást fejlesztettek ki. Ennek során a valódi és illesztett (szintetikus) adatok közötti reziduál vektor L1 normáját minimalizálták azzal a feltétellel, hogy a forrásfüggvény nem lehet negatív. A tapasztalatok szerint a módszer hatékony és megbízható, publikálása 2009 folyamán megtörtént. *(Elméleti kutatás, földszerkezet)*

E) Továbbfejlesztették a köpenyben zajló áramlások felszálló ágait és a felettük kialakuló felszíni megnyilvánulásokat leíró kvantitatív 3D kvantitatív modellt. A hőmérséklet- és mélységfüggő viszkozitással számoló modellekben a viszkozitás értékek háromdimenziós

eloszlása a modellezés során alakul ki. A hőmérsékletfüggés hatására a termikus határrétegek egyre jellemzőbbek lesznek, megjelennek a viszkozitásban is. A modellszámításokban kialakult a Földre jellemző kép: a viszkozitás horizontális átlagát nézve a felszínhez képest először csökken (litoszféra-asztenoszféra), majd a mélységgel növekedik, végül az alsó határrétegben újra csökken (D" réteg). A melegebb tartományokban csökken a viszkozitás is, ezáltal növekedik a sebesség, ami a hőtranszportot könnyíti, az áramlási cella belseje melegebb lesz. A nagy és közepes földrengések visszatérési idejének kutatása a deformáció hányados megfigyelések adatai alapján végezték. A vizsgálati eljárás eredményeit döntő mértékben befolyásoló fészektérfogat számítását pontosítva kimutatták, hogy azok a különböző nagyságú földrengések esetében egyaránt jól közelíthetők azzal a térfogattal, melyekben az utórengések előfordulnak. Az eljárás alkalmazásával Arra az eredményre jutottak, hogy a visszatérési idő a legnagyobb ($MW \geq 9.0$) földrengések fészkeiben hozzávetőleg 250 év, míg a nagy és közepes ( ) szeizmikus események estében ≈103év. *(Planetáris geofizika, környezettudomány)*

F) Budapest földrengés kockázatának vizsgálatára módszert fejlesztettek ki, mely a 2008-ban használt módszernél lényegesen nagyobb terület felmérését teszi lehetővé. Az új eljárás lényege: a mikroszeizmikus zajból számított épületenkénti sajátfrekvencia értékek és a 2D altalaj modellekből nyert gyorsulásokra vonatkozó válaszspektrum egybevetése. Nyilvánvaló, a földrengés veszély annál nagyobb, minél közelebb van a válaszspektrum csúcsérték frekvenciája és az épület számított sajátfrekvenciája. Megállapítást nyert: a helyi földtani viszonyok a gyorsulás értékeket elsősorban a radiális horizontális komponens esetében változtatják (növelik), a transzverzális összetevőt jellemző gyorsulások kevésbé módosulnak. *(komplex kutatás, környezettudomány, építészet)*

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai intézményi kapcsolatok: MTA Geod. Tud. Biz. (elnök), Geof. Tud. Biz., Geomat. Tud. albiz., Dokt. Biz., VEAB szak- és munkabizottságok, Űrkut. Tud. Tanács, IUGG, IAGA, COSPAR, URSI, IAG, IASPEI, IAGA, EASE, EAEE, IAEE, Nemzetk. Litoszféra Program nemz. biz.-ok, MTA Bolyai János Kut. Ösztöndíj Kuratórium (2 fő), ELGI, MÁFI, ELTE, ME, MFTTT elnöksége, MGE, MANT, Kormányzati Koordinációs Biz. Tud. Tanácsa, MTA Mat. és Termtud. Kuratórium és fiatal kutatói albiz., AKT, AKVT, NIIF Alkalmazói Tanács, HUNGARNET, OTKA Szakkoll., Acta Geod. et Geophys. Hung. Szerk. (főszerk. is), EUROCODE 8 Szabványosítási Biz., NAÜ Földrengés Szakértői Biz., Kormányz. Koord. Biz. Tud. Tanácsa és Földrengés Elleni Védekezés Munkabiz., doktori isk. tagságok (NYME, ELTE, BME, ME), doktori és habil. biz. tagságok (NYME, BME), MAB Föld- és Környezettud. Biz., Föld Bolygó Nemzetközi Éve nemz. biz., MTA KÖTEB Energetika és Környezet albiz.

Hazai oktatási tevékenység: NYME: nappali környtud. és környmérn. képzés, Kitaibel Pál Környezettud. Doktori Iskola geo-környezettud. program, matematika, dipl. munka-konzulens, bírálóbiz. dipl. védésnél, PhD szigorlatoknál, PhD témavezetések, államvizsga biz., ELTE és ME geofizikus képzés: előadások, doktori iskola előadások, gyakorlatok és szakdolgozatok, doktori témavezetések, BMGE geodéta PhD képzés.

Nemzetközi kapcsolatok: Geophys. Prospecting (Dep. Editor), J. of Appl. Geod. (Edit. Board) Contributions to Geophys.&Geod. (Advisory Board), Central European Journal of Geosciences (elektronikus folyóirat, Versitas Kiadó) szerkesztő, CEI Earth Sci. Com. of WG Sci&Technol. (Secretary General), CEI WG on Earthquakes (coordinator). IAGA 11th Sci. Assembly (Sopron, 2009. augusztus 23-30.) és INTERMAGNET konferencia szervezőbizottság. COST 296 WP1.4, 2.2 (Mitigation of Ionospheric Effects on Radio Systems), COST P18. Cikkek bírálata kb. 8 nemzetk. folyóiratban. Brémai Nemzetközi Egy., az Orosz TA Földfiz. Int., Prágai Légkörfiz. Int., Pekingi Földtud. Int., L'Aquila-i Egy., Bécsi Űrkutatási Int., Grazi Műsz. Egy., Jénai Egy., Reading Univ., MIT Parsons Lab., Tel Aviv Univ., Bécsi Műsz. Egy., Univ. Paris Sud, CETP (St. Maur), GFZ Potsdam, Obs. de Paris, Teheran Univ., Stuttgart Univ., Római Egy. Földtud. Int., Inst. of Oceanography of the Russian Acad. Sci., Computer Aided Engineering Dep., Univ. of Architecture, Civil Engineering & Geodesy (Sofia), Central Lab. Seismic Mechanics and Earthquake Engineering (Sofia), Modra Observatory (Szlovákia), ECANES, Lengyel Tud. Akad. Geof. Int., IAG WG 4.2.4 (elnök), 9 bilaterális em.

Külföldi oktatás: Bécsi Műsz. Egy. (PhD), Babes-Bolyai Tud. Egy (ált. és alk. geofiz. MSc), Brémai Egy. (BSc)

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A nemzetközi nagypályázatok kiírási feltételeit igen kedvezőtlennek tartják. Igyekeznek részt venni az FP7-pályázatokban. 2009-ben több ilyen pályázatban közreműködők.

A Geodéziai Főosztályon 2009-ben három OTKA pályázat keretében folytattak kutatást. Ezek közül egyet 2009-ben nyertek el a dunaszekcsői partfalmozgás kinematikus és dinamikus viselkedésének tanulmányozására. Két pályázat eredményei a földtani veszélyforrások csökkentésében a harmadik pályázat eredményei az előző kettő matematikai támogatásában játszanak szerepet. E pályázatok keretében 2009-ben négy publikáció jelent meg nemzetközi, egy publikáció hazai idegennyelvű és 4 publikáció magyarnyelvű folyóiratban. Az OTKA pályázatok mellett az elnyert NIIFP pályázat az intézet számítógépes infrastruktúrájának fenntartásában játszott szerepet.

A Geofizikai Főosztály nagy összegű OTKA kutatási projektje (61013) 2009 elején befejeződött. 2008-ban és 2009 első felében az IAGA-kongresszus eredményes lebonyolítása volt az elsődleges szempont. Ennek érdekében többek között sikeres NKTH, Űrkutatási Iroda, KvvM és MTA pályázatokat nyújtottak be, illetve egyszeri támogatásokat szereztek. A 2009 során benyújtott OTKA-pályázatok részsikerrel járultak: egy posztdoktori OTKA pályázat volt a nyertesek között; egy NKTH-OTKA pályázat eredménye 2010. február 10-én még mindig nem ismert. Az űrkutatási pályázat biztosította a támogatott területeken a kutatások folytonosságát. A Ny-D Reg. Fejl. Ügynökség két (egy geodéziai és egy geofizikai) regionális GGKI-műszerpályázatot is elutasított apró, a kiírásban elrejtett formai hiányosságok miatt. 2009-ben megbízójuk volt a MAVIR Magyar Villamosenergia-ipari Rendszerirányító Részvénytársaság (téma: Az űridőjárás földi hatásai). A "European Risk from Geomagnetically Induced Currents" című, 2009-ben benyújtott konzorziális FP7 pályázatukban a partnerek: Finnish Meteorological Institute, British Geological Survey (Natural Environment Research Council), NeuroSpace Sweden, Swedish Institute of Space

Physics Sweden, Polar Geophysical Institute of the Russian Academy of Sciences, University of Maryland. Meglévő pályázati projektjeiket időarányosan teljesítették.

A Szeizmológiai Főosztály két OTKA kutatási projekt (K60394, K68308) keretében eredményes kutatási tevékenység folytatott, melyek eredményeiből 2009-ben három, vezető nemzetközi folyóiratban megjelent publikáció született és további öt megjelenésére 2010 első félévében kerül sor. Aktív szeizmológiai szakértői tevékenységet folytattak a FP6 NERIES (Network of Research Infrastructures for European Seismology) (magyar történeti földrengés információk beépítése a készülő egységes európai adatbázisba) és a FP7 SHARE (Seismic Hazard Harmonization in Europe) (magyar földrengés kockázat kutatási eredmények beépítése a készülő egységes európai kockázat becslési rendszerbe) Collaborative Project-ek keretében. Kétoldalú MTA által támogatott együttműködési kutatások során bolgár kutatókkal közösen szpeleológiai adatokat alkalmaztak Bulgária és Magyarország földrengés kockázatának kutatására, orosz geofizikusokkal globális geomágneses térerősségi adatbázist fejlesztettek (eredményeikről 2010 tavaszán az Oceanology-ban jelenik meg értekezés), német és olasz kutatókkal együtt kutatták a Föld múltbeli tektonikai fejlődését (közösen elért eredményeikről az EGU 2009. évi közgyűlésén tartottak előadást. Az Allianz Hungária Zrt. megbízásából „A földrengés veszély mértéke és kiterjedtsége Magyarországon" című szerződés keretében földrengés kipattanási valószínűségeket határoztak meg. Az MTA FKI kutatóit bevonva NKTH-OTKA pályázatot nyújtottak be.

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

1. Bus Z, Grenerczy Gy, Tóth L, Mónus P: Active crustal deformation in two seismogenic zones of the Pannonian region — GPS versus seismological observations. Tectonophysics, 474 (1-2), 343-352 (2009)
2. Kronberg EA, Kis Á, Klecker B, Daly PW, Lucek, E: Multipoint Observations of ions in the 30-160 keV energy range upstream of the Earth's bow shock. Journal of Geophysical Research-Space Physics, Vol. 114 Art. Num: A03211. doi:10.1029/2008JA013754 (2009)
3. Mentes G, Eper-Pápai I: Relations between microbarograph and strain data. Journal of Geodynamics, 48, 110-114. (doi:10.1016/j.jog.2009.09.005). (2009)
4. Mentes G, Theilen-Willige, B, Papp, G, Síkhegyi, F., Újvári, G. 2009: Investigation of the relationship between subsurface structures and mass movements of the high loess bank along the River Danube in Hungary. Journal of Geodynamics, 47, 130-141. (doi:10.1016/j.jog.2008.07.0005)
5. Papp G, Szeghy E, Benedek J: The determination of potential difference by the joint application of measured and synthetical gravity data: a case study in Hungary. Journal of Geodesy, 83(6), pp. 509-522. (2009)
6. Sátori G, Mushtak V, Williams E: Schumann Resonance Signature of Global Lightning Activity, Chapter 16 in *Lightning: Principles, Instruments and Applications,* pp. 347-386. eds. H.D. Betz, U. Schumann, P. Laroche, Springer Science+ Business Media B.V., ISBN: 978-1-4020-9078-3 (2009)
7. Szalai S, Novák A, Szarka L: Depth of Investigation and vertical resolution of surface geoelectric arrays, Journal of Engineering and Environmental Geophysics 14, pp. 15-23, (2009)

8. Újvári G, Mentes Gy, Bányai L, Kraft J, Gyimóthy A, Kovács J: Evolution of a bank failure along the River Danube at Dunaszekcső, Hungary. Geomorphology, 109, 197-209. (doi:10.1016/j.geomorph.2009.03.002). (2009)
9. Varga P: Common roots of modern seismology and of earth tide research. A historical overview, Journal of Geodynamics, 48, 241-246 (2009)
10. Varga P, Süle B, Illés AE: On the tidal heating of Enceladus, Journal of Geodynamics, 48, 247–252 (2009)
11. Wéber Z: Estimating source time function and moment tensor from moment tensor rate functions by constrained L1 norm minimization, Geophysical Journal International 178, 889–900, doi: 10.1111/j.1365-246X.2009.04202.x (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	69			Ebből kutató[2]:			33
PhD, kandidátus:	12	MTA doktora:	5	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							7
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							114
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							108
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			19
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	22			idegen nyelven:			63
összesített impakt faktor[6]:	36,057			összes hivatkozás száma[7]:			708
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							554
Magyarul könyv[8]/atlasz:	1			könyvfejezet:	2	jegyzet:	1
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	2	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	0,33	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	74			poszterek száma[12]:			40
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							10
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	16			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							12
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4			Diplomamunkát (BSc):			2
Diplomamunkát (MSc):	2			PhD-t:			10
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							1810
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						250,07	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	4			Teljes saját bevétel[18]:		66,04	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						25,36	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						3,74	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]							MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						1,846	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						35,10	MFt

GEOKÉMIAI KUTATÓINTÉZET
1112 Budapest, Budaörsi út 45.
Telefon/Fax: 319-3137
e-mail: demeny@geochem.hu; honlap: www.geochem.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet 2009-ben is folytatta a litoszféra anyagának, folyamatainak jobb megismerését célzó azon alapkutatásokat, amelyek az intézetben nagy hagyományokkal rendelkeznek és egyben nemcsak a hazai szakmai közvélemény, hanem a nemzetközi tudományos közösség által is elismertek. Ezek az alapkutatások az ásvány-, kőzet-, és fluidum-képződés, az izotóp-geokémia, a környezet-geokémia és a szerves-geokémia területén folytak. Feladatuk a litoszférát felépítő, a geodinamikai folyamatok rekonstrukcióját lehetővé tevő fontos magmás, metamorf és üledékes kőzettípusok és velük együtt előforduló fluidumok képződési folyamatainak pontosabb megismerése volt. Mind a geokémia belső fejlődése, mind pedig a természetes környezet állapotának megismerése, megőrzése, az életminőség javítása szempontjából egyre nagyobb jelentőségű környezettudományi kutatások keretében folytatták a geoszférákban, illetve azok határfelületein végbemenő geokémiai folyamatok kutatását. Ezek közül elsősorban a múltbéli és jelenkori környezet állapotát és változásait, a nehézfémek körforgalmát, a talajok, valamint a felszíni és felszín alatti vízbázisok, hévizek sajátságait, valamint az épített környezet és kulturális örökségünk egyes tárgyi emlékeit ért antropogén hatásokat vizsgálták. Folytatták az egyes hazai ásványi nyersanyagaink képződését, migrációját és felhalmozódását eredményező, illetve befolyásoló geokémiai folyamatok kutatását is.

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 ásvány-kőzettani kutatásaik keretében tisztázták a kisfokú metamorf pelites eredetű kőzetekben uralkodó rétegszilikát ásványok (muszkovit, paragonit és prekurzoraik) együttes megjelenésének körülményeit. A szakirodalmi adatok kritikai értékelésével kimutatták, hogy a hőmérséklet változása nem játszik szerepet ezen ásványfázisok képződésében vagy hiányában. Megállapították, hogy jelentős különbségek vannak egy adott kőzet tényleges (analizált) és effektív (a metamorfózis során ható) kőzetkémiai összetételei között. A különbség oka a metamorf átalakulás során inertként viselkedő átöröklött, törmelékes ásvány- és kőzetszemcsék jelenlétével magyarázható. E hatást figyelembe véve megállapították, hogy a kőzetek Na/(Na+Al) és K/(K+Al) arányainak csökkenése kedvez a paragonit képződésének. Ezzel cáfolták azt a korábbi, a nemzetközi szakirodalomban elterjedt nézetet, mely szerint egy kőzet Na-tartalmának vagy Na/K arányának növekedése kedvezne a paragonit képződésének. A jelen tapasztalatok szerint a paragonit az Al-ban gazdag és kevés Na-t, K-t Ca-t (valamint kevés Fe-t és Mg-t) tartalmazó kémiailag erősen érett (erősen mállott) és/vagy utómagmás hidrotermális hatásra erősen kilúgozott finomtörmelékes eredetű kőzetekben képződik. Ez a felismerés egyben kőzetkémiai magyarázatul is szolgál a különböző geotektonikai rendszerekben a filloszilikát együttesekben már korábban kimutatott szignifikáns különbségek

értelmezéséhez. Termodinamikai modellezéssel kimutatták, hogy – adott kőzetkémizmus esetén – a metamorf nyomás növekedése kedvez a paragonit képződésének A paragonit tartalmú ásványegyüttesek stabilitási tartományai nőnek és a kisebb nyomásértékek felé tolódnak el a teljes kőzet Na/(Na+Al) és K/(K+Al) arányainak csökkenésével.

Magmás kőzettani-geokémiai kutatásaik során hozzájárultak az ausztráliai Yungul karbonatit genetikai vizsgálatához. Az előzetes feltételezések szerint a képződmény genetikai kapcsolatban van egy jelentős fluorit-előfordulással. Az intézetben végzett stabilizotóp-geokémiai vizsgálatok kimutatták, hogy ugyan a kőzet kémiai összetétele eltér az átlagos karbonatitétól, a Föld köpenyéből származó karbonátolvadék-eredet azonban megállapítható.

A kanadai Wekusko Lake karbonatit-kimberlit összlet gyémántpotenciáljának geokémiai vizsgálata során meghatározták a kőzetösszlet széntartalmának eredetét. A korábbi vizsgálataikhoz kapcsolódóan folytatódott más kanadai karbonatitok elemzése is. Az eddig nem ismert Paint Lake előfordulás karbonatitjainak sajátos magmás-hidrotermás fejlődését mutatták ki, ami a masszívum egyéb előfordulásainak genetikájára is fontos információt nyújt.

Vizsgálták a Dél-Bakony és Balatonfelvidék jól ismert lelőhelyeiről származó peridotit xenolitok klinopiroxénjeinek rácsparamétereit (cellatérfogat, M1 és M2 térfogat). Az eredmények azt mutatják, hogy a klinopiroxének a protogranuláris, a porfiroklasztos és néhány ekvigranuláris szövetű xenolitban egy ún. „primer" összetételi trendet alkotnak, amely a szerkezeti, kémiai és szöveti változásokat tükrözi. A trend azt is mutatja, hogy a deformáció a nyomás és a hőmérséklet csökkenésével növekszik. A protogranuláris xenolitok mutatják a legnagyobb nyomást (közel a gránát stabilitás határához), míg az ekvigranuláris xenolitok jóval kisebb nyomáson (a plagioklász stabilitás tartományhoz közel) kerültek egyensúlyba. Néhány ekvigranuláris xenolit, továbbá a poikilites és a mozaik szövetű xenolitok kristálykémiája eltér a „primer" trendtől, ezek valószínűleg kisebb nyomáson képződtek, a plagioklász stabilitási tartomány közelében, vagy azon belül. A deformáció és a nyomás közti negatív korreláció a „primer" sorozaton belül a térség alatti köpenydiapír jelenlétével magyarázható, amely deformációt és litoszféra kivékonyodást okozott a Kárpát-Pannon térségben.

A metamorf és magmás geokémiai kutatási témák alapkutatási jellegűek, így közvetlen gazdasági hasznot nem jelentenek. Az ausztráliai Yungul karbonatit genetikai vizsgálatát a NiPlats Australia Ltd nevű, nyersanyagkutatással foglalkozó cég munkatársaival együtt végezték. Mivel a képződmény a hozzá közel eső, kb. 6,7 millió tonnás készletet képviselő fluorit-előfordulással genetikai kapcsolatban lehet, így a geokémiai elemzésnek közvetlen nyersanyag-kutatási vonatkozásai lehetnek.

A hazai ásványi nyersanyagok kutatása során folytatták a Dunántúli-középhegység jura időszakában felhalmozódott üledékes környezetű Mn-telepek vasas, kovás, oxidos, illetve vasas, oxidos képződményeinek ásványtani, geokémiai és szöveti vizsgálatát. Az úrkúti ércesedést fedő kovás, vasas kifejlődés komplex vizsgálata alapján megállapították, hogy az oxigénszegény, neutrofil környezetben Fe(II) oxidáló baktériumok működésével képződött, tehát őskörnyezeti indikátor. A csárdahegyi kovás-vasas ércben mikrobiális tevékenység nyomait mutatták ki morfológiai és különböző típusú amorf szénfázisok jelenléte alapján, valamint vas-szulfidos előfázis jelenlétét valószínűsítették mikromorfológiai és nyomelem-tartalom vizsgálatok alapján (kén-gipsz előfordulás). Folytatták a Csárdahegy területéről, az úrkúti karbonátos ércesedésből és az úrkúti medencét alkotó formációkból származó

mélyfúrások és fúrási magminták kémiai adatsorainak matematikai statisztikai és 3D térinformatikai feldolgozását.

Kőolajok reprezentatív csoportjainak nyomelem-tartalmát vizsgálva arra jutották, hogy négy fém (Co, V, Ni, Mo) koncentrációja a biomarkerek krakkmutatóihoz hasonló besorolást tesznek lehetővé. A kőolajmintákat nyomelem-tartalmuk szerint csoportosították, és megállapították a különböző területek kőolajainak nyomelem-forrásait, valamint hogy a Pannon-medence magyar kőolajai jól tükrözik a rendkívül tektonizált szerkezeti viszonyokat. Az adatok jó összefüggést mutattak a kőolajok keletkezési, vándorlási és tárolási körülményeivel is.

Kőolajfrakciók izotópos összetételét vizsgálva megállapították, hogy a frakciók szénizotópos összetételén alapuló technikák a magyarországi, nagy hőmérsékletű és érettségű olajok esetében nem hoztak kielégítő eredményeket a kőolajok rokonításában, és így a valószínűsíthető anyakőzetek vizsgálatára sem alkalmasak. Bevezettek egy új, eddig nem alkalmazott módszert, a deutérium-görbék használatát, amely hasznosnak bizonyult a vizsgált olajminták esetében, és a két módszer kombinációja alkalmas volt a különböző eredetű olajok csoportosítására.

A nyersanyagok kitermelésével kapcsolatos közvetlen anyagi hasznon túl az eredmények gyakorlati hasznosítása a környezetszennyezés és elhárítás, valamint a bánya-rekultivációs tevékenység keretében valósulhat meg.

A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak vizsgálata

A talaj-nehézfém kölcsönhatás vizsgálata témakörben folytatták a nehézfémekkel adszorbeált agyagásványok nedvesítési-kiszáradási, illetve a nehézfémek talajbeli szorpciós viselkedésének kísérletes vizsgálatát. Megállapították, hogy a Cu, Pb Co, Cd, Zn és K elemekkel adszorbeált montmorillonitok krisztallitmérete c-tengely és laterális irányban egyaránt jelentősen csökken a nedvesítési-kiszáradási ciklusok számával. E változások azonban nem feltétlenül, nem minden fém esetében hatnak jelentősen az agyag vagy talaj fizikai-kémiai tulajdonságaira, például a montmorillonitok duzzadóképességére. A kálium adszorbeált montmorillonit azonban a ciklusok számának növekedésével egyre kevesebb ólmot képes megkötni. Ugyanakkor az ólomnak tizede nem-kicserélhető formába kerül.

Talajokon elvégzett nehézfém-szorpciós kísérleteik eredményei azt mutatják, hogy a réz és a cink elsősorban a szervetlen talajalkotó ásványfázisokon, míg az ólom inkább a talaj szerves alkotóin kötődik meg a három fém együttes jelenléte esetén. A kompetitív helyzet a vasoxidok szerepének növekedését is eredményezte az ólom esetében a szerves anyagban szegény mintákon, ami azt jelzi, hogy az oldatban levő többi fém (elsősorban a réz) kiszorítja az ólmot az agyagásványok megkötődési helyeiről. Úgy találták, hogy gyengén alkáli körülmények között a cink megkötődése csak kissé, míg az ólomé és a rézé nagymértékben növekedett. E két utóbbi elem esetében jelentős szerepe van a kicsapódásnak (elsősorban karbonátként), de míg az ólom esetében ez kizárólagos folyamat a megkötődésben, addig a réznél sokkal jelentősebb az agyagásványok felületén történő megkötődés jelentős növekedése a lúgos kémhatásnak köszönhetően.

A talaj-agyag-nehézfém kapcsolat mélyreható vizsgálatának eredményei megkönnyíthetik a talajok környezetszennyezőkkel szembeni pufferkapacitásának jobb megismerését, segítve a szennyezések pontos elkülönítését és lehatárolását, valamint viselkedésének megértését. Az eredmények fontos adatokat szolgáltattak hulladéktárolók agyag védőrétege fejlődésének, változásának megismeréséhez is.

A *paleoklíma- és környezet-rekonstrukciós kutatásaik* keretében folytatták a barlangi képződmények, édesvízi mészkövek, kagylóhéjak, faévgyűrűk és tavi üledékek komplex geokémiai vizsgálatát. A bükk-hegységi Kiskőháti-barlang képződményeinek tanulmányozásával lehetővé vált a régió klíma- és csapadékrekonstrukciója az elmúlt ezer évre vonatkozóan. Kimutatták, hogy a Kisjégkorszak és a Középkori Meleg Időszak között nem csak a hőmérsékletben, hanem a csapadék mennyiségében is jelentős különbséget is képesek jelezni a barlangi képződmények kémiai és stabilizotóp-összetételei. A Baradla-barlang képződményének stabil H-C-O izotópos vizsgálata a legutolsó klímaoptimum és a rákövetkező jégkorszak átmenetének klimatikus viszonyait tükrözi, amely jó egyezést mutat az alpi régióból leírt változásokkal.

A gerecsei és budai-hegységi édesvízi mészkövek stabilizotóp-geokémiai vizsgálatával jelentősen módosították eddigi ismereteinket a képződmények keletkezési idejével, paleohidrológiájával, a Duna-teraszokkal való kapcsolatával kapcsolatban. Az U/Th sorozatos kormeghatározásnak köszönhetően lehetőség nyílt a mészkövek képződése során fennálló éghajlati viszonyok pontosabb rekonstrukciójára is. Az édesvízi mészkőképződést kísérő stabilizotóp-geokémiai folyamatok megértéséhez recens példákon (Egerszalók és Pamukkale, Törökország) történtek elemzések.

A Balatonból származó recens kagylóhéjak vizsgálata alapján megállapították, hogy a növekedési mintázat és a stabilizotóp-összetételek tükrözik a környezeti paraméterek változékonyságát, ami bizonyíték a módszer múltbéli környezet- és klímarekonstrukcióra való alkalmazhatóságára. Rézkori településekből előkerült kagylómaradványok elemzésével kimutatták, hogy – hasonlóan a korábban meghatározott bronzkori változásokhoz – a késő-rézkor során jelentős klímaváltozás következett be, ami a régészeti bizonyítékok alapján társadalmi (településszerkezeti és mezőgazdasági) változásokat is okozott. A tiszapüspöki Karcsú-ér fúrásszelvényből származó szubrecens kagylóhéjak stabilizotóp-összetétel vizsgálatának eredményei a terület paleohidrológiájához szolgáltattak kiegészítő információkat. A héjak előzetes nyomelem-tartalmának vizsgálata alapján valószínűsíthető a 7080 évvel ezelőtti talajerózió.

Dendrokronológiai módszerrel dátumozott cirbolyafenyők évgyűrűin elvégzett geokémiai vizsgálatokkal szolgáltattak bizonyítékot a közeli külszíni kénkitermelés környezetterhelésére. Az adatok segítettek értelmezni a vizsgált cirbolyafenyők növekedésében tapasztalt átmenetileg leromlott hőmérsékleti érzékenységet is.

Szervesanyag-tartalmukat tekintve igen eltérő holocén és pleisztocén tavi üledékek szerves komponenseit vizsgálva kimutatták az üledékképződéskor jellemző élőlény-együttesek változását. Lipid-mutatók segítségével különbséget tettek az üledékek szerves anyagának forrásai között, valamint igazolták a feltételezett vízszint-ingadozásokat is. Az irodalmi adatokkal történt összehasonlítás során megállapították, hogy az üledékekben talált szerves anyagok egyes jellemzői egyediek a hasonló földtani környezetekben.

A fenti képződmények vizsgálatával a földtörténeti közelmúlt klíma- és környezetváltozásait lehet nyomon követni. A múltbeli klímaváltozások folyamatának megértése, a paleoklimatológia nagymértékben járul hozzá a jövőbeli klímaváltozások előrejelzéséhez, ezért a vizsgálatok nagy gazdasági és társadalmi jelentőségűek. Mindemellett a recens hévforrások vizsgálatának turisztikai vonzata is van.

Vízgeokémiai kutatásaik során folytatták a Budapest környéki hévizek és összetevőik eredetének vizsgálatát a pontos áramlási rendszer jobb megismerése érdekében.

Tapasztalataik szerint változó mértékben, de mindegyik hévízre jellemző a viszonylag nagy szulfáttartalom (100-400 mg/l). Kimutatták, hogy a hévízben oldott szulfát S-izotópos összetétele tengeri szulfát beoldódására utal, valószínűleg perm korú evaporitokból. Ezzel szemben a langyos vizekben (Lukács-források, Bründl-forrás) a szulfát valószínűleg a tardi agyagban lévő pirit beoldódásából származik. A szulfát és a víz O-izotópos összetétele alapján feltételezik, hogy a legfeljebb 80-90 °C-os vízben, aminek kora 20 000 évnél kisebb, beállt az oxigénizotópos egyensúly. Ha ez igazolódik, akkor ez lesz a tudományos irodalomban az első olyan leírás, ahol a 80-90 °C tartományban becslést adnak a szulfát-víz oxigénizotópos egyensúly elérésének idejére.

Termálvizek oldott szerves anyagaival kapcsolatos kutatások során vizsgálták a hévizek szerves és szervetlen fáciesének összefüggését. A szerves anyag bomlása szén-dioxid, metán és ammónia mellett kis molekulasúlyú, vízben jól oldódó aromás szerves vegyületeket is termel, amennyiben a hőmérséklet elér egy 80°C körüli küszöbértéket, és ezen szerves összetevők minősége és a homológ sorok tagjainak aránya függ a vizek hőmérsékletétől. Megállapították, hogy a hévizek eredetétől és korától is függ a szerves fácies. A vizek szervetlen összetevőinek mennyiségére hatással van a szerves anyagok bomlása, de nem a teljes oldott szerves széntartalom a befolyásoló tényező, hanem a kromatografálható szerves anyag megjelenése egy adott hőmérsékleti küszöbérték felett. Egyes oldható szerves anyag típusok koncentrációja alapján kialakított fácies csoportokhoz tartozó szervetlen jellemzők is karakterisztikusan különböznek. Vizsgálták a makói-árok több nagymélységű termálvize szerves összetevőinek időbeli változását is, és megállapították, hogy ilyen szempontból ezek a képződmények stabilnak tekinthetők. Eredményeik szerint a hévizek fulvosavai oxigénben szegényebbek, az O/C hányadosaik pedig szignifikánsan eltérnek a felszíni vizektől, ráadásul alifásabbak is.

Napi monitoring-vizsgálatok segítségével összehasonlították a szentendrei és a váci Duna-ágak egyes vízkémiai paramétereit. Megállapították, hogy a két Duna-ág vize azonosnak tekinthető. A vízkémiai paraméterek pozitív csúcsai a vízállás hirtelen megnövekedéséhez voltak köthetők. A Fővárosi Vízművek Zrt. hidrodinamikai modelljének eredményeivel összevetve a $\delta^{18}O$ értékeket sikerült egy olyan képletet alkotni, amellyel a vizsgált víznyerő kutak várható $\delta^{18}O$ értékei a vizsgált időszakban becsülhetővé váltak. A területen vizsgált megfigyelő-kutak vízhőmérsékletét a partközeli régióban néhány hónapos eltolással a Duna vízhőmérséklete befolyásolja, a sziget közepén azonban a vízhőmérsékletben évszakos változás nem mutatható ki.

Magyarország nagyon gazdag hévizekben, amelyeket számos célra használnak (vízgyógyászat, sport, rekreáció, ásványvíz palackozás). Engedélyezési és üzemeltetési szempontból rendkívül fontos a vízáramlást leíró hidrodinamikai modell megbízhatósága, pontossága, hiszen ezen alapszik a hévizek hosszú távú kitermelhetősége, valamint a víz minőségének biztosítása. A kutatásokat a GWIS Kft.-vel együttműködve végezték.

A *kulturális örökség vizsgálata* témakörben több magyarországi lelőhelyről vizsgáltak régészeti grafitos kelta kerámiákat a vaskorból. Kimutatták, hogy a grafitos kerámia készítéséhez alkalmazott grafitos soványító anyag import eredetű, ásványos és geokémiai összetétele alapján a dél Cseh-masszívum ún. Tarka Egységének környékéről származik. Ez az eredmény jól illeszkedik a korábbi vizsgálatok következtetéseihez. Petrográfiai megfigyelések alapján sikerült kizárni más potenciális grafit forrásrégiókat is. A régészeti lelőhelyen grafitos kőzet töredékeit találták meg cölöphely betöltésekben, mely arra utal, hogy az import grafitot helyben törték és keverték a helyi eredetű agyagos alapanyagba. Tehát

Bátaszék esetében bebizonyosodott a grafitos kerámiák helyi készítésének ténye. A fenti vizsgálati eredmények arra engednek következtetni, hogy a kelták kiterjedt kereskedelmi szövetséggel rendelkeztek.

Módszert dolgoztak ki a régészeti csontanyagon végzendő DNS vizsgálatok találati sikerességének növelésére, az apatit rendezettség és szerves anyag várható mennyisége közötti kapcsolat feltárásával. A gyakorlati tapasztalatok alátámasztották a módszer használhatóságát, alkalmazásával jelentős anyagi megtakarítás érhető el a DNS vizsgálatok vegyszer-felhasználásának csökkenésével.

A hazai neolitikum egyik legjelentősebb lelőhelyén, az Aszód-Papi földek környéki régészeti lelőhelyekről származó csiszolt kőeszközök részletes petroarcheológiai vizsgálatával megtalálták az eszközök nyersanyagául szolgáló finomszemcsés bazaltos andezit egy lehetséges lelőhelyét az aszódi telephez közel eső területen, a Cserhát-hegységben.

Zöldpala metabázit, obszidián és dácit kőeszközök, továbbá nyersanyagként szóba jöhető kőzetminták összehasonlító elektron-mikroszondás vizsgálatát végezték. Az eredmények azt mutatták, hogy a Bakonyból és a Balatonfelvidékről származó metabázit kőeszközök anyaga a Cseh Masszívumból származik. A Kárpátaljáról származó obszidián és a dácit kőeszközök anyaga a mikroszondás ásványkémiai vizsgálatok alapján teljesen megegyezik a korábban lehetségesnek tartott nyersanyagok anyagával.

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

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A *metamorf ásvány-kőzettani kutatások* keretében hivatalos nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn TéT pályázatok keretében a Zágrábi Egyetemmel (Horvátország), továbbá a granadai és a jaeni egyetemekkel (Spanyolország). A 2007-ben indult horvát-magyar együttműködés elsődleges célja a Medvednica- és a Szlavóniai-hegység metamorf fejlődéstörténetének vizsgálata. A szintén 2007-ben kezdődött spanyol-magyar együttműködés célja az antropogén folyamatok során és a diagenezis, a talajképződés eredményeként kialakuló rétegszilikát-átalakulások nyomon követése transzmissziós elektronmikroszkópos és röntgen-pordiffrakciós módszerek együttes alkalmazásával.
A témakörben további informális nemzetközi együttműködést folytattak a baltimore-i Johns Hopkins Egyetemmel, a cádizi, a granadai, az oviedoi, a padovai egyetemekkel, valamint a Krétai Műszaki Egyetemmel, a negevi Ben Gurion Egyetemmel és a Brit Geológiai Szolgálattal.

A *magmás kőzettan-geokémiai kutatásaikat* a hazai kutatóhelyek közül az MTA Izotópkutató Intézetével együttműködésben végezték. A témakörben informális nemzetközi kutatási kapcsolatot tartottak fenn a Bécsi Természettudományi Múzeummal, a londoni Birkbeck College munkatársaival, a lausanne-i, a müncheni, a la lagunai egyetemekkel, az University of Manitoba kutatóival, valamint a NiPlats Australia Ltd nyersanyagkutató céggel.

A *hazai ásványi nyersanyagok kutatása* sokrétű informális hazai és nemzetközi együttműködés keretében folyt. Magyarországon elsősorban a Magyar Állami Földtani Intézettel, a Szegedi Tudományegyetemmel, a Debreceni Egyetemmel, és az MTA

Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézetével működtek együtt. Az Amerikai Geológiai Szolgálattal, az Orosz Tudományos Akadémiával, az ausztráliai Monash University kutatóival, a freibergi Bányászakadémiával, valamint a Stanford Egyetem, az ausztráliai Curtin University mukatárasaival, a newcastle-i, a lausanne-i és a belgrádi egyetemekkel, továbbá az International Research Institute of Stavanger munkatársaival nemzetközi együttműködést folytattak.

A *talajok környezetgeokémiai és -ásványtani kutatása* az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével és az MTA Kémiai Kutatóközpont Anyagtudományi és Környezetkémiai Kutatóintézetével együttműködve történt.

A *paleoklimatológiai tanulmányok* elsősorban az Eötvös Loránd Tudományegyetem, a Természettudományi Múzeum, a Szegedi Tudományegyetem, a Magyar Állami Földtani Intézet, az MTA KFKI Atomenergia Kutatóintézetével, az MTA Izotópkutató Intézetével valamint a Régészeti Intézet és a Kulturális Örökségvédelmi Szakszolgálat munkatársaival közös kutatómunka keretében folytak. Magyar-török TéT pályázat keretei között folyik együttműködés a denizli-i Pamukkale University mukatársaival az édesvízi mészkövek kutatása kapcsán. További együttműködést tartottak fenn a hannoveri Leibniz Institute for Applied Geosciences, a tajvani University of Taipei, a tartui, a lausanne-i, a Zágrábi Egyetem, a Bécsi Műszaki Egyetem, a bécsi Természettudományi Múzeum, valamint a romániai Erdészeti Kutató és Gazdálkodó Intézet kutatóival.

Vízgeokémiai kutatásaikat az Eötvös Loránd Tudományegyetem, a Szegedi Tudományegyetem, Magyar Állami Földtani Intézet, a VITUKI Kht., valamint a GWIS Kft. és a Fővárosi Csatornázási Művek munkatársaival együttműködve végezték. Kutatásaik során nemzetközi kapcsolatot tartottak fenn a lublini Maria Curie-Skłodowska Egyetemmel, a Potsdami Egyetemmel, a müncheni Helmholz Zentrum és svájci ETH munkatársaival.

A *kulturális örökség vizsgálata* témakörben a Kulturális Örökségvédelmi Szakszolgálattal, az MTA Régészeti Intézetével, az MTA Művészettörténeti Kutatóintézetével, az MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézetével, a Magyar Nemzeti Múzeummal, az Iparművészeti Múzeummal, a Hopp Ferenc Kelet-Ázsiai Művészeti Múzeummal, a Szépművészeti Múzeummal, az Aquincumi Múzeummal, a sárospataki II. Rákóczi Ferenc Múzeummal, a Kiscelli Múzeummal valamint a Pécsi Tudományegyetemmel és az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel folytattak közös kutatásokat. Nemzetközi együttműködést folytattak a bécsi Iparművészeti Egyetemmel, az osztrák Műemlékvédelmi Hivatallal és a Tübingeni Egyetemmel.

Az intézet egy kutatója részt vett az IUGS Subcommission on Systematics of Metamorphic Rocks munkájában, az albizottság tagjaként és a Very low-grade metamorphic rocks nemzetközi munkacsoport vezetőjeként. Az intézet igazgatója az MTA Geokémiai és Ásvány-Kőzettani Tudományos Bizottság elnöke, három további kutató a bizottság tagja. Egy kutató a bizottság Archeometriai Munkabizottságának titkára. Egy kutató az MTA Geonómiai Tudományos Bizottságának tagja és a Geokémiai és Ásvány-Kőzettani Tudományos Bizottság Szerves Geokémiai Albizottság elnöke. Két kutató a Magyarhoni Földtani Társulat választmányának tagja, egyikük tiszteleti tag. Egy kutató a társulat Ásványtan-Geokémiai Szakosztályának elnöke, egy másik a szakosztály vezetőségének tagja. Egy kutató a társulat Agyagásványtani Szakosztályának titkára. Az intézet igazgatója a Bolyai János Ösztöndíj Szakértői Kollégium tagja, egy kutatója az OTKA Földtudomány I. zsűri tagja. Egy kutató az IUGS Magyar Nemzeti Bizottság titkára, egy másik a Hidrogeológusok Nemzetközi Társulata

Magyar Nemzeti Tagozatának titkára. Egy kutató az European Society for Isotope Research pénzügyi ellenőrző bizottságának tagja.

Az intézet igazgatója az Earth System Science Data, valamint a Central European Geology folyóiratok szerkesztőbizottsági tagja. Egy kutató az Acta Mineralogica et Petrographica folyóirat szerkesztő bizottságának tagja.

Az intézet egy kutatója egyetemi magántanár a Szegedi Egyetemen, földtudományi szakon, egy másik ugyanitt a Földtudományi Doktori iskola törzstagja. Az intézet igazgatója az ELTE Kari és Szakterületi Habilitációs Bizottságok tagja. Egy kutató PhD kurzust tartott az ELTE Földtudományi Doktori Iskolájában, ketten ugyanitt a graduális képzésben tartottak gyakorlatot, illetve speciális kollégiumokat. Három további kutató tartott a Szegedi Egyetemen speciális kollégiumot, közülük egy a Pécsi Tudományegyetemen és a Képzőművészeti Egyetemen is oktatott.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A beszámolási évben a GKKI kutatói 5 OTKA pályázatban voltak témavezetők és háromban szerepeltek alvállalkozóként. A projektek a munkatervekben meghatározott feladatok szerint haladnak.

Az intézet kutatói témavezetőként a tárgyévben egy OTKA pályázaton nyertek, amely 2010-ben indul (konzorciumi társpályázat az Iparművészeti Múzeummal „A magyarországi köz-és magángyűjteményekben fellelhető habán kerámiák művészettörténeti és archeometriai kutatása, számítógépes adatbázis és szakkatalógus elkészítése” címmel).

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

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

1. Chakhmouradian AR; Bohm CO; Demeny A; Reguir EP; Hegner E; Creaser RA; Halden NM; Yang P “Kimberlite” from Wekusko Lake, Manitoba: Actually a diamond-indicator-bearing dolomite carbonatite. Lithos 112: Suppl. 347-357 (2009)
2. Siklosy Z; Demeny A; Vennemann TW; Pilet S; Kramers J; Leel-Ossy Sz; Bondar M; Shen CC; Hegner E Bronze Age volcanic event recorded in stalagmites by combined isotope and trace element studies. Rapid Communications in Mass Spectgrometry 23: 801-808 (2009)
3. Sipos P; Németh T; Kovács Kis V; Mohai I Association of individual soil mineral constituents and heavy metals as studied by sorption experiments and analytical electron microscopy analyses. Journal of Hazardous Materials 168: 1512-1520 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Geokémiai Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	31			Ebből kutató[2]:			18
PhD, kandidátus:	8	MTA doktora:	2	levelező tag:	0	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							9
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							33
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							32
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			7
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	8			idegen nyelven:			12
összesített impakt faktor[6]:	14,576			összes hivatkozás száma[7]:			229
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							173
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	2	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	2	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	20			poszterek száma[12]:			28
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3			Diplomamunkát (BSc):			1
Diplomamunkát (MSc):	9			PhD-t:			2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							214
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						118,879	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	3			Teljes saját bevétel[18]:		39,85	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						10,90	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						5,78	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						5,721	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						5,95	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						11,5	MFt

IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET
1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33., 1525 Budapest, Pf. 77.
Telefon: 392-2531, Fax: 392-2533,
e-mail: wojn@iki.kfki.hu, honlap: www.iki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az Izotópkutató Intézet fő feladatai 2009-ben is több tevékenységi területen oszlottak meg.

A kutatás terén céljai négy tematikus csoportba tartoznak: nukleáris kutatások; sugárzások hatásainak vizsgálata, dozimetria; katalizátorok és katalitikus folyamatok vizsgálata; nagyenergiájú sugárzás és katalizátorok alkalmazása környezetvédelmi technológiákban. A kitűzött feladatok részben kapcsolódnak az előző években már megkezdett munkához, ill. újabban kialakult projektekhez.

A nukleáris analitikai módszerek alkalmazása és továbbfejlesztése elsősorban a prompt gamma aktivációs analízis (PGAA) módszerének továbbfejlesztését (érzékenység- és szelektivitásnövelés, adatkönyvtár bővítés), valamint a módszer újabb területeken történő alkalmazását (3D képalkotás, -elemanalitika) tűzték ki célul.

A nukleáris és egyéb anyagok, ill. izotópjaik kimutatása, és mennyiségeik meghatározásával kapcsolatos főbb feladatok a nukleáris biztosítéki tevékenység analitikai módszereinek továbbfejlesztését irányozták elő négy fő analitikai módszer – egyrészt a gamma-spektrometria, másrészt a neutron koincidencia- és késő neutronszámlálás, harmadrészt a nagyérzékenységű tömegspektrometria (LA-ICP-MS), valamint a retrospektív dozimetria – kombinálásával.

A sugárzások hatásainak vizsgálata, dozimetria terén új, nagyérzékenységű termolumineszcens, valamint optikai stimuláció hatására lumineszkáló dozimetriai anyagok előállítása és vizsgálata, továbbá a Sunna filmdoziméterek kis dózistartományban történő alkalmazására megfelelő mérési módszer kidolgozása volt a tervezett feladat.

A katalizátorok és katalitikus folyamatok témakörben fém-fém (Pd, Pt, Te, Au), ill. fém-félvezető (FeO_x, CeO_x) nanoszerkezetek, belőlük készített szilicium-dioxid hordozós modellkatalizátorok vizsgálata; továbbá nagy felületű hordozós és modellkatalizátorokban az arany-aktív oxid határfelület kialakulásának, kölcsönhatásának vizsgálata; valamint az energiakonvertálás szempontjából perspektivikus folyamat, a metán száraz reformálásának vizsgálata kompozit oxid felhasználásával készített Ni és kétfémes katalizátorokon; illetve prokirális telítetlen ketonok aszimmetrikus hidrogénezésének Pd katalizátorokkal való vizsgálata volt a kijelölt tevékenység.

A nagyenergiájú sugárzás és katalizátorok alkalmazása környezetvédelmi technológiák témakörben vízminősítő laboratórium felállítása, analitikai eljárások kidolgozása vizek szennyező komponenseinek megállapítására, egyidejű sugárzásos és katalitikus szennyvízkezelés hatékonyságának követésére, valamint katalitikus nedves oxidációk vizsgálata Ru-Ir oxid/Ti monolit katalizátorokon, valós ipari technológiai vizekkel, továbbá környezetvédelmi szempontból perspektivikus katalitikus folyamatok és katalizátorok (dinitrogén-oxid bontás zeolitokon, $NiMoO_x/Al_2O_3$ HDS katalizátorok) témáinak vizsgálata volt a kitűzött feladat.

Az intézet munkájának számottevő része a közvetlen kutatási tevékenység végzése mellett szakmai-tudományos háttértevékenység ellátására is irányul (elsősorban az Országos Atomenergia Hivatal és kisebb részben a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség számára).

Az intézet feladatai közé tartozik továbbá a Budapesti Neutron Centrumban egy, jelentős részben az EU által finanszírozott mérőhely üzemeltetése is, itt a szakmai-technikai infrastrukturális hátteret kell biztosítani az EU különböző országaiból érkező kutatók számára.

Említést érdemel, hogy az intézet 2009-ben ünnepelte alapításának ötvenedik évfordulóját. Az évfordulóval kapcsolatos események szervezése, kiadványok készítése is az intézet tárgyévi feladataihoz tartozott. Ez alkalomból „Kutatás innovatív környezetben: 50 éves az Izotóp Intézet" címmel tartottak előadóülést az MTA Székházában (az ülés programja és előadásai megtalálhatók az intézet honlapján), valamint a Magyar Kémiai Folyóirat 115. évf. (2009) összevont teljes 3-4 száma is az intézeti jubileumhoz kötődik.

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

Az intézet munkájának eredményeképp újabb, nagyérzékenységű analitikai módszerekkel bővült a nukleáris vizsgálati módszerek eszköztára, ezek bemutatása a beszámoló mellett külön, kiemelten is megtalálható.

A nukleáris mérési módszerek továbbfejlesztése témakörében kiemelkedőek a PGAA mérés elméletének, a standard nélküli könyvtár és kiértékelési eljárásoknak fejlesztésében elért eredmények, amelyek jelentősen bővítik és általánosítják a módszer alkalmazásának lehetőségeit.

A PGAA *méréstechnikában* is jelentős fejlesztéseket végeztek. Egyrészt pontosabb aktivációs mérésekhez biztosabb nyalábnyitást és -zárást valósítottak meg, másrészt tökéletesítették az adatok analízisét és a mérési eredmények bizonytalanságának becslését. Számos összetett minta belső elemeloszlásának megjelenítését és mennyiségi analízisét is megvalósították. Monte Carlo módszerrel jellemezték a felújított gamma-spektrométer átviteli függvényét, így az analízisek pontossága javult. A PGAA módszerük és az elért eredmények összefoglalásából egy MTA doktori értekezésben adtak számot. A PGAA nemrég kialakított térbeli változatával (PGAI) is újabb eredményeket értek el.

Aktív módszert dolgoztak ki urán kimutatására ismeretlen anyagokban hidegneutron-nyaláb felhasználásával, és neutron-koincidencia mérőberendezést állítottak össze. Megállapították, hogy a detektált kettős neutron-koincidenciák száma arányos az ^{235}U tartalommal, és első közelítésben független a minta kémiai formájától. A mérési elrendezésben az ^{235}U kimutathatósági határa 1000 s–os mérési idő mellett 1 μg-nak adódott. Ez a mennyiség 1-2 nagyságrenddel kisebb, mint a szokásos neutronforrásokkal elérhető mennyiségek.

A nukleáris vizsgálati módszereket eredményesen alkalmazták különböző területeken**.**

A PGAA módszert*:*

– *Archeometriai vizsgálatokban* a magyarországi, horvátországi és romániai pattintott és csiszolt őskori kőeszközök eredetének, ill. nyersanyagaik lelőhelyének meghatározására, magyarországi késő-neolit régészeti lelőhelyek kerámia leletanyagának és lehetséges

agyaglelőhelyeinek azonosítására, valamint reneszánsz bronz szobrok ötvözőinek (Cu, Zn, Sn, Pb), továbbá mezopotámiai hematit anyagú pecsétnyomók elemösszetételének roncsolásmentes meghatározására alkalmazták.

– *Geológiai vizsgálatokban* előnyösen használták ki a módszer erősségeit – nevezetesen, azt hogy néhány, más módszerrel nehezen mérhető nyomelem (pl. B, Cl, Gd) mérésére is lehetőséget ad amellett, hogy meghatározható vele a teljes kőzetek főelem oxidjainak koncentrációja is, továbbá, kiemelkedő a módszer abból a szempontból is, hogy a minták H, ezzel H_2O-tartalma közvetlenül mérhető.
– Vizsgálatokat végeztek nagy nyomású metamorf kőzeteken (Syros, Görögország), melyekben megállapították, hogy a B/Be és Cl/Be arányok korrelálnak a H_2O-koncentrációkkal, amit a dehidratáció és metamorfózis során fellépő B és Cl kilépés szabályoz. Ez alapján nyomon követhetők a lemezben az alábukás hatására lejátszódó, metamorfózist követő dehidratációs folyamatok. Ugyanebben a témakörben tengerfenéki fúrásokból származó nagyszámú szerpentinit kőzet minta összetételét határozták meg. Az adatokból a kőzetek hidratációs és dehidratációs folyamataira, a B, a Cl és a H körforgalomra következtettek. A Balaton-felvidéki és észak-patagóniai alkalikus bazaltok bórtartalmainak összehasonlításával megállapították, hogy a Balaton-felvidék alkáli vulkáni területe alatt nagyobb mértékű kéregvékonyodás és extenziós hatásra bekövetkező nyomáscsökkenéses olvadás miatt fluid-mobilis elemekben jóval gazdagabb litoszféra köpenyanyag olvadt meg, mint ahogy ez Észak-Patagónia vulkáni területei alatt történt.

Mössbauer spektroszkópia segítségével:

– A Bodai Aleurolit kőzettest redox sajátosságainak elemzését végezték a Fe^{2+} és Fe^{3+} ionok arányának meghatározásával a kőzetet alkotó ásványokban. A kőzet mállásának mértéke jól korrelál a Fe^{2+}/Fe^{3+} arány változásával. Szintetikus úton előállított mikro- és mezopórusos ferriszilikátokat, valamint ezekkel analóg szerkezetű, porózus fém-organikus vegyületeket is vizsgáltak. A porózus szerkezet különböző rácspozícióit elfoglaló vasionok jól megkülönböztethetőek a módszerrel.

Nukleáris anyagok vizsgálata terén*:*

– PuBe neutronforrások tölteteinek méretét radiográfiai vizsgálattal határozták meg, az intézeti LINAC fékezési sugárzása és a KFKI AEKI anyagvizsgáló röntgenberendezése segítségével. 7 db PuBe neutronforrás vizsgálata alapján újraértékelték a korábbi eredményeket, melyek nagyrészt e méretek becslésén és a $PuBe_{13}$ vegyület irodalmi sűrűség-értékén alapultak. A források kalorimetriával meghatározott Pu-tömegeiből és a $PuBe_{13}$ vegyület stöchiometriai arányából kiindulva kiszámították az egyes források PuBe töltetének tömegét, a méretek alapján a térfogatát, ebből a sűrűségét. A PuBe töltet sűrűségére az eredmények szerint 1,5 – 2,5 g/cm^3 érték fogadható el, az eddig feltételezett 3,7 sűrűségérték helyett. Ennek valószínű oka az, hogy az anyag nem tömör, csak laza por.
– Lefoglalt nukleáris minták eredetének meghatározásához modelloldatból (100 ng/g U és 1 ng/g ritkaföldfém) 14 ritkaföldfém (Nd, Pm, Sm, Gd, Tb, Dy, Er, Tm, Yb, Ce, Pr, Eu, Ho, Lu) meghatározására alkalmas eljárást fejlesztettek ki. A módszer alkalmas arra, hogy valós minták (ismeretlen eredetű urán-oxidok) eredet-meghatározásához alkalmazható legyen az elemujjlenyomatok felvétele alapján.
– A neutronkoincidenciás mérésekhez NAÜ támogató program keretében elkészített listázó módú adatrögzítő rendszerrel felvett fájlok visszajátszására kifejlesztettek egy virtuális sugárforrásnak nevezett készüléket. A berendezés jól használható a neutron-koincidenciás mérések alapelveinek oktatásához. A virtuális sugárforrás rendszerrel olyan ritka vagy a

helyszínen rendelkezésre nem álló források jelei is vizsgálhatók, amelyekhez a hallgatók egyébként nem férnének hozzá. A virtuális sugárforrás rendszer könnyen szállítható, ami nagy szabadságot biztosít a képzési helyszínek kiválasztásánál.

– Mintaelőkészítési módszert (mikrohullámú roncsolásos és extrakciós kromatográfiás elválasztásos eljárást) és induktív csatolású plazma tömegspektrometriás meghatározást dolgoztak ki nukleáris biztosítéki célú dörzsminták U és Pu izotóp-összetételének, valamint egyéb aktinida-tartalmának meghatározásához. Az analitikai eljárás megfelel a NAÜ és a Nemzetközi Laborhálózat (NWAL) követelményeinek. A módszer alkalmas a dörzsminták gyors és egyszerű mintaelőkészítésére, elemzésére, valamint az elért alacsony kimutatási határ révén alkalmas nyomnyi mennyiségű nukleáris szennyezések kimutatására és eredetének felderítésére.
– Nagyaktivitású nukleáris hulladékok (kiégett atomerőművi fűtőelemek) kőzettestekben történő elhelyezésével kapcsolatban vizsgálták hosszú felezési idejű hasadványtermék (^{99}Tc) és urán migrációját. A hasadványtermék anionos formában viszonylag gyorsan, a víz öndiffúziójával összemérhető sebességgel diffundál a kőzet pórusaiban, míg az urán nagyobbik része U(IV) formában kiválik és nem diffundál.

Sugárzások hatásainak vizsgálata, dozimetria terén:

– Megteremtették a retrospektív (utólagos) dozimetria alkalmazásának lehetőségét az intézetben. Ennek során az optikailag stimulált lumineszcencia (OSL) jelenségén alapuló készüléket terveztek meg és állítottak össze. Megkezdték a készülék tesztelését, illetve finom beállítását, próbaméréseket végeztek.
– Ukrán-magyar akadémiai együttműködés keretében megvizsgálták többféle (kristályos és amorf) szerkezetű, Eu-mal aktivált magnézium-borát minták alapvető optikai, főként lumineszcencia tulajdonságait.
– Kidolgozták az OSL mérésén alapuló Sunna doziméter filmek alacsony (5 – 500 Gy) dózistartományú alkalmazhatóságát.

Katalizátorok és katalitikus folyamatok vizsgálata terén:

– *Arany nanorészecskéket* jellemeztek, tanulmányozták adszorpciós és katalitikus tulajdonságaikat. Arany/oxidhordozó (brookit és anatáz – TiO_2 módosulatok) kölcsönhatásait vizsgálva megállapították, hogy a katalizátorok CO oxidációs aktivitását meghatározó fontos tényező az arany nanorészecskék mérete mellett az aktív oxid kristályszerkezete, ill. amorf jellege. Az inverz, vas-oxid/arany/hordozó kölcsönhatást a MBE módszerrel párologtatott FeOx/Au/SiO_2/Si(100) modell rendszerben vizsgálták. Megállapították, hogy a CO oxidációban a redukált felület sokkal aktívabb, mint az oxidált. SFG spektroszkópiával követett CO adszorpciós vizsgálatok kimutatták, hogy vékony vasoxid réteg esetén az Au centrumok egy része hozzáférhető a CO számára, azonban a vastagabb réteg már teljesen fedi az aranyat, nem mutatható ki CO kötődés. Karbamidos és NaOH lecsapással készült Au/TiO_2 katalizátorokon *a PROX reakciót* vizsgálva megállapították, hogy az előző részben említett, szol adszorpcióval készített mintákhoz képest ezek kevésbé színterelődnek, amit a primer kölcsönhatások erősségével értelmeznek. Nem észleltek jelentős különbséget a szelektivitásban a különböző mintákon. Au/FeO_x rendszerben XRD és XPS vizsgálatokkal igazolták AuFe kétfémes szemcsék képződését hidrogénes redukció hatására. A minták redukciójával a PROX aktivitás csökkent, amit az Au színterelődésének tulajdonítanak.
– *Metán átalakítási* folyamatát a szintézis gáz előállítására alkalmas száraz reformálásban (CH_4+CO_2) tanulmányozták, Ni/$MgAl_2O_4$ és Ni/$Ce_2Zr_2O_8$ katalizátorokon. Ni/$Ce_2Zr_2O_8$

katalizátoron a folyamat melléktermékeként keletkező szén oxidációja kis hőmérsékleten történik és a Boudouard reakció is hatékonyabb. Ez a felületi szén eltérő szerkezetének a következménye. $MgAl_2O_4$ hordozó esetében a kis Ni részecskéket beburkolják a keletkező CMWNT szén-nanocsövek, a $Ce_2Zr_2O_8$ esetében inkább szálas szerkezetű a CMWNT.

– *Metilciklopentán gyűrűfelnyílási reakcióit* vizsgálták kétfémes katalizátorokon. Kb. 1-8 monoréteg Ge-t tartalmazó PtGe katalizátoroknak optimális az aktivitása és legjobban gátolt a dezaktíválódása. Kétfémes PtIr-Al_2O_3 katalizátorok esetén, ha az Ir-ot szerves komplex formájában vitték be, a Pt és Ir ugyanazokon a helyeken rakódott le és megnőtt az aktivitás, a C6 termékek szelektivitásával együtt.
– A környezetbarát („zöld") kémia területéhez tartozó *aszimmetrikus heterogén katalitikus hidrogénezés* folyamatát a prolin-izoforon rendszer Pd katalizátorokkal történő hidrogénezésében vizsgálták. Igazolták, hogy a folyamat katalizátorfüggő, felületi sztereodifferenciálás történik, az optikailag aktív telített keton nemcsak kinetikus reszolválással, hanem az izoforon enantioszelektív hidrogénezésével is keletkezik.

Nagyenergiájú sugárzás és katalizátorok alkalmazása környezetvédelmi technológiák témában:

– Szőlő- és borfeldolgozó üzemek szennyvizében, nagy mennyiségben található *galluszsav* elbontásának lehetőségeit vizsgálták. Sugárkémiai vizsgálatok segítségével derítették ki a galluszsav oxidációs/redukciós reakcióinak számos részletét. Tisztázták a galluszsav ionizáló sugárzással történő elroncsolásának mechanizmusát.
– Kimutatták, hogy a felszíni vizekben szinte mindenhol előforduló erősen toxikus *2,4-diklorofenoxi ecetsav* sugárzásos lebontásában nem csupán a korábban gondolt hidroxil gyökök vesznek részt, hanem – a körülményektől függően – a hidratált elektronok roncsoló hatása is jelentős lehet. Ugyanakkor a hidratált elektronok és az oxigén közötti reakcióban keletkező $O_2^{-\bullet}/HO_2^{\bullet}$ páros csak kismértékben járul hozzá az átalakulásokhoz.
– A nagy szervesanyag tartalmú *szennyvizek monolit katalizátorokkal* végzett oxidációjának vizsgálata során megállapították, hogy a Ru oxid és Ir oxid Ti hálók stabilisak és emellett a legaktívabbak is.
– Az erős üvegház- hatást kifejtő gáz*, a dinitrogén-oxid* eltávolítását tanulmányozták a $N_2O + CH_4$ reakcióban M/H-ZSM-5 és M/Ga/H-ZSM-5 (M- Ru, Pd, Pt) zeolit katalizátorokon. Megállapították, hogy a nemes fémeket (Ru, Pd, Pt) tartalmazó mintákon a Fe, Co, Mo fémeket tartalmazó mintáktól eltérően az erős redox centrumok mellett megőrződnek az erős savas centrumok is. A ruténiumot és a platinát tartalmazó minták aktívabbak (az 50% konverzió hőmérséklete, T_{50},, a N_2O bontásban: 598 K, a N_2O+CH_4 reakcióban: 408 K), mint a Fe, Co és Mo-tartalmú minták (T_{50}: 675 ill. 583 K a két folyamatra).
– *Katalitikus kéntelenítési folyamatokat* szulfidált $NiMoO_x/Al_2O_3$ katalizátorokon vizsgáltak különböző Ni:Mo arányokkal. ^{35}S-el jelzett tiofén reagenst használva megállapították, hogy a tiofén irodalomból ismert reciklizációja H_2S és butadién között nagy valószínűséggel lejátszódik a szulfidált katalizátor és a tiofén hidrodeszulfurálás során képződő butadién között is. A tiofén-kén és H_2S-kén ↔ katalizátor-kén izotópcsere közötti különbségeket az egyes katalizátorok közötti energetikai különbségeknek tulajdonították.

Összegezve megállapítható, hogy az MTA Izotópkutató Intézet 2009-es tevékenysége során továbbfejlesztette nukleáris mérési módszereit, ill. ezeket a módszereket egyéb korszerű technikákkal kombinálva eredményesen alkalmazta nukleáris anyagok vizsgálatára. Ezzel 2009-ben is a hazai, ill. nemzetközi nukleáris biztosítéki tevékenység egyik bázisintézete volt. Az intézetben a sugárhatáskémiai, katalitikus és környezeti kémiai irányok kombinálása az

utóbbi időben egyre nagyobb hangsúlyt kap. Ezek a kutatások ipari együttműködések keretében is folynak (MOL, FCsM, EGIS), melyek célja az ipari megvalósítás és ezzel vizeink és a levegő tisztaságának megőrzése.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az intézet munkájában jelentősen támaszkodik kapcsolatrendszerére. Ezt az is mutatja, hogy a megjelent tudományos közleményeinek döntő többsége hazai vagy külföldi társszerzőkkel közösen készült.

A *hazai kapcsolatokat* illetően:
- az *egyetemekkel* fennálló kapcsolatok igen sokrétűek. Az intézet munkatársai részt vesznek az oktatási tevékenységben – a hallgatói képzésben rendszeres előadások tartásával, gyakorlatvezetéssel, valamint szakdolgozatok és PhD témák vezetéseivel (BMGE, ELTE, Pannon Egyetem). Számos vezető intézeti kutató tagja egyetemek doktori iskoláinak is. Ugyancsak számos, egyetemekkel közös kutatás is folyik az intézetben.
- az egyéb *intézményi* kapcsolatokban elsősorban az Országos Atomenergia Hivatallal (OAH) kialakított – és együttműködési szerződéssel is megerősített – kapcsolat említendő. Ez az együttműködés elsősorban a hazai nukleáris biztosítéki tevékenység tudományos hátterét biztosítja az OAH számára.

Az intézet *nemzetközi kapcsolatai* is széleskörűek.

A *nemzetközi intézményi* kapcsolatok között említendő:
- a Nemzetközi Atomenergia Ügynökséggel (NAÜ) fennálló többrétű kapcsolat. Ennek keretében szoros a szakmai kapcsolat a Department of Safeguards Division of Technical Support (SGTS) részlegével, pl. az intézet több alkalommal tartott NAÜ által koordinált szakmai tanfolyamot nukleáris biztosítéki ellenőrök számára.
- Az intézet képviselteti magát a nemzetközi nukleáris biztosítéki szervezetekben – pl. intézményi tagja az ESARDA-nak (European Safeguards Research and Development Association).
- Nemzetközi együttműködési szerződései is vannak pl. a berlini Fritz-Haber Intézettel, és a Vietnam Nemzeti Egyetemmel (Hanoi) – a nukleáris kutatások terén.

Az intézet *nemzetközi kutatási* kapcsolatai is kiterjedtek:
- A nukleáris kutatások területén az Európai Uniós Joint Research Centerek közül többel is (ITU, ISPRA, IRMM), Észak-Amerikában a Lawrence Berkeley National Laboratory-val, ill. a National Institute of Standards and Technology-val, Európában az Institut Laue Langevin-nel van szakmai kapcsolat. Katalitikus vizsgálatok terén a berlini Fritz Haber intézettel van hosszabb ideje kutatási együttműködés különböző témákban. Mindkét területen számos egyetemmel, ill. különböző kétoldalú szerződésekkel támogatott egyéb kutatási együttműködések partnerei intézeti kutatók. A nukleáris kutatás területén pl. partnerek: CNR – ISOF (Olaszország), Institute of Nuclear Sciences, Vinča, (Szerbia), Ruder Boskovič Institute, Zagreb, (Horvátország), valamint egyetemek kutatói (Németországból: tübingeni, müncheni, heidelbergi, kölni, Venezuelából a Simon Bolivar egyetemről, Ausztriából, a bécsi egyetemről, továbbá Új-Zélandról a Massey Egyetemről). Katalitikus területen hagyományosan jók a kapcsolatok indiai és spanyol intézetekkel és a Poitiers-i, brüsszeli, bécsi egyetemekkel.

A nemzetközi kutatások része az is, hogy külföldi kutatók számára az intézet EU-s projektek keretében hozzáférést biztosít a hideg-neutronos PGAA mérőhely mérési kapacitásának egy részéhez. Az erre a célra fenntartott keret mindig kihasznált.

Az intézet nemzetközi elismertségét mutatja az is, hogy nemzetközi konferenciák rendezési jogát rendszeresen megkapja. 2009-ben a sugárkémiai 26th Miller és az „EFNUDAT Slow and Resonance Neutrons" konferenciákat szervezték az intézet kutatói.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az intézet kutatási tevékenysége jelentős részben épül a pályázati részvételre. A kutatómunkában felhasznált anyagok, eszközök beszerzésének, valamint a külföldi rendezvényeken, konferenciákon történő részvételek fedezetének csaknem kizárólagos forrása a pályázatokon elnyert támogatás. Ez különösen érvényes az intézet egyedi legnagyobb mérőhelyére, a BNC egyik hidegneutron-nyalábja mellé települt PGAA és NIPS mérésekre, ezeket a költségigényes berendezéseket majdnem kizárólag a különböző pályázatok keretében elnyert támogatásokból fejlesztik és üzemeltetik.

A *hazai pályázatok* között:
- kiemelt helyen említendő a *NAP VENEUS* projekt. A már futó konzorciális projekt 2009-ben újabb 3 évre kapott jelentős támogatást a hideg neutronos mérési módszerek továbbfejlesztésére.
- Ugyancsak fontosak az *OTKA projektek.* 2009-ben az intézetben összesen 10 OTKA projekt volt folyamatban, ezek között volt egy-egy „nagy nemzetközi" NN [ERA-CHEMISTRY], „nagy fiatal", NF, és a tárgyévben indult egy NNF projekt is.
- az intézet kutatói számos, az Országos Atomenergia Hivatal által *nukleáris biztosítéki* témakörökben meghirdetett pályázatot is elnyertek.

A *nemzetközi pályázati* részvétel is alapvető a kutatás feltételeinek biztosítása szempontjából.

A nagyobb projektek:
- *EFNUDAT EU FP6 Integrated Infrastructure Initiative project (2006-2010) (European Facilities for Nuclear Data)* Az intézet munkatársai a projekt teljes körű támogatásával 2009. szeptember 25-29. között megrendezték a 2. EFNUDAT Tudományos Munkaértekezletet kb. 40 résztvevővel. A három nap során a résztvevők 32 előadást tartottak a nukleáris adatok témaköréből, amelyek elérhetők a (http://www.iki.kfki.hu/efnudat/sciprg.shtml) weboldalon. A projekten belül nukleáris adatokat mértek IV-generációs reaktorok és ADS rendszerek tervezéséhez.
- *ANCIENT CHARM EU FP6 STREP NEST projekt (2006-2009) (Analysis by Neutron Resonant Capture Imaging and other Emerging Neutron Techniques: New Cultural Heritage and Archaeological Research Methods)* A projekt záróévében eredeti műtárgyak 3D-ós elemi képalkotásának méréseit végezték különböző műkincseken az FRM-II reaktornál és az ISIS spallációs neutron forrásnál.
- *CHARISMA EU FP7 ('Cultural heritage advanced research infrastructures: synergy for a multidisciplinary approach to conservation/restoration')* A 2009 októberében megkezdődött projekt keretében férhetnek hozzá Uniós kutatók a fejlett kutatási infrastruktúrákhoz – így az intézet PGAA mérőhelyéhez is – kulturális örökséggel kapcsolatos témákban.

– *NMI3 – EU FP7 (Integrated infrastructure initiative(2009-2010) for neutron scattering and muon spectroscopy)* A projekt keretén belül mérési lehetőséget nyújtanak Uniós kutatóknak tetszőleges tématerületen.
– *ReCosy EU FP7 CP (Redox Phenomena Controlling Systems)* A 2008-2011 között folyó projekt a nagyaktivitású radioaktív hulladékok végleges elhelyezéséhez kapcsolódik. A projekt keretében azt vizsgálják, hogy a hosszú élettartamú radioizotópok kőzettestekben lejátszódó migrációját mennyire befolyásolhatják a redukciós/oxidációs folyamatok.
– *EU – FP7 Biodosimetric Tools for Triage to Responders* projekt 2009-ben kezdődött, témája a sugárszennyeződés mértékének gyors felmérésére szolgáló módszerek kidolgozása.
– *COST* - D36 WG 003/06 Interfacial functionalisation of (bi-)metallic nanoparticles to prepare highly active and selective catalysts: understanding synergy and/or promotion effect, 2007-2010.

A Nemzetközi Atomenergia Ügynökség több projektjének is részt vevője az intézet:
– így a „Nuclear Forensic Methods and Techniques for Combating Illicit Trafficking of Nuclear and other Radioactive Material" koordinált kutatási projektnek,
– a RER/8/017 „Enhancing Quality Control Methods and Procedures for Radiation Technology" technikai kooperációs projektnek,
– MANREAD (Minor Actinide Neutron Reaction Data) projektnek,
– a HUN8008-as technikai kooperációs projektnek, mely segítségével vízanalitikai laboratórium létesítésére kerül sor az intézetben.

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

1. Zs. Révay: Determining elemental composition using prompt γ activation analysis. Analytical Chemistry. 81, (2009) 6851 – 6859
2. R. Melo, J.P. Leal, E. Takács, L. Wojnárovits: Radiolytic degradation of gallic acid and gallic acid derivatives in aqueous solution. Journal of Hazardous Materials. 172 (2009) 1185 – 1192
3. L. Guczi, A. Beck, K: Frey: Role of promoting oxide morphology in dictating the activity of Au/SiO_2 catalyst in CO oxidation. Gold Bulletin. 42 (2009) 5 – 12
4. Z. Paál, R. Schlögl: Investigation of a traditional catalyst by contemporary methods: Parallel electron spectroscopic and catalytic studies on Pt black. Surface Science. 603 (2009) 1793 – 1801
5. H.R. Marshall, R. Altherr, K. Gméling, Zs. Kasztovszky: Lithium, boron and chlorine as tracers for metasomatism in high-pressure metamorphic rocks: a case study from Syros (Greece). Mineralogy and Petrology. 95 (2009) 291 – 302
6. J. Bagi, L. Dechamp, P. Dransart, Z. Dzbikowicz, J.-L. Dufour, J. Huszti et al: Neutron coincidence counting with digital signal processing. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A, 608 (2009) 316 – 327
7. A Magyar Kémiai Folyóirat 115. évf. teljes, 2009/3-4 száma. A folyóirat különszáma, mely az intézet megalakulásának 50 évfordulójával kapcsolatos, intézeti szerzők tíz közleményét is tartalmazza

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Izotópkutató Intézet

Átlaglétszám[1]:	92		Ebből kutató[2]:		51
PhD, kandidátus:	21	MTA doktora: 8	levelező tag: 0	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					17
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					61
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					58
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		38
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	14		idegen nyelven:		6
összesített impakt faktor[6]:	57		összes hivatkozás száma[7]:		1307
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					873
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 2		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 1		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 2	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	47	poszterek száma[12]:			21
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			6
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					16
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát (BSc):			2
Diplomamunkát (MSc):	3	PhD-t:			3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					330
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				329,86	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	5	Teljes saját bevétel[18]:		37,04	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				24,94	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				12,1	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: www.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

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

Nanokémiai és Katalízis Intézet
1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1132, Fax: 438-1164
e-mail: valyon@chemres.hu

Szerkezeti Kémiai Intézet
1025 Budapest Pusztaszeri út 59/67.
(1525 Budapest, Pf. 17.)
Tel.: 438-1120, Fax: 438-1143
e-mail: kubinyi@chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóközpont alapvető közfeladatai a következők voltak 2009-ben:

- a kémia és a vele rokon szaktudományok fontos területein olyan alapvető és nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása, amelyek a kutatók összehangolt tevékenységét, valamint korszerű nagyműszerek koordinált alkalmazását igénylik;
- kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
- részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
- alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
- a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
- hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
- részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

A központ tevékenységében lényeges szerepük van a hazai, ill. az európai iparvállalatokat segítő, a versenyképesség fokozását, korszerű termékek és eljárások kidolgozását szolgáló kutatási programoknak. Ebből a szempontból kiemelkedő jelentősége volt a „Kémia az életminőség javításáért, Kémiai Kooperációs Kutatási Központ tevékenységének megerősítése, a technológiai folyamatok elősegítése” c. (Új Magyarország Fejlesztési Terv, Közép-Magyarországi Operatív Program) pályázat feladatai 2009. évi teljesítésének. Az említett projekten kívül több más, az NKTH-által támogatott témában is részt vettek a Központ kutatói 2009-ben. Ezeknek a programoknak az eredményei, reményeink szerint, hozzájárulnak az ország gazdasági stabilizációjához, valamint az akadémiai-egyetemi kutatóhelyeknek a vállalati kutatási-fejlesztési programokba való bevonásához. A kitűzött célok elérését jelentős mértékben segítette az EU-FP-7 kutatási programjaiban való aktív részvétel is.

Az MTA Kémiai Kutatóközpont 2009. évi tudományos kutatásait a potenciálisan funkcionális anyagok kémiai kutatása, előállításuknak, szerkezetüknek és tulajdonságaiknak vizsgálata foglalta egységes keretbe.

A kutatási tevékenység fő irányai 2009-ben a következők voltak:

Anyag- és Környezetkémiai Intézet

– Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása az anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások területén, amelyek elsősorban környezetkímélő előállítási technológiák kifejlesztésére, nanorétegek, különleges kerámia bevonatok, fémkomplexek, funkciós polimerek és polimer kotérhálók előállítására, továbbá vizsgálatára, valamint a biomassza hasznosítására, légkörkémiai kutatásokra és a műanyagok újrahasznosítására terjednek ki.

Biomolekuláris Kémiai Intézet

– Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a biomolekuláris kémia területén, amelyek magukban foglalják különböző, gyógyszerkémiai vagy finomkémiai szempontból fontos szintézismódszerek kidolgozását, különös hangsúllyal az eredeti heterociklusos szerves vegyületek és szénhidrátok előállítására; ismert és nem ismert cél-molekulák alapvető biokémiai, fiziológiai szerepének vizsgálatát; új diagnosztikai lehetőségek feltárását.

Nanokémiai és Katalízis Intézet

– Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a nanokémia és a katalízistudomány területén, amelyek magukban foglalják nanoszerkezetű anyagok szintézisét és tanulmányozását, önszerveződő nanorétegek vizsgálatát, felületek jellemzését és módosítását, valamint heterogén katalizátorok és katalitikus reakciók kutatását, továbbá alternatív energiaforrások kutatását.

Szerkezeti Kémiai Intézet

– Nemzetközi színvonalú tudományos kutatások folytatása a szerkezeti biológia és kémia területén, különös tekintettel a szupramolekuláris kémiai (önszerveződő) rendszerek tanulmányozására, nagyműszeres szerkezetvizsgálatokra a gyógyszerkutatások támogatásának érdekében, orvosi analitikai kémiai témákra, valamint funkcionális vegyületek (polimerek, fluoreszcens próbák, fotokrom vegyületek) vizsgálatára.

A 2009. évi munkáról szóló beszámoló részletei az egyes intézetek anyagában olvasható.

II. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézmény neve: MTA Kémiai Kutatóközpont összesen

Átlaglétszám[1]:	340		Ebből kutató[2]:		202
PhD, kandidátus:	79	MTA doktora: 39	levelező tag:	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					10
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					85
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					273
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					259
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		183
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	7		idegen nyelven:		27
összesített impakt faktor[6]:	479,506		összes hivatkozás száma[7]:		4672
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					3832
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 16		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 19		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 13,67		MTA doktora: 1,33	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0		külföldön:[11]		1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	99		poszterek száma[12]:		137
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	32		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		27
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					62
TDK munkát készítő hallgatók száma:	12		Diplomamunkát (BSc):		15
Diplomamunkát (MSc):	19		PhD-t:		72
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					3846
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				1481,80	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	16		Teljes saját bevétel[18]:	983,24	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				11,49	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				110,51	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				297,28	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				10,971	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				249,01	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				133,91	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				181,56	MFt

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézetben 2009-ben művelt témák az anyagtudományi és környezeti kémiai kutatások közé sorolhatók, de ez az osztályozás nem szigorúan értendő az egyes kutatási projektekre. Az anyagtudományi témák szinte mindegyikénél érvényesülnek közvetlenül vagy közvetve környezetvédelmi szempontok, mint például: környezetkímélő előállítási technológiák kifejlesztése, alkalmazása; szerkezeti anyagok élettartamának növelését célzó kutatások; biológiailag lebomló komponensek alkalmazása. Hasonlóképpen az elsődlegesen környezetkémiai témáik művelése sok esetben nem fejeződik be a kárenyhítésnél, hanem kiterjed arra is, hogy a hulladékokat hasznos alapanyaggá lehessen átalakítani.

Tevékenységük jellemzője, hogy a tudományos kérdésekre komplex módon, többféle módszer alkalmazásával, a gyakorlati vonatkozásokat is figyelembe véve keresik a válaszokat.

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

Különleges kerámia bevonatok előállítása

Radarsugárzást magas hőmérsékletű környezetben is elnyelő, újszerű, nanoszerkezetű kerámia bevonatokat állítottak elő atmoszférikus plazmaszórással. A munka során egyrészt kifejlesztettek olyan mátrix anyagokat, amelyek a radarsugárzást nem verik vissza, másrészt olyan adalékanyagok (BN/MWNT nanokompozitok, SiC nanoszálak, ferrit nanoporok) előállítását kísérletezték ki, amelyek a radarsugárzás energiáját hő/elektromos/mágneses veszteség formájában nyelik el. Eljárást dolgoztak ki nem olvadó (nitrid, karbid, borid) kerámia porok plazmaszórására, és optimálták a plazmaszórás paramétereit. Az intézetben kifejlesztett különleges kerámia bevonatokat Svédországban, repülőgép sugárhajtóműbe építve tesztelték, és ezek a tesztek megfelelő eredményt hoztak. A bíztató eredményeknek köszönhetően a projekt várhatóan folytatódik 2010-ben is. Résztvevő vállalkozások: Volvo Aero, Saab. Az, hogy magyar kutatóhelyek aktív részt vállaltak egy demonstrációs célú sugárhajtómű-konstrukció kialakításában, gazdasági előnyökkel is járhat a projekt finanszírozásában részt vevő hazai szervezeteknél.

Nanorétegek előállítása és vizsgálata

Plazma-alapú ionimplantációval kezeltek nitrogénben poliamid (PA) és polikarbonát (PC) felületet. PA esetében imin, protonált amin és uretán-szerű kötések képződtek, míg PC esetében imin, tercier amin és amid-szerű csoportok alakultak ki a felületen. A hidrofil tulajdonságok megnőttek, a felületi elektromos ellenállás pedig több nagyságrenddel csökkent mindkét anyagnál. A kopási térfogat PA-nál az eredetinek 11 %-ára, és PC-nél 59 %-ára

csökkent. A kopásállóság főleg az iongyorsító feszültség és a felületegységre eső részecskedózis növelésekor javult. PA esetében a beépülő N-tartalom kismértékű növekedése javította, további növekedése azonban rontotta a kopásállóságot. PC esetében a kopásállóság nem a teljes N-tartalom növelésével, hanem a térhálósodást kiváltó, hármas koordinációjú, tercier amin típusú N-atomok koncentrációjának növelésével növekedett, elsősorban a felületegységre eső részecskedózis és dózisteljesítmény emelésekor.

Cr-, Si- és Cr+Si-tartalmú szénrétegeket választottak le Si hordozóra kettős magnetron-porlasztással. XPS és XAES vizsgálatokkal a rétegekben döntően C-Si és C-Cr kötéseket, illetve - nagy króm-tartalom esetén - Cr-szilicidet azonosítottak. Nanomechanikai vizsgálatok tanúsága szerint a háromkomponensű filmek keménysége H=13-16 GPa, redukált modulusa pedig E=120-140 GPa között volt. A kétkomponensű, Cr-tartalmú szénfilmek hasonló értékei jóval nagyobbnak bizonyultak (H≈22 GPa, E≈170 GPa).

Fémkomplexek előállítása és vizsgálata

A vashiányos anémia a világon mindenhol probléma és hatásos kezelése kiemelt feladat. Amint az állatkísérletekben és humán vizsgálatokkal már bizonyítást nyert, a vas-poligalakturonátból a vas könnyen felszívódik, és a szervezetben jól hasznosul. A vegyület hatásossága sok tényezőtől függ, ilyen például a dózis, a vas oxidációs állapota és koordinációja. Ezért 57Fe Mössbauer spektroszkópiával megvizsgálták a vas-poligalakturonát vaskoncentrációjának hatását a vas oxidációs állapotára és mikrokörnyezetére. A Mössbauer spektrumokon három jellegzetesen megkülönböztethető kvadrupólus felhasadás látható, melyből kettő a vas(II) és egy a vas(III) mikrokörnyezetéhez kapcsolható. A három jellegzetes szerkezeti komponens előfordulása telítési tendenciát mutat a vaskoncentráció növekedésével. Az alkalmazott koncentrációtartományban a vas (III) előfordulása nőtt a vaskoncentrációval. Az eredmények alapján látható volt, hogy a vas-poligalakturonátban előforduló háromféle vas species a komplexben kötött vas különböző mikrokörnyezetéhez tartozik.

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

Tovább folytatták a poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilén amfifil kotérhálókkal kapcsolatos kutatásaikat. Fémezüst bevitelével a kapott nanohibrid anyagok katalizátorként használhatók szerves kémiai reakcióban. Létrehoztak TiO_2 tartalmú nanohibrid anyagokat is. Különböző oldalhosszúságú poli(etilén-oxid)-metakrilátok és akrilátok, valamint módosított láncvégű, telekelikus poliizobutilén makroiniciátor felhasználásával jól definiált szerkezetű amfifil blokk-kopolimereket állítottak elő. Ezek a blokk-kopolimerek és kotérhálók, mivel összetevőik biokompatibilisnek bizonyultak, gyógyászati alapanyagként is alkalmazhatók lesznek a jövőben. Vizsgálatokat végeztek nanoméretű réz előállítására kotérhálókban, illetve azok Ullmann-reakcióban megmutatkozó katalitikus aktivitására. Előállítottak kettős intelligenciájú amfifil kotérhálókat, melyek a pH mellett a hőmérsékletre is érzékenyek. Az amfifil kotérhálók egy új csoportjaként hőre érzékeny, poli(N,N-dietil-akrilamid)-ot és poli(dimetil-sziloxán)-t, illetve poliizobutilént tartalmazó kotérhálókat szintetizáltak. Az ilyen anyagoknak széles körű speciális alkalmazási lehetőségei vannak a gyógyászattól, a biotechnológiától a szenzorokig bezárólag. Politetrahidrofurán makromonomerek felhasználásával poli(N-vinil-imidazol)-l-politetrahidrofurán kotérháló sorozatot állítottak elő. A kotérhálók fémionokkal komplexeket képző rendszereiben a különböző fém

nanorészecskék antibakteriális hatásait különböző felszaporított tiszta baktérium törzseken bizonyították.

Új típusú polimerek kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációval

A közelmúltban olyan komplex szerkezetű polimereket állítottak elő gazdaságosan és környezetileg előnyösen kváziélő gyökös polimerizációs eljárásokkal, amelyek felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai tulajdonságait. Új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására. Ezzel nemcsak a laboratóriumban előállított speciális szerkezetű, hanem kereskedelmi forgalomban kapható monomerek (sztirol és akrilátok) felhasználásával is egy lépésben előállíthatók nagyszámú funkciós csoporttal rendelkező hiperelágazásos polimerek. Az e téren szerzett új ismereteket fogászati alkalmazásokban és ipari együttműködésekben is megpróbálják kamatoztatni.

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

Különböző tulajdonságú monomerek kváziélő gyökös polimerizációját is sikeresen megvalósították egy környezetbarátnak tartott, halogénmentes oldószerben.

Az előállított új szerkezetű polimereket minden esetben modern analitikai módszerekkel, mint pl. fényszóródás, törésmutató és viszkozitás detektorokkal felszerelt multidetektoros gélpermeációs kromatográfiával és NMR spektroszkópiával elemezték és jellemezték.

Funkciós polimerek kationos polimerizáció alkalmazásával

Tovább tanulmányozták a karbokationos polimerizáció során alkalmazható környezetileg előnyös körülményeket. A lineáris polimerek mellett különleges szerkezetű és tulajdonságú hiperelágazásos polimereket is előállítottak környezetbarát oldószerben, szobahőmérsékleten. Megvizsgálták a szükséges minimális katalizátormennyiséget két gyakran használt átmenetifém katalizátor esetében is ($TiCl_4$, $SnCl_4$). A körülmények optimalizálása mellett a leírt esetekben a reakciók kinetikáját is nyomon követték.

Kísérleteket végeztek az általuk kidolgozott eljárással előállított karboxil funkciós poliizobutilének alkalmazásának lehetőségeire. Megállapították, hogy a víz és hexán nem elegyedő oldószerpár esetében ezen polimer felületaktív tulajdonságai így felhasználhatók például motorolajadalékokban. A poliizobutilén karboxil funkciós csoportok reakcióival igazolták, hogy további módosításokkal anyagtudományi kutatásokban felhasználható makromonomerek előállítása is megvalósítható.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és módosítása

Folytatták a különböző katalizátorokkal gyártott poliolefinek (polietilén és polipropilén) szerkezetét befolyásoló tényezők tanulmányozását feldolgozási és alkalmazási körülmények között. Tanulmányozták a polimerizációs körülmények (katalizátor típusa, gyártási paraméterek) hatását a polietilén és a polipropilén jellemzőire. Összefüggést állapítottak meg a polimer por jellemzői és a feldolgozás során végbemenő kémiai folyamatok között. Megállapították, hogy a polipropilén szerkezete és tulajdonságai erősen függenek a külső donor típusától. Meghatározták a fenolos és foszfortartalmú antioxidánsok szerepét és

hatásmechanizmusát a polietilén feldolgozási stabilizálásában. Megállapították, hogy a polietilén feldolgozása során lejátszódó kémiai lebomlások elsősorban a foszfortartalmú antioxidáns hatékonyságától függnek, amit a stabilizátor kémiai szerkezete és termikus stabilitása jelentősen befolyásol. Elemezték a savmegkötő hatású adalékok szerepét a stabilizátorok hatékonyságában és fogyásában a polietilén feldolgozása során. Folytatták a polietilén csövek hidrolitikus stabilitásának vizsgálatát. A különböző kísérletek eredményei egyértelműen azt bizonyították, hogy az adalékok hatását nagymértékben meghatározza a teljes adalékcsomag összetétele mind a polietilénben, mind pedig a polipropilénben. A kutatást a TVK-val, a poliolefinek gyártójával együttműködésben végezték. A kutatás eredményei közvetlenül hasznosulnak a különböző poliolefinek adalékrendszerének kidolgozásában, ezzel javítják a TVK versenyképességét.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

Tovább folytatták különböző polimerek és társított rendszereik szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek és a terhelés hatására végbemenő deformációs folyamatainak tanulmányozását. Különböző szemcseméretű töltőanyagot tartalmazó PP/faliszt kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusát vizsgálták. Megállapították, hogy a tulajdonságokat elsősorban az erősítőanyag szemcseszerkezete befolyásolja. A termék tönkremenetelét több mikromechanikai folyamat iniciálhatja. Terhelés hatására bekövetkezhet a szálak kereszt- és hosszirányú törése is, ezért a szálak saját szilárdsága a kompozit tulajdonságok javításának egyik fontos tényezője. Jelentős haladást értek el a delaminációval előállított rétegszilikát nanokompozitok tanulmányozásában. A korábban kidolgozott módszereket rutinszerűen alkalmazzák a szerkezet jellemzésére. Egy kísérletsorozat segítségével meghatározták a kompozitokban kialakuló határfázis vastagságát és tulajdonságait. A szilikát lemezek, valamint a lemezek és a polimer közötti kölcsönhatásokat további adalékokkal módosították. További kísérleteket végeztek a természetes polimerek és a gyógyászatban alkalmazott poliuretánok szerkezetének felderítésében. Különböző módszerek segítségével megállapították a heterogén szerkezet felépítését és a tulajdonságokat döntően meghatározó tényezőket. Egyre jobban előtérbe kerül a biológiailag lebontható polimerek és társított rendszereik kutatása is. A kutatások jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Biomassza anyagok hasznosítását megalapozó kutatások

A második generációs bioetanol előállítására alkalmas cellulóz tartalmú biomassza anyagok előkezelésének hatását tanulmányozták termikus módszerekkel. Megállapították, hogy a gőzrobbantás és a lúgos kezelés nemcsak a rostokat roncsolja szét, hanem megváltoztatja a lignocellulózok kémiai összetételét is. Összefüggést mutattak ki a lignin funkciós csoportjainak mennyisége és a polietilén-glikol enzimes hidrolízisre gyakorolt hatékonysága között gőzrobbantott biomassza mintáknál. Fentieken kívül még a nyomás és hevítés kombinációjával előkezelt biomassza mintákból történő aktívszén-előállítás folyamatairól is új ismereteket nyertek. Új típusú, az eddigieknél pontosabb modellt dolgoztak ki a szilárd, növényi eredetű anyagok égésének két kémiai részfolyamatára. A modell az oxigén jelenlétében a hőbomlás összesített tömegveszteségét és az eközben képződő szenes maradék kiégését írja le egyidejűleg.

Légkörkémiai kutatások

Meghatározták a propionil-aldehid OH-gyökkel végbemenő elemi reakciójának sebességi együtthatóját. A reakcióban propionilgyök, C_2H_5CO, keletkezik, ami a légkörben O_2-molekulával reagál tovább. A csoport kutatói gyorsáramlásos kinetikai kísérletekkel igazolták, hogy kis nyomásokon a $C_2H_5CO + O_2$ reakcióban nagy elágazási aránnyal OH-gyök keletkezik, az elágazási arány azonban rohamosan csökken a nyomás növelésével.

Benzofenon származékok fotoredukciós folyamatainak vizsgálata alapján megállapították, hogy ezen alapvető jelentőségű folyamatok kinetikája termodinamikailag szabályozott. Stacionárius, valamint mikro-, nano-, pico- és femtoszekundum időfelbontású kinetikai mérésekkel igazolták, hogy az N-fenil-pirrol típusú molekulák fotofizikájának leírásakor az általánosan elfogadott nagy amplitúdójú szerkezeti relaxációt (TICT) feltételező mechanizmus alapvetően hibás. Ezt bizonyítja az is, hogy fluorazin molekula esetében, ahol TICT jellegű relaxáció nem játszódhat le, nagyon hasonló fotofizikai tulajdonságokat tapasztaltak.

Környezeti elektrokémia

A már szobahőmérsékleten is folyékony szerves sóknak, az ú.n. ionos folyadékoknak nagy jövőt igérnek a modern, környezetbarát elektrokémiai technológiákban. Az ezek kidolgozásához szükséges alapadatok jelenleg hiányosak, ezért ilyenek meghatározására alap-elektrokémiai méréseket végeztek Au(111) egykristály elektródon 1-butil-3-metil-imodazólium hexafluorofoszfát (BMImPF6) elektrolitban. Voltammetriás és elektrokémiai impedancia mérésekkel meghatározták e rendszer töltésmentes potenciálját. Megállapították továbbá, az ilyen rendszerek határréteg-dinamikáját értelmező jelenlegi elméletek nem írják le a ténylegesen mérhető hatásokat.

Az MTA Atomenergia Kutatóintézet magas hőmérsékletű elektrokémiai rendszeréhez használható speciális sokelektródos potenciosztátot, továbbá három különböző, femtoamperes felbontású bipotenciosztátot fejlesztettek ki. Az utóbbiakat osztrák ill. svájci laboratóriumokban használt pásztázó elektrokémiai mikroszkóphoz ill. elektrokémiai atomerő-mikroszkóphoz illesztették.

Műanyagok környezetbarát újrahasznosítását megalapozó kutatások

Polimerek környezetileg előnyös lebontása és átalakítása témában tovább tanulmányozták a PVC termikus valamint termooxidatív lebontását. Előbbit egyes funkciós csoportokat tartalmazó vegyületek jelenlétében végezték. Úgy találták, hogy ez az eljárás alkalmas lehet reaktív kettős kötéseket tartalmazó, erősen elszíneződött PVC-ben a kettős kötések telítésére, ezáltal új szerkezetű, módosított PVC előállítására. A termooxidatív lebontással elődegradált PVC-t elegyítették biológiailag lebomló politejsavval, így egy biológiailag részlegesen lebomló polimer keveréket tudtak előállítani.

Nitrogéntartalmú műanyag pirolízisolajának átalakítására alkalmazott Y típusú zeolitok aktivitás csökkenését és regenerálhatóságát tanulmányozták. Az eredeti zeolittal gyakorlatilag azonos aktivitású regenerált zeolitot sikerült nyerniük a lecsökkent aktivitású katalizátorból levegőáramban hevítéssel. XRD vizsgálatok igazolták, hogy az Y zeolitok kristályszerkezete nem károsult számottevően a regenerálás következtében. A katalitikus aktivitás elvesztését

okozó szénlerakódás minőségét és mennyiségét oxidatív atmoszférában végzett termogravimetriás-tömegspektrometriás (TG-MS) méréssel vizsgálták. Megállapították, hogy HUSY zeoliton lerakódott szén oxidációja nagyobb hőmérsékleten, és nagyobb sebességgel játszódik le, mint a NaY zeoliton. Ez arra utal, hogy a katalizátoron lerakódott szenes bevonat eltérő minőségű a két különböző kationt tartalmazó zeoliton.

Folyamatos üzemű berendezés poliklórozott aromás vegyületek dehalogénezésére

Olyan dehalogénező üzem létrehozásán dolgoznak, mely alkalmas poliklórozott aromás hulladékok, köztük a poliklórozott bifenilek környezetvédelmi szempontból biztonságos ártalmatlanítására. Az üzem méretét és kapacizását (a hulladék klórtartalmától függően 150-500 t/év) úgy tervezték, hogy az közúton vagy vasúton is szállítható legyen. A technológia fő lépései a szerves anyag dehalogénezése és a klórmentes termék fűtőértékének hasznosítása. Az új technológia olcsó és könnyen hozzáférhető mészkövet használ dehalogénező reagensként és egyben a lehasított klór rögzítésére. Mészkőzuzalékkal megtöltött folyamatos csőreaktorban vizsgálták a dehalogénezési, klórmegkötő és a szerves szennyezők oxidációját eredményező reakciókat. A projekt keretében kinetikai és termodinamikai számításokat végeztek a tervezett technológia optimális működési paramétereinek meghatározására. Optimalizált körülmények mellett mind a dehalogénezés, mind pedig a klórmegkötés közel 100%-os hatásfokkal lejátszódott a hulladék teljes mineralizációját eredményezve. A képződő $CaCl_2$-t elválasztás és tisztítás után az ipar különböző területein kívánják értékesíteni. A kifejlesztett eljárás hasznosításában hazai kisvállakozások vesznek részt.

Talajok olajszennyezésének felkutatására és kárenyhítés

Geoelektromos módszeren alapuló laboratóriumi kísérleteket folytattak talajellenállás feltérképezésén alapuló technológia kidolgozására., melynek célja a talajban lévő olajszennyezések felkutatása. Részletesen vizsgálták, hogy miképpen hatnak a különböző talaj- és szennyezéstípusok a szennyezett talaj mérhető ellenállására. Elemezték, hogy miképpen lehet az olajszennyezések és a rétegvizek migrációját megakadályozni, és a szennyezéseket helyhezkötni. Az olajszennyezések helyszíni kezelésére, a kárenyhítésre oxidációs kezelést dolgoztak ki. Analitikai módszerekkel (GC/MS, HPLC, UV/VIS) megállapították a hazánkban előforduló olajtípusok tulajdonságait, ezeket az adatokat felhasználták a technológia kidolgozásában és a folyamatok ellenőrzésében. Laboratóriumi kísérletekkel modellezték, és analitikai vizsgálatokkal követték a különböző olajok talajból történő extrakcióját. A technológia hasznosításában a MOL Nyrt. vesz részt.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az AKI munkatársai 2009-ben is számos hazai kutatóhellyel dolgoztak együtt sokféle kutatási témában. Különösen intenzívek voltak kutatási együttműködéseik az MTA intézeteivel, így a Kémiai Kutatóközpont másik három intézetével, valamint nanonanokompozit rétegek jellemzése témában a Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézettel. A hazai egyetemek közül funkcionális nanorészecskék témában a Pannon Egyetemmel, műszaki műanyagok részecskesugaras felületmódosítása terén a Szent István Egyetem Gépipari

Technológiai Intézet kutatóival, sokkomponensű biológiai rendszerekben a Semmelweis Egyetem munkatársaival végeztek közös kutatásokat. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékkel cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételén dolgoztak.

Az intézet munkatársai magas óraszámban vettek részt a felsőoktatásban: graduális és posztgraduális előadásokat tartottak, szemináriumokat és laborgyakorlatokat vezettek a BME Vegyész- és Biomérnöki Karán és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán. Az ELTE, a BME, a Budapesti Corvinus Egyetem, a Pannon Egyetem és a Semmelweis Egyetem hallgatóinak BSc, MSc és PhD munkáit irányították.

Az intézet a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratóriumot működtet, és funkcionális nanorészecskék témában folytat együttműködést. Az Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztály az intézet és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék közös szervezeti egysége, mely különböző műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseit vizsgálja.

Nemzetközi kapcsolatok

Műszaki műanyagok felületét módosították plazmaimmerziós ionimplantáció alkalmazásával, az így kialakított ultra-nagy molekulatömegű polietilén felületet jellemezték XPS módszerrel. Együttműködő partnerintézmény: National Institute for Space Research, Sao Jose dos Campos, Brazil. Szén bevonatú mágneses nanorészecskék előállításán dolgoztak, a vizsgálatokhoz RF plazmában mintákat készítettek a Varsói Egyetem Kémia Tanszékével közös kutatásban.

A Marie Curie-Tudástranszfer megállapodás keretében a Maribori Egyetemről szlovén kutatót fogadtak, és nyújtott illatanyag leadású mikrokapszulákat fejlesztettek ki. TéT pályázat keretében gyógyászatban használt polimereket vizsgáltak a hollandiai Twente Egyetem kutatóival. Biológiailag lebontható politejsav/CaSO4 kompozitok szerkezetét és tulajdonságait kutatták a belgiumi University of Mons-Hainaut-tal. A Pisai Egyetemmel közösen természetes szállal erősített kompozitokatat, ezen belülis PP és PLA/fa kompozitokat állítottak elő, és meghatározták jellemzőiket. A romániai Petru Poni Makromolekuláris Intézettel együttműködésben optoelektronikában alkalmazható termékeket fejlesztettek ki.

Energetikai célokra alkalmazható biomassza anyagok hőbomlási tulajdonságait határozták meg, valamint a cellulóz egy új típusú hasznosítási lehetőségét vizsgálták a Dongying városban működő China University of Petroleum kutatóival. A trondheimi Norwegian University of Science and Technology-val közösen dolgoztak a faszén széndioxiddal történő elgázosításának lehetőségén, és a folyamatok kinetikájának pontos felderítésén.

Magyar-Lengyel TéT együttműködés keretében az éghajlatváltozás és a légkör kémiájának kölcsönhatása témán, gázfázisú elemi reakciók kísérleti és elméleti vizsgálatán dolgoztak University of Medicine in Wrocław munkatársaival. Ugyanezzel az intézménnyel Magyar-Lengyel Akadémiai Együttműködés keretében meghatározták egyes, a troposzféra halogénkémiájában fontos szerepet játszó elemi reakciók mechanizmusát és kinetikáját. A légkör fizikai kémiája témában a Lille-i Egyetemmel közös PhD témát vezettek, kinetikai és fotokémiai kísérleteket folytattak. A göttingeni Max-Plack-Institute for biophysikaliskalische Chemie munkatársaival jellemezték az N-fenil-pirol/fluorazin renszer fotofizikai tulajdonságait.

MTA – DFG együttműködés keretében az Ulmi Egyeetemmel közösen elektrokémiai impedanciaméréseket folytattak egykristály elektródokon, vizes oldatokban annak demonstrálására, hogy az elektrokémiai kettősréteg dinamikai tulajdonságait az adszorpciós folyamatok határozzák meg a kettősréteg-tartományban. Molekuláris vezetőképesség mérésére szolgáló femto Amper érzékenységű műszereket fejlesztettek ki a Berni Egyetem részére.

Magyar – argentin TéT együttműködés keretében a La Plata-i Festékkutató Intézettel közösen vízhígítású festékekből készült környezetbarát bevonatokat alakítottak ki, és impedancia módszerrel vizsgálták a korrózióvédő tulajdonságaikat.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézet kutatói 2009-ben a következő OTKA illetve OTKA-NKTH pályázatokon dolgoztak, és az alábbi figyelemre méltó eredményeket érték el:

- Hordozható XRF készülékkel nagyszámú mérést végeztek Győr és Budapest környéki ásatásokból származó tégla leletanyagon, továbbá mázakat és pigmenteket vizsgáltak múzeumokban, restaurátor műhelyekben, régészeti gyűjteményekben (PD-75740).
- Polietilén-tereftalátot, poliamidot és polikarbonátot kezeltek nitrogén plazmaimmerziós ionimplantációval és meghatározták a kiváltott felületkémiai, felületi energetikai és csúszósúrlódás típusú tribológiai változásokat (K-67741).
- Poli-tejsav-glikolsav (PLGA) kopolimerekre kötött lineáris és csillagszerkezetű poli-etilén-glikol (PEG) rétegeket jellemeztek XPS módszerrel (K-68120).
- Hiperelágazásos polimerek szerkezete és a kiindulási lineáris polimer karok molekulatömege közötti összefüggést állapítottak meg, valamint új szintézis módszert dolgoztak ki hiperelágazásos polimerek előállítására (T-48409).
- Szabályosan alternáló szerkezetű amfifil polimer kotérhálókat tanulmányoztak. Újfajta hiperelágazásos és csillak polimerek előállítását dolgozták ki multifunkciós inimerek alkalmazásával (F-61299).
- PP/rétegszilikát kompozitokban az exfóliáció és a határfelületi kölcsönhatások, valamint a kompozit tulajdonságai és szerkezete közötti összefüggéseket, továbbá a kompozitok termooxidatív stabilitását befolyásoló paramétereket határozták meg (K-67936).
- Hagyományos töltőanyagokat (kréta, üveggyöngy, faliszt), valamint rétegszilikátokat tartalmazó polimer kompozitokat állítottak elő, és vizsgálták a társított polimerek tulajdonságait meghatározó két fontos tényező, a komponensek között kialakuló határfelületi kölcsönhatások, valamint a kompozit szerkezetének hatását a tulajdonságokra (F-68579).
- A fenolos és foszfortartalmú antioxidánsok hatékonyságát és hatásmechanizmusát meghatározó tényezőket tanulmányozták a polietilén feldolgozási körülményei között (K-77860).
- Meghatározták egy jellegzetes fém/ionos folyadék határfelület (Au(111) egykristály / 1-butil-3-metil-imodazólium hexafluorofoszfát) töltésmentes potenciálját (K-67874).

– Jellemezték a nitrogéntartalmú polimerek pirolízisolajának módosítására alkalmazott Y zeolitok felületén felhalmozódó szénlerakódást, és meghatározták az ennek eltávolítására alkalmas optimális regenerálási körülményeket (K-68752).
– Részlegesen karboximetilezett cellulóz mintákon meghatározták a molekulában jelenlevő savas csoportok, valamint a cink és kalcium ionok hatását a hőstabilitásra és a hőbomlás mechanizmusára (K-61504).
– Olyan alapismereteket nyertek, melyek elősegítik a biomassza jobb hasznosítását erőművekben folyékony üzemanyagként, valamint szennyvíztisztításra alkalmas termékekben (K-72710).
– Meghatározták a propionaldehid és a propionilgyök légkörkémiában fontos elemi reakcióinak kinetikai paramétereit (K-68486).
– Reakciókinetikai és fotokémiai vizsgálatokkal megállapították, hogy a gamma-valerolakton légköri lebomlási élettartama 4 nap (CNK-78079).

Az intézet kutatói a következő egyéb hazai kutatási pályázatok művelésében vettek részt, és az alábbi eredményeket érték el:

– Nanotechnológia alkalmazásával kerámia bevonatokat állítottak elő sugárhajtómű terelő lemezeire, majd a hajtóműben fellépő termikus igénybevétel hatásait tesztelték (OMFB-00252/2007).
– Vizsgálták, hogy miképpen lehet különböző fémek termikus plazmába adagolásával befolyásolni ipari hulladékok feldolgozhatóságát (JÁP_TSZ_P0400808).
– Nanofázisú polimer kotérhálókat és nanohibridjeiket fejlesztettek ki baktericid gyógyászati eszközök, intelligens hatóanyag-bevitelű és bőrsejttenyészeti mátrixok céljára (MTA Kémiai Kutatóközpont Nanomedicina témapályázata).
– Laboratóriumi kísérletekben optimalizálták a poliklórozott aromás vegyületek dehalogénezésére és a klórmegkötésre kifejlesztett technológia működési körülményeit (TECH_08-A462-2008-0160).

Nemzetközi pályázatok

Az intézet kutatói az alábbi EU pályázatok kidolgozásában vettek részt 2009-ben:

– Nagy hozzáadott értékű termékek használt gumiabroncs elgázosítási maradékból témájú pályázat keretében kísérletek történtek használt gumiabroncsok pirolízis maradékának feldolgozására termikus plazmában (Támogatási szerződés száma: 226549).
– A Stratosphere-Climate Links with Emphasis on the UTLS pályázat résztvevőjeként javaslatot tettek az aceton és metil-etil-keton légköri fotokémiájának részletes mechanizmusára (GOCE-CT-2004-505390-SCOUTO3).

Egyéb nemzetközi vagy külföldi forrásból művelt témák:

– Új típusú multifunkciós polimerek kutatásán dolgoztak a DuPont (USA) Research Award támogatásával.
– A kristályos szerkezet és a tulajdonságok kapcsolatát vizsgálták polipropilénben, ezen belül a gócképzés hatását a PP optikai jellemzőire. Együttműködő partnerintézmény: Borealis GmbH, Ausztria.
– Polimer stabilizátorok hatásmechanizmusát határozták meg a Clariant Huningue S.A., France megbízásából.

– A British American Tobacco southamptoni Kutatási és Fejlesztési Központjával végzett munkában dohány hőbomlását és égését valamint nikotin és formaldehid aeroszolból való felszabadulásának kinetikájáról szereztek ismereteket.
– Speciális elektrokémiai műszereket fejlesztettek ki a CEST Kompetenzzentrum für elektrochemische Oberflächentechnologie GmbH (Wiener-Neustadt, Austria) számára.
– Speciális kerámia nanoporokat állítottak elő, és vizsgálták azok tulajdonságait a BASF AG. támogatásával.

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

1. Bertóti I, Mohai M, Kereszturi K, Tóth A, Kálmán E: Carbon based Si- and Cr-containing thin films: chemical and nanomechanical properties, *Solid State Sci. 11*, 1788-1792 (2009)
2. Bozi J, Blazsó M: Catalytic modification of pyrolysis products of nitrogen-containing polymers over Y zeolites, *Green Chemistry. 11*, 1638-1645 (2009)
3. Bystrzejewski M, Károly Z, Szépvölgyi J, Kaszuwara W, Huczko A, Lange H: Continuous synthesis of carbon-encapsulated magnetic nanoparticles with a minimum production of amorphous carbon, *Carbon. 47*, 2040-2048 (2009)
4. Kali G, Georgiou T K, Iván B, Patrickios C: Anionic amphiphilic end-linked conetworks by the combination of quasiliving carbocationic and group transfer polymerizations, *Polym. Sci., Part A: Polym. Chem. 47*, 4289-4301 (2009)
5. Kriston I, Orbán M Á, Nagy G, Staniek P, Földes E, Pukánszky B: Melt stabilisation of Phillips type polyethylene, Part II: Correlation between additive consumption and polymer properties, *Polym. Degrad. Stab. 94*, 1448-1456 (2009)
6. Nagy L, Pálfi V, Narmandakh M, Kuki Á, Nyíri A, Iván B, Zsuga M, Kéki S: Dopant-assisted atmospheric pressure photoionization mass spectrometry of polyisobutylene derivatives initiated from mono- and bifunctional initiators, *J. Am. Soc. Mass Spectrom. 20*, 2342-2351 (2009)
7. Pajkossy T, Kolb D M: The interfacial capacitance of Rh(111) in HCl solutions, *Electrochim. Acta. 54*, 3594–3599 (2009)
8. Renner K, Móczó J, Pukánszky B: Deformation and failure of PP composites reinforced with lignocellulosic fibers: Effect of inherent strength of the particles, *Compos. Sci. Technol. 69*, 1653-1659 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

Átlaglétszám[1]:	110		Ebből kutató[2]:		44
PhD, kandidátus:	16	MTA doktora: 10	levelező tag:	rendes tag:	
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					19
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					81
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					79
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		42
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	6		idegen nyelven:		8
összesített impakt faktor[6]:	80,338		összes hivatkozás száma[7]:		1378
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					1233
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 2		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 19		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 2,33	MTA doktora: 0,33	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	41		poszterek száma[12]:		46
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	16		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		12
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					20
TDK munkát készítő hallgatók száma:	9		Diplomamunkát (BSc):		10
Diplomamunkát (MSc):	14		PhD-t:		23
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					2033
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				376,09	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	4		Teljes saját bevétel[18]:	339,69	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				3,28	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				33,81	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				24,93	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				71,26	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				102,86	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				106,84	MFt

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

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet fő feladatai, egyes tevékenységi területei 2009-ben a következők voltak:
– alapvető és nemzetközi színvonalú biomolekuláris kémiai kutatások folytatása, amelyek magukban foglalják különböző, gyógyszerkémiai vagy finomkémiai szempontból fontos szintézismódszerek kidolgozását, különös hangsúllyal az eredeti heterociklusos szerves vegyületek és szénhidrátok előállítására; ismert és nem ismert cél-molekulák alapvető biokémiai, fiziológiai szerepének vizsgálatát; új diagnosztikai lehetőségek feltárását.

Az intézet, a tudományos feladatokhoz kapcsolódóan a következő területeken fejtett ki tevékenységet:
– kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
– részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
– alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
– a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
– hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
– részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

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

Heterociklusos vegyületek szintézise és vizsgálata

Újabb palládium-katalizált keresztkapcsolások végrehajtásával fenotiazinnal szubsztituált diéneket és ezek redukált származékait szintetizálták, melyeknek multidrog-rezisztenciára gyakorolt hatását kooperációban kutatták. A rezisztenciagátlás vizsgálata az életminőség javítása szempontjából napjaink egyik kiemelt területe.

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

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

Biológiailag aktív szénhidrátok szintézise

Az α-aminonitrilek a Strecker-szintézis köztitermékei. Az aminonitrilek a szerkezetükben található amino és nitril (látens karbonil és imin funkció) csoportok miatt hasznos kiindulási anyagok lehetnek mono- és bifunkcionális vegyületek előállításában. Savas hidrolízisükkel α-aminosavak állíthatók elő. A nitrilcsoport hidridekkel és karbanionokkal történő nukleofil szubsztitúciójával aminok képződnek. A nitrilcsoport teljes reduciójával 1,2-diaminok, míg

részleges hidrogénezéssel és hidrolízise után α-aminoaldehidek állíthatók elő. Az aminonitrilek számos nitrogéntartalmú heterociklusos vegyület kiindulási anyagai lehetnek. A cukrok anomer szénatomjához kapcsolt α-aminonitril funkció az irodalomban eddig le nem írt C-glikoaminonitrileket eredményez, amelyekből a fenti funkcióscsoport-átalakítások során biológiailag aktív új szénhidrátszármazékok állíthatók elő.

A kidolgozott alán-Strecker reakcióval számos α- és β- kapcsolt C-glikoaminonitrilt állítottak elő glüko-, galakto- és manno-szénhidrátokkal. Az alán-Strecker reakció körülményeinek (oldószer, amin, cianidforrás) optimalizálásával 85% diasztereomer felesleg érhető el organokatalizátorok használata nélkül.

Oligoszacharidok reakcióinak tanulmányozása

A heparin szerkezet-hatás összefüggés tanulmányozásával kapcsolatban, a korábban kidolgozott ortogonális védőcsoport-stratégiával, előállították a heparin két tetraszacharid egységét.

A heparánáz enzim inhibitorainak szintézise során egy új védőcsoportot, a 2-nitrobenzolszulfonil csoportot, vezettek be azacukrok nitrogénatomjának a védésére. A kidolgozott módszerrel azacukrot tartalmazó heparin-diszacharid analógokat állítottak elő.

Szisztematikusan vizsgálták a szénhidrát egységek szubsztituenseinek hatását glikozilezési reakciók hozamára, sztereoszelektivitására és sebességére. Megállapították, hogy a kísérleti adatok alapján a jelenleg általánosan elfogadott szomszédcsoport-részvételen alapuló értelmezés nem helytálló. Egy új, a glikozil oxokarbénium ion konformációs preferenciáin alapuló, elméleti modellt dolgoztak ki a glikozilezések sztereoszelektivitásának eredetére és a szubsztituensek hatásának értelmezésére. Az új modell segítségével korrektül megjósolható volt a reakciók sztereokémiai eredménye, és így a modell alapul szolgálhat az eddigieknél sokkal hatékonyabb glikozilezési módszerek kifejlesztésére.

Organokatalitikus reakciók tanulmányozása

Az aszimmetrikus organokatalízis paradigmaváltást hozott a szintetikus kémiában az elmúlt évtized során. A kutatások legújabb irányzata ezen a területen az ún. domino vagy kaszkád reakciók vizsgálata és kifejlesztése. E módszer lehetővé teszi egyszerű építőelemekből komplex, multifunkcionális molekulák előállítását. E területhez kapcsolódva, új elvet ismertek fel és aknáztak ki a bifunkcionális organokatalízis területén, amelyet enantiospecifikus aktiválásnak neveztek el. Erre a királis felismerésen alapuló elképzelésre építve, számos ciklohexán-vázas vegyület szintézisét valósították meg kimagasló enantio- és diasztereoszelektivitással. A koncepció további bizonyításaként, egy egészen egyedi, kinetikus rezolválási folyamatot dolgoztak ki. Az eredmények alapvetően új lehetőséget kínálnak több kiralitás centrummal rendelkező, bonyolult gyógyszermolekulák egyszerű előállítására.

A katalízis területének további fejlődése alapvetően új aktiválási elvek felfedezésétől függ. A korábban általuk leírt, frusztrált Lewis-sav-bázis párok területe alapvetően új stratégiát jelent a főcsoport elemeire épülő katalizátorfejlesztésben. A sztérikus zsúfoltságra mint katalizátor tervezési elvre építve számos Lewis-sav-bázis párt hoztak létre, amelyeket a hidrogén heterolitikus hasítására, illetve katalitikus hidrogénezésre használtak.

2009-ben olyan frusztrált rendszereket sikerült kifejleszteniük, amelyek fokozott funkcióscsoport-toleranciával rendelkeznek, így a gyakorlatban is felhasználhatóak. Az eredmények hozzájárulhatnak az első zöld, fémmentes, ipari méretű hidrogénezési folyamat kidolgozásához.

Természetes szerves anyagok szintézise

Az indolvázas alkaloidokat és alkaloidszerű vegyületeket széles körben használják a gyógyászatban. Ezen a területen az intézet kutatócsoportja a Richter Gedeon Nyrt-vel együttműködésben dolgozik már hosszú ideje. 2009-ben egy egyszerű eljárást dolgoztak ki 2-,3- és 4-dialkilaminoetilanilinek szintézisére, amik alkalmasak indolvázas alkaloidok és alkaloidszerű vegyületek előállítására.

Nukleotidkémiai kutatások

A korábban előállított 5-szubsztituált-pirimidin peptid-nukleinsav (PNS) építőegységek felhasználásával öt 11-mer homopirimidin PNS-oligomert szintetizáltak szilárd fázison, és meghatározták a homopurin DNS komplementerrel képzett duplexeinek termikus stabilitását. Azt találták, hogy egy kivételével mindegyik módosítás növelte a duplexek termikus stabilitását a referencia, a csak timin és citozin bázisokat tartalmazó, PNS-duplexhez viszonyítva. Megállapították, hogy a szóban forgó 5-aril-, ill. 5-alkinil-uracil bázisokat tartalmazó peptid nukleinsavak, erős és szelektív hibridizációs tulajdonságuk folytán alkalmasak géndiagnosztikai célokra.

L-arabinózból kiindulva, lineáris szintézis-stratégia alkalmazásával számos új 5-(2-tienil)-pirimidin bázist, emellett 2'-, ill. 3'-módosításokat is tartalmazó L-*ribo*- és L-*arabino*-nukleozidot állítottak elő antivirális, ill. antitumor hatásvizsgálat céljából.

Neurokémiai kutatások

Transzport-célfehérjék által szabályozott idegi folyamatok mechanizmusának jobb megértése céljából in vitro nyomjelzéses, képalkotó és elektrofiziológiai eljárásokkal, valamint in vivo mikrodialízis technika alkalmazásával azonosítottak egy új típusú, glutaminsav-felvételével közvetlenül kiváltható γ-amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamatot, ami új stratégiát kínál a fokozott glutaminsav-aktivitással járó agyi rendellenességek (pl. epilepszia, ischemia) kezelésében. Leírták a GABA- és a Glu-áramok dinamikáját és a Glu-transzport szerepét a hipomagnéziával kiváltott, rekurrens, rohamszerű események keletkezésében és fenntartásában, akut hippokampális agyszeletben. Antiepileptikus gyógyszerek tervezését is érintő lényeges felismerés: a GABA és a nátriumion között kialakuló reverzibilis kémiai kapcsolódás a neuronális és a gliális GABA-transzporter altípusok szubsztrát kötőzsebében. A tiltott drog, γ-hidroxi-vajsav (GHB, folyékony "Extasy") hatásmechanizmusának megértése szempontjából fontos jelátviteli mechanizmusokat, ATP-vel kiváltott konnexin csatornákon keresztül terjedő gliális kálciumion-hullámot és GHB hatására fellépő intracelluláris $[Ca^{2+}]$-növekedést figyeltek meg akut nucleus accumbens agyszeletben konfokális lézerfluoreszcencia-technika alkalmazásával.

Molekuláris farmakológiai kutatások

A 2009. év folyamán 26 kinázgátló kötődését határozták meg AGP és HSA szérumfehérjéken, amiből a gyógyszerek farmakokinetikájára és molekulák kötődésmódjára kaptak információt.

CD-spektroszkópiai módszerrel vizsgálták az avidin ligandumkötő tulajdonságait. A kidolgozott eljárást módszerként javasolták az avidin és egyéb, gyógyszercélpontként is ismert emberi és virális fehérje ligandumkötésének kimutatására.

Kimutatták glicin receptorokon a tropeinek kötőhelyét és eltérő kötődésmódját gátlás és potencírozás esetén. A szerkezet-hatás összefüggések feltárása hozzájárul a glicin receptorokra hatásirány- és alegység-szelektív modulátorok kifejlesztéséhez.

Újonnan szintetizált 19 β-laktám vegyület királis elválasztását oldották meg permetil- és szulfobutil-β-ciklodextrinek keverékével, kapilláris elektroforézis módszerrel. A királis analitikát a vegyületek farmakológiai tesztelésében lehet alkalmazni.

A metabolizmus folyamatainak vizsgálata

2009-ben folytatták az ABC-transzportereken (ABCC2/3; ABCB11, ABCG2) lejátszódó gyógyszer-interakciók tesztelését humán és patkány hepatocita szendvicskultúrában, kibővítve az „uptake" transzportereken történő interakciók vizsgálatával (NTCP, OATP). A gyógyszer-mellékhatásként létrejövő kolesztázis mechanizmusát vizsgálták szendvics-kultúrában tartott humán és patkány hepatocitákon, tesztelték a kolesztázis kialakulásában szerepet játszó ABCB11 és NTCP transzporterek specifikus szubsztrátja, a taurokolát eliminációjának és intracelluláris akkumulációjának változását kolesztatikus gyógyszerek hatására. A módszer lehetővé teszi a bazolaterális és kanalikuláris transzporterek működésének egyidejű és egymástól független vizsgálatát. Kimutatták, hogy az epesók vektoriális transzportja eltérő humán és patkány hepatocitákban. Kolesztatikus gyógyszerek hatására az epesók intracelluláris akkumulációja sokkal nagyobb mértékű a humán, mint a patkány sejtekben, ami magyarázhatja, hogy ezeknek a vegyületeknek hepatotoxikus mellékhatását a patkány toxikológiai kísérletek nem jelezték. Igazolták, hogy ABCB11 gátlás esetében, patkány hepatocitákban, a nagyobb mértékű bazolaterális transzport védi a sejteket a toxikus epesók magas intracelluláris koncentrációjától.

Gyógyszer-kölcsönhatások vizsgálata

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

In vitro CYP2C9-indukciós vizsgálatok eredményeinek értékelésére matematikai modellezést végeztek, és szimulációs megközelítést alkalmaztak. A modell és a kísérletes megközelítés integrálása az indukciós mechanizmus jobb megértését szolgálja. Az indukciós vizsgálatok, illetve a modell és a szimulációs analízis eredményei, a PXR, a CAR, valamint a

GR-aktiváción túl egy további szabályozó faktor részvételét valószínűsítik. Az expressziós profil alapján feltételezik az ösztrogén receptor aktív közreműködését.

Biooxidációs vizsgálatok

Sportolásnál, az edzés által kiváltott oxidatív stressz idegrendszeri funkciókra gyakorolt hatását mérték a szervezet általános állapotára, különös tekintettel az emlékezőképességre.

Tanulmányozták a multidrog rezisztenciáért felelős transzporterek jelenlétét állati tumorokban, különös tekintettel a fotodinamikus terápiában résztvevő transzporterekre.

Új, a fotodinamikus terápiában alkalmazandó vegyületeket állítottak elő, és elvégezték azok in vitro tesztelését.

Kemometriai kutatások

Új, módszer- és modell-összehasonlításra szolgáló, rangsoroló módszert fejlesztettek ki. Elvégezték nyers kávéminták növénytani és földrajzi megkülönböztetését a minták metil-xantin- és fenolvegyületei tartalmának kemometriai elemzésével. Kis molekulákra vonatkozó fizikai-kémiai és kromatográfiás polaritási jellemzőket hasonlítottak össze. Megállapították, milyen jellemzőket, milyen körülmények között lehet használni.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Hazai együttműködéseik közül kiemelendők az egyetemekkel és más akadémiai intézetekkel folytatott közös kutatások, ill. az oktatási kapcsolatok.

Az ELTE TTK Biológiai Intézet Proteomikai Laboratórium, Élettani és Neurobiológiai Tanszékével a „Glu-GABA cserefolyamat vizsgálata mikrodialízis technikával in vivo”, a Semmelweis Egyetem-MTA Neuromorfológiai és Neuroendokrinológiai Laboratóriummal „A Glu-GABA cserefolyamatban résztvevő célfehérjék anatómiai és immunhisztokémai lokalizációja”, az MTA SZBK, Enzimológiai Intézettel és az ELTE TTK Kémia Intézet, Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratóriummal „Acil-aminoacilpeptidáz kristályszerkezetek meghatározása” c. témák kutatásait folytatják közösen.

Kutatási együttműködést indítottak a Semmelweis Egyetem Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Pathobiokémiai Intézetével, valamint az Uzsoki utcai Kórház Sebészeti-Érsebészeti Osztályával „Humán hepatociták izolálása és gyógyszerinterakciók vizsgálata” c. témában. Eddig egy közös publikációt jelentettek meg.

Igen eredményes kutatási kapcsolatokat alakítottak ki a Semmelweis Egyetem Transzplantációs és Sebészeti Klinikájával. Az együttműködés keretében vizsgálták a transzplantációra kerülő (donor) máj gyógyszerlebontó képességét. Ennek eredményeként kialakítható a transzplantáción átesett betegek egyéni gyógyszeres terápiája. Eddig 11 közös publikációt jelentettek meg.

Az MTA Enzimológiai Intézetével folytatott közös kutatások („Glutation és aminosav konjugátumok kölcsönhatása Drosophila melanogaster multidrug rezisztens fehérjékkel” c. téma) eredményeinek alapján megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek glutation és

cisztein konjugátumai kölcsönhatnak a *Drosophila melanogaster* multidrug rezisztens fehérjékkel.

Az „Aszimmetrikus biotranszformációk folyamatos csőreaktorban” c. témában együtt dolgoznak a BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék kutatóival. 2009-ben az eredményekről egy közös publikációban számoltak be.

Több hazai vállalattal vannak közös projektjeik: így pl. a Creative Labor Kft-vel a „Sejtvonalak előállítása immunfestési metodika tesztelésére”, a LuminoChem Kft.-vel „Új Na^+ ion-szelektív fluoreszcens festékek fejlesztése”, a Nanochem Kft.-vel „Ultraérzékeny fluoreszcens detektor fejlesztése” és a Richter Gedeon Nyrt-vel „Új anxiolitikumok tervezése és felismerése” c. témában dolgoznak együtt.

A Vichem Kft-vel folytatott együttműködés keretében gyógyszerhatóanyagok szérumfehérje-kötődésének vizsgálatát végzik. Az említett cég kutatóival közös publikációt jelentettek meg.

Az „ABC transzporter fehérjék kölcsönhatása környezeti szennyezőkkel” c. témában (együttműködő partner: Solvo Biotechnológia Zrt., Szeged), transzporter-vizsgálatokat végeztek. Megállapították, hogy a klóracetanilid herbicidek, mint környezeti szennyezők gátolják az ABC transzportfehérjék működését, ezáltal jelentősen befolyásolják a gyógyszerek felvételét, és érzékennyé teszik a sejteket a citosztatikus vegyületekkel szemben. A vizsgálatok eredményeként kapott információk igen fontosak az újonnan kifejlesztett növényvédőszerek használatával járó kockázati tényezők előrejelzésében. Az együttműködés eredményeként két közös publikációt jelentettek meg.

Nemzetközi kapcsolatok

Számos európai egyetemmel és kutatóintézettel alakítottak ki jó kapcsolatot: a Department of Pharmacology and Pharmacotherapy, Faculty of Pharmaceutical Sciences, University of Copenhagen intézménnyel a „Glu-GABA cserefolyamat jellemzése primer sejtkultúra modellekben” c. témában, a Neurofiziológiai Intézet, Charité–Universitätsmedizin, Berlin intézménnyel „Az NO szerepe a rohamszerű események keletkezésében”, a National Institute of Nuclear Physics, Róma intézménnyel a „Funkcionalizált szén nanocsövek fejlesztése”, a Ruhr University, Bochum intézménnyel a „Glutaminsav és γ-amino-vajsav detektálására alkalmas enzimrendszerek fejlesztése”, míg a University of Rome “La Sapienza” intézménnyel a “Neuronális hálózatok modellezése” c. témában folytatnak eredményes együttműködést. Az elért eredményekről 2009-ben két folyóiratcikket publikáltak.

A „Nukleozid analogonok szintézise és antivirális hatásuk vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Rega Institute for Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven) a partnernek átadott nukleozidok közül 2009-ben 9 származék *in vitro* antivirális tesztelésére került sor.

„Hatékony módszerek kidolgozása heparin és heparán szulfát oligoszacharidok biológiai célra történő előállítására” című témapályázatot (ERA Chemistry) nyújtottak be a Centre for Synthesis and Chemical Biology, University College Dublin (Írország) intézménnyel közösen. A projektet 2010-es kezdéssel hagyták jóvá.

A Department of Anatomy, National University of Singapore kutatóival a „Bioaktív emlőrák ellenes glikózaminoglikán oligoszacharidok” c. témát a *STAR-NKTH pályázatra adták be.

A „Glukokortikoid hormonok szerepe az aromás-szénhidrogén receptor sejt-szignál működésében humán hepatocitákban” c. témában (TéT-együttműködés, partner: Palaczky University Olomouc) végzett kutatások eredményeként megállapították, hogy a humán hepatocitákban a glukokortikoidok 50-60%-al csökkentik a CYP1A1 fehérje szintjét, azonban a CYP1A1 mRNS mennyiségét nem befolyásolják. Ugyanakkor a dexametazon fokozza a CYP1A2 mRNS indukciót 3-metilkolantrén vagy TCDD kezelt humán sejtekben. A szteroid prehormon dehidroepiandroszteron (DHEA) hatása részben emlékeztet a dexametazon hatásra. Bár a CYP1A1 mRNS szintjét nem befolyásolja, a metilkolantrénnel kezelt sejtek CYP1A aktivitása 25-30%-al csökken DHEA jelenlétében. A DHEA drasztikusan (50%-kal) csökkenti a CYP1A2 expresszióját metilkolantrén-indukálta sejtekben. Az eredményekről három közös publikációt jelentettek meg.

Az „Új antioxidáns klorinvegyületek a rákterápiában” c. témát Magyar-kínai TéT-egyezmény keretében folytatták a Yantai University, Kína kutatóival.

„A koleszterin homeosztázis és a gyógyszermetabolizmus kapcsolatának kísérletes és matematikai modellezése” c. téma (TéT-együttműködés, partner: University of Ljubljana) kutatásainak eredményeiből két közös publikációt jelentettek meg.

Az „Inverz gázkromatográfiás adatok feldolgozása, hordozók, segédanyagok osztályozása” c. kutatási téma az MTA-Lengyel Akadémia közötti egyezményben szerepel. 2009-ben sikerült osztályozniuk a segéd- és a töltőanyagokat, valamint csökkenteni az ezek értékelésére használt referenciaanyagok számát. Eddig négy publikációt jelentettek meg.

Eredményes közös munkát végeztek a „Polaritási indikátorok és a kromatográfiás polaritás értelmezése” c. témában (együttműködő partnerintézmény: St. Petersburg University). Különböző polaritási jellemzőket értékeltek és hasonlítottak össze. Az oldott anyag és oldószer kölcsönhatásokat modellezték mindkét kölcsönható partner szempontjából. Két publikációban foglalták össze az eredményeket.

A „Különböző tulajdonságok előrejelzése szerkezet-sajátság összefüggésekkel. Modellek összevetése objektív módszerekkel” c. téma (partnerintézet: Idaho State University, Pocatello, Idaho, USA) MTA-OTKA-NSF közös projektként szerepel. A kutatások eredményeként különböző modellek összehasonlítására alkalmas kemometriai módszereket dolgoztak ki. Két közös publikációt jelentettek meg.

Eredményes kapcsolatokat alakítottak ki a „Biológiailag aktív indol és imidazopirimidin vegyületek előállítása” c. témában a Bayer Crop Protection, Frankfurt, Németország céggel. Az együttműködés keretében új típusú heterociklusos (indol és imidazopirimidin) vegyületeket állítottak elő.

2009-ben folytatták eredményes kutatási együttműködésüket a Biopredic International (Rennes, Franciaország) biotechnológiai céggel, aminek keretében azt vizsgálják, hogy helyettesíthetőek-e a primer hepatociták HepaRG humán májsejtekkel gyógyszerinterakciós vizsgálatokban.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az NKTH Nemzeti Technológia Program keretében a 2009-2013. közötti időszakra „Intelligens nanoszenzor fejlesztése az ionháztartás folyamatainak szubcelluláris szintű

diagnosztizálására (nanoSEN9)" című pályázatuk 79 M Ft támogatást nyert. A 2009. évi feladatok magukban foglalták a kifejlesztendő nanoszenzor célbajuttatási metodikájának és funkcionális neurotoxikológiai vizsgálati platformjának kidolgozását, a nanoszenzor tesztelését, valamint különböző méretű szilika nanorészecskék kapilláris elektroforézissel történő elválasztását. Az elnyert nanoSEN9 projekt számos pozitív visszajelzést váltott ki a nyomtatott és az elektronikus médiában.

Az NKTH-Asbóth Oszkár program keretében in vivo gyógyszerinterakció screening-szolgáltatást fejlesztettek ki. A projekt címe: „Xenobiotikum Transzporter Technológiai Platform (XTTP) – Terápiás és Toxikológiai Alkalmazások". A programot a Solvo Biotechnológiai Zrt. koordinálja.

Az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszer-kiegészítők előállítására hazai termesztésű gyógynövényekből" c. témában a Gradiens Termékfejlesztő Kft.-vel, a CycloLab Kft.-vel, a BME-vel, valamint a Delta Informatika Zrt.-vel dolgoznak közösen egy GVOP-Jedlik Ányos Program keretében. Az elvégzett vizsgálatok eredményei alapján új, hatékony, királis HPLC állófázisokat fejlesztettek ki, amelyek rövidesen kereskedelmi forgalomba kerülnek.

A „4-, 5-, 6- és 7-(klórmetil)indolok előállítása és alkalmazásuk indolvázas alkaloidok szintézisében" c. OTKA-téma keretében új szintézismódszert fejlesztettek ki.

NKTH-Jedlik Ányos program keretében, az „Új, gazdaságos elválasztási módszerek fejlesztése biztonságos élelmiszer-kiegészítők előállítására hazai termesztésű gyógynövényekből" c. projekt feladatainak teljesítése során, 19 újonnan szintetizált (biciklusos-, aromás triciklusos-, alifás triciklusos-, illetve 4-aryl-szubsztituált-) β-laktám enantiomerpár királis elválasztását oldották meg permetil-βCD és szulfobutil-βCD keverékével, kapilláris elektroforézissel.

Nemzetközi pályázatok

A „Reversal of Multi Drug resistance" c. EU-projekt keretében három külföldi egyetemmel (University of Lisbon, Portugália, University of Reims és University of Marseille, Franciaország) folytattak közös kutatásokat. Több, multidrog-rezisztenciát gátló származék hatását mutatták ki kísérletileg.

Sikeresen fejlesztettek ki eljárást az intézetben bifunkciós, tiokarbamid alapú organokatalizátorok előállítására. Az új terméket a Sigma Aldrich Rt. az intézettel kötött szerződés keretében az intézet laboratóriumától rendeli és forgalmazza.

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

1. Hajós Gy, Riedl Zs: Ring closures to heterocycles via nitrenes, CURRENT ORGANIC CHEMISTRY. 13(8): 791-809 (2009)
2. Soós T: Fluorous chiral catalyst immobilization, In: Recoverable and Recyclable Catalytst (Ed. Benaglia M). Wiley, 2009, pp 179-198
3. Héja L, Barabás P, Nyitrai G, Kékesi KA, Lasztóczi B, Tőke O, Tárkányi G, Madsen K, Schousboe A, Dobolyi Á, Palkovits M, Kardos J: Glutamate uptake triggers transporter-mediated GABA release from astrocytes. PLOS ONE 4(9): e7153-1—12 (2009)

4. Monostory K, Pascussi JM, Kóbori L, Dvorak Z: Hormonal regulation of CYP1A expression, DRUG METABOLISM REVIEWS. 41(4): 547-572 (2009)
5. Daragics K, Fügedi P: Regio- and chemoselective reductive cleavage of 4,6-O-benzylidene-type acetals of hexopyranosides using BH_3 THF-TMSOTf, TETRAHEDRON LETTERS. 50(24): 2914-2916 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Biomolekuláris Kémiai Intézet

Átlaglétszám[1]:	96			Ebből kutató[2]:			52
PhD, kandidátus:	16	MTA doktora:	8	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							26
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							48
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							45
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			37
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1			idegen nyelven:			4
összesített impakt faktor[6]:	123,202			összes hivatkozás száma[7]:			879
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							656
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	1	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 3,66		MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	12			poszterek száma[12]:			26
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							12
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0			Diplomamunkát (BSc):			0
Diplomamunkát (MSc):	1			PhD-t:			17
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							349
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						466,46	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	4			Teljes saját bevétel[18]:		106,71	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						38,82	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						23,07	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						5,78	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						10,23	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						28,82	MFt

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT
NANOKÉMIAI ÉS KATALÍZIS INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67., Levélcím: 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 438-1132, Fax: 438-1164
e-mail: valyon@chemres.hu, honlap: http://www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet fő kutatási feladata 2009-ben a következő volt:
– nemzetközi színvonalú tudományos kutatások végzése a nanokémia és a katalízistudomány területén, amelyek magukban foglalják nanoszerkezetű anyagok szintézisét és tanulmányozását, önszerveződő nanorétegek vizsgálatát, felületek jellemzését és módosítását, valamint heterogén katalizátorok és katalitikus reakciók kutatását, továbbá alternatív energiaforrások kutatását.

Az intézet a tudományos feladatokhoz kapcsolódóan a következő területeken fejtett ki tevékenységet:
– kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
– részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
– alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
– a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
– hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
– részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

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

Nano-medicinális kutatások

A gyógyszerhordozók fejlesztése területén végzett kutatások eredményeként, az irányított hatóanyag-leadást biztosító, sztérikusan stabilizált vezikulák szerkezetére pontos leírást adtak. A vezikulák gyógyszermolekula-komponensének kettősrétegen belüli elhelyezkedését szinkrotron sugárzás alkalmazásával határozták meg. Az ún. anomális röntgenszórás módszerével a hatóanyag-tartalom roncsolásmentes megállapítása vált lehetővé. Ezek a kísérletek a jövőben a gyógyszerkészítmények minőségellenőrzésének új lehetőségeit kínálják.

Kihasználva a cirkónium-dioxid észterezési reakciókban betöltött katalitikus szerepét, a cirkónium-dioxid nanorészecskék felületén polialmasavat kötöttek meg. Ilyen módon új, olcsó, biokompatibilis gyógyszerhordozókat kaptak.

$Mn_xZn_{1-x}Fe_2O_4$ összetételű nanoporok ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópiai, röntgendiffrakciós, elektronmikroszkópiai és mágneses tanulmányozása feltárta a kristályrácsot és a vasatomok lokális állapotát jellemző paraméterek, valamint a mangán koncentrációja közötti eddig nem ismert összefüggéseket.

A lipid monoréteg és antituberkulotikus hatóanyagjelöltek, valamint peptidkonjugátumaik között létrejövő kölcsönhatást tanulmányozták a lipidréteg szerkezetében bekövetkező változások nyomon követésével. Kísérleteik részletes képet adtak a vizsgált kölcsönhatásokról, lehetővé téve a vizsgált hatóanyagjelöltek minősítését. Megállapították,

hogy a peptidkonjugáció számos esetben jelentősen megnöveli a hatóanyagjelöltek sejtpenetrációs képességét.

Kiegészítve más felületanalitikai módszereket (AFM, SEM), sikeresen alkalmazták az FTIR-mikroszkópiás és képalkotásos módszert kémiailag módosított mikrostrukturált felületeken lejátszódó felületspecifikusan immobilizált molekulák azonosítására, különös tekintettel az immobilizált molekulák és a felület közötti kémiai kölcsönhatásra.

Felületmódosítási és nanoszerkezet-vizsgálatok

Az önszerveződéssel és a Langmuir-Blodgett filmmérleggel készített mono- és multimolekuláris filmeknél vizsgálták a hiszterézis jelenségét, a különböző fémionok rétegbe épülését, a szilárd hordozókon kialakított rétegek korrózió- és mikrobamegtapadás-gátló hatását. A hatékonysági adatok elemzése alapján megállapították, hogy a legkedvezőbb körülmények között kialakított LB-rétegek akkor a leghatékonyabbak, ha legalább 3, legfeljebb 7 réteg épül egymásra. A fémionok jelenlétének vizsgálata azt mutatta, hogy mind réz-, mind vashordozó esetében a vas- és a rézionok jelenléte nagymértékben megnöveli az antikkorróziós hatást.

A Semmelweis Egyetem Orvosi Biokémiai Intézetével való együttműködésben nagyfelbontású mikroszkópia alkalmazásával összefüggést állapítottak meg a trombust alkotó fibrin litikus érzékenysége és struktúrája között.

Szintézist dolgoztak ki különböző kristályszerkezetű (rutil, illetve anatáz) nanoméretű titán-dioxid részecskék vizes közegben történő előállítására. Módszert dolgoztak ki a részecskék formulázására, aminek eredményeképpen a festékipar számára jól felhasználható formulákat (géleket, illetve diszperziókat) állítottak elő. Ezek kiválóan alkalmazhatónak bizonyultak különböző vizes bázisú festékrendszerek aktív komponenseiként, elsősorban olyan transzparens lakkokban, amelyeknek fő alkalmazási területe az UV-sugárzás elleni védelem.

Preparatív eljárást dolgoztak ki nagy koncentrációjú (100-200 ppm között), vizes közegű arany-kolloidok előállítására. Ezen kolloidok felhasználásával poláros – illetve apoláros oldószerekre kimagaslóan nagy érzékenységű elektrokémiai szenzorokat készítettek.

Szol-gél eljáráson alapuló szintézist dolgoztak ki különböző összetételű, nanoszerkezetű, perovszkit-típusú mágneses anyagok ($La_xSr_{(1-x)}MnO_3$) előállítására. Az előállított anyagok mágneses jellemzőinek vizsgálata alapján meghatározták azt az összetételt, amely a leginkább megfelelő lehet biomedicinális alkalmazások, pl. hipertermiás terápiás célra.

Szerves katalitikus kutatások

A finomkémiai és az energetikai ipar (tüzelőanyag cellák) katalitikus vonatkozású területein végzett kutatások hozzájárultak a fizikai-kémiai tulajdonságok és a reakcióképesség közötti összefüggések feltárásához, ami az anyagi összetétel és a komponensek nano-környezetének szabályozása révén új, hatékony, katalitikusan aktív anyagok előállítását tette lehetővé. Az "irányított felületi reakcióval (IFR)" előállított Pt-Sn/C katalizátoron kimutatták a Pt_3Sn-ötvözet-fázis promotor szerepét CO és etanol elektrooxidájában. Az IFR-val előállított Pt-Ge/C katalizátorok, a Pt-Ge kölcsönhatás miatt, nagy szelektivitást mutattak telítetlen aldehidek alkohollá történő hidrogénezésében. Az IFR-val előállított katalizátorok tulajdonságai felülmúlták az impregnálással előállítottakét.

Elsőként mutatták ki Au-Sn/Al_2O_3 katalizátoron az ötvözet-fázis jelenlétét és a „Sn^{n+}-Au” aktív helyek szerepét CO alacsony hőmérsékletű oxidációjában.

Az alumínium-szilikát hordozós, kis fémtartalmú, kétfémes katalizátorok aktívnak bizonyultak olajok aromástartalmának hidrogénezésében.

Az aktivált ketonok aszimmetrikus hidrogénezési reakciójának vizsgálatakor megállapították, hogy a cinchona alkaloid, mint királis módosító hozzáadására tapasztalt sebességnövekedés a rendszer belső sajátossága, a szakirodalomban felvetett katalizátor-tisztítóhatás elképzeléssel ellentétben.

Heterogén katalíziskutatások

Az alternatív energiahordozók iránti érdeklődés világszerte és hazánkban is fokozódik. Az elmúlt évben a hidrogéntechnológiák területén alkalmazható néhány heterogén katalizátor tervezésére, előállítására és vizsgálatára került sor. A hidrogén előállítása etanol vízgőzös reformálásával történt. Szintén a hidrogéntermelést célozza a víz fotokatalitikus bontása, amihez a szükséges eszközök, és berendezések tervezése folyamatban van. A hidrogén tisztítására (szénmonoxid-mentesítésére) a preferenciális CO-oxidáció (PROX) biztosít lehetőséget. A hidrogént tüzelőanyag-cellákban lehet felhasználni energiatermelés céljából. Elindult a direkt metanol tüzelőanyag-cellák anód katalizátorainak a tervezése.

A PROX-reakció katalizátorának modelljeként felfogható arany egykristályfelület gázadszorpciós tulajdonságainak összegfrekvencia-keltési spektroszkópiával történő in situ tanulmányozása során kiderült, hogy bár a sima (111) felületen alacsony hőmérsékleten sincs kimutatható szénmonoxid-adszorpció, az ionbombázással durvává tett felületen széles nyomás- és hőmérséklet-tartományban viszonylag gyengén kötött CO-molekulák detektálhatók. A felületpásztázó alagútmikroszkópos vizsgálata azt mutatja, hogy az ionbombázásos durvítás hatására elsősorban néhány atomsor magasságú lépcsőkkel határolt gödrök keletkeznek, így a lépcsők éleit alkotó aranyatomok azonosíthatók CO adszorpciós helyekként. A durvított arany felületen lezajló CO adszorpció elektronspektroszkópiai tanulmányozása jelenleg folyamatban van.

Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása

Biológiai eredetű trigliceridek hidrokonverziójának mechanizmusát tanulmányozták trikaprilin és kaprilsav modellvegyületek alkalmazásával szénhordozós palládium (Pd/C) és promoveált molibdénoxid-alumíniumoxid (Ni,Mo/γ-Al_2O_3)-katalizátoron. Megállapították, hogy a reakció két konszekutív lépésben megy végbe: első lépésben a trikaprilin hidrogenolízise játszódik le kaprilsavvá és propánná, amit a kaprilsav intermedier hidrogénező oxigénmentesítése követ a kívánt szénhidrogén termékké. Ez utóbbi reakciólépés a folyamat sebességmeghatározó lépése, amelyről kimutatták, hogy a két eltérő katalizátoron különböző reakcióutakon megy végbe. A Pd/C-katalizátoron a kaprilsav C_7-alkánt és szénmonoxidot eredményező dekarbonileződése bizonyult az elsődleges reakcióútnak, míg a (Ni,Mo/γ-Al_2O_3)-katalizátoron a kaprilsav konszekutív hidrogénaddíciós és dehidrogénezési lépéseken keresztül víz keletkezése közben alakul át C_8 alkén és alkán termékekké. Az eredmények jelentős mértékben járulnak hozzá a növényolajok heterogén katalitikus hidrokonverziójában alkalmazható katalizátorok kiválasztási stratégiájának kialakításához.

A kutatási eredményeket egy ipari katalizátor kifejlesztésénél hasznosítják. A kutatás-fejlesztés említett és korábbi eredményeire alapozva, a MOL Zrt. 200 000 t/év kapacitású növényolaj-feldolgozó üzem építését tervezi. A kutatás, a létesítendő üzem révén, hozzájárul az EU biohajtóanyag direktívájának magyarországi teljesítéséhez.

Felületi szerkezetek kutatása

A tárgyévben fontos eredményeket értek el a metanol, az etanol és a dimetil-éter katalitikus vizsgálatában. A szénhordozó felületére felvitt Pt-fémek nanométer dimenzióban kitűnő katalizátoroknak bizonyultak a hidrogén előállításában. A metanolból történő hidrogénképződést elősegítette a különböző hordozókra felvitt aranykatalizátor is. A káliummal promotált Au(111) felület nagymértékben segítette a széndioxid aktiválását és redukcióját.

Elektron-, foton- és ion-spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-mel tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek (Au-Mo, Au-Rh és Rh-Mo) képződését és fizikai-kémiai sajátságait egykristály titándioxid felületen. A Mo adatom elősegítette az arany nanoklaszterek szétszakadását. A Rh viszont a nanoklaszter térfogatát növelte meg. Ennek eredményeképpen az arany vált dominánssá a felületen. A Rh-Mo bimetallikus réteg esetében ötvözetképződést figyeltek meg. Mindezek az eredmények energetikai szempontból hasznosíthatók.

Nukleáris spektroszkópiai vizsgálatok

Új típusú, korábban nem ismert, Fe-Sn biner, illetve kristályos formában nem létező Sn-Co-Fe terner ötvözeteket állítottak elő a Glasgow-i Caledonia Egyetemmel együttműködve, elektrokémiai leválasztás útján. Az anyagok hatásos korrózióvédelmi galvánbevonatoknak bizonyultak. Röntgendiffrakciós és Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatok alapján megállapították, hogy ezek a rétegek amorfok és ferromágnesesek. Az ötvözetek akkumulátorok elektródjaiként is gazdaságosan alkalmazhatók lehetnek. ^{119}Sn Mössbauer-vizsgálatok alapján megállapították, hogy az (Sn-Co-Fe)-terner ötvözetekben az ón olyan transzferált, hiperfinom mágneses teret érzékel, aminek az alapján az amorf ötvözet rövidtávú rendezettsége jellemezhető.

Sikerült amorf állapotú vas képződését előidézniük nagyenergiájú, nehézion-besugárzás segítségével elektrokémiai úton előállított vas-vékonyrétegekben. Azt tapasztalták, hogy az amorfizáció mértéke jelentős dózis- és ionfüggést mutat.

Pozitronannihilációs spektroszkópiai módszerekkel bizonyították, hogy a gyógyszerészeti hordozóanyagok összetételfüggő, öregedési tulajdonságai jelentősen befolyásolják a kiszerelt gyógyszer hatóanyagleadási tulajdonságait.

Karbon nanocsövek β-vas vas-ftalocianin pirolízisével történő előállítása lépéseinek vizsgálata során, sikerült olyan előállítási paramétereket találniuk, ahol a rétegek közé beépülő oxigén specieszek közül csak olyan lép fel, ami hőmérsékletfüggő spinátmenetet mutat. Ennek a lehetséges térbeli konfigurációjára megfelelő magyarázatot adtak.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Mind a kutatás, mind az oktatás területén eredményes együttműködéseket folytattak a hazai egyetemekkel, kiemelten a BME Természettudományi Karával, ill. a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karával, valamint az ELTE Természettudományi Karával.

A BME Vegyészmérnöki Karán például rendszeresen tartottak emelt szintű, speciális laboratóriumi gyakorlatokat a gyógyszer-technológia oktatásához kapcsolódó témakörökben.

A Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatok területén számos egyetemi és akadémiai kutatócsoporttal alakítottak ki gyümölcsöző kapcsolatokat. Így például partnerük az ELTE Kémiai Intézet, Fizikai Intézet, Földrajz- és Földtudományi Intézet, Biológiai Intézet; a Semmelweis Egyetem Egyetemi Gyógyszertár; a Szegedi Egyetem, Kémiai Intézet, az MTA Izotópkutató Intézet és a Pannon Egyetem Kémiai Intézet.

A hazai kutatóhelyek közül kiemelendők az MTA Izotópkutató Intézettel folytatott munkák, amelyek a felületi ón állapotának hordozós Sn, Sn-Pt és Sn-Au katalizátorokban Mössbauer spektroszkópia segítségével, *„in situ”* körülmények között történő meghatározására vonatkoznak. A vizsgálatok eredményei elsőként szolgáltattak bizonyítékot arra, hogy Al_2O_3-hordozós Sn-Au katalizátorokban ötvözet típusú részecskék léteznek. Sikerült az Sn(II) ↔ AuSn és Sn(IV) ↔ AuSn reverzibilis átmeneteket jelentős arányban, szimultán kimutatni. 2009-ben két közös közleményük jelent meg.

Az „Inverz oxid/fém határfelületek genezise, jellemzése és alkalmazása model rendszerben” c. témában az arany/átmenetifém-oxid katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértését célzó vizsgálatok eredményeiről is közös publikációban számoltak be.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek igen széleskörű és eredményes nemzetközi kapcsolatai vannak mind európai, mind tengerentúli kutatóhelyekkel.

A „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként” c. téma keretében (MTA-BTA egyezmény) az Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia intézménnyel együttműködve, három tudományos publikációt jelentettek meg.

A „NO_2 bomlása Fe-tartalmú zeolitokon” c. téma (együttműködő partner: National Institute of Chemistry, Ljubljana, Szlovénia) közös eredményeiből előadást állítottak össze, amelyet nemzetközi konferencián mutattak be.

A „Rézfelületek korróziója esővizes kezelések hatására” c. témában a Polytechnic School of the São Paulo University, Brazília intézménnyel folytatott együttműködés eredményeiről egy közös folyóiratcikket jelentettek meg.

Az „Elektro-katalizátorok fejlesztése direkt metanol tüzelőanyag cellákhoz” c. témában (partnerintézet: Instituto de Catalisis y Petroleoquimica, CSIC, Spanyolország), MTA-CSIC kétoldalú egyezményes együttműködés keretében új módszert dolgoztak ki Me-Pt/C elektrokatalizátorok előállítására (Me: Sn, Ge, Pb), amelynek alkalmazásával az aktív szénen található Pt-fázis szelektíven módosítható.

Az „Immobilizált heteropolisavak (HPA) és fémorganikus vegyületek alkalmazása szerves szintézisekben” c. témában folytatott együttműködés során (partner: Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, Novoszibirszk, Oroszország) az Orosz-Magyar Tudományos Akadémia közötti egyezmény keretében megállapították, hogy a hordozón rögzített heteropolisavak hatásosan alkalmazhatók katalizátorként oxidációs reakciókban. A HPA-katalizátor stabilitását jelentősen befolyásolja a rögzítéshez alkalmazott felületi amincsoportok koncentrációja és típusa. A heteropolisav káros kioldódása annál kisebb, és ezért aktivitása annál nagyobb, minél nagyobb a rögzítéshez alkalmazott aminvegyület szénlánchossza. Egy, az együttműködés eredményeként létrejött közleményt egy nemzetközi folyóirat már elfogadott, egy további közlemény előkészületben van.

Az „Elektro-katalizátorok fejlesztése direkt metanol tüzelőanyag cellákhoz” c. téma kutatásait (együttműködő partner: Institute of Catalysis and Petrochemistry, Madrid, Spanyolország) a Spanyol-Magyar, MTA-CSIC egyezmény keretében kezdték el 2009-ben. A tervezett projekt új típusú, többkomponensű katalizátorok fejlesztésére irányul direkt metanol tüzelőanyagcellák (DMFC) katódja és anódja számára. Elsődleges szempont a katalizátorok nemesfémtartalmának csökkentése.

Magyar-argentin TéT-együttműködés során a „Fémkarbid alapú katalizátorok elméleti és kísérleti vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Departmento de Física – Universidad Nacional del Sur, Buenos Aires, Argentína) a metanol adszorpcióját és disszociációját vizsgálták DFT-spektroszkópiával $Mo_2C(100)$ felületen. Két közös publikációt jelentettek meg és egy nemzetközi konferencián tartottak előadást.

Az „Oxid-fém határátmenetek tanulmányozása pásztázó alagútmikroszkópiával és szinktrotron-sugárzással gerjesztett fotoelektron-spektroszkópiával” c. egyezményben foglalt témában (együttműködő partner: Department of Thin Films, Institute of Physics, Academy of Sciences of Czeh Republic) sikeresen állítottak üzembe egy Q-PLUS típusú, STM-AFM kombinált működésre alkalmas berendezést. Sikerült atomi febontásban AFM-képet felvenni $TiO_2(110)$ felületéről.

Magyar-francia TéT-egyezmény keretében a „Fém-komplexek alagútáram–indukált disszociációjával előállított nanométer léptékű határfelületek tanulmányozása” c. téma kutatásainak során (együttműködő partner: Institut Carnot de Bourgogne, CNRS-Université de Bourgogne) $TiO_2(110)$ egykristály felületen sikerült adszorbeált $Mo(CO)_6$ molekulákat azonosítani STM-mel. Megmutatták, hogy a $TiO_2(110)$ felületen létrehozott nanopötty alapvetően szigetelő jelleget mutat, viszont a Cu(110) felületen végzett hasonló mérések a nanopöttyök vezető jellegre utalnak.

Az MTA-Orosz Tudományos Akadémia közötti együttműködés keretében, a „Növényi és bakteriális metabolitok fémekkel való kölcsönhatásának vizsgálata” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Orosz Tudományos Akadémia Biokémiai és Növényélettani Intézet, Szaratov, Oroszország) végzett kutatások során, sikerrel alkalmazták a Mössbauer-spektroszkópiát a környezeti tényezők kémiai hatásának vizsgálatára. Megvizsgálták és leírták a vas(III) komplex képződésének és redukciójának mechanizmusát az indol-3-karbonsavat, ecetsavat, propionsavat, illetve butánsavat tartalmazó vizes oldatokban. A glutamin szintetáz enzim ^{57}Co emissziós Mössbauer-vizsgálatával megállapították, hogy a két kation-kötőhely nem azonos affinitással köti meg a Co^{2+}-ionokat. 2009-ben két közös cikket publikáltak.

Magyar-francia TéT-együttműködés során a „Kobaltát perovszkitok mágneses fázisátalakulásainak és növények vasfelvételi mechanizmusainak vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával” c. témában (együttműködő partnerintézmény: CNRS Le Mans-i Szilárdtestfizikai Kutatólaboratóriuma, Franciaország) a kolosszális mágneses ellenállást mutató mintasorozatokon részletes, hőmérsékletfüggő Mössbauer-méréseket végeztek. Elemezték az anyagok elektromos és mágneses fázisátalakulásait mind az összetétel, mind a hőmérséklet függvényében. Az eredményekről egy nemzetközi konferencián közös előadásban számoltak be.

Magyar-cseh TéT-egyezmény keretében végzett alacsony hőmérsékletű és mágneses térben történő Mössbauer-mérésekről 3 konferencia-előadásban számoltak be.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az NKFP-„Nanodrug” Jedlik Á. pályázatukban a KPS Orvosi Biotechnológiai és Egészségügyi Szolgáltató Kft. irányításával, hat konzorciumi partner K+F-munkája kapcsolódik össze. Az elért eredményekről a KPS, a Semmelweis Egyetem Pathológiai Intézete és a Vichem Chemie Kutató Kft. kutatóival közösen három tudományos előadást tartottak.

A témában 2009-ben, az irányított hatóanyag-leadást biztosító, hagyományosan használt, vezikuláris rendszerek sajátságainak feltárására, új módszereket vezettek be. A hatóanyag-leadást biztosító más nanorendszerek előállításának első lépéseit megtették.

Megkezdték az egy- és többfunkciós szilika nanorészecskék kidolgozását. Az előállítással párhuzamosan fejlesztik az elválasztási és jellemzési módszereket. Előkészületeket folytattak nagyon kis vezikulák és megfelelően funkcionalizált dendrimerek előállítására is. Pontos leírást adtak az irányított hatóanyag-leadást biztosító, sztérikusan stabilizált vezikulák szerkezetére.

Az NKFP-METANANO-projekt keretében különböző kémiai redukciós és elektrokémiai módszerekkel előállított, arany nanorészecskékkel borított, interdigitális elektródokat, így gáz- és gőzérzékelő impedancia-szenzorokat fejlesztettek. Impedanciaspektroszkópiai mérésekkel megállapították, hogy a formaldehiddel redukált, glükózzal stabilizált arany szol kiválóan alkalmas szenzorként. Az anyag poláros oldószergőzök hatására több nagyságrendű ellenállás- és kapacitásváltozást szenved, a változás frekvenciafüggő. A szenzor gyors válaszidejű és reverzibilis. További előnye, hogy viszonylag kis felületi borítottság esetén is alkalmazható, így a kis anyagszükséglet miatt, alkalmazása igen gazdaságos**.**

Az NKFP-NANOLAKK: „Új generációs nanobevonatok a versenyképes festékiparért” c. projektben sikerült kifejleszteniük egy olyan korróziógátló adalékot, amelyet vizes bázisú festékekbe téve, a száradás során bekövetkező korróziót vissza lehet szorítani. Az adalék hatásosságát a konzorciumi partnerek bizonyították, a legkedvezőbb tulajdonságú termékből laboratóriumi leirat alapján üzemi előállítás történt.

Az NKFP-ALMAACID: „L-almasav alapú biopolimerek előállítása és azok felhasználási lehetőségei a gyógyászatban és az élelmiszeriparban” c. projekthez kapcsolódóan 30 különböző, homo- és kopolimer előállítására, vizsgálatára került sor. A vizsgálatok során

mérték a telítetlen anyagtartalmat, a savasságot, a pH-függő stabilitást és a származékkészítési lehetőségeket.

A „Környezetvédelmi és biztonságtechnikai célú, nemesfém nanoporokon alapuló innovatív termékek (szűrők, szenzorok, katalizátorok) fejlesztése” c. NKFP-projekt 2009-ben végzett munkájának legfontosabb eredménye annak felismerése, hogy aktív szén és új típusú, szén-nanocső-hordozós Pd-katalizátorok hatékonyan alkalmazhatók ketonok szelektív hidrogénezésében a finom kémiai ipar számára fontos alkoholok előállítására.

A „Katalitikus hidrogéntermelés megújuló energiaforrásokból” c. OTKA-projekt keretében magnézium spinell alapú, többkomponensű katalizátorokat fejlesztek ki etanol vízgőzös reformálására. Nagy hidrogénhozam mellett, sikerült lecsökkenteni a szénlerakódások képződésének mértékét. Nagyáteresztő-képességű berendezést terveztek fotokatalitikus vízbontás vizsgálatára.

Az „Innovatív bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus-fejlesztés” c. GOP-pályázat keretében laboratóriumi, kísérleti katalitikus berendezést terveztek és kiviteleztek, valamint katalizátort fejlesztettek ki pirolízis olajok magas hőmérsékletű vízgőzös reformálásához. Katalitikus kísérleteket végeztek a pirolízis olajok összetételére jellemző aromás, oxigéntartalmú és nitrogéntartalmú modellvegyületekkel. Az eredményeket a megfelelő katalizátor kiválasztásához, ill. a tényleges pirolízis olaj vízgőzös reformálásához szükséges katalizátor megtervezéséhez használták fel.

Az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése” (Nemzeti Technológia Program – Élhető, fenntartható környezet) c. program 2009. évi munkáinak során elkészítették egy félüzemi, kísérleti, szennyvíztisztító berendezés kiviteli terveit. Kiválasztották az egyes részegységeket, és elkezdték a beruházásukat.

Az NKTH-OTKA-támogatással végzett „Katalitikus és gázszenzorikai 2D modellrendszerek nanoléptékű tanulmányozása” c. téma kutatásainak során arany és ródium egymást követő párologtatásával a két fém krisztallizációját tanulmányozták TiO_2(110) felületen alagútmikroszkópiai és ionszórásos-spektroszkópiai módszerekkel. Kidolgoztak egy módszert, amellyel 50-5000 atomból álló Rh-Au mag-héj nanoklasztereket tudnak létrehozni előre meghatározott méretben és felületi koncentrációban. A Rh-Mo bimetallikus rendszer esetében ötvözetképződést figyeltek meg. Az eredményekről eddig két dolgozatban számoltak be.

A „Szénhidrogének és alkoholok reakciójának katalitikus és felületkémiai vizsgálata” c. OTKA-projekt kutatásaiban elsősorban a hidrogén előállítására koncentráltak. A szén- és oxid-hordozóra felvitt platinafémeken azt találták, hogy az alkoholokból hidrogén is képződik, aminek mértéke a hordozó minőségétől függ. Ezen a katalizátoron megvizsgálták a dimetil-éter átalakulását és bomlását is. Tanulmányozták továbbá Au(111) felületen a kálium adalékolásának hatását a CO_2 aktiválására és disszociációjára. A folyamatok elemi lépéseit elektronspektroszkópiai módszerekkel is követték. Elektron-, foton- és ionspektroszkópiával tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek képződését és fizikai-kémiai sajátságait titán-oxid felületen. A pályázat keretében eddig hét folyóiratcikk született.

A „Szerkezetváltozások hatása kondenzált fázisok szabadtérfogatára: pozitronannihilációs vizsgálatok” c. OTKA-témában folytatták gyógyszer-technológiailag fontos polimerekben az öregedés és a vízfelvétel hatásainak vizsgálatát pozitronannihilációs és hagyományos polimervizsgáló módszerek kombinációjával. Megállapították, hogy összefüggés van a hordozó szabadtérfogatának változása és a tabletta hatóanyagkibocsátási tulajdonságai között.

Tabletták bevonataként alkalmazott Na-alginát filmek adalékolásának a hatását vizsgálták. Megállapították, hogy laktóz hatására a filmek szerkezete erősen megváltozik. Pozitronannihilációs spektroszkópiai módszerekkel bizonyították, hogy a gyógyszerészeti hordozóanyagok összetételfüggő öregedési tulajdonságai jelentősen befolyásolják a kiszerelt gyógyszer hatóanyagleadási tulajdonságait.

Nemzetközi pályázatok

Az EXCELL „Exploring Cellular Dynamics at Nanoscale" FP7-projekt keretében 9 európai és egy izraeli partnerrel dolgoznak együtt. Az eredmények megvitatására félévi rendszerességgel megtartott szakmai konzultációkon kerül sor.

Az elmúlt évben kidolgozták a mikroelektródák felületének kolloidkémiai, azaz nanorészecske-megkötődésen alapuló módosítását. A Dán Műszaki Egyetemmel folytatott együttműködésben a kifejlesztendő „lab-in-a-cell" folyadékcellák biokompatibilitását növelő felületmódosítási stratégiákat alakítottak ki.

A COST D33: „Nanoscale electrochemical and bioprocesses (corrosion) at solid-aqueous interfaces of industrial materials" c. együttműködés keretében a Duisburg-Essen University, Németország kutatóival hoztak létre szoros kapcsolatokat a mikrobiológiai korrózió témájában.

Az EU-FP7 N2P-projektjének keretében vertikálisan rendezett szénnanocső-erdővel borított elektródok szuperkondenzátorként történő alkalmazását vizsgálták. Kidolgozták a szuperkondenzátorok elektrokémiai módszerekkel történő minősítését. Vizsgálták a különböző elektrolitok hatását a kondenzátorok működési paramétereire, így az energiasűrűségre és teljesítménysűrűségre. A kísérletek alapján egyelőre 4-10 F/g specifikus kapacitást sikerült elérni, míg a maximális teljesítménysűrűség > 50kW/kg.

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

1. Paszternák A, Felhősi I, Pászti Z, Kuzmann E, Vértes A, Kálmán E, Nyikos L: Surface analytical characterization of passive iron surface modified by alkyl-phosphonic acid layers, ELECTROCHIMICA ACTA. 55: 804-812 (2009)
2. Csanády A, Kálmán E, Konczos G (eds.): Bevezetés a nanoszerkezetű anyagok világába. ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2009, p. 313
3. Tompos A, Margitfalvi JL, Szabó EGy, Pászti Z, Sajó I, Radnóczi Gy: Role of modifiers in multi-component MgO-supported Au catalysts designed for preferential CO oxidation, JOURNAL OF CATALYSIS. 266(2): 207-217 (2009)
4. Pászti Z, Guczi L: Amino acid adsorption on hydrophilic TiO_2: A sum frequency generation vibrational spectroscopy study, VIBRATIONAL SPECTROSCOPY. 50(1): 48-56 (2009)
5. Lónyi F, Kovács A, Szegedi Á, Valyon J: Activation of hydrogen and hexane over Pt,H-mordenite hydroisomerization catalysts, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 113(24): 10527-10540 (2009)

6. Kiss J, Óvári L, Bugyi L, Berkó A: Characterization of Au-Rh and Au-Mo bimetallic nanoclusters on TiO_2(110): A comparative study, REACTION KINETICS AND CATALYSIS LETTERS. 96(2): 391-396 (2009)
7. Tolmacsov P, Gazsi A, Solymosi F: Decomposition and reforming of methanol on Pt metals supported by carbon Norit, APPLIED CATALYSIS A-GENERAL. 362(1-2): 58-61 (2009)
8. Kuzmann E, Szalay R, Vértes A, Homonnay Z, Pápai I, de Chatel P, Klencsár Z, Szepes L: Observation and interpretation of 157.5 T internal magnetic field in $Fe[C(SiMe_3)_3]_2$ coordination compound, STRUCTURAL CHEMISTRY.20(3): 453-460 (2009)
9. Onyestyák Gy, Bóta A: Sorption dynamics of N_2 and O_2 in carbon monoliths from spruce, beech and oak affected by activation, MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS. 120(1-2): 84-90 (2009)
10. Tálas E, Margitfalvi JL, Egyed O: Additional data to the origin of rate enhancement in the enantioselective hydrogenation of activated ketones over cinchonidine modified platinum catalyst, JOURNAL OF CATALYSIS. 266(2): 191-198 (2009)

Szabadalmak:

1. Bóta A, Varga Z, Molnár M, Kálmán E: Anisotropic nanoparticles: preparation process and their use as quantumdots in liquid crystals. (KNST 2 00067/KSU.336)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

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

Átlaglétszám[1]:	78			Ebből kutató[2]:			60
PhD, kandidátus:	28	MTA doktora:	9	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							25
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							83
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							79
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			49
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			12
összesített impakt faktor[6]:	123,584			összes hivatkozás száma[7]:			559
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							458
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	14	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	1	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	5,33	MTA doktora:	0,33	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	25			poszterek száma[12]:			38
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			11
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							17
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0			Diplomamunkát (BSc):			0
Diplomamunkát (MSc):	0			PhD-t:			16
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							928
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						210,93	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	4			Teljes saját bevétel[18]:		446,625	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						8,21	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						15,435	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						223,02	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						10,971	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						153,23	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						9,78	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						34,19	MFt

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET
1025 Budapest, II. Pusztaszeri út 59-67., Levélcím: 1525 Budapest, Pf. 17.
Telefon: 438–1120, Fax: 438–1143
e-mail: kubinyi@chemres.hu, honlap: www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet feladata 2009-ben nemzetközi színvonalú tudományos kutatások művelése volt, elsősorban azokon a területeken, amelyek több kutató és kutatási nagyműszer koordinált együttműködését igénylik. A kutatások a következő főbb területeken folytak:

– szerkezeti biológia és kémia,
– szupramolekuláris kémia (önszerveződő rendszerek),
– nagyműszeres vizsgálatok a gyógyszerkutatások támogatására,
– orvosi analitikai kémia,
– funkcionális vegyületek (polimerek, fluoreszcens próbák, fotokrom vegyületek).

Az intézet, a tudományos feladatokhoz kapcsolódóan a következő területeken fejtett ki tevékenységet:

– kutatási infrastruktúra üzemeltetése;
– részvétel a graduális és posztgraduális szakemberképzésben;
– alap- és alkalmazott kutatásokhoz szükséges módszerek és eszközök fejlesztése;
– a tudományos eredmények hasznosításának kezdeményezése és elősegítése;
– hazai és nemzetközi tudományos rendezvények szervezése;
– részvétel a nemzetközi tudományos életben és a tudományos szervezetekben.

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

Szerkezeti biológia és kémia

A triapinmolekula széles körű biológiai hatásáról (antimaláriás, antimikrobiális és antitumor aktivitás) ismert. A biológiai hatás és a komplexképző sajátságok közötti összefüggések felderítésére három piridin-tioszemikarbazon vegyület összehasonlító vizsgálatát végezték el Cu(II)ionokkal. Megállapították, hogy az oldatban a *mono*komplexek, valamint *bisz*komplexek mellett egy Cu_2L_3 összetételű dimer molekula képződik, ami a biológiai pH-tartományban domináns. A három vegyület komplexképző sajátságainak összehasonlításából az is kiderült, hogy az N-terminális pozícióban dimetilezett származékok fémmegkötő képessége (a biológiai hatás növekedésével együtt) megnőtt a triapin-hoz képest (nemcsak réz(II), de Fe(II) és Zn(II) esetén is).

A *maximin 4* nevű, antimikrobiális tulajdonsággal rendelkező peptidről NMR-spektroszkópiai vizsgálatok kombinációjával megállapították, hogy míg vizes oldatban konformációja rendezetlen, SDS micellákban és foszfolipid kettősrétegekben alfa-hélix szerkezetet vesz fel. Szilárdfázisú NMR-mérések alkalmazásával mutatták ki, hogy a peptidlánc mélyen a hidrofób alkilláncok közé merül a membránban, és kitüntetett orientációval rendelkezik. Ez utóbbi felismerés jól definiált pórusok jelenlétére utal a lipid kettősrétegben, és megerősíti a korábbi

elképzelést, mely szerint a peptid antibakteriális hatását a sejtmembrán átjárhatóságának növelése révén fejti ki.

A 2008-2009-ben létrehozott Központi Fehérje Expressziós Laboratóriumban 2009 júniusára a technikai háttér lehetővé tette, hogy NMR-spektroszkópiai és más szerkezeti biológiai, illetve biokémiai/biofizikai vizsgálatok céljára bioszintetikus úton fehérjét állítsanak elő. Az NMR-laboratórium munkatársai 2009 II. félévében optimálták az expressziós körülményeket és a tisztítási eljárást az NMR-spektroszkópiai vizsgálatokhoz szükséges ^{13}C, ^{15}N izotópjelzéssel ellátott humán epesavkötő fehérje előállításához, és megkezdték a fehérje flexibilitása és funkciója közötti összefüggések feltárására irányuló spektroszkópiai vizsgálatokat.

Egyrétegű a foszfolipid vezikulákhoz adott különböző komponensek (PEG-molekulák és egy gyógyszermolekula) hatására a vezikulák szerkezeti és dinamikus tulajdonságában bekövetkező változásokat tanulmányozták 16-DSA spinszonda segítségével. Megállapították, hogy a PEG-molekulák hatása független a molekulatömegtől. Ez alátámasztja azt a korábbi feltevést, hogy a molekulának csak egy kis része csapdázódik a vezikulában, a többi része az oldatban marad. Megállapították továbbá, hogy a vizsgált gyógyszermolekula a vezikula hidrofób részében csapdázódik.

Az MTA KK Biomolekuláris Kémia Intézetével folytatott együttműködésben bifunkcionális organokatalizátorok dinamikájának vizsgálatát végezték el alacsony hőmérsékletű folyadék NMR-módszerekkel. Felismerték a katalizátorok asszociációs folyamatainak a monomer állapotok konformációs egyensúlyára gyakorolt hatását. A jelenség értelmezésével javaslatot tettek a bifunkcionális organokatalizátorok önaktivációs működésének mechanizmusára, amivel értelmezhető a katalizátorcsalád apoláris, aprotikus közegben történő sikeres alkalmazása.

Elméleti tanulmányok alapján megállapították, hogy a nagy térkitöltésű Lewis sav–bázis párok („frusztrált Lewis-párok”) reaktivitásának értelmezésére javasolt modell az amin–borán és az imin–borán párok hidrogénnel történő reakcióira is sikeresen alkalmazható. Felderítették a borán–katalizált iminhidrogénezés mechanizmusának részleteit, amiből kiderült, hogy a kísérleti megfigyelések alapján javasolt reakcióút mellett egy autoinduktív mechanizmus is fontos szerepet játszhat a katalízisben. Ez utóbbi mechanizmus szerint az amintermék is részt vesz a hidrogénaktiválási folyamatban. A magasabb hőmérsékleten végbemenő hidrogénhasítási reakciók értelmezéséhez bevezették az inherens és termikusan indukált frusztráció fogalmát.

Azonosították azokat a tényezőket, melyek alapvetően meghatározzák a Lewis-párok hidrogénhasítási reakcióinak termodinamikai feltételeit. Mindehhez egy olyan energiafelbontást javasoltak, melyben az egyes tagok jól jellemzik a Lewis-komponensek savi illetve báziserősségét, a hidrogénezett termék stabilizációs energiáját, esetenként a Lewis-párok között kialakuló datív kötés erősségét. Megállapították, hogy a teljes reakcióenergiát elsősorban a sav-bázis sajátságok határozzák meg, de a molekulaszerkezet változtatásával a többi tag is finomhangolható.

Kvantumkémiai számítások segítségével elősegítették a $[RhCl(H)_2(P^iPr_3]_2$ komplex szerkezetének azonosítását. A kapcsolódó kísérletek szerint a komplex hatékony katalizátorként alkalmazható olefinek hidrogénezésében. Felderítették a katalitikus ciklus mechanizmusát, miszerint a hidrogénezési folyamat sebesség-meghatározó lépésének a dihidrogén fémcentrumhoz történő addíciója tekinthető.

Car-Parrinello metadinamikai szimulációk segítségével megállapították, hogy a Wacker-reakció során az úgynevezett külső mechanizmus is összhangban van a reakció kinetikájával. A szimulációk továbbá azt is megmutatták, hogy a belső mechanizmus valószínűsége az etiléncsoport erős transz hatása miatt nagyon kicsi.

A bullvalén és barbaralén molekulákon végrehajtott Born-Oppenheimer molekuladinamikai szimulációk segítségével megmutatták, hogy az aromásság kialakulása átmeneti állapotban igen erős szervező erő. Szerkezeti, elektronszerkezet és szabadenergia számításokkal igazolták, hogy a ciklikus delokalizáció magas hőmérsékleten is képes a jelentős szerkezeti fluktuációk szinkronizálására az átmeneti állapotban.

Kvantumkémiai számításokkal meghatározták a CH_2BrI^+ és $CH_2I_2^+$ kationok elektronállapotai közti spin-pálya csatolást. Az ezek figyelembevételével végzett kvantumdinamikai szimulációk megmutatták, hogy a spin-pálya csatolásnak, továbbá a dinamikus Stark-eltolódásnak és a multi-foton csatolásnak köszönhetően a molekulákon nagy intenzitású lézerekkel végzett időfelbontásos mérések során több elektronállapot is koherensen gerjesztődik.

Kvantumkémiai számítások felhasználásával modell-potenciálokat fejlesztettek ki víz, metanol és etanol zeoliton történő adszorpciójának vizsgálatára, és molekuladinamikai modellezéssel sikeresen leírták az abszolút etilalkohol ipari előállításában használt szelektív adszorpció jelenségét.

Levezették és beprogramozták a molekulán belüli atomi spinek kvantumkémiai alapon való kiszámításához szükséges formulákat.

Analitikus levezetést adtak a Hückel-féle klasszikus "4n+2" képletre.

Energiapartíciós számításokkal is igazolták, hogy az etán forgási gátja elsősorban az átfedési taszításból származik.

A vizes oldatokban jelen lévő hidroxidionra új, molekuláris dinamikai potenciálokat dolgoztak ki. A kölcsönhatási potenciálok segítségével lehetővé válik felületi, illetve oldatban lévő hidroxidionok szerkezetének tanulmányozása is.

Cink monorétegeket és a felületen létrejövő szerkezeteket tanulmányozták Pd(111) felületen. A létrejövő katalizátor ígéretesnek bizonyult a metanol-reformálás során alkalmazott rézalapú katalizátorok kiváltására nagyobb aktivitásuk, szelektivitásuk és stabilitásuk miatt.

Szupramolekuláris kémia, önszerveződő rendszerek

2009. évben előállítottak és egykristály röntgendiffrakcióval szerkezetileg jellemeztek egy olyan kétfémes Au–CN–Sn szupramolekuláris rendszert, amely eltérő komplexképző sajátságú fémcentrumokat tartalmaz. Ez a szerkezeti érdekességek mellett szokatlan ioncsere-sajátságokat eredményezett. Bebizonyították, hogy a könnyen kivitelezhető ioncsere-reakció hatékony módja a kompakt, háromdimenziós szerkezetű kétfémes rendszerek egymásba alakításának. Az arany mellé beépített fémnek a milyenségétől függően új, változatos sajátságokat mutató, potenciálisan hasznos anyagok alakíthatók ki.

Önszerveződő rendszerek, szupramolekuláris rendszerek tanulmányozásának érdekében, klasszikus molekuláris dinamikai potenciálokat fejlesztettek. Meghatározták néhány aranykomplex szerkezetét. Geometriailag jellemezték a kialakuló szupramolekuláris formákat, valamint a komplexek teljes oldatszerkezetét.

2009-ben sikerrel folytatták a szilárd fázisú molekuláris asszociátumok diffrakciós szerkezetvizsgálatát és az ezekben kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzését. Több új típusú átmenetifém komplexének szerkezetét határozták meg.
Kristályosítási eljárásokat fejlesztettek rosszul oldható anyagok kristálynövesztésére.
Folytatták a reszolválás /molekuláris szelekció szerkezeti alapjainak földerítését.

Önszerveződő kukurbituril aggregátumokban vizsgálták a biológiai spin-jelzőként alkalmazott TEMPO szabad gyökök ESR-spektrumát. A kutatások célja: hosszú élettartamú és in-vivo körülmények között is alkalmazható spin-jelölés kidolgozása. Jelentős előrelépést eredményezett az a megfigyelés, hogy a nitroxid vendégmolekulák trimer szerkezetet hoznak létre a kukurbituril üregek belsejében. A felismerés biológiai rendszerek vizsgálatában hasznosítható.

Nagyműszeres vizsgálatok a gyógyszerkutatások támogatására

Szilárdfázisú NMR-módszerekkel meghatározták egy természetes alapú biopolimerből előállított film mechanikai tulajdonságait. Vizsgálták az adalékanyagok hatását befolyásoló másodlagos kölcsönhatásokat többkomponensű formulázott gyógyszerekben, valamint a hatóanyag morfológiáját, eloszlását a hordozó mátrixban. Új NMR-mérési módszert adaptáltak, amelynek segítségével hidrogélek és biológiailag hatékony kismolekulák közti hidrogénhidas kölcsönhatásokat derítettek fel.

Orvosi analitikai kémia

A biológiai funkcionális vegyületek nagyműszeres szerkezetvizsgálata és analitikája területén tanulmányozták zsírsavak és glikopeptidek szerepét a kórós elhízás mechanizmusában és gyógyításában. Továbbfejlesztették az előző évben általuk kidolgozott HPLC-MS-módszert, amely így képes az emberi szervezet számára fontos mintegy 15, nagyon eltérő polaritású zsírsav gyors elválasztására.

Megállapították, hogy a kórosan elhízott és a kontroll egyének zsírsaveloszlása szignifikánsan eltérő, és statisztikai módszerekkel azonosították a legnagyobb eltérést mutató zsírsavakat.

Számítógépes programot fejlesztettek ki, melyet glikopeptidek azonosítására használnak fel a glikopeptidek HPLC-MS/MS-spektrumainak alapján.

Módszert dolgoztak ki szintetikus és biopolimerek ütközésaktivált bomlási spektrumainak felvételéhez a kísérleti körülmények optimalizálására.

Funkcionális vegyületek

Dópolt és dópolatlan, egyfalú szén-nanocsöveket vizsgáltak. Káliummal dópolt esetben a mágneses Ni:Y katalizátorrészecskék széles ESR-jele mellett egy keskeny jel is megjelenik. Kimutatták, hogy a fellépő extra jel a vezetési elektronoktól származik.

2009-ben a kumarinszármazékok körében vizsgálták a cianid-szubsztitúció hatását a fluoreszcencia-kioltásra poláros prótikus oldószerekben; megállapították, hogy ilyen körülmények között az oldószerrel a cianidcsoporton keresztül képződő hidrogénhidas komplex hozzájárul a gerjesztett állapot kioltásához. Fotokrom vegyületek tulajdonságainak kutatása során új, fémkomplexek keletkezését kísérő színváltozást mutattak ki. Fluoreszcencia-spektroszkópiai módszert dolgoztak ki ionfolyadékok és makrociklusos

vegyületek közötti kölcsönhatás egyensúlyi állandójának meghatározására. Az 1-alkil-3-metilimidazólium-sókkal végzett szisztematikus vizsgálatok eredményeként megállapították, hogy az ionfolyadék–kukurbit[7]uril komplexek stabilitása maximum görbe szerint változik az 1-alkilcsoport szénatom-számának a függvényében, míg a 4-szulfonátokalixarénekhez való kötődés erőssége a makrociklus méretétől függő irányú, lineáris változást mutat. Igazolták, hogy egy benzofenantridin típusú alkaloid, a koralin erős kötődése a negatív töltésű poliszacharidokhoz elősegíti a dimerképződést, ami fluoreszcenciaélettartam mérésekkel különösen érzékenyen követhető. A fémkomplexek önszerveződési reakcióiban megmutatkozó sztérikus hatás mélyebb megismerése érdekében vizsgálták Pd-difoszfin komplexek kölcsönhatását olyan új ligandumokkal, melyekben terminális és láncközi koordinációs helyek is vannak. Megállapították, hogy a donor atomok eltérő sztérikus árnyékoltsága meghatározza a Pd-tektonok koordinációjának sorrendjét és helyét is. Azt találták, hogy a vizsgált rendszerekben a várt trimer és tetramer termékeken kívül, az irodalomban egyedülálló módon, pentamerek és hexamerek is kimutathatók.

Elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy a metán távoli UV-fény hatására végbemenő disszociációja elsősorban az első és második gerjesztett szingulett állapot részvételével játszódik le, a triplett állapot szerepe pedig valószínűleg elhanyagolható.

Kvantumkémai számítások segítségével meghatározták Hg(I) és porfirin különböző összetételű komplexeinek szerkezetét és értelmezték fotofizikai és fotokémiai tulajdonságaikat.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az intézet széles körű hazai tudományos együttműködéseket folytat a felsőoktatási intézményekkel, valamint akadémiai kutatóhelyekkel is. Az intézet kutatói intenzíven részt vesznek az egyetemi oktatásban.

A „Paramágneses fullerénvázas vegyületek és egyéb nano-struktúrák mágneses tulajdonságainak vizsgálata ESR- és ENDOR-spektroszkópiával” címmel kutatásokat folytattak a BME-vel. Egy közös folyóiratcikket publikáltak.

„Átmenetifém komplexek vizsgálata” területén a Szegedi Tudományegyetem kutatóival két publikációban foglalták össze eredményeiket.

A „Fémkomplexek szerkezetének NMR-spektroszkópiai vizsgálata oldat és szilárd fázisban” c. téma kutatásait a Pannon Egyetem, NMR Laboratórium, Veszprém kutatóival közösen végzik. A korszerű NMR-spektroszkópiai módszerek alkalmazása (multinukleáris NMR, Diffusion Ordered Spectroscopy, CP-MAS) az elmúlt években döntő szerepet játszott a közös projektek igen sikeres művelésében, amit a közös munka eredményeit összefoglaló 6 publikáció is fémjelez.

A „Peptidek és peptid konjugátumok szerkezet-funkció vizsgálata” c. témában (együttműködő partner: ELTE, Szerves Kémiai Tanszék, Peptidkémiai Kutatócsoport) NMR-spektroszkópiai módszerekkel meghatározták a kalpain fehérjét aktiváló két kalpasztatin-peptidszármazék konformációját vizes és metanolos oldatban [Ca^{2+}] jelenlétében, illetve távollétében. A

peptidláncok [Ca^{2+}] hatására észlelt letekeredése lehetséges magyarázattal szolgált a [Ca^{2+}]-koncentráció szabályozó szerepére a kalpain-kalpasztatin kölcsönhatásban.
Az elért eredményeket közös publikációban jelentették meg.

A „Mukoadhezív polimer filmek szerkezetvizsgálata" c. téma (együttműködő partner: Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszertechnológiai Intézet) kutatási eredményeit két folyóiratcikkben foglalták össze.

Az „Ojtással funkcionalizált természetes alapú polimerek NMR vizsgálata" c. kutatások (együttműködő partnerek: BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, MTA KK AKI Alkalmazott Polimer Fizika-Kémiai Osztály) 2009-ben egy közös publikációt eredményeztek.

A „Nanoméretű volfram-oxidok ^{1}H-MAS NMR szerkezetvizsgálata" c. téma (Együttműködő partner: MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport) kutatási eredményeiből egy közös publikáció született 2009-ben.

A Pannon Egyetemmel (Veszprém) az „Adszorpció modellezése zeolitokon" c. témában kvantumkémiai számítások felhasználásával modellpotenciálokat fejlesztettek ki víz, metanol és etanol zeoliton történő adszorpciójának vizsgálatára, és molekuladinamikai modellezéssel sikeresen leírták az abszolút etilalkohol ipari előállításában használt szelektív adszorpció jelenségét.

Az eredményekről közös publikációban számoltak be.

A „Tervezett fotofizikai tulajdonságokkal bíró ruténium-komplexek előállítása és jellemzése" c. téma (együttműködő partner: Pannon Egyetem, Veszprém) kutatásainak eredményeként, új egy- és kétmagvú ruténium-bipiridil komplexeket állítottak elő, megmérték fotofizikai tulajdonságaikat, és kvantumkémiai számításokkal értelmezték a megfigyeléseket. Az eredményeket közös folyóiratcikkben foglalták össze.

A Debreceni Egyetemmel közös kutatások során felderítették az Al(glifozát) komplex különböző formáinak szerkezetét. A munkáról cikket jelentettek meg.

Rendszeresen, továbbá eseti megbízások alapján spektroszkópiai anyagvizsgálati/minőségellenőrzési szolgáltatást végeztek az Izotóp Kft. részére.

A Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet részére ugyancsak mérési szolgáltatásokat végeztek.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézetnek igen eredményes nemzetközi kutatási kapcsolatai vannak mind európai, mind tengerentúli kutatóhelyekkel.

A „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata" c. témában igen eredményesen kooperáltak az Université de Provence, Marseille, Franciaország, továbbá az Ohio State University, USA; Medical College of Wisconsin, Milwaukee, USA; az Eindhoven University of Technology, Hollandia és a University of Rosario, Argentína kutatóival. Összesen hat közös publikációt jelentettek meg.

A „Spinszondák és spinjelölések alkalmazása" c. témában (együttműködő partner: Department of Physics, Indian Institute of Science Bangalore, India) MTA-Indiai TA kétoldalú egyezményes keretben spinszondák alkalmazását tanulmányozták polimer elektrolit, illetve szén-nanocső rendszerek vizsgálatára.

Az eredményekből közös publikáció jelent meg, és egy nemzetközi konferencián előadást tartottak.

A „Víz érzékelésére szolgáló fluoreszcens próbák biológiai rendszerek vizsgálata” c. TéT-egyezmény keretében (együttműködő partnerintézmény: University of Vienna, Ausztria) mérési eredmények összegyűjtését végezték el az együttműködés első évében, az adatok rendszerezése, kiegészítése után a publikáció ebben az évben várható.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Max-Planck-Institute for Bioinorganic Chemistry, Mülheim an der Ruhr, Németország) MTA-DFG együttműködés keretében feltárták, hogy a mikrokörnyezet sajátságai miként befolyásolják különféle farmakológiai fontosságú alkaloidok fluoreszcenciás sajátságait és fény hatására lejátszódó folyamatait. Kimutatták, hogy hidrogénhíd-akceptor anyagok alapvetően megváltoztatják a nitro-szubsztituált 4-hidroxi-sztilbének gerjesztett állapotból kiinduló energiavesztésének a sebességét.
Két közös publikációt jelentettek meg az eredményekről.

A „Lézerrel indukált szénplazmák emissziós spektroszkópiai analízise” c. témában (együttműködő partnerintézmény: Center for Laser Applications, The University of Tennessee Space Institute, Tullahoma, TN, USA) lézerrel indukált plazmák sajátságait tárták fel idő-felbontott emissziós spektroszkópiai vizsgálatokkal.
Az eredményeket közös publikációban foglalták össze.

A „Spontán emisszió korom részecskék lézer fénnyel történő besugárzásakor” c. téma keretében, a Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, Livermore, California, USA intézménnyel együttműködve, lézerfénnyel besugárzott koromrészecskék emissziós spektrumát értelmezték.
Az eredményekről egy folyóiratcikket publikáltak.

„A rezgési spektrumok tanulmányozása kísérleti és kvantumkémiai számításos módszerekkel” c. témát a Department of Physical Sciences, Helsinki University, Finnország kutatóival közösen folytatták. Különféle kémiai anyagok IR- és Raman-spektrumait elemezték. A spektrumokat részletesen értelmezték elméleti számítások segítségével.
Az eredményekről egy nemzetközi konferencián számoltak be.

A „Membránpeptidek hatásmechanizmusának vizsgálata szilárd fázisú NMR-spektroszkópiával” c. témában (együttműködő partner: University of Karlsruhe, Németország) a Budapesten és Karlsruhe-ban végzett szilárd fázisú NMR-vizsgálatok alapján kimutatták a maximin 4 nevű antimikrobiális peptid kitüntetett orientációját lipid kettősrétegekben. A pórusképződés mechanizmusának felállítása folyamatban van.

A „Biomolekulák tömegspektrométerben végbemenő elemi reakcióinak modellezése” c. témában (együttműködő partnerintézmény*:* B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukrajna), Ukrán-Magyar MTA-kétoldalú megállapodás keretében, a biológiai rendszerekben fontos szerepet betöltő molekulák gázfázisú ionkémiai tulajdonságait vizsgálták tömegspektrometriai és elméleti kémiai módszerekkel.

MTA-DFG-egyezmény keretében a „Halometánok: kvantumkémiai és kvantumdinamikai számítások a fotodisszociáció lézeres szabályzására” c. témában (együttműködő partner: Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena, Németország) kimutatták, hogy a CH_2BrI^+ molekulákon végzett időfelbontásos mérések eredményeinek értelmezésére

használt korábbi modell közelítései helyesek voltak, de a megfigyelt dinamikus rezonanciák pontos értelmezéséhez több gerjesztett elektronállapot- és a közöttük levő spin-pálya csatolás figyelembevétele is szükséges.
Az eredményekről egy közös cikk készült.

Az „Energiadekompozíciós és kötésrendszámítási módszerek” c. témában (együttműködő partner: Department of Chemistry and Institute of Computational Chemistry, University of Girona, Spanyolország) beprogramozták és alkalmazták az előző évben javasolt "effektív minimális bázist" a "fuzzy atomok" módszer keretében.
Két publikációt jelentettek meg.

A University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA intézménnyel való együttműködésben klasszikus- és kvantummechanikai reakciódinamikai számításokkal kvantitatíve meghatározták, hogy az égések kémiájában alapvető ($H + O_2$)-reakció sebességét milyen mértékben növeli az oxigénmolekula forgási gerjesztése.

A Department of Physics, Stony Brook University, New York, USA és az Institute of Physical Chemistry, Friedrich-Schiller-University Jena, Németország partnerintézményekkel közösen megmutatták, hogy a (CH_2I_2)-molekula intenzív lézerrel történő ionizációja során több elektronállapot koherensen gerjesztődik.

Az USA négy egyetemével folytatott kooperációban, az elméleti kémia kutatások területén összesen négy közös publikációt jelentettek meg 2009-ben.

MTA-CNRS-egyezmény keretében, a „Molekuláris folyadékok és oldatok szerkezetvizsgálata kombinált diffrakciós és szimulációs módszerrel” c. témában (együttműködő partner: Laboratoire Leon Brilouin, Saclay, Franciaország) tanulmányozták a formamidot és formamid-víz elegyeket. A tiszta formamidban a molekulák kiterjedt H-kötésű hálót alkotnak, a tiszta vízhez hasonlóan. $NaNO_3$ vizes oldatában a nitrátion körül kialakuló hidrátszféra szerkezetét tanulmányozták. Megfigyelték, hogy a vízmolekulák az N–O tengely irányában koordinálódnak az anionhoz.
Az együttműködés eredményeiből két közös cikket jelentettek meg.

OTKA-projekt keretében „Arany-makrociklusok, arany-arany és arany-fém klaszterek előállítása és szerkezeti jellemzése különböző módszerekkel: Röntgendiffrakció, NMR, STM” c. témában (együttműködő partner: Department of Chemistry, University of Utah, USA) megvizsgálták az $[Au_2(xantfosz)_2](NO_3)_2$ nitrometános oldatának szerkezetét. Az önszerveződő komplex felületén diffúz szolvátburok alakul ki; az anionok nem koordinálódnak a központi arany(I)ionokhoz, szemben a nitrometán-molekulákkal. A komplexek közötti térben a tiszta oldószerre jellemző szerkezetű nitrometán folyadék található.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

OTKA-kutatások keretében a „Bioligandumok fémkoordinációjának termodinamikai vizsgálata ESR-spektroszkópiával” c. témában hisztidinben gazdag glikoproteinek rézkomplexeinek vizsgálatát végezték el.

Ugyancsak OTKA-pályázati téma („Koordinációs viszonyok és konformációs egyensúlyok vizsgálata aliciklusos beta-aminosav származékok réz(II) komplexeinél kétdimenziós ESR-spektroszkópiai módszerrel") keretében végzett kutatások eredményeként 2009-ben a vizsgálatokat fluorozott szalicilsavak, tioszemikarbazon származékok és hisztidin vegyületek–réz(II) komplexeinek tanulmányozására is kiterjesztették.

A „Nagy pontosságú modellek az elméleti kémiában és spektroszkópiai alkalmazások" c. OTKA-témában közepes molekulatömegű molekulák (250 – 1000 Dalton) spektroszkópiai vizsgálatának értelmezését végezték el nagy pontosságú kvantumkémiai számítások segítségével.

A „Nem-kovalens kölcsönhatások szerepe biológiai fontosságú vegyületek fényelnyelés hatására végbemenő folyamataiban" c. OTKA-pályázat keretében ionfolyadékoknak, alkaloidoknak, egy biológiai kutatásokban széleskörűen használt festéknek és a riboflavin fő bomlástermékének, a lumikrómnak szupramolekuláris komplex képződését tanulmányozták. Feltárták, hogy a molekulaszerkezet változtatása miként befolyásolja a keletkezett komplexek stabilitását és fluoreszcenciás sajátságait.

„A sejtek közötti kommunikáció újonnan azonosított mikrovezikulum-útjának vizsgálata" c. OTKA-projektben a Semmelweis Egyetem kutatóival együtt minta-előkészítési módszert dolgoztak ki a fehérjék vezikulumokból történő kinyerésére. A vezikulumok fehérjeösszetételének meghatározására egy nanoUPLC-MS/MS technikát fejlesztettek ki.

NKFP-Jedlik Ányos Program keretében „Molekuláris célpontok és biomarkerek azonosítása kóros elhízás mechanizmusában és gyógyításában" c. projekt keretében mintaelőkészítési eljárást dolgoztak ki a szabad zsírsavak vérplazmából történő extrakciójára és hidrolízisére. Sikeresen vizsgálták kóros elhízásban szenvedő, ill. kontroll csoportok összesített, valamint egyéni mintáit. Az egyes csoportok és egyének zsírsavmintázatában szignifikáns különbségeket határoztak meg.

Az NKTH-NAP VENEUS-pályázat segítségével lehetővé vált a Philips X'Pert MPD diffraktométer műszaki fejlesztése. Többek között olyan kisszögű feltétet fejlesztettek ki a készülékhez, mellyel lehetőség nyílik a kisszögű tartományban történő mérésre is, azaz a nagyméretű (néhány száz Å) molekulák tanulmányozására is. Ezen felül új fűthető – hűthető mintatartókat is készítettek a mérési lehetőségek kiterjesztésére.

Az „Önszerveződő aranyvegyületek szintézise és szerkezeti jellemzése különböző módszerekkel: röntgendiffrakció, NMR" c. OTKA-témában a dicianoaurát(I) aniont eredményesen alkalmazták kétfémes (Au–CN–Sn)-kapcsolatot tartalmazó szupramolekuláris rendszerek előállítására. Megállapították, hogy a kompakt, háromdimenziós szerkezetű, kétfémes rendszerek ioncsere reakcióval könnyen átalakíthatók egymásba. A könnyen kivitelezhető reakció lehetővé teszi potenciálisan hasznos új anyagok széles körének előállítását.

Nemzetközi pályázat

Az FP6-Marie Curie Early Stage Researcher Training projekt során az Akzo Nobel cég kutatóival közösen módszert dolgoztak ki szintetikus és biopolimerek ütközésaktivált bomlási spektrumainak felvételéhez a kísérleti körülmények optimalizálására.

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

1. Bardelang D, Banaszak K, Karoui H, Rockenbauer A, Waite M, Udachin K, Ripmeester JA, Ratcliffe CI, Ouari O, Tordo P: Probing cucurbituril assemblies in water with TEMPO-like nitroxides: A trinitroxide supraradical with spin−spin interactions, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 131(15): 5402-5404 (2009)
2. Varga O, Kubinyi M, Vidóczy T, Baranyai P, Bitter I, Kállay M: Methylene blue-calixarenesulfonate supramolecular complexes and aggregates in aqueous solutions, JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY A-CHEMISTRY. 207 (2-3): 167-172 (2009)
3. Miskolczy Zs, Biczók L, Megyesi M, Jablonkai I: Inclusion complex formation of ionic liquids and other cationic organic compounds with cucurbit[7]uril studied by 4',6-diamidino-2-phenylindole fluorescent probe, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 113(6): 1645-1651 (2009)
4. Tőke O, Bánóczi Z, Tárkányi G, Friedrich P, Hudecz F: Folding transitions in calpain activator peptides studied by solution NMR spectroscopy, JOURNAL OF PEPTIDE SCIENCE. 15 (6): 404-410 (2009)
5. Baráth G, Kaizer J, Speier G, Párkányi L, Kuzmann E, Vértes A: One metal-two pathways to the carboxylate-enhanced, iron-containing quercetinase mimics, CHEMICAL COMMUNICATIONS. 24: 3630-3632 (2009)
6. Fábián B, Csámpai A, Nagy T Zs, Czugler M, Sohár P: Synthesis, ring transformations, IR-, NMR and DFT study of heterocycles with two ferrocenyl units, JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY. 694(23): 3732-3741 (2009)
7. Krenyácz J, Drahos L, Vékey K: Collision energy and cone voltage optimisation for glycopeptide analysis, EUROPEAN JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 15 (2): 361-365 (2009)
8. Rokob TA, Hamza A, Pápai I: Rationalizing the reactivity of frustrated Lewis pairs: Thermodynamics of H_2 activation and the role of acid-base properties, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 131(30): 10701-10710 (2009)
9. Deák A, Tunyogi T, Pálinkás G: Synthesis and structure of a cyanoaurate-based organotin polymer exhibiting unusual ion-exchange properties, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 131(8): 2815-2817 (2009)
10. Megyes T, Bálint Sz, Peter E, Grósz T, Bakó I, Krienke H, Bellissent-Funel MC: Solution structure of NaNO(3) in water: Diffraction and molecular dynamics simulation study, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 113(13): 4054-4064 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Átlaglétszám[1]:	56		Ebből kutató[2]:		46
PhD, kandidátus:	19	MTA doktora: 12	levelező tag:	rendes tag:	
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					15
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					86
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					81
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		74
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1		idegen nyelven:		3
összesített impakt faktor[6]:	206,699		összes hivatkozás száma[7]:		1856
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					1485
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 3		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 2,33	MTA doktora: 0,67	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	21	poszterek száma[12]:			27
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					13
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát (BSc):			5
Diplomamunkát (MSc):	4	PhD-t:			16
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					536
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				426,649	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	4	Teljes saját bevétel[18]:		90,20	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				22,44	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				26,26	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				18,75	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				11,05	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				11,71	MFt

KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest, XII. Konkoly-Thege út 15-17
Telefon: 391-9322, Fax: 275-4668
e-mail: abraham@konkoly.hu, honlap: www.konkoly.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A beszámolási időszakban az intézet az alapító okiratban rögzített feladatainak megfelelően alapkutatást végzett, valamint több egyetemen részt vett a felsőfokú oktatással kapcsolatos feladatok ellátásában. A fentiekkel összhangban az intézet az alábbi témakörökben folytatott eredményes kutatómunkát:

- *A csillagok és a Nap fizikája, belső szerkezete, fejlődése*
  - A csillagok belső szerkezete és pulzációja
  - Aktív jelenségek csillagok légkörében
  - Napaktivitás
- *A csillagok körüli tér, benne a Naprendszer, kutatása*
  - Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája
  - Exobolygórendszerek
  - A Naprendszer égitestjei
- *Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások, technológia*

  Gamma-kitörések

  Csillagászattörténet

  Hazai műszer- és megfigyelési infrastruktúrafejlesztés

Minthogy 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

A csillagok belső szerkezete és pulzációja

Az intézet kutatói feltérképezték a rövid periódusú, alapmódusú, galaktikus mező RR Lyrae csillagoknál a Blazhko-moduláció előfordulásának gyakoriságát. A tapasztalt 47%-os előfordulási arány magasabb minden korábbi becslésnél. Valószínűleg az általuk felfedezett kis amplitúdójú modulációk okozzák a gyakoriság növekedését. Néhány esetben instabil modulációt figyeltek meg. Ellenőrizték a fémtartalom (periódus, fázis) összefüggés érvényességét Blazhko-csillagokra. Azt tapasztalták, hogy a formula pontos eredményt ad kis modulációs amplitúdójú csillagokra, és abban az esetben is, ha a nagy amplitúdójú moduláció minden fázisát lefedik a megfigyelések.

Az MW Lyr-ről gyűjtött többszín-fotometriai méréseik feldolgozása során először sikerült kimutatni, hogyan változnak egy csillag átlagos fizikai paraméterei a Blazhko-moduláció során. 1-2%-os sugár-, hőmérséklet- és luminozitás-változást tapasztaltak. Ezek mértéke jó egyezésben van a modellszámítások eredményével. A megfigyelt fázismodulációt a pulzáció periódusváltozásának véve, szintén jó egyezést kaptak a megfigyelt sugárváltozás alapján várható periódusváltozás értékével. Eredményeik arra mutatnak, hogy a moduláció során a csillag végig radiális pulzációt végez, az erős amplitúdó- és fázisingadozást valószínűleg a luminozitás modulációs ciklus szerinti ingadozása okozza.

Gömbszimmetrikusan pulzáló csillag légkörére felírva a hidrodinamika alapegyenleteit, továbbá a Kurucz-féle csillaglégkör modellek fotometriai kalibrációját használva új módszert alkottak RR Lyrae csillagok fundamentális paramétereinek meghatározására. A meghatározható paraméterek: a légköri fémtartalom, az intersztelláris vörösödés a csillag irányában, a csillag tömege, távolsága, pozíciója az elméleti Hertzsprung—Russell-diagramon. Feltételeket adtak arra, hogy mely pulzációs fázisokban írják le jól a Kurucz-féle sztatikus légkörmodellek a dinamikusan változó csillaglégkört. A módszer spektroszkópiai észlelések nélkül, pusztán fotometriából adja a fundamentális paramétereket.

A CoRoT-űrtávcső az LRc01 területén mérte a V1127 Aql jelű RR Lyrae változócsillagot. A csillag jelentős Blazhko-effektust mutat. A fénygörbe Fourier-spektrumában megtalálható a Blazhko-moduláció frekvenciája, és annak két felharmonikusa is. Ez azt mutatja, hogy a moduláció nemlineáris. Sőt, azt is sikerült kimutatni, hogy a fázismoduláció erősebben nemlineáris, mint az amplitúdómoduláció. Az ilyen modulált csillagok spektrumában szokásos frekvenciatriplettek mellett a kutatók magasabb rendű multipletteket (egészen a 8. rendig) is találtak. Azonosítottak továbbá olyan frekvenciákat, amelyek nem illeszkednek a harmonikusok és multiplettek rendszerébe. Ezek a frekvenciák valószínűleg nemradiális módusokat jelentenek.

A Blazhko-effektusra egy szokásostól eltérő matematikai leírást fejlesztettek ki. A leírás természetes magyarázatot ad a Blazhko-effektus egy sor megfigyelt tulajdonságára: pl. az átlagfényesség változására, a fénygörbe burkolóinak nemlineáris voltára, a szinuszostól eltérő frekvenciaváltozásra. A Fourier-spektrum tartalmazhatja a triplettek mellett a magasabb rendű multipletteket is, sőt ezek amplitúdója nagyobb is lehet, mint az alacsonyabb rendűeké. Az egyes harmonikusokhoz tartozó mellékcsúcsok amplitúdója a paraméterektől függően lehet szimmetrikus és aszimmetrikus is. Mindezen előnyök mellett a leíráshoz szükséges paraméterek száma kb. egytizede a szokásosnak.

Két fontos korai eredményt kell említeni a Kepler-misszió során észlelt RR Lyrae csillagok egy részének analízisével kapcsolatban. A mintában megfigyelt, legalább 40%-os Blazhko-modulációs arány megerősíti a Konkoly Blazhko Survey által kapott magas gyakoriságot. Ezen kívül néhány csillagnál a fő pulzációs periódus és modulációs komponensein kívüli extra frekvenciák is kimutathatók voltak. Az alapmódus fél-egész számú többszöröseinél észlelt frekvenciákat először sikerült megfigyelni RR Lyrae csillagoknál. A jelenség a II. populációs cefeidáknál előforduló periódus-kettőződésre hasonlít.

Az intézet munkatársai megvizsgáltak egy közelmúltban javasolt új magyarázatot az RR Lyrae csillagokban megfigyelt Blazhko-effektusra. A Stothers-modell a konvektív réteg, illetve a csillag mágneses tere közötti periodikus kölcsönhatással magyarázza a megfigyelt modulációt. Az amplitúdó-egyenletek részletes vizsgálatával kimutatták, hogy a Stothers által javasolt mechanizmus a nagy amplitúdójú változásokat csak nagyon hosszú időskálán

hozhatná létre. A modell a tipikus Blazhko-periódusidők esetén nem képes a kellő változást létrehozni.

A mátrai Schmidt-távcsővel észlelték az M53 gömbhalmazt. A kapott fénygörbéken a TFA trendszűrési módszert alkalmazták felfedezve 12 új változót. Először mutatták meg empirikus adatok alapján, hogy az RRc csillagok, megfelelő perióduseltolás után, ugyanazt a periódus—fényesség—szín relációt követik, mint az RRab csillagok. Kimutatták, hogy a halmaz óriásainak a fémessége szisztematikusan alacsonyabb (kb. 0,5 dex-el) mint az RRab csillagoké, amelyet a V fénygörbe Fourier-dekompozícióján alapuló formulából vezettek le. Az eltérés valószínű oka a kalibrációs mintájában szereplő alacsony fémességű csillagok kis száma.

Megállapították a galaktikus klasszikus cefeidák fotometriai és a radiálissebesség-amplitúdójának a csillaglégkör nehézelem-gyakoriságától való függését. Az s-cefeidák fotoelektromos fénygörbéjének szórásából enyhén gerjesztett nemradiális módus jelenlétére következtettek. A cefeidák periódus-változásainak pontos nyomon követése érdekében meghatározták a fényességmaximum fáziskésésének hullámhosszfüggését.

A HD 50844 δ Scuti csillagra a CoRoT-űrtávcső mérései és a földi-bázisú előkészítő mérések alapján a következők adódtak: a CoRoT-idősor analíziséből több száz frekvencia a 0—30 1/d tartományban, a spektroszkópiai módusazonosításból pedig magas rendű módusok egészen l=14-ig. Bebizonyosodott, hogy a kioltási effektus nem elegendő ahhoz, hogy a módusok által létrehozott fluxusváltozásokat törölje.

Először mutattak ki egyértelmű Nap típusú oszcillációt az NGC 6819 nyílthalmaz vörös óriáscsillagaiban, ami egyike a Kepler-látómezőben található négy nyílthalmaznak. Azt találták, hogy az asztroszeizmológiai paraméterek lehetővé teszik a luminozitás meghatározását, és ezzel a halmaztagság eldöntését. Sikerült négy csillagot azonosítaniuk, melyek valószínűleg nem halmaztagok, annak ellenére, hogy radiálissebesség-adataik alapján korábban halmaztagoknak gondolták őket. A luminozitásban két nagyságrendet lefedő csillagok oszcillációs amplitúdóit meghatározva jó egyezést találtak azokkal az elméleti jóslatokkal, melyek szerint az amplitúdó a luminozitás 0,7-es hatványa szerint nő.

A γ Dor csillagok 1 nap körüli periódusú, magas rendű g-módusokban pulzálnak. A δ Sct csillagokban néhány órás periódusú, alacsony rendű g- és p-módusok gerjesztettek. A két fajta móduscsoport tulajdonságait a csillagbelső eltérő részei határozzák meg, s ezért egymást kiegészítő feltételeket szabnak a modelleknek. A γ Doradus és δ Scuti csillagok között eddig 4 ismert hibrid volt. A Kepler-űrtávcső első 43 napjának mérései alapján, több száz csillagon végzett vizsgálat azt mutatta, hogy az ilyen csillagok frekvenciaspektruma annyira gazdag, hogy lényegében minden csillag rezgései között találhatók mind a δ Sct, mind a γ Dor tartományba tartozó módusok.

Aktív jelenségek csillagokon

A kutatók az EY Dra-ról több, mint 1000 napra kiterjedő $BV(RI)_C$ fotometriát végeztek. A fénygörbe változásait a csillag felszínén levő foltok okozzák a rotáció miatt. A foltos felszín modellezése azt mutatja, hogy két nagy aktív terület található a csillagon, egy-egy a két féltekén. A felszíni alakzatok változása flip-flop jelenségre utal. Meghatározták a csillag rotációs periódusát, és egy, a Napéhoz hasonló aktivitási ciklust, mely 350 nap hosszú. Ez az egy év körüli hosszúságú ciklus a legrövidebb, amit valaha találtak aktív csillagon.

A V405 And gyorsan forgó aktív, fedési változót tanulmányozták fotometriai és optikai spektroszkópiai adatok felhasználásával. A mért fényességváltozást a foltosság és a kettősség kombinációja okozza. A megfigyelések alatt három fler történt, valamint egy érdekes eruptív jelenséget is találtak, amely legalább három rotáción (= keringésen) át tartó kitörések sorozatával magyarázható. Eredetük a csillag egyenlítőjén átívelő mágneses fluxuscsövek lehetnek, melyek a két féltekén levő aktív területeket kötik össze. A V405 And két komponense közül az egyik tömege lényegesen fölötte, míg a másiké alatta van a teljes konvekció elméleti határának. Ez a ritka tulajdonság a V405 And-t a csillagdinamók észlelésének és modellezésének ideális célpontjává teszi.

A ς Andromedae RS CVn-típusú kettős óriás komponenséről nagy felbontású VLT (ESO) spektrumokat gyűjtöttek, egyben optikai interferometriai és fotometriai méréseket is végeztek. Az újabb Doppler-képek sok hasonlóságot mutattak a tíz évvel korábbi képekkel. A spektrumok Hα vonalai alapján a kromoszférában protuberanciák és hideg anyagfelhők jelenléte mutatható ki. A 12 évet lefedő fotometriai adatok alapján foltciklusra lehet következtetni, amit a Doppler-képek is megerősítenek.

Napaktivitás

2,5-D MHD szimuláció segítségével kimutatták, hogy a mágneses átkötődés a fotoszférán áttörő, felemelkedő mágneses fluxus és a környező „nyitott" (koronalyuk-szerű) mágneses terei között egy idő után irányt vált, és oszcillációs jellegzetességet mutat. Ez a szimuláció magyarázatot szolgáltat számos korábban megfigyelt oszcillációs jelenségre a flerekben mind a Napon, mind más csillagokon.

A Hinode EIS és XRT megfigyelései és mágneses extrapolációk felhasználásával kimutatták, hogy az AR10942 aktív vidékben a plazmaáramlások a mágneses szerkezet speciális helyeiről indultak ki, ahol a mágneses kapcsolódás drasztikus változáson megy át. Ezeket a helyeket kvázi-szeparatrix rétegnek, vagy QSL-nek nevezik. A leggyorsabb plazmakiáramlásokat a legerősebb mágneses terű QSL-ekből figyelték meg. A QSL-ek mentén folytonosan végbemenő mágneses átkötődések szolgáltathatnak magyarázatot a plazmakiáramlások eredetére, amelyek a lassú napszél lehetséges forrásai.

Vizsgálták a Nap aktív hosszúságait a 22. és 23. ciklusban a debreceni napfoltkatalógus (DPD) alapján. Az eddigi eredmények szerint a 22. ciklusban az északi félgömbön egy jól azonosítható hosszúsági tartomány kiemelkedik, de a délin és a 23. ciklusban ez eddig nem azonosítható. A jelenlegi elhúzódó tevékenységi minimum után elkezdődni látszik a 24. napciklus, de a jelek szerint minden eddiginél alacsonyabb heliografikus szélességről indul. Ez a napfoltokra és a torziós hullámra egyaránt igaz. Úgy tűnik, hogy minden eddiginél gyengébb ciklus várható.

Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája

Befejeződött a Cepheus flare területén a fősorozat előtti csillagok fotometriai és spektroszkópiai vizsgálata. A 77 vizsgált csillagból 64 újonnan azonosított fősorozat előtti csillag. Az 1 m-es RCC távcsővel készült képeken 15 vizuális kettőst találtak, köztük 5 új kettős T Tauri csillag is van. IRAS, 2MASS, és Spitzer adatbázisok felhasználásával meghatározták a csillagok spektrális energiaeloszlását (SED). Az eredmények megerősítik, hogy a Cepheus flare területén különféle távolságú és fejlődéstörténetű felhők találhatók.

78 F színképtípusú csillagot tanulmányoztak a Spitzer infravörös űrtávcsővel, és eközben négy eddig ismeretlen meleg törmelékkorongot találtak. A két legfiatalabb korong esetén, amelyek nagyjából 30 millió évesek, a megfigyelhető porgyűrűk valószínűleg a nemrégen kialakult planetezimálok közötti ütközésekre vezethetők vissza. A HD 169666-nál, amely a legidősebb forrás (2,1 milliárd éves), a törmelékkorong túl sok port tartalmaz, hogy egyensúlyi állapotban lehessen. Valószínű, hogy ebben az esetben egy olyan esemény hatását figyelték meg, amely nagy mennyiségű por keletkezésével járt. Az ilyen kis méretű szemcsék a csillag sugárnyomása miatt igen gyorsan távoznak a rendszerből. Az a tény, hogy az alakzatok változatlan erősséggel látszottak a három év különbséggel felvett két spektrumban, arra utalnak, hogy a kisebb porszemcsék ,,termelése" legalábbis ezen az időskálán folyamatos.

A Spitzer-űrtávcső képeit felhasználva összehasonlították a törmelékkorongok megjelenési arányát bolygóval rendelkező és bolygó nélküli csillagoknál. A összes kiválasztott objektum szerepelt bolygókeresési programokban, 150 objektumnál találtak nagybolygókat a csillag közelében, 118 esetben azonban nem. A kutatócsoport eredményei szerint a törmelék-korongok megjelenési aránya csak marginálisan volt magasabb a bolygós csillagoknál, mint a bolygó nélkülieknél.

Az EX Lupi az EXorok prototípusa. Nyugalomban optikai és infravörös tulajdonságai alapján nehezen különíthető el a többi normális T Tauri csillagtól. Összeállították a forrás optikai—infravörös spektrális energiaeloszlását (SED), majd összehasonlították más fiatal csillagok SED-jével, és az adatokat egy radiatív transzfer kód segítségével modellezték. A SED-et egy enyhén flerező koronggal sikerült illeszteni. A modell alapján a korong belső sugara 0,2 CSE-nél található, amely jóval nagyobb a szublimációs határ által indokoltnál. Ez a belső lyuk a csillag körül az, ami megkülönbözteti az EX Lupit a többi fiatal csillagtól.

Befejeződött a V1647 Ori jelű fiatal eruptív csillag körüli anyag radiatív transzferjének modellezése. A fő eredmények: a csillag körüli por (korong és burok) szerkezete hasonló más beágyazott fiatal csillagok körül található por szerkezetéhez; a csillagra hulló anyag akkréciós rátája jelentősen változott a kitörés során (megnőtt); habár a korong szerkezete alapvetően nem változott a kitörés alatt, a burok belső sugara jelentősen megnőtt a kitörés kései időszakában. Az első eredmény alátámasztja azt a feltételezést, miszerint az eruptív fiatal csillagok nem különleges források, hanem minden Naphoz hasonló kis tömegű fiatal csillag élete során átél hasonló eseményeket.

Exobolygórendszerek

Az intézet kutatóinak közreműködésével felfedeztek 6 újabb fedési exobolygót, melyek közül csak két érdekesebbről lesz itt szó.

HAT-P-11b az ötödik legkisebb tömegű fedési exobolygó. Alacsony tömege miatt a szuper Neptunuszok családjába tartozik. Egy másik érdekes tulajdonsága a rendszernek, hogy a bolygó nagy valószínűséggel a csillag forgási irányával ellenkező irányban kering. Bár a csillag egy K törpe, a bolygó kis sugara miatt a fedéskor tapasztalható fénycsökkenés mindössze 0,4%. A kis bolygótömeg miatt a csillag imbolygása csupán 11 m/s-os sebességingadozáshoz vezet, amelynek kimutatása még a Keck-távcsővel is több mint 50 nagy pontosságú radiálissebesség-mérést tett szükségessé. A pálya, amelyen 4.9 naponként halad végig a bolygó, elég nagy excentricitású (e=0,2). Az excentricitás egyik lehetséges magyarázata, hogy a rendszer tartalmaz egy másik bolygót is.

HAT-P-13 az első olyan exobolygórendszer, amelyben az egyik komponens fedéseket mutat. A HAT-P-13 csillagkomponense egy G4 törpe, elég magas becsült fémtartalommal. A bolygó tömege a Jupiterének 85%-a. A külső bolygó periódusa sokkal hosszabb, mint a belső bolygóé (429 nap, szemben a 2,9 nappal). A radiális sebességek analíziséből a tömeg alsó határára 15 Jupiter-tömeg adódott. Érdekes, hogy mindkét bolygó pályája excentrikus és hogy a nagytengelyek jó közelítéssel egybeesnek. Ez az árapály erők által kialakított egyensúlyi állapotra utal.

A Naprendszer égitestjei

Az ekliptikai üstökösmagok és primitív égitestek színindexeit hasonlították össze, statisztikai tesztek segítségével keresve az ekliptikai üstökösök lehetséges őseit. Az eredmények szerint az ekliptikai üstökösök magjának színe széles tartományban oszlik el a kék, és nagyon vörös színek között. A színindexek és dinamikai szimulációs vizsgálatok szerint az ekliptikai üstökösök legvalószínűbb ősei a kentaurok (szórt korong objektum – kentaur átmenet alapján), a plutinók, és bizonyos típusú klasszikus Kuiper-övi objektumok lehetnek.

Elemezték a Spitzer-űrtávcsőnek a 8P/Tuttle (Halley típusú) üstökös magjáról és kómájáról készült megfigyeléseit. Ezek szerint az üstökös magjának legjobb modellje két egymással érintkező gömb („súlyzó” alak). Sikerült a mag forgási pólusának térbeli irányát is megbecsülni. A megfigyeléskori 1,6 CSE naptávolságában a becsült vízkibocsátási ráta $1{,}2\pm0{,}3\times10^{28}$ molekula volt másodpercenként, ami azt jelenti, hogy a mag felszínének mintegy 10%-a aktív, hasonlóan az ekliptikai üstökösök aktivitásához.

A Spitzer infravörös űrteleszkóppal megfigyelték a 107P/(4015) Wilson-Harrington földközeli kisbolygó-üstökös átmeneti objektumot, ami az ESA-JAXA közös, Marco Polo elnevezésű tervezett űrprogramjának valószínű célobjektuma. A Marco Polo program célja a helyszíni anyagminta-vétel, és a minta Földre való visszahozatala. A Spitzer megfigyelésekből az égitest átmérője 3,46±0,32 km, és alacsony albedójú, ami megfelel egy üstökösének vagy egy C-, P-, D típusú aszteroidáénak, és így a 107P az üstökösmagokhoz nagyon hasonló sötét kis égitest lehet.

Megvizsgálták a Naprendszer primitív kis égitestjeinek (üstökösmagok, kentaurok, transzneptun objektumok és fő-övbeli üstökösök) forgás miatti széteséssel szembeni stabilitását. Kiszámították a testek belső húzófeszültségét a porszemcse aggregátumok új szerkezeti és rugalmas-mechanikai modelljei alapján, és az ezeknek megfelelő stabil és szétesési zónákat elválasztó vonalak helyzetét. A megfigyelt üstökösmagok, kentaurok, TNO-k és MBC-k néhány kivételtől eltekintve stabilak.

Korábban az intézet kutatói egy észak-dél aszimmetriát találtak a Föld felső légkörének sűrűségében, amely szerint az északi félgömb felett átlagban melegebb a légkör. Az okokat keresve megvizsgálták a jelenség szezonális függését. Azt találták, hogy az észak-déli aszimmetria minden szezonban fennáll, ami előnyben részesíti a két félgömb közötti különböző kontinens-óceán fedettségi magyarázatot, mint az aszimmetria okát.

Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások, technológia

Gamma-kitörések. A Swift mesterséges hold méréseit felhasználva a gamma kitörések gamma tartományban mért spektrális keménysége és időtartama alapján is megmutatták, hogy a rövid és hosszú időtartamú csoportok között valószínűleg létezik egy köztes, harmadik csoport is. A klasszifikált kitörések egy részére léteznek vöröseltolódási adatok is. Ennek

alapján megállapították, hogy a közepes csoport tagjai követik a hosszú kitörésekre felállított, a spektrális csúcsintenzitás és a kisugárzott ekvivalens izotróp energia közötti ún. Amati-relációt a spektrálisan lágyabb és kisebb energiájú tartományban.

Csillagászattörténet. Folytatva a folytonos spektrumokkal kapcsolatos korábbi munkát, tanulmányozták annak az elméletnek a részleteit, amellyel Kövesligethy Radó a vonalas színképek létrejöttét magyarázta. Az általa a vonalas színképek létrejöttére kidogozott formalizmus speciális esetként a hidrogén Balmer-sorozatáról is számot ad.

A változócsillagokra az első osztályozást Johann Christoph Sturm készítette a 18. sz. elején. Megvizsgálták milyen forrásokat használt fel (Kirch, Hevelius, Brahe), milyen elméleteket hasznosított (Bullialdus, Riccioli). Tanulmányozták a körülményeket, amik lehetővé tették az osztályozás megalkotását. Ezek a χ Cygni fényváltozásának felfedezése (egy második periodikus csillag a Mira mellett), személyes hatások (Erhard Weigel), és az ortodox evangélikus teológia (a „folytonos teremtés” elmélete) voltak.

Hazai műszer- és megfigyelési infrastruktúra fejlesztés. Az intézetben a piszkéstetői 1 m-es RCC távcsőre kis felbontású spektrográfot építettek. A 2009-ben beszerzett ANDOR iXON 888 EMCCD kamerához csillagászati észlelőszoftvert fejlesztettek ki. Az észlelésekhez használt szűrőváltóhoz és a kamera temperálását végző egységhez vezérlőszoftvert terveztek és fejlesztettek ki. „Lucky imaging”-et valósítottak meg az intézet új EMCCD kamerájával, valamint új nagy sebességű hullámfrontszenzor architektúrát fejlesztenek FPGA segítségével a jobb adaptív optikai korrekció érdekében.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai: Együttműködtek a soproni GGKI-vel (felsőlégköri kutatások, planetológia); a Budapesti Műszaki Főiskolával (a fényszennyezés műszaki vonatkozásai); a Zselici Tájvédelmi Körzettel (fényszennyezés vizsgálata, Nemzetközi Csillagoségbolt-park); valamint az MTA SZTAKI Analogikai és Neurális számítások Laboratóriumával (új hullámfront-érzékelő fejlesztése).

A beszámolási időszakban is részt vettek az egyetemi oktatásban előadások, gyakorlatok tartásával, valamint szakdolgozati és doktori témavezetéssel. Kutatóik az alábbi előadásokat, illetve gyakorlatokat tartották:

ELTE-n előadás: Asztrofizika, Csillagok Világa, A csillagkeletkezés alapjai, Csillagászat a fizikatanár továbbképzőn, Csillagaktivitás - aktív csillagok I-II., Asztrofizikai megfigyelési módszerek, Asztrostatisztika I-II, Csillagrendszerek dinamikája I-II, Planetológia I-II, Mars-kutatás, A napfizika aktuális eredményei, Galaktikus csillagászat, Csillaglégkörök fizikája.
Gyakorlat: Mérési gyakorlat IV. éves fizikus hallgatók számára.

DTE-n előadás: Bevezetés a csillagászatba.

SZTE-n előadás: Űrcsillagászat, Galaktikus csillagászat.

BME-n: Mérnöktovábbképzés – fényszennyezéssel kapcsolatos egyedi előadások.

Nemzetközi: Együttműködés az International Astronomical Union-nal (IBVS szerkesztés, IAU Comm. 27., Comm. 42 és Div. V. webszolgáltatások karbantartása. Részvétel nemzetközi szakbizottságokban (ASTRONET, SCOSTEP, SEAC). Együttműködés az

amerikai Spitzer infravörös űrtávcsőre és az európai VLT teleszkópra benyújtandó pályázatok közös kidolgozásában (MPIA Heidelberg, STSI Baltimore). Részvétel az ESA Herschel-űrtávcső operációs feladatainak ellátásában, és a PACS fotométer és spektrométer kalibrálásában (a Max-Planck Institut koordinációjában). Részvétel a COROT mesterséges hold munkálataiban és az Additional Program-ban (ESA/PECS által támogatott projekt). Tagság a GAIA asztrometriai űrmisszió változócsillag-munkacsoportjában; folyamatos részvétel a Nemzetközi Asztronautikai Akadémia munkájában. Részvétel és két munkacsoport vezetése a Kepler-űrtávcső Kepler Astroseismic Science Consortium-ában. Szoros együttműködés a Harvard Smithonian Center for Astrophysics intézettel (HATNet adatanalízis). Közös projekt a Wise Observatory-val, Izrael (Wise Hungarian-made Automated Telescope).

A DPD katalógushoz nemzetközi együttműködések keretében kapnak észleléseket a világ 12 napfizikai obszervatóriumából. Projektvezetés a ”Production and cross-calibration of space-borne sunspot data” ESA-PECS projektben (együttműködés a stanfordi SOHO/MDI kutatócsoporttal a közös katalógus készítése céljából). Munkakapcsolat az AIP Potsdammal. Francia-magyar együttműködés a Naprendszer kutatására az MTA-CNRS egyezmény keretében. Japán-magyar együttműködés a csillagközi anyag kutatására (Nagoya Egyetem). Munkacsoport vezetése az EU FP7 SOTERIA (Solar Terrestrial Investigations and Archives), projektben. Együttműködés a Bolgár Akadémiával, a Virtual Observatory fejlesztésével kapcsolatban. A 24“-es távcsőhöz kiegészítő méréseket kapnak (Michigan State University, Toronto University, CALTECH, AAVSO, ESO). Munkakapcsolat a Penn State University-vel gamma kitörések vizsgálatára. Részvétel a Herschel ESA űrtávcső „TNOs are cool: A Survey of the Transneptunian Region” című Open Time Key Program-ja köré szerveződött konzorciumban. Rendszeres megfigyelések a Teide Obszervatóriumban az EU FP7 Opticon programja támogatásával. Részvétel a Csillagászat Éve 2009 magyarországi szervezőbizottságában (magyar koordinátor, sajtófelelős). Szoros együttműködés és megfigyelések a Whole Earth Telescope (WET) network számára. Együttműködés a Delaware Asteroseismic Research Center-rel. Együttműködés a Saclay asztrofizikai intézettel EU FP7 pályázat kriogenikus elektronikai alkatrészek közös kifejlesztésére ESA mesterséges holdak számára. Együttműködés a CALTECH-el (közös NSF pályázat). Együttműködés a NASA UMD-vel kisbolygó és üstökös asztrometria és fotometria területén.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az ESA-val történt szerződés alapján 2009-ben négy PECS pályázat futott az intézetben. Ezek közül három (CoRoT, Herschel, Gaia) űreszközök előkészítésében, illetve programjának a lebonyolításában teszi lehetővé részvételüket. A negyedik pályázat keretében ESA űradatok alapján napfoltadatok kinyerése történik. Valamennyi pályázat fontos kapcsolódást jelent élvonalbeli európai projektekhez.

Az EU FP7 keretében kezdődött 2008. végén a SOTEIRA program, amelyben az egyik munkacsoportot a debreceni obszervatórium vezetője irányítja. A program a Nap-Föld kapcsolatok vizsgálatát tűzte ki. A SOTEIRA-ban való részvétel komoly lehetőség arra, hogy a Napfizikai Obszervatóriumban folyó munka az eddigieknél is jobban betagozódjon az európai napfizikai kutatásokba.

Az Akadémia Lendület programjának keretében új kutatócsoport létrehozására kaptak lehetőséget, amely az exobolygó-kutatást fogja erősíteni. A program része a piszkéstetői obszervatórium műszerparkjának jelentős korszerűsítése.

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

1. Ábrahám P, Juhász A, Dullemond CP, Kóspál Á, van Boekel R, Bouwman J, Henning Th, Moór A, Mosoni L, Sicilia-Aguilar A, Sipos N: "Episodic formation of cometary material in the outburst of a young Sun-like star", *Nature*, 459**,** 224 (2009)
2. Jurcsik J, Sódor Á, Szeidl B, Hurta Zs, Váradi M, Posztobányi K, Vida K, Hajdu G, Kővári Zs, Nagy I, Molnár L, Belucz B: "The Konkoly Blazhko Survey: is light-curve modulation a common property of RRab stars?", *Monthly Notices R.A.S.*, 400**,** 1006 (2009)
3. Bognár Zs, Paparó M, Bradley PA, Bischoff-Kim A: „Characterizing the pulsations of the ZZ Ceti star KUV 02464+3239", *Monthly Notices R.A.S.*, 399, 1954 (2009)
4. van Driel-Gesztelyi L, Culhane JL: "Magnetic Flux Emergence, Activity, Eruptions and Magnetic Clouds: Following Magnetic Field from the Sun to the Heliosphere", *Space Sci. Rev*. 144, 351 (2009)
5. Kolláth Z, Oláh K:"Multiple and changing cycles of active stars. I. Methods of analysis and application to the solar cycles", *Astron. & Astrophys.*, 501, 695 (2009)
6. Kun M, Balog Z, Kenyon SJ, Mamajek EE, Gutermuth, R. A.: "Pre-Main-Sequence Stars in the Cepheus Flare Region", *Astrophysical Journal Suppl. Ser.*, 185, 451 (2009)
7. Lamy P, Tóth I: "The colors of cometary nuclei - Comparison with other primitive bodies of the solar system and implications for their origin", *Icarus*, 201**,** 674 (2009)
8. Bakos GÁ, Pál A, Torres G, Sipőcz B, Latham DW, Noyes RW, Kovács G, et al.: "HAT-P-10b: A light and moderately hot Jupiter transiting a K dwarf", *Astrophysical Journal*, 696, 1950 (2009)
9. Csizmadia Sz, Borkovits T, Paragi Zs, Ábrahám P, Szabados L, Mosoni L, et. al..: "Interferometric Observations of the Hierarchical Triple System Algol", *Astrophysical Journal*, 705, 436 (2009)
10. Marquette JB, Beaulieu JP, Buchler JR, Szabó R, et al.: "The beat Cepheids in the Magellanic Clouds: an analysis from the EROS-2 database", *Astron. & Astrophys.*, 495, 249 (2009)
11. Bagoly Zs, Borgonovo L, Mészáros A, Balázs LG, Horváth I: "Factor analysis of the long gamma-ray bursts", *Astron. & Astrophys.*, 493, 51 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	65		Ebből kutató[2]:		37
PhD, kandidátus:	11	MTA doktora: 11	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					14
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					208
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					148
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		56
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	2		idegen nyelven:		90
összesített impakt faktor[6]:	280,969		összes hivatkozás száma[7]:		1193
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					1193
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 1		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 1		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	30	poszterek száma[12]:			21
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	18	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					13
TDK munkát készítő hallgatók száma:	6	Diplomamunkát (BSc):			2
Diplomamunkát (MSc):	10	PhD-t:			15
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					946
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				284,69	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	3	Teljes saját bevétel[18]:		112,88	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				17,83	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				11,678	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				19,74	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				54,46	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				9,17	MFt

KFKI ATOMENERGIA KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33., 1525 Budapest, Pf. 49.
Telefon: 395-9159, Telefax: 395-9293
e-mail: gado@aeki.kfki.hu, honlap: www.kfki.hu/~aekihp/

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az intézet fő kutatási feladatai nyolc tudományterületre terjednek ki, az alábbiakban e területekre csoportosítva mutatják be az eredményeket.

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

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

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

Reaktorfizikai kutatások (5 kutató, 427,4 MFt ráfordítás, 32,3 MFt pályázat)

A jövőben elképzelhető új reaktortípusok kialakítása a transzurán elemek kiégetése és az új hasadóanyag szaporításának tekintetében még nem kiforrott. Az optimális és egyben biztonságos megoldások a fűtőelem-típusokat, a hűtőközeget, a teljesítményt, a méreteket, a kiégetendő és a szaporítandó anyagok elhelyezését illetően továbbra is nyitottak. Az NKTH által támogatott NUKENERG projekt keretében megkezdték azoknak a módszereknek, eszközöknek a kidolgozását, melyek révén az egyes gyors-spektrumú Generation IV reaktor-típus változatok összehasonlító elemzése megtörténhet, elősegítve ezzel a stratégiai döntések szakmai megalapozását. Ennek során elkészült a KIKO3D nodális program sok-csoport változatának, valamint az ehhez visszacsatolást biztosító termohidraulikai modellnek a rendszerterve. A nodális sok-csoport program első változatával megtörténtek az első próbaszámítások.

A szuperkritikus vízzel hűtött negyedik generációs reaktorokkal (Supercritical Water-Cooled Reactor, SCWR) kapcsolatos kutatásokat a Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatal által finanszírozott NUKENERG projekt és a nemzetközi HPLWR Phase 2 projekt keretében végezték. Céljuk a zónatervezési részfeladatban a szuperkritikus nyomású vízhűtéses reaktor európai változatának, a HPLWR reaktornak (High Performance Light Water Reactor) olyan stacionárius kapcsolt reaktorfizikai-termohidraulikai programrendszerének létrehozása, amely alkalmas a legújabb zónakoncepció számítására. Elvégezték a reaktivitás üzemzavarok biztonsági elemzéseit az új zónára. A HPLWR Phase2 projektben elért eredményeket folyamatosan adaptálják a NUKENERG projektben elvégzett munkájuk során.

A kiégett üzemanyag hosszú távú tárolásával kapcsolatban egy OECD NEA által kezdeményezett vizsgálat keretében kiszámították a tároló szubkritikusságát az idő függvényében. A vizsgálatok során arra következtetésre jutottak, hogy bár a sokszorozási tényező a kezdeti csökkenés után a magfizikai átalakulások után néhány száz év után újra nőni fog, az ezután fellépő maximum nem éri el a kezdeti értéket.

Az atomerőművek élettartamának meghatározó eleme a tartály sugárterhelés által okozott elridegedése. A paksi neutron-dozimetriai méréseket felhasználva a tartály fluens-számításának hatáskeresztmetszet pontatlanságokból származó bizonytalanságát megfelelő matematikai statisztikai eljárások alkalmazásával csökkentették. Az eredmény az erőmű napirenden lévő élettartam hosszabbításának tervezése során hasznosítható.

Az atomerőmű csőtöréssel járó üzemzavarai esetén jelentős mennyiségű radionuklid jut a hermetikus térbe, aminek egy része a hermetikus tér szivárgása révén az erőmű helyiségeibe és végül a szabadba kerülhet. Folytatódott a korábban elkezdett komplex modell fejlesztése a hermetikus térben végbemenő termohidraulikai és aktivitásterjedési folyamatok leírására, elkészültek az első számítási eredmények, valamint a program dokumentációja.

A jelenlegi és a közeljövőben létrehozandó reaktorok más energia-termelési módokkal versenyképes és biztonságos üzemeltetésének feltétele a normál üzemi és üzemzavari limitiek és biztonsági sávok megalapozott, de nem túlzottan konzervatív kijelölése. Az AEKI részt vesz az OECD NEA jelenleg folyó hasonló célú együttműködéseiben, például a kritikussági biztonsági elemzések területén a „burnup credit” témával foglalkozó WPNCS OECD NEA munkacsoport tevékenységében. A bizonytalanságok, vagy éppen a túlzott konzervativizmusok egyik forrása az a jelenlegi helyzet, hogy a különböző diszciplínák (reaktorfizika, termo-hidraulika, termo-mechanika) az egyes modellekben nem állnak megfelelő kölcsönös kapcsolatban egymással. Ezt a kérdést az un. „multi-phsysics” modellezés segítségével vizsgálták.

Termohidraulikai kutatások (1 kutató, 193,2 MFt ráfordítás, 0 MFt pályázat)

A 2009. évre kitűzött céloknak megfelelően az év legfontosabb kísérleti kutatási feladata a súlyos baleset következményeinek csökkentésére kialakított koncepció alapján tervezett kísérleti berendezés létrehozása volt. A kísérletek legfontosabb célja annak igazolása, hogy a tartályfal melletti kritikus szűkületek nem teszik lehetetlenné a hatékony hűtést. Az év végére megépült CERES (**C**ooling **E**ffectiveness on **R**eactor **E**xternal **S**urface) kísérleti berendezés a reaktortartály elliptikus fenekének (a hűtött felületnek) 1:40-ed részét modellezi. Axiális méretében az arány 1:1, ami a természetes cirkuláció kialakulása szempontjából fontos. A kísérletek, nemzetközi érdeklődés mellett, a következő évben folytatódnak.

A NURISP projekt keretein belül buborékok mozgását vizsgálják, a fűtőelemköteg plexiből készített makettjében Particle Image Velocimetry (PIV) technikával. A kísérletekkel párhuzamosan folyik a jelenségek numerikus modellezése.

A NUKENERG projekten belül üvegmakett készül, melyben a kritikus hőfluxus kialakulása gyors videokamera segítségével megfigyelhető.

Termodinamikai számításokat végeztek szuperkritikus víz-nemesgáz rendszerekre. Kiterjesztették a Hagen-Poiseuille egyenletet hidrofób folyadékokra. Általánosították a Johnson-Nyquist zaj elméletet az egyensúlyi fluktuációk alapján.

Folytatódtak a Dinamikus Neutron Radiográfiai (DNR) vizsgálatok a szuperkritikus nyomású víz megfigyelésére. A hűtőközeg-vesztéses balesetek szimulációjában regisztrálták a nyomáshullámok időbeli változását.

Folytatódnak a paksi új típusú gadoliniumos fűtőelemekre vonatkozó CFD számítások, melyek eredményeit összevetik a paksi blokkok első mérések eredményeivel.

A Paksi Atomerőmű üzemvitelében előírt üzemeltetési korlátok közül az egyik legfontosabb a primer kör előírt lehűtési/felfűtési sebességének a betartása. Ezen értékek megalapozása és pontos értelmezése a 2009. év kiemelt számítógépes modellezési feladata volt. A RELAP kódra alapozva létrehoztak egy olyan termohidraulikai modellt, amelyik alkalmas arra, hogy a tényleges felfűtés/lehűtés folyamatát kövesse úgy, ahogy az automatika, illetve az operátor irányítja a beavatkozásokat. Ilyen modell létrehozásához először meghatározták azon rendszerek és rendszerelemek körét, amelyek a modellezendő folyamatokban szerepet játszanak, majd az irányítástechnikai modellt átalakították, hogy kövesse a tényleges beavatkozásokat. Ezzel létrejött a Paksi Atomerőmű „technológiakövető" RELAP modellje.

A Paksi Atomerőmű Végleges Biztonsági Jelentésének (VBJ) aktualizálásához további vízütéses vizsgálatok elvégzésére került sor. Minthogy az erőmű primerkörre csatlakozó vezetékei potenciálisan ki vannak téve nagyenergiájú vízütésnek, a kérdéskör vizsgálata megtörtént. A vízütés veszélye azáltal állhat elő, hogy egy primerköri hűtőközeg-vesztéses üzemzavar következtében az érintett vezeték gőzzel telik fel, majd a ZÜHR betáplálás megindulásakor a gőz a befecskendezett hideg víz hatására hirtelen lekondenzálódik. A vizsgálat feltételezte a visszacsapó szelep áteresztését is ebben az állapotban, így „érintett vezetéknek" tekintette a ZÜHR vezetékeknek a primerkör és az első elzáró szerelvény közötti szakaszát. A USNRC számára kidolgozott metodikát követve meghatározták a kondenzációs vízütés által potenciálisan veszélyeztetett csővezetékeket, majd az üzemzavar-elemzések eredményeit megvizsgálva megállapították, hogy a fenti vezetékekben az üzemzavarok során előállhatnak-e és milyen esetben olyan paraméterek, amelyek elvileg lehetővé teszik a vízütés kialakulását. Az így meghatározott esetekre a WAHA kóddal végeztek számításokat annak ellenőrzésére, hogy a kondenzációs vízütés jelensége valóban fellép-e. Ennek eredményeképpen megállapítást nyert, hogy a rendszer vezetékei közül két vezeték veszélyeztetett.

Befejeződött a teljes keresztmetszetű hidegági töréses üzemzavar elemzése a paksi atomerőműre a legjobb becslés módszerével, bizonytalanság-elemzéssel kiegészítve. Ez a munka egyben a VBJ-ben szereplő termohidraulikai üzemzavarok vonatkozásában a módszer első alkalmazása. A BEMUSE projektben a nagytöréses folyamatra végzett hasonló vizsgálatok tapasztalatai alapján 35 paraméter került be a bizonytalanság-elemzésbe. A 35 paraméter bizonytalansági intervallumának ill. valószínűségi eloszlásának meghatározása után a véletlenszerűen változtatott bemenő paraméterhalmazzal 130 különböző számítás végrehajtása történt meg. A legjobb becslés módszerének hatékonyságát mutatja, hogy a maximális burkolat-hőmérsékletek a teljes időtartományban alatta maradtak a hagyományos módszerrel számoltnak, s a maximális érték mintegy 80 ^{o}C-kal alacsonyabbra adódott.

Az OECD PKL-2 projektben Magyarország nem csupán tagországként, hanem PMK kísérletek végzésével is résztvesz. 2009-ben került sor az első kísérlet-sorozat végrehajtására, amely három kísérletből állt. A kísérletek a természetes cirkuláció zavarainak különböző eseteit vizsgálták az átrakásra előkészített reaktoron, primerköri folyás feltételezésével. Az eredmények azt mutatták, hogy az operátori beavatkozás akkor a legeredményesebb az üzemzavar elhárítására, ha a reaktortartály feltöltése előtt az összes primerköri légtelenítőt bezárják, ui. így a természetes cirkulációval történő hőátadás a szekunder oldal felé helyreáll, és ez a zóna hatékony hűtését biztosítja.

Fűtőelem és reaktoranyag kutatások (3 kutató, 169,6 MFt ráfordítás, 8,2 MFt pályázat)

Az AEKI-ben kifejlesztett FUROM fűtőelemviselkedési kód átfogó validációjához létrehoztak egy olyan adatbázist, amely tartalmazza a legtöbb elérhető külföldi VVER fűtőelemes kísérlet mért adatait. Az adatbázis felhasználásával számítássorozatokat végeztek és meghatározták a FUROM kódban lévő legfontosabb folyamatokat leíró öt modell bizonytalanságát. Előállították a modellek és a mérések technológiai input paramétereire vonatkozó érzékenységi mátrixokat, majd e mátrixok ismeretében egy legkisebb négyzetes illesztési eljárással meghatározták a modellparaméterek illesztett szorzófaktorait és azok hibáit. A számítások eredményeként meghatározták a FUROM kód mérnöki tartalékfaktorait.

A haldeni IFA-650.6 LOCA tesztre a FRAPTRAN fűtőelem kóddal végeztek számításokat. A szimuláció eredményeit mérésekkel összehasonlítva megállapították, hogy az AEKI-ben új anyagfüggvényekkel kiegészített kód pontosan számolja a VVER fűtőelem pálca képlékeny deformációját és felhasadását. A burkolat-felhasadás időpontját a FRAPTRAN korábban jelzi a tesztben tapasztalt meghibásodási időpontnál, az eltérés azonban, az elvégzett érzékenység vizsgálatok alapján, összevethető a hőmérséklet peremfeltétel bizonytalanságából adódó eltéréssel.

Cikrónium burkolat magas hőmérsékletű oxidációjával feltérképezték azokat a körülményeket, amelyek burkolaton képződő oxidréteg felhasadásához vezethetnek.

Rámutattak, hogy a Pakson használatos E110 típusú burkolaton a felhasadás nem jár együtt közvetlenül a burkolat elridegedésével, mivel – az oxidációs hőmérséklet függvényében – az oxidréteg felhasadás a rideg-képlékeny átmenet előtt vagy után is elkezdődhet.

Az intézet szakemberei numerikus modelleket dolgoztak ki a Paksi Atomerőmű 4. blokkján azonosított szivárgó fűtőelem viselkedésének szimulációjára. A szivárgó fűtőelem azonosítását a reaktor leállítása után ún. sipping eljárással hajtották végre. A mérések végrehajtásakor jó egyezés volt tapasztalható a numerikus modell előrejelzései és a mért adatok között. A szivárgó kazetta további vizsgálatára az intézet szakemberei javaslatot dolgoztak ki.

A kiégett üzemanyag kezelésével és lehetséges újrahasznosításával kapcsolatban elemzéseket végeztek a jelenleg üzemelő paksi blokkokra, az erőmű bővítésében szereplő reaktorokra, valamint a negyedik generációs reaktorokra. Körvonalazták egy üzemanyagciklust szimuláló program terjedelmét, a modellezendő reaktorok és újrafeldolgozási technológiák körét.

Operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése (2 kutató, 181,7 MFt ráfordítás, 11 MFt pályázat)

A Paksi Atomerőműben működő VERONA zónaellenőrző rendszer rekonstrukciójának második fázisában folytatódott a gadolinium kiégő mérget tartalmazó kazetták kezelésére is képes számítási apparátus fejlesztése. Az év első felében az új reaktorfizikai számításokat végző modulok tesztelése (validációs és verifikációs vizsgálata) történt meg a VERONA-e nevű szakértői rendszeren, majd az integrált zónaellenőrző rendszer gyártóművi tesztjeit végezték el valós blokki adatokkal a VERONA-t konfiguráción (ez a rendszer kifejezetten a tesztelést és az üzemeltetést támogatja). Az új rendszer átfogó tesztelése után a V6.20 verzió első blokki üzembe helyezésre 2009 őszén, a 3. blokk főjavítása alatt került sor.

A 3. blokk a visszaindulása után néhány héttel (2009. november 13-án) már emelt teljesítményen, a névleges teljesítmény 108%-án üzemelt, ezzel a Paksi Atomerőmű összes blokkja elérte a tervezett 500 MW villamos teljesítményt. Az átalakított VERONA rendszer hatékonyan támogatta a teljesítménynövelés biztonságos megvalósítását, így a saját eszközeivel sikeresen hozzájárult ahhoz, hogy a hazai atomerőmű összteljesítménye elérje a 2000 MW értéket**.**

2009-ben a kiégőmérget tartalmazó új üzemanyag bevezetése is megkezdődött, első lépésben 12 db teszt kazettát raktak be a 4. blokk zónájába, hogy az új üzemanyag viselkedését egy teljes kampány alatt vizsgálják. Miután a 4. blokkon 2009-ben még nem a V6.20 verziójú zónaellenőrző rendszer működött, azt a megoldást választották, hogy a teszt kazetták adatait a VERONA-t konfiguráción működtetett V6.20 rendszer is folyamatosan figyelte. Így az erőmű szakemberei folyamatos információt kaptak arról, hogy mit mutatna az a VERONA rendszer, amely a gadolinium kiégőmérget tartalmazó kazettákat is pontosan képes elemezni.

A blokki munkákkal párhuzamosan üzembe helyezték a V6.20 verziót az erőmű teljesléptékű szimulátora mellett is, hogy 2010-ben a személyzet képzése már az új rendszerrel történjen.

Az Országos Atomenergia Hivatal Nukleáris Biztonsági Igazgatósága (OAH NBI) által működtetett Vészhelyzeti Intézkedési, Gyakorló és Elemző Központot (CERTA) paksi mérési adatokkal az AEKI által kifejlesztett CERTA VITA információs rendszer látja el. A VITA rendszer teljes rekonstrukciója 2008-ban történt meg, majd az átadás-átvételi tesztek sikeres végrehajtása után az új rendszer hónapokon át párhuzamosan működött a régi CERTA VITA rendszerrel. A párhuzamos üzem 2009 tavaszán sikeresen befejeződött és az új rendszert üzemi rendszerré nyilvánították.

A Paksi Atomerőmű blokkjain működő reaktor zajdiagnosztikai adatgyűjtő és jelfeldolgozó rendszerek átfogó rekonstrukciója 2008-ban befejeződött, 2009-re már csak az utómunkálatok maradtak. Az új PAZAR adatgyűjtővel rendszeresen mért diagnosztikai jeleket egyrészt a blokkok állapotának monitorozására, másrészt új modellek tesztelésére használták fel. Az új modellek fejlesztése a moderátor hőmérséklet szerinti reaktivitás együtthatójának meghatározására koncentrált. Sikerült egy olyan – a reaktor állapotát nem befolyásoló és kizárólag a diagnosztikai méréseket felhasználó – eljárást kifejleszteni, amely megbízhatóan és kellő pontossággal adja meg az együttható értékét. Az előzetes tesztek biztató eredményeket adtak.

Atomerőművi szimulációs kutatások (4 kutató, 157,1 MFt ráfordítás, 1,4 MFt pályázat)

Befejeződött a Paksi Atomerőmű Teljesléptékű Szimulátorának átalakítása. A feladat a teljesítmény növelés második lépéséhez, a gadolíniumos fűtőelemek bevezetéséhez kapcsolódik. A bevezetés során igen változatos zónakonfigurációk alakulhatnak ki, amelyekhez kapcsolódó szimulátoros oktatás már nem végezhető el a meglévő egyszerű modellekkel. Sikeresen a szimulátorba integrálták az AEKI-ben fejlesztett KIKO3D 3D neutronkinetikai kódot, a RETINA kétfázisú termohidraulikai kódot, és ehhez az egész szimulátort már átkerült egy sokkal nagyobb teljesítményű számítástechnikai környezetbe. Sikeresen lezajlott az előzetes tesztek első fordulója, jelenleg a hivatalos átadás-átvételi folyamat zajlik.

Anyagtudományi kutatások (8 kutató, 312,1 MFt ráfordítás, 6,4 MFt pályázat)

Kisszögű neutronszórással és számítógépes szimulációs módszerekkel tanulmányozták különböző metil-szubsztituált piridin származékok, valamint aceton vizes oldatainak szerkezetét és az oldatokban fellépő intermolekuláris kölcsönhatásokat. Az eredmények alapján következtetéseket vontak le a molekulák közötti kölcsönhatásoknak az oldhatóságban játszott szerepére.

Korróziós termékek adszorpcióját vizsgálták elektrokémiai kvarc kristály mikromérleggel és radiokémiai nyomjelzéses technikával. A nyomjelzéses vizsgálatok megerősítették mind kvantitatívan, mind kvalitatívan a kvarckristály mikromérleges méréseik eredményét. Mindezek eredményeképpen, a kapott izotermák alapján konzervatív becslés adható a primerköri szerkezeti anyagok felületi szennyezettségére.

A BKR biztonságos üzemeltetését szolgáló vízkémiai program keretében műszeres neutron-aktivációs analitikai (INAA) és gamma-spektroszkópiai módszerrel vizsgálták a primer- és szekunderköri hűtőközeg, valamint a különböző tároló medencék vízmintáit.

Gamma-spektroszkópiai módszerrel vizsgálták primerköri vízmintákban a szerkezeti anyagok kémiai korróziójából származó szennyezők, hasadási nuklidok aktivitás-koncentrációit. Reaktorgáz mintákban, elsősorban a ^{41}Ar és ^{135}Xe nuklidok aktivitás-koncentrációit mérték a reaktor szellőzőrendszerének ellenőrzése, a normál üzemi viszonyokra jellemző kibocsátások monitorozása céljából.

Áztatásos kísérletekben, adszorpciós/deszorpciós vizsgálatokat végeztek rozsdamentes acél és Zr-1%Nb felületeken ^{51}Cr, ^{59}Fe, ^{59}Co, ^{134}Cs illetve ^{141}Ce izotópokkal jelzett különböző koncentrációjú bórsavas oldatokban, szobahőmérsékleten a maximális adszorpció mennyiségének meghatározása céljából nagy-felbontású, HPGe alapú gamma-spektroszkópia segítségével.

Sugárvédelmi és környezetfizikai kutatások (13 kutató, 185,6 MFt ráfordítás, 98,9 MFt pályázat)

Az AEKI-ben kifejlesztett *Pille-MKSz* dózismérő rendszer a Nemzetközi Űrállomás (ISS) orosz modulján a dozimetriai szolgálati rendszer része. A több ezer mérés eredményét 2009-ben – a korábbi évekhez hasonlóan – feldolgozták és nemzetközi konferenciákon,

folyóiratokban publikálták. Charles Simonyi repülése kapcsán négy új dózismérőt juttattak az ISS fedélzetére, és sor került a hat éve üzemelő kiolvasónak és tíz dózismérőnek a fedélzeti kalibrációjára.

A *Pille* tapasztalatai alapján az AEKI-ben kifejlesztett földi, kereskedelmi célú *PorTL* rendszert az AEMI Atomenergia Mérnökiroda Kft. sikeresen hasznosítja. Az AEKI-ben 2009-ben is folytatódott a *PorTL* továbbfejlesztése, elsősorban a LiF TL tabletták ragasztási technológiájával, illetve a dózismérő blokkok gyártásának felszerszámozásával kapcsolatosan.

Az elmúlt évben folytatódott a 4π térszögben közel egyenletes érzékenységgel rendelkező háromtengelyű szilícium detektoros űrdozimetriai teleszkóp (*TriTel*) fejlesztése és tesztelése. A készülék az elnyelt dózis mellett a LET (lineáris energiaátadási tényező) és a sugárzási minőségi tényező meghatározására is alkalmas, így számítható lesz a sugárzás biológiai károsító hatásával összefüggésben lévő dózisegyenérték. A *TriTel* különböző változatai a jövőben a Nemzetközi Űrállomás európai modulján és orosz szegmensén, valamint egy műhold fedélzetén fognak méréseket végezni.

Az ESA *Rosetta* űrszondája 2014-ben éri el a Csurjumov-Geraszimenko üstököst. Az AEKI közreműködésével az űrszonda leszálló egységére két műszer is készült (a *ROMAP/SPM* plazma- és a *SESAME/DIM* pordetektor). 2009-ben is sor került a műszerek repülés alatti ellenőrzésére, a teszt-adatok kiértékelésére.

Megkezdődött az európai COLUMBUS modul belsejében a dózistérképezés, mely több éven keresztül folytatódik a naptevékenység hatásainak követése céljából. Az AEKI-ben készült mérőegységek is beletartoznak azon eszközök sorába, melyekkel Magyarország hozzájárul a Nemzetközi Űrállomáson a nagy LET értékű neutron- és kozmikus sugárzás spektrumának és az integrális dózisnak a meghatározásához, ezzel jelentősen növelve hazánk műszaki és tudományos hírnevét.

A lakosságot érő kis dózisú ionizáló sugárzások hatásának felmérésére az elmúlt években numerikus modellt fejlesztettek ki. Ebben az évben a modellt több vonatkozásban is továbbfejlesztették. A fejlesztések az alfa részecskék által a tüdő hámsejtjeiben kiváltott hatások mechanizmusainak minél pontosabb leírását célozták meg. Ez alapvetően a sejtek sugárzás hatására történő inicializációs és promóciós folyamatok matematikai leírását foglalta magába az irodalomban fellelhető sejtbiológiai kísérletek eredményei alapján. Ezen direkt hatásokon túlmenően közvetett hatások, mint például a bystander hatás és az indukált apoptózis modellezése is sorra került. Sikerült továbblépni a realisztikus légúti geometriák előállítása terén is.

Összehasonlították és összegezték Csehország, Magyarország és Szlovákia meglévő atomerőműveinek normálüzemi és baleseti kockázathoz köthető externáliáit, VVER440 és VVER1000 reaktorblokkok figyelembe vételével. A tervezett erőművekhez harmadik generációs referencia reaktorként az EPR szolgált. A vizsgált országokban az atomerőművek normálüzemi externáliája 0,045 és 0,074 c€/kWh közöttinek adódott a 2005–2007 közötti időszakban, amelynek 10%-a köthető regionális hatáshoz. Az EPR – várható radioaktív kibocsátásai alapján – 30%-kal kisebb normálüzemi külső költséggel jár, mint a jelenlegi VVER blokkok. A teljes üzemanyagciklus figyelembe vételével megmutatták, hogy az erőmű működése során a teljes externáliának csupán 20%-a keletkezik, az üzemanyag-ellátás

szakasza a legjelentősebb (76%). A jelenlegi erőművek baleseti kockázatból származó – COSYMA kóddal számított – externáliái összemérhetők a normálüzemi radioaktív kibocsátások regionális hatásával, az EPR esetén a baleseti járulék az objektív kockázat figyelembe vételével elhanyagolható.

Magyarországra adaptált több szempontú döntési modellel elvégezték a fosszilis, nukleáris és megújuló villamosenergia-termelési alternatívák fenntarthatósági értékelését, 2010-es technológiák figyelembe vételével. Az alternatívák sorrendjét a súlyozott pontszámösszeg módszerével határozták meg, az egyes szempontok szerinti pontszámok, illetve több mint 100 fős felmérés során meghatározott szempontsúlyok alapján. Az elvégzett értékelés szerint legjobban teljesítenek a megújuló energiák (szél, víz, fotovillamos), majd a nukleáris, a biomassza; a sor végén a fosszilis alternatívák foglalnak helyet.

A tervezett Európai Spallációs Forrás engedélyeztetésének feltétele, hogy leszerelési tervvel rendelkezzen. Bár nem Magyarországon lesz megépítve, az előkésztő szakaszban egy FP7 program keretében az AEKI is elvégez bizonyos tervezési munkákat. Ennek keretében felmérték a target üzemelése után várható hulladékokra vonatkozó radioaktív leltárt és meghatározták a három opcióra (Hg, PbB és PbAu) vonatkozóan a radioaktív hulladék osztályt és a hulladék várható mennyiségét.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének fő eredményei (0 kutató, 3058,3 MFt ráfordítás, 43,4 MFt pályázat)

A Budapest Műszerközpont (BKM) évek óta működteti a user programot, amelynek keretében a Budapest Kutatóreaktor nagyberendezésein mérési időre lehet pályázni. Kutatási pályázat évente kétszer nyújtható be, a pályázati forma letölthető a Budapest Műszerközpont (Budapest Neutron Centre) honlapjáról, www.bnc.hu. A beérkezett pályázatokat egy nemzetközi bírálóbizottság értékeli és rangsorolja. A bizottság tagjai a neutron anyagvizsgálati módszerek területén nemzetközileg elismert szakemberek. A pályázatok elbírálásának fő szempontjai a tudományos érték, az új kutatási téma, Ph.D vagy diplomamunka. Az évente beérkező rendkívül nagy mérési idő igény miatt csak a kiváló és jó pályázatok számára tud a Műszerközpont mérési kapacitást biztosítani.

2000 óta a BKM részt vesz az Európai Közösség által támogatott „Transnational Access" programokban, 2004-től NMI3 (The Integrated Infrastructure Initiative for Neutron Scattering and Muon Spectroscopy) nemzetközi konzorcium tagja, amelynek egyik fő célkitűzése, hogy a meglévő neutron és muon berendezések hatékony kihasználtságát biztosítsa. Az NMI3-FP7-es program keretében, amely 2009. februárjában indult, újból lehetőség nyílt, hogy a program követelményeinek megfelelő pályázók utazási támogatásban részesüljenek. 2009-ben 15 projektet támogatott a BKM, amelynek keretében 85 reaktornapot bocsátott az európai userek rendelkezésére.

2008-ban az AEKI kezdeményezésére, amelyet a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség is támogatott, létrejött a közép-kelet-európai kutatóreaktorok koalíciója, Eastern European Research Reactor Initiative (EERRI) névvel. A kezdeményezés célja, hogy a régióban működő kutatóreaktorok összehangolják tevékenységüket a reaktor üzemeltetés és hasznosítás területétén. 2009-ben az EERRI az IAEA-val együtt tréning programot szervezett. Ennek

keretében a hallgatók egy hetes elméleti és gyakorlati oktatáson vettek részt a Budapest Kutatóreaktornál.

Az eredmények gazdasági-társadalmi haszna

Az intézet eredményeinek alapvető hasznosulása a magyar nukleáris kompetencia fenntartása. Ennek legfontosabb területei egybeesnek az intézet hármas célkitűzéseivel: a jelen igényeinek megfelelő nukleáris biztonsággal kapcsolatos kutatások, a Magyarországon létesítendő új atomerőmű blokkok előkészítése, valamint a jövő energiatermelésének megalapozása.

A kutatások és fejlesztések eredményei jelenleg két területen hasznosulnak. Az első terület a magyar atomerőmű (PA Rt), ahol a kutatási eredmények egy része közvetlenül hasznosul. A másik terület a magyar nukleáris hatóság (OAH), ahol az ellenőrzés, engedélyezés, felügyelet minőségének javulása az eredmények hasznosulási formája. Mindezen területeken azonban jelentős az eredmények nemzetközi hasznosulása is.

A Budapesti Kutatóreaktor működésének eredményeként ma Magyarország az EU új tagállamai közül egyedül rendelkezik olyan tudományos nagyberendezéssel, amit az EU működés részbeni finanszírozásával elismer.

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 BMGE-n pedig a nukleáris technika, ezen belül elsősorban a reaktorfizika területén.
Nemzetközi kapcsolataik fontos részét képezi az EU projektekben való részvétel, kiterjedt nemzetközi kapcsolataik vannak számos kutatóintézettel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A hazai pályázatok közül a legfontosabb az intézet jövője szempontjából a NUKENERG, amely kétszer három évre biztosítja a perspektivikus energiatermelési mód (negyedik generációs atomerőművek, fúzió) kutatásának lehetőségét. Az NKFP és GVOP pályázatok fontos szerepet játszanak az intézet témaválasztékának bővítésében.

Az elnyert nemzetközi pályázatok mintegy fele az EU keretprogramjaiból származik és ezek jelentősége abban áll, hogy a korszerű atomenergetikához kapcsolódó nemzetközi

kutatásokhoz biztosít kapcsolatot. A legnagyobb összegű EU pályázat a kutatóreaktor európai hasznosítását teszi lehetővé. Jelentős a fúziós, valamint az űrelektronikai pályázatok szerepe is.

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

1. Hegyi Gy, Keresztúri A, Willermoz G: APOLLO: Analysis of hexagonal critical experiments, Annals of Nuclear Energy, Vol. 36 (pp: 1431-1439), 2009
2. Maráczy Cs, Keresztúri A, Trosztel I, Hegyi Gy: Safety analysis of reactivity initiated accidents in a HPLWR reactor by the coupled ATHLET-KIKO3D code, Progress in Nuclear Energy, Vol. 5236 (pp: 1901-196), 2010
3. Schulenberg T, Maraczy Cs, Heinecke J, Bernnat W: Design and Analysis of a Thermal Core for a HPLWR – a State of the Art Review,: NURETH 13, Kanazawa, Japan, Sept. 27 to Oct. 2, 2009
4. Szabados L, Ézsöl Gy, Perneczky L, Tóth I, Guba A, Takács A, Trosztel I: *Major findings of PMK-2 Test Results and Validation of Thermohydraulic System Codes for VVER Safety Studies. Volume II*., Akadémiai Kiadó – Budapest, ISBN 978-963-05-8810-2
5. Hózer Z, Szabó E, Pintér T, Baracska Varjú I, Bujtás T, Farkas G, Vajda N: Activity release from damaged fuel during the Paks-2 cleaning tank incident in the spent fuel storage pool, Journal of Nuclear Materials 392 (2009) 90–94
6. Kiss S, Lipcsei S, Végh J: MTC estimation based on neutron noise and propagating temperature perturbation in VVER-440 reactors, Annals of Nuclear Energy 37, 166-174, 2010
7. Hazi G, Farkas I: On the Pressure Dependency of Physical Parameters in Case of Heat Transfer Problems of Supercritical Water, *J. Eng. Gas Turb. and Pow.*,131, (2009), 012904
8. Römer F, Imre AR, Kraska T: The relation of interface properties and bulk phase stability: MD simulations of carbon dioxide, *Journal of Physical Chemistry B*, 113(2009)4688-4697
9. Horváth Á, Jákli Gy, Horváth M, Csordás A, Sikó L, Imre AR: Study of corrosion in supercritical water, in :Proceeding of the 4th International Symposium on Supercritical Water-Cooled Reactors, Paper No. 57 (CD), 2009
10. Vidovszky I, Dewes J, Gadó J, Tőzsér S: Nuclear Spent Fuel Repatriation from the, Budapest Researh Reactor, EAES RROG, April 15, 2009, Budapest, Hungary

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA KFKI Atomenergia Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	191		Ebből kutató[2]:		36
PhD, kandidátus:	26	MTA doktora: 4	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					12
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					125
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					93
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		40
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	12		idegen nyelven:		41
összesített impakt faktor[6]:	51		összes hivatkozás száma[7]:		113
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					96
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 1		jegyzet:	7
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	78	poszterek száma[12]:			20
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát (BSc):			1
Diplomamunkát (MSc):	6	PhD-t:			7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					500
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				694,56	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	5	Teljes saját bevétel[18]:		1242,51	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				1,31	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				24,322	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				111,8	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				119,08	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				43,71	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				942,29	MFt

KFKI RÉSZECSKE- 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

Az MTA KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet alapító okiratában rögzített feladatainak, valamint az MTA közfeladatainak ellátásából ráháruló teendőknek megfelelve 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, fúziós plazmadiagnosztika, űrtechnika, gyors adatfeldolgozás, spektroszkópia, speciális elektronikus, mechanikai és információ-technológiai eszközök, különböző operációs rendszerek alatt futó szoftverek. A Magyar Euratom Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálta a szabályozott magfúziós energiatermelés megvalósításához hozzájáruló magyar kutatás-fejlesztési tevékenységet. Működtette és fejlesztette nagyberendezéseit, az EG-2R gyorsítót, a hozzá kapcsolt NIK nehézion-implantert, az MBE molekulanyaláb-epitaxia berendezést, a kutatást és a kapcsolatokat szolgáló GRID rendszerű és más nagykapacitású számítógépes hálózatait. Fenntartotta, működtette és fejlesztette a KFKI Telephely számítástechnikai hálózatát, fejlesztette az ennek biztonságát növelő eszközöket, és ellátta a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program regionális központi feladatait is.

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

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion-fizika

A CERN nagy hadron ütköztetője, az LHC, a technikai problémák megoldását követően 2009 novemberében sikeresen újraindult. A gyorsítás beindításáig is intenzív kutatómunka folyt a detektorok kozmikus sugárzásból jövő részecskékkel történő továbbfejlesztése és kalibrálása terén. Az elért ütközési energia (2,36 TeV) már az eddigi rövid gyorsítási periódusban meghaladta a világon eddig elért legnagyobb értéket.

Az RMKI, az ATOMKI, a Debreceni Egyetem Kísérleti Fizikai Intézet és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Atomfizikai Tanszék kutatóiból álló magyar CMS-csoport, melynek munkáját az RMKI koordinálja, jelentős hardware fejlesztő munkát végzett a barrel müon detektor (a CMS kísérlet egyik fontos detektora) pozíció-monitorának üzembe állításával és működtetésével. A rendszer jól vizsgázott a CMS 4 Tesla mágneses terében elvégzett éles tesztekben, mind a kozmikus sugárzási mérések, mind az LHC működése során.

Az RMKI kutatói jelentős részt vállaltak a kísérlet első, de máris unikális energiájú proton-proton ütközések analízisében a pixel- és szál-geometriájú szilícium alapú detektorrendszer által rögzített nyomok kiértékelésével, a részecskespektrumok és a 2,36 TeV tömegközépponti energiájú ütközésekben keletkező töltött hadronok pszeudo-rapiditás- és merőleges impulzus eloszlásának meghatározásával. Az eredmények jó egyezést mutatnak a proton-antiproton kölcsönhatásban mért – alacsonyabb energiákra vonatkozó – adatokkal,

megerősítve ezzel a kölcsönhatás töltésfüggetlenségét. A magyar teljesítmény elismerését jelzi, hogy az év végétől az intézet kutatóját választották meg a CMS mintegy 60 fős QCD csoportja vezetőjének, és így kutatóik az eredményekről beszámoló kollaborációs közlemény megírásában vezető szerepet játszottak.

A 2009-ben az RMKI és az ELTE által elnyert konzorciális NKTH-OTKA pályázat segítségével a CERN RD51 nemzetközi együttműködés keretében indult el új típusú, kozmikus sugárzásból származó részecskék pályáját nagy pontossággal meghatározó CCC gázdetektorok fejlesztése. Kifejlesztésre került a CERN-LHC ALICE kísérlete részére egy trigger-detektor prototípusa, mely sikerrel vizsgázott a tesztmérésekben.

Az ALICE kísérletben – olasz és mexikói kutatókkal együttműködve – elkészítették a "Nagyon Nagy Impulzusú Részecskéket Azonosító Detektor" (VHMPID) megvalósítási tervét, amelyet az ALICE elfogadott. Az RMKI-ban lévő detektor-laboratóriumban megépítették a HPTD trigger-egység tesztelhető változatát, mellyel az LHC 7 GeV-es proton nyalábjával tesztméréseket is végeztek. Az eredmények alapján optimalizálták a berendezést és elkészítettek egy új, gyorsabb kiolvasó elektronikát. Az ALICE HMPID detektorral sikeres adatgyűjtést végeztek a LHC gyorsítóban végbement p-p ütközésekben is 900 GeV és 2.36 TeV energiákon.

A CERN LHC TOTEM kísérleti együttműködésben a Detektor Kontroll Rendszer (DCS) fejlesztéséhez járultak hozzá, lehetővé téve a távoli vezérlést is. Az adatgyűjtés 2009 végén elindult.

A kiemelt LHC kísérletek mellett a CERN továbbra is határozottan támogatja az SPS gyorsítóra alapozott és a részecskefizika szempontjából nagyon fontos egyéb kísérleteket, így a magyar-lengyel kezdeményezésű és magyar részről RMKI vezetésű NA61/SHINE kísérletet is, melynek új adatgyűjtő rendszerében a teljes hardware és software magyar fejlesztésű. A kísérletben különböző energiájú proton- és pion-nyalábokat szén- és folyékony hidrogén-céltárgyra lőve megkezdődött a szisztematikus adatgyűjtés, melynek keretében a 20-160 GeV energia-tartományban elvégezték az első összehasonlító méréssorozatot a p+p rendszeren. Az RMKI vezette felújítás eredményeként a négyhónapos mérési periódus alatt 40 millió eseményt sikerült rögzíteni, annyit, mint korábban az elől NA-49 kísérletben tíz év alatt. A 2009-ban felvett adatok elsősorban a T2K neutrinó és az Auger, illetve KASCADE kozmikus sugárzási mérésekben jelentenek komoly előrelépést. A NA61-es kísérlethez elkészült a később megépítendő centralitás-detektor teszt-verziója is.

Az RMKI Detektorépítő csoportja által kidolgozott Detektor Data Link (DDL) hálózati kártyái sikeresen működnek mind az ALICE, mind az NA61 (SHINE) kísérlet adatgyűjtő rendszerében. Az ALICE kísérlet számára kifejlesztették a DDL kártyák kiolvasásához szükséges RORC (Read-out Receiver Card) kártyák PCI Express alapú változatát. Az adatok kiértékelését nehezítő zajok kiszűrését lehetővé tevő fejlesztéseik jelentősen elősegítették a részben hazai vezetésű NA61 kísérlet 2009. évi eredményes működését.

A CERN antiproton-lassítójánál a Tokió-Budapest-Bécs-Brescia-München együttműködésben tovább folyt az anyag-antianyag szimmetriáját kimondó CPT-invariancia kísérleti ellenőrzése. A lézer-mikrohullám-lézer hármas rezonancia módszerével megmérték az antiproton-állapotok hiperfinom felhasadását antiprotonos héliumatomokban, és ezzel tovább pontosították az antiproton mágneses momentumának a protonéval összehasonlított értékét. Továbbfejlesztették az antiprotonos hélium energiaátmeneteinek Doppler-mentes mérését két, egymással szemben haladó lézersugár segítségével. Eddig valamennyi mérés a CPT-

invariancia teljesülését bizonyítja. A korábban is RMKI részvétellel épített kétmódusú Paul-csapdába detektorrendszert terveztek és építettek az antihidrogén keletkezésekor történő antiproton-annihiláció monitorozására.

A Worldwide LHC Computing Grid együttműködés keretében továbbfejlesztették az RMKI BUDAPEST Grid-állomását, amely 2009 végére 426 processzorral és 144 terabyte tárolóval rendelkezett, s az év folyamán a BUDAPEST grid-állomás végig 96% fölötti teljesítménnyel (rendelkezésre állással és elérhetőséggel) működött. Ezzel a közel száz hasonló Tier-2 központ között egyike volt a legeredményesebbeknek.

A BNL RHIC gyorsítónál (Brookhaven, USA) a PHENIX és a STAR kísérletekben gyűjtött 200 AGeV tömegközépponti energiájú Au+Au adatok elemzésével az eta'(958) részecske tömegmódosulását vizsgálták, s a korrelációs függvények analízise során 99.9 %-os konfidencia szinten megállapították, hogy az 'eta' mezon tömege a nehézion-ütközésben nagy mértékben, több mint 200 MeV-el csökken. Ez az eredmény egy fontos részecskefizikai szimmetria, az $U_A(1)$ szimmetria részleges helyreállására utal a nehézion-ütközés során.

Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel

Az anyagtudományi témacsoport feladata az volt, hogy elsősorban magfizikai módszerekkel kísérleti alapkutatásokat végezzen az anyagtudomány területén, és fejlessze az ehhez szükséges kísérleti és elméleti hátteret. Üzemeltették az 5 MeV-es EG-2R iongyorsítót és a NIK nehézion-implantert, amelyek a Magyar Ionnyaláb-fizikai Platform (HIPP) részei.

Az ugyancsak a HIPP részét képező molekulanyaláb-epitaxia (MBE) berendezést az év során folyamatosan üzemeltették; összesen 98 minta készült 48 növesztésen. Mintáikat hazai akadémiai és egyetemi kutatóhelyek, valamint német és orosz kutatóintézetek is használták. Az MBE berendezést molekuláris oxigénforrással bővítették. A Budapesti Kutatóreaktor Műszerközpontban próbaüzembe helyezték a GINA neutronreflektométert, amely ezzel külső felhasználók fogadására is alkalmassá vált.

Az itthoni kísérleti adottságokon túlmenően az egyes csoportok munkájukat részben nagy európai kutatási infrastruktúráknál, illetve partnereik lehetőségeit kihasználva végezték.

Az adattárolók fejlesztésében (spintronikában) jelentős alkalmazási lehetőségekkel rendelkező mágneses vékonyrétegeket vizsgálva MgO(100)/Fe/MgO(100) rétegek esetében Mössbauer-spektroszkópiás mérésekkel meghatározták a mágneses anizotrópia értékeket a Fe-rétegek vastagságának függvényében. Különféle összetételű Fe-Pd és Fe-Pt rendszerekben a mágneses anizotrópia meghatározása mellett a rétegek fázisanalízisét is elvégezték a rétegképződés folyamatainak jobb megértése és a gyakorlati alkalmazás elősegítése céljából.

Az átmenetifém-vegyületek transzport- és gerjesztési tulajdonságainak megértéséhez elengedhetetlen a legkisebb energiájú betöltetlen elektronállapotok ismerete. Ezek elemszelektív vizsgálatára rezonáns rugalmatlan röntgenszórást alkalmaztak; a vizsgálatok eredményeként javaslatot tettek az átmenetifémek 1s előélének új általános értelmezésére. A világon először alkalmazták a röntgenemissziós spektroszkópiát ultragyors folyamatok vizsgálatában, amelynek során egy gerjesztett vaskomplex tranziens spinállapotát határozták meg 60 ps-mal a gerjesztés után.

Az implantált hélium felhalmozódását vizsgálva megállapították, hogy az alacsony lítiumoxid-tartalmú $(LiO)_x(SiO_2)_{(1-x)}$ ($x < 0{,}33$) szilikátokból a hélium kiszökik, hasonlóan, mint a tiszta szilíciumoxidból. Magasabb lítiumoxid-tartalomnál ($x > 0{,}5$) viszont a hélium

jelentős része már az anyagban marad. Ezek az eredmények segíthetik a jövő fúziós reaktorainak tervezését.

Neutronreflektometriával – a rezonanciaerősítés jelenségét kihasználva – elsőként mutatták ki szupravezető/ferromágnes kettősrétegben a szupravezető állapot visszahatását a mágneses rétegszerkezetre. A diffúziót részenként homogén ötvözetekben modellezték. Modelljüket metastabil FePd-filmek neutron- és Mössbauer (-konverzióselektron és -reflektometriai)-adataira alkalmazva három lokális diffúziós állandót határoztak meg. Elméletileg megjósolták a magrezonancia-előreszórás reciprocitás-sértését, és javaslatot tettek annak kísérleti igazolására. A DWBA módszer diffúz szinkrotron-Mössbauer-reflektometriára általuk korábban kidolgozott változatához hatékony programot fejlesztettek ki, mellyel az antiferromágneses multirétegek doménjeinek korrelációs függvényét exponenciálisnak találták. Elméletet dolgoztak ki és annak alapján készült szimulációs programot alkalmaztak konverziós elektronokkal mért Mössbauer-spektrumok polarizációfüggő intenzitásszámítására. Ezzel lehetővé vált mágneses vékonyrétegekben a Mössbauer-polarimetria segítségével a rétegmágnesezettségek irányának néhány fokos pontossággal történő meghatározása.

Porózus anyagokon és szén nanocsöveken végzett pozitronannihilációs vizsgálatokkal megállapították, hogy utóbbiakban a pozitróniumképződés előbbiekhez képest megfigyelt elnyomása homogén, tiszta felületeknek tulajdonítható. Nagytisztaságú Si-mintákban a nagyenergiás nehézion-besugárzással keltett hibaszerkezet képződési dinamikáját pozitronannihilációval vizsgálva azt találták, hogy divakancia-képződés csak egy küszöbdózis felett lép fel, a polivakancia-képződés pedig egy újabb küszöb felett. A pozitronannihilációs élettartam-spektroszkópián kívül (portugál és horvát TÉT-kooperációban, valamint az MTA-EAI együttműködésben) az annihilációs sugárzás Doppler-effektusának mérését is alkalmazva kimutatták, hogy a hagyományos adatkiértékeléshez képest mintaspecifikus energiaablakok alkalmazásával a mérési érzékenység megkétszerezhető.

Amptek gyártmányú részegységekből összeépítettek egy mini röntgencsöves hordozható röntgenfluoreszcencia (XRF) spektrométert. A gerjesztő sugár, illetve a detektor elé helyezett szűrőrétegekkel megkeresték az elem-érzékenység szempontjából elérhető legjobb kompromisszumot. A kapott értékeket összevetették radioizotóp gerjesztéses spektrométerük hasonló adataival (ez utóbbi készüléküket az Amptek cég feltette a honlapjára a műtárgyak analízisének illusztrálására), és megállapították, hogy a csöves gerjesztésű spektrométer érzékenysége átlagosan majd egy nagyságrenddel jobb, de a $Z<18$ elemek kimutatására a Cu szűrő helyett célszerűbb Ti szűrő alkalmazása. A röntgencsöves spektrométer használatával reményeik szerint elhárulnak a radioaktív források szállítása és használata által okozott, a múzeumi, képtári *in situ* alkalmazásokat eddig komolyan akadályozó nehézségek.

Elméleti fizika

A híres Maldacena-féle AdS/CFT (anti-de-Sitter tér/ konformális térelmélet) dualitási sejtés a 10-dimenziós AdS_5xS_5 téridőn definiált IIB típusú húrelmélet és a négy-dimenziós N=4 szuperszimmetrikus Yang-Mills elmélet egzakt ekvivalenciáját mondja ki úgy, hogy a Yang-Mills elméletbeli anomális dimenziók a húrelmélet energiáinak felelnek meg. A sejtés ellenőrzése csak nem-perturbatív technikák segítségével lehetséges, amire a dualitás mindkét oldalán felfedezett integrálhatóság ad lehetőséget. A dualitás ellenőrzése szempontjából alapvetően fontos az ún. Konishi operátor, mivel a Yang-Mills elméletben ez a legegyszerűbb nem nulla anomális dimenziójú operátor. A húrelmélet integrálhatóságát és a dualitási sejtést kihasználva kutatóik 5-hurok rendig kiszámították a Konishi operátor anomális dimenzióját.

Az eredmény az energiaspektrum/anomális dimenziók meghatározására javasolt, a várakozások szerint minden rendben egzakt, ún. termodinamikai Bethe-Ansatz integrálegyenletek ellenőrzése szempontjából is meghatározó jelentőségű.

A spontán sérülő térelméletben gyakran előforduló klasszikus megoldások, az úgynevezett topológikus defektek, dinamikailag a fázisátalakulások alatt keletkezhetnek. Nagy valószínűséggel jelentős a szerepük a korai univerzum fejlődésében is, mivel számos kozmikus húr-típusú defekt-megoldást találtak az úgynevezett szemi-lokális elméletekben, ahol nincs a defektek topológiájából „automatikusan" következő stabilitás. Az RMKI kutatói a globális SU(2)-szimmetriával rendelkező skalármezőket tartalmazó Abel-féle Higgs modellben nemrég felfedezett ún. "csavart húr" típusú defekt-megoldások stabilitását vizsgálva megmutatták, hogy ezek a defektek húrirányú hullámszámokkal jellemzett instabil módusokkal rendelkeznek. A bifurkációs pont közelében lévő csavarás-értékeknél az instabil módusok sikeres szemi-analitikus leírásával föltárták az instabilitások természetét.

A legújabb elméleti vizsgálatok arra utalnak, hogy a gravitációt a hullámfüggvény kollapszusa okozhatja, azaz a makroszkopikus testek kvantummechanikai lokalizálódása és a gravitáció létezése egymást feltételezik. Felvázolták ezen jelenség elemi matematikai modelljét. A kvantumos Brown mozgásról megmutatták, hogy az eddig ismert kvantum-Boltzmann-egyenlet az impulzus dekoherenciáját nem kezeli jól, ezért egy új egyenletet vezettek be a jelenség leírására.

Új numerikus eljárást fejlesztettek ki a csillagok gravitációs összeomlási folyamatának, a fellépő gravitációs sugárzási jelenségek részletes tanulmányozására. A numerikus relativitáselmélet fejlődése lehetővé teszi, hogy a gravitációs hullámok érzékelését végző kísérletek pontos információt adjanak a keresett jelalakokról. Az elméleti eredmények felhasználásra kerültek a gravitációs hullámok detektálására irányuló VIRGO együttműködésben, amelyben az RMKI kutatói aktívan részt vesznek.

Megmutatták, hogy a fekete lyukak és a valószínűségelmélet határeloszlásai számos közös tulajdonságot mutatnak entrópiájuk tekintetében. A párhuzam fennáll a fekete lyukak „kopaszsági" („no hair") tételére, az entrópia maximalizálására, a holografikus entrópia határhoz vezető Susskind-folyamatra és a feketelyuk-entrópia kvantáltságára. Eredményük "Dicséret"- ben részesült a Gravity Research Foundation 2009. évi esszé-pályázatán.

A relativisztikus hidrodinamika alapegyenleteinél a stabilitás és a kauzalitás érvényessége olyan elvárások, amelyeket olykor nehéz biztosítani. A disszipatív Fourier-Navier-Stokes relativisztikus kiterjesztése során olyan új megoldást találtak, amely egyszerű feltételek teljesülése mellett stabil. Ehhez a belső energia, a mechanikai munka és az entrópia relativisztikus általánosítását speciális módon oldották meg.

Elméleti magfizikai számolásokban megmutatták, hogy az antikaon-nukleon szórási kísérletek eredményei mind gyengén, mind erősen kötött kéttest-rendszerekkel értelmezhetők. Ez az ellentmondás speciális háromtest-rendszerek, így antikaon-proton-proton és antikaon-deutérium rendszerek elméleti vizsgálatával oldható fel, mert a háromtest-kölcsönhatás egyértelműen dönthet az erős és a gyenge kötés között.

Plazmafizika és hűtött atomok fizikája

A fúziós plazmafizikai kutatások területén számos európai fúziós kísérlethez kapcsolódva folytatták az elmúlt évben megkezdett technikai fejlesztéseket. Felépült a MAST tokamakra 2010-ben felszerelendő kétdimenziós nyalábemissziós spektroszkópia diagnosztika. Ez az

Európában egyedülálló mérőeszköz – melynek fejlesztésébe, illetve az építésbe bekapcsolódott az RMKI két spin-off vállalkozása is – a plazmába hatoló fűtő hidrogén atomnyaláb fényének fluktuációiból a szél- és magplazma turbulenciát és a plazma áramlásait fogja mérni. A TEXTOR tokamakon a korábban megépített lítium atomnyaláb-emissziós diagnosztika segítségével a plazma szélén más módon nem kivitelezhető méréseket végezve megállapították, hogy a plazma szélső rétegeiben is megjelennek az úgynevezett Geodesic Acoustic Mode (GAM) áramlási modulációk, amelyek az elméletek szerint fontos szerepet játszanak a plazma-turbulencia önszabályzásában. Megmutatták, hogy a diagnosztika 10 µs-nál jobb időfelbontással képes mérni a plazma sűrűségváltozását.

A Prágában újraépülő COMPASS tokamakra az RMKI kutatói építik az új lítium atomnyaláb diagnosztikát, mely a TEXTOR-on működő berendezéshez lesz hasonló. A rendszert alkalmassá tették arra, hogy újdonságként az atomnyalábból származó ionokat is detektálni lehessen még a vákuumkamrán belül. Ennek a mérésnek a célja az árameloszlás meghatározása a plazma szélén, ami kiemelt fontosságú feladat az úgynevezett ELM instabilitások elméleteinek ellenőrzésére. A berendezés fő elemei elkészültek és várhatóan 2010 első felében a diagnosztika felszerelésre kerül Prágában.

A tokamakokban fellépő plazma-diszrupciók berendezést károsító potenciális hatásai közismertek. Mivel ezek a hatások az ITER-nél is nagy károkat okozhatnak, csökkentésük elsőrendű fontosságú. Az egyik lehetséges hatáscsökkentő mechanizmus a masszív (nagy mennyiségű) gázbelövés, melynek vizsgálatához a TCV tokamakon az RMKI kutatói építettek ki és teszteltek egy általuk tervezett, új szuperszonikus gázinjektort, amely képes néhány milliszekundum időtartam alatt a plazmában lévő ionoknál több semleges gázatomot a vákuumkamrába juttatni.

Az ASDEX Upgrade tokamakon a pellet által okozott mágneses perturbáció három különböző plazma-üzemmódban történő tanulmányozásával az ELM instabilitások keltési folyamatát vizsgálták. Megfigyeléseik szerint a pellet szélessávú Alfvén-hullámokat kelt, valamint a sűrűség növelése által csökkenti az ohmikus plazmában megfigyelhető stabil TAE rezgések jellemző frekvenciáját. Az eredményekből arra következtettek, hogy a pellet-belövés során kialakuló ELM-et nem a pellet által keltett mágneses perturbáció, hanem a plazma szélén kiváltott plazmanyomás-perturbáció okozza. A JET tokamakra épített gyors kamerarendszerrel megfigyelték, hogy a pelletek által keltett ELM instabilitásokat kiváltó perturbáció nagy valószínűséggel a pelletek felhőjéből indul ki.

A Greifswaldban épülő Wendelstein 7-X következő generációs szupravezető sztellarátor 10-csatornás videó diagnosztikájának létrehozása az RMKI feladata. Az ehhez szükséges speciális, gyors (akár 100kHz képfrekvenciára is képes) intelligens CMOS kamera fejlesztése során elkészült a végleges kamera, amely már 10Gbit-es kommunikációt használ a kamera-fej és a képfeldolgozó és vezérlő egység között.

Az ITER fúziós berendezés fejlesztésének keretében az RMKI mérnökei jelentős részt vállalnak több diagnosztikai rendszer, valamint az európai trícium szaporító tesztkazetta rendszerek tervezésében. 2009-ben egy ITER bolométer tomográfia diagnosztika detektor hőterhelésének analízisére került sor. A vizsgálatok eredményeképpen előállt egy olyan ANSYS modell, amellyel tesztelhető lesz, hogy egy adott detektor konstrukció hogyan fog viselkedni a plazma sugárzása miatti hőmérséklet-emelkedés hatására. A második témában jelentős áttervezéssel sikerült tömegében lényegesen csökkenteni a rendszer cseréjét biztosító 60 tonnás modul vázszerkezetét, továbbá megszületett a belső részegységek elrendezésének gyárthatóság, szerelhetőség és karbantartás szempontjából is megfelelő elrendezése.

A lézer-plazma kölcsönhatás kutatásának területén a Szegedi Egyetemmel együttműködésben az RMKI kutatói megmutatták, hogy a szilárd target felületére fókuszált nyaláb reflexiója a plazmaküszöb fölött logaritmikusan nő, majd 10^{14}W/cm^2 intenzitás elérése után, amikor a plazma teljesen ionizálttá válik, telítést mutat. Ekkor több, mint 40%-os reflexiót sikerült elérni, azaz a plazmatükör akár közvetlenül is alkalmazható az ultrarövid KrF lézerimpulzus tisztítására. Ennél is perspektívikusabbnak tűnik azonban a plazmatükörnek az utolsó erősítő előtt való alkalmazása, amelyre kísérleteik szerint a feltételek adottak. Az eredmények alkalmazhatók lesznek nemcsak KrF, hanem hosszabb hullámhosszú szilárdtest-lézerekben is, mint az épülő ELI vagy a HiPER. Ezek a kutatások nemcsak alapkutatási jelentőségűek, de fontosak lehetnek a szabályozott magfúzió lézeres megvalósítása szempontjából is.

A LASERLAB Europe keretében nyertes pályázatuk segítségével a Garching-i Max-Planck-Institut für Quantenoptik partner-laboratóriumában az általuk készített polarizáció-analizátorral megvizsgálták az ottani 8fs impulzushosszú (3-ciklusú) lézerrel keltett harmonikusoknak mind a lézer polarizációjától (illetve annak ellipticitásától) való függését, mind pedig a keltett harmonikusok polarizációját. Megmutatták, hogy a 3-ciklusú lézerrel keltett harmonikusok polarizációjában a p-komponens, azaz a beesési síkban levő polarizáció a domináns.

A hideg plazma és atomok lézeres manipulációjának területén frekvenciacsörpölt lézerimpulzusok használatával két új eljárást dolgoztak ki Λ-sémát alkotó atomi állapotok tetszőleges szuperpozíciójának gerjesztésmentes preparálására. A gerjesztődés elnyomása hatékonyan csökkenti a gerjesztett állapot spontán emisszió következtében fellépő dekoherenciát. Az első módszerben két olyan lézerimpulzust használnak, melyek vivőfrekvenciái távol esnek a megengedett atomi átmenetek frekvenciáitól. A metastabil állapotok koherens szuperpozícióját megvalósító második módszer a Λ-atomok és két, hasonlóan frekvenciamodulált lézerimpulzus kölcsönhatásán alapul.

Új módszert dolgoztak ki fázis- és amplitúdóinformáció (transzverzális kép) rögzítésére és hosszú távú tárolására, amely szilárdtestek esetében is alkalmazható. Az információtárolásra többnívós atomok hosszú élettartamú metastabil energianívói szolgálnak. A transzverzális kép egy további lézerimpulzus alkalmazásával olvasható ki. A számítások során a szilárdtestekre jellemző, nagymértékben inhomogén-kiszélesedett atomi átmeneteket tételeztek fel. A módszert egy tripod nívószerkezetű atommodellen demonstrálták. Módszereik használhatók kvantuminformatikai alkalmazásokban, ill. rezonáns nemlineáris optikai effektusok felerősítésében gáz- és szilárd állapotú közegek esetén.

Nemzetközi OTKA pályázat keretében az elektromágnesesen indukált átlátszóság (EIT) jelenségét vizsgálták magneto-optikai csapdában (MOT) összegyűjtött és lehűtött Rb-atomok felhőjében. Számításaik megmutatták, hogy a konstans vivőfrekvenciás esethez képest frekvenciacsörpölt lézerimpulzusok használatával az EIT frekvenciatérbeli átlátszósági ablaka jelentősen kiszélesíthető, így jóval rövidebb lézerimpulzusok lassíthatók le, ill. állíthatók meg a közegben.

Űrfizika és űrtechnika

Az intézet kutatói kísérleti és elméleti alapkutatást végeztek az űrfizika, valamint fejlesztési tevékenységet fejtettek ki az űrtechnika területén. Az Európai Űrügynökség 2004-ben indította a Rosetta-Philae űrszonda-párost a Churjumov-Geraszimenko üstököshöz, a tervek szerint 2014-ben a Philae leereszkedik az üstökösmag felszínére. A műszerek és az üstökös paramétereinek pontosítása a szoftver folyamatos finomítását igényli, ebben az intézet kutatói

– mint a Philae központi számítógépének szoftver-fejlesztői – aktív résztvevők. Egy újabb szoftver változat készült, amely a hibernálás előtt kerül fel majd a leszállóegység számítógépébe.

A Nemzetközi Űrállomásra kerülő PWC plazmahullám-mérő rendszer három számítógépből álló adatgyűjtő szoftverének véglegesítését az RMKI fejlesztői végezték. Az űrállomásra kerülő példányt 2009 februárjában szállították ki Oroszországba. Moszkvában a tesztek sikeresen lezajlottak, a tartalékpéldány gyártása megkezdődött.

A Szaturnusz bolygót és környezetét vizsgáló Cassini űrmisszióban részt vevő kutatóik új elemekkel gazdagították a Titán holdra vonatkozó ismereteket. Kimutatták, hogy a T9 jelű Titán megközelítés több speciális tulajdonságát feltehetően az okozta, hogy ezen megközelítés előtt a szonda belépett a Szaturnusz mágneses korongjába, ahol elsősorban protonok által dominált környezetbe került, és módosult a Titánt elérő nyaláb iránya. A Titán éjszakai ionoszféráját kizárólag a magnetoszferikus elektronok gerjesztik. Az elsődleges misszió ionadataiból számított sűrűség, hőmérséklet és sebesség-momentumok segítségével megkezdték a Szaturnusz mágneses korongjának átfogó vizsgálatát. A mágneses korong a magnetoszféra ionjai számára egyfajta csapdát képez, a nehezebb (vízcsoport) ionok a korong körül egy igen szűk, míg a protonok kiterjedtebb térrészbe koncentrálódnak. A mágneses korong és a magnetoszférikus ionok tulajdonságai közti összefüggések kvantitatív vizsgálata alátámasztotta a mágneses korongot aszimmetrikus forgó objektumként leíró modelleket. Az űrszonda a Titánnal igen változó körülmények között találkozik az egymást követő megközelítések során, ezeket az ion-adatok alapján osztályozták. Kiderült, hogy a megközelítések körülményeit befolyásoló egyik legfontosabb tényező a szondának a mágneses koronghoz képest elfoglalt helyzete.

A Nap körül poláris pályán keringő Ulysses űrszonda 1992 és 2009 között végzett méréseket a helioszférában. Az első alkalommal, amikor a szonda Naphoz közel mozgott (1995-ben), az energikus részecskék fluxusában észak-déli aszimmetriát találtak. A megfigyelést a helioszféra ellentétes mágneses polaritású tartományait elválasztó áramlepel 10°-os déli irányú átlagos eltolódásával magyarázták. Az Ulysses szondával megfigyelt mágneses szektorátmenetek helyének elemzésével meghatározták az áramlepel átlagos eltolódását az első és a harmadik Naphoz közeli pályaszakaszok során (1995, 2007). Megállapították, hogy mindkét esetben az áramlepel csak néhány fokos szöggel tolódott el a déli irányban. Rámutattak, hogy az eltolódás kis mértéke összeegyezhetetlen a részecskefluxus mérések magyarázatánál hivatkozott 10°-os értékkel. A mindkét napciklusban megfigyelt kismértékű déli eltolódás megerősíti a Föld pályájánál végzett korábbi megfigyelések eredményeit.

A 15 európai kutatóintézettel közösen beadott SOlar-TERrestrial Investigations and Archives (SOTERIA) pályázatuk elnyerte az EC-7 keretprogram 9. témájának támogatását (FP7-SPACE-2007-001, projekt szám: 218816). A SOTERIA projekt – nagyszámú Nap-eredetű geoeffektív űridőjárási esemény egyidejű földi és űrbeli műszerekkel történő megfigyelésével és analízisével – széleskörű együttműködést valósít meg a napfizika, űrfizika és geofizika területén. A programban az űridőjárás és a földi magnetoszféra külső határfelületeinek modellezésével vesznek részt. Egy részecskeesemény fluxusainak időbeli fejlődéséből kimutatták, hogy a koronakitörés optikai megfigyeléséből levezetett Naphoz közeli lökéshullám-sebesség pontatlan eredményt ad a lökéshullám Földhöz való megérkezési idejére, amelynek ismerete pedig elengedhetetlen az űridőjárási események előrejelzéséhez.

Az Európai Űrügynökség 2014-ben a Merkúrhoz induló BepiColombo nevű szondája Plazma Ion Kamera műszeréhez elkészítették a tápellátó rendszer laboratóriumi példányát.

A Venus Express szonda ASPERA részecskedetektorának utókalibrációjához szükséges szoftver és hardvermódosításokat a mérnökök elvégezték a Kiruna-i kalibrációs rendszeren.

Biofizika

Az ICEA című pályázatuk keretében újabb kísérletek során megmutatták, hogy a hippokampális és az entorhinális kérgi helyreprezentációnak a környezet módosítása során bekövetkező változásait megmagyarázza a két agyterület közti kölcsönös kapcsolat. A patkány helymeghatározását vizsgáló biológiai modelljüket – robotok navigációs algoritmusának egy fontos építőköveként – széles körben használják. Analitikus számításokkal megmutatták, hogy az entorhinális agykérgi területen található úgynevezett rács-sejtek szabályos háromszögrácsokba szerveződött érzékenységi mezeje nemcsak a szükséges sejtek számát tekintve optimális reprezentációja a metrikus térnek, de ez az elrendezés igényli a lehető legkevesebb idegi aktivitást is, tehát ez az idegsejtek által elérhető leggazdaságosabb metrikus síkreprezentáció.

A fejlődő hálózatokban kialakuló nagy amplitúdójú és alacsonyfrekvenciájú oszcillációs ritmusok kialakulásának neurális alapjait vizsgálva megállapították, hogy a GABA-A áramoknak permisszív hatása van a kialakuló GDP (Giant Depolarizing Potential) potenciálok kialakításában, de ez a hatás nem inicializáló jellegű.

Nemzetközi együttműködés keretében megvizsgálták, hogy miképpen hatnak kölcsön alacsony és magas rendű stimulus komponensek vizuális tanulás közben. Megterveztek és lefuttattak két pszichológiai kísérletet, melyekben ezek a faktorok kontrollálhatóak voltak, és egy kifejlesztett modell segítségével kiértékelték, hogy egy optimális tanulóhoz képest miképpen teljesítenek az emberek. Megállapították, hogy az alacsonyrendű stimulus jellemzők olyan erős prior információt jelentenek az emberek számára, hogy a tréningezés hosszától függetlenül az optimálistól eltérő viselkedést mutatnak. Egy kontroll-kísérletben megmutatták, hogy ha viszont az alacsonyrendű jellemzők eltávolításával létrehozott adattal tréningezik az embereket, akkor a viselkedés ismét optimális lesz.

EEG vizsgálatokkal tanulmányozták a beszédpercepcióhoz kapcsolódó audiovizuális integráció jelenségét. Rámutattak egy korábban alkalmazott vizsgálati módszer lehetséges hibáira, és új módszert javasoltak. A módszerrel arra az eredményre jutottak, hogy a kiváltott válaszok úgynevezett N1 és P2 komponensei, melyek az ingert követően mintegy 100, illetve 200 ms múlva jelennek meg, a multimodális integráció alatt szupresszálódnak, és a két komponenshez kapcsolódó integrációs hatás eltérő féltekei aszimmetriát mutatnak.

Valós, orvosi gyakorlatban alkalmazható statisztikus adatelemzési módszert dolgoztak ki, amellyel AIDS-es betegek esetén egyénre szabva javasolni lehet optimális gyógyszer kombinációkat**.** A bemenő mennyiségek a beteg állapotát és a vírusokat leíró adatok, ezek hiányosan, gyéren mintázott adatmezők voltak, a kezelés kimenetele pedig a módszer szempontjából kimenő mennyiségnek számított. Statisztikai és adatbányászati módszerekkel kapcsolatot találtak a bejövő és kimenő mennyiségek között.

Nemzetközi együttműködés keretében új modellt állítottak fel az intézményi döntéshozatali rendszerek működésére. A modell a költségvetési kiadások fluktuációinak eloszlását többszintű, hierarchikus feszültség-akkumulációs rendszerrel magyarázva jó egyezést adott a mért eloszlásokkal.

Informatika, e-tudomány (e-science)

A CERN LHC Grid üzemeltetését és fejlesztését az RMKI különböző főosztályai és az RMKI SZHK továbbra is eredményesen végezték. Ez a professzionalizmus tette lehetővé a BUDAPEST GRID rendszer magas megbízhatóságát.

A MObil SegítőTárs (MOST) fejlesztése (GVOP - 2004 – 3.1.1) projekt keretében a Nav-N-Go Kft. navigációs motorját felhasználva vakok számára kifejlesztették a GPS navigáció első változatát, s már 20 tesztelőnek kiadták. 23 új MOST rendszert telepítettek, használatukat betanították, régi felhasználóikkal (100 vak ember) folyamatos konzultációt folytattak.

Kifejlesztették, s már tesztelik a Talkpad érintőképernyős programot autisták kommunikációjának támogatására. Támogatták a Pannon Egyetem három diákjának szakdolgozat-írását. Az RMKI SzHK Beszéd- és Rehabilitáció-technológiai Osztály tagjai az év folyamán a MOST-ról beszámoltak a vakok szervezeténél, az Üzleti Angyal Klubban, de a Duna TV Heuréka magazinjában és az MTV1-en is.

Egyéb bemutatható eredmények

A NASA a tudományos sikerhez nyújtott kiemelkedő hozzájárulásért kitüntetésben részesítette a Cassini űrszonda Plazma Spektrométer kutatócsoportjának tagjait, köztük öt RMKI kutatót.

Az LHC gyorsító újraindítását kísérő médiaérdeklődést kielégítendő, a közvélemény tájékoztatása és az események értelmezése érdekében az RMKI vezető kutatói jelentős közszereplést (közszolgálati és kereskedelmi rádió és TV csatornák, internetes fórumok, ismeretterjesztő előadások) vállaltak. A kedvező visszhang jelezte, hogy ezzel a tevékenységgel egyrészt a tudományos célkitűzések közérthetőbbé váltak, másrészt az intézet és a hazai természettudományos kutatás ismertsége és elismertsége is érezhetően nőtt.

Sorozatban kilencedszer rendezték meg a „Zimányi Winter School on Heavy Ion Physics” nehézionfizikai iskolát, mely mostanra (rendszeresen mintegy 50 résztvevővel és 40 előadással) a kutatási terület fontos rendezvényévé vált.

Ismét – immár hatodszor – megrendezték 30 európai és tengerentúli ország 70 kutatóintézetével és egyetemével közösen, középiskolás diákok számára az egész napos videokonferenciás „Részecskefizikai mesterkurzust”, melyen évente 10-10 budapesti középiskola mintegy két tucat diákja vesz részt.

Nagy érdeklődésre tartottak számot a Simonyi Nap – melyet 2009-ben ötödik alkalommal tartottak meg – előadásai, melyeket az RMKI kutatói tartanak eredményeikről közérthető nyelven az intézet minden dolgozója és a szélesebb közönség számára is.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az RMKI szakmai kapcsolata számos MTA kutatóintézettel hagyományosan igen aktív, elsősorban a KFKI Telephelyen található kutatóintézetekkel és az ATOMKI-val. A telephelyi összefogást jól jelzi, hogy az RMKI tagja az SZFKI, AEKI, MFA és RMKI alkotta KFKI Condensed Matter Research Center-nek (CMRC) és az AEKI, IKI, RMKI és SZFKI alkotta Budapesti Neutron Központnak (BNC) is. A hagyományosan erős ATOMKI kapcsolatokat a

nagyenergiájú fizika területén közös pályázatok, a hazai ionnyaláb-fizikai berendezések hatékonyabb működtetése, kihasználása és fejlesztése céljából létrehozott „Magyar ionnyaláb-fizikai platform” (Hungarian Ion-beam Physics Platform, HIPP, http://hipp.atomki.hu/) és a European Centre for Theoretical Studies in Nuclear Physics and Related Areas (ECT, Trento, Olaszország) tevékenységében való együttes részvétel céljából megalakított „ECT-Hungary” konzorcium fémjelzik. Az RMKI aktív munkakapcsolatokat tart fenn a KK, a SZTAKI, a Konkoly Thege Miklós Csillagászati KI és az SZBK kutatóival is. Az RMKI SzHK az NIIF program regionális központja, az SzHK két munkatársa az NIIF egy-egy bizottságának tagja. Az RMKI tagja a Magyar Grid Kompetencia Központnak is (további tagok a BME, ELTE, NIIFI és a SZTAKI).

Az RMKI látja el a széles magyar tudományosság számára elérhető Nemzetközi Elméleti Fizikai Műhely (NEFIM), a Szinkrotron Bizottság és a Dubna Bizottság – melyek mindegyikének az intézet egy munkatársa az elnöke – adminisztratív és pénzügyi feladatait is.

Az RMKI nagy fontosságot tulajdonít az egyetemekhez fűződő szoros kapcsolatoknak, az oktatómunkát intézeti munkaköri feladatnak ismeri el. 2009-ben az RMKI 40 munkatársa tartott kötelező és speciális előadásokat, vezetett gyakorlatokat az ELTE, a BME, a Pécsi Tudományegyetem, a Szegedi Tudományegyetem, a Debreceni Egyetem, a Szent István Egyetem, a Közép-európai Egyetem és a Budapest School of Cognitive Sciences tanszékein, és a felsorolt egyetemekkel érdemi kutatási együttműködés is folyt. Az RMKI munkatársai több külföldi felsőoktatási intézményben is tartottak előadásokat. Munkatársaik elsősorban a magfizika, a részecskefizika, a gravitációelmélet, a relativitáselmélet, a térelmélet és a kvantummechanika témakörében folytattak oktatási tevékenységet, de a hagyományokat folytatva az ELTE Természettudományi Karán megtartották a „Nukleáris szilárdtestfizika” (I és II) című speciális előadásokat is, részt vettek az „Nanoszerkezetek alakítása és minősítése foton-, ionnyaláb- és magfizikai módszerekkel” című ERASMUS iskola szervezésében (2009. május, Bonn-Bad Honnef, Németország) és az iskolát akkreditálták az ELTE Fizika Doktori Iskolájába, továbbá emelt szintű hallgatói laboratóriumi gyakorlatokat vezettek a témájában. Ugyancsak részt vettek a BME mérnök-fizikus hallgatóinak szóló „Vizsgálati módszerek az anyagtudományban” című speciális kollégium és gyakorlat megtartásában a nukleáris analitikai módszerek és a Mössbauer-spektroszkópia ismertetésével. Számítógépes idegrendszer-modellezés kurzust tartottak az ELTE TTK-n, ill. Computational Neuroscience kurzust a Budapest School of Cognitive Sciences-en. Fizikát oktattak a Szabadkai Műszaki Főiskolán. A Szent István Egyetem Állatorvostudományi Karán a kötelező Biofizika tárgyat az intézet kutatója tartja magyar és angol nyelven. Az RMKI rendszeresen fogadja az ELTE fizikus és biofizikus hallgatóit, valamint a BME mérnök-, illetve mérnök-fizikus hallgatóit is a tanrendben előírt emelt szintű Mössbauer-spektroszkópiai és energiadiszperzív röntgenfluoreszcencia laboratóriumi gyakorlatok végzésére, témákat és témavezetést biztosít tudományos diákköri dolgozatok és 17 egyetemi szakdolgozat készítéséhez. Jelenleg 23 PhD értekezés készül RMKI-s témavezető irányításával. Az ELTE, a BME és a Szegedi Tudományegyetem érdekelt Doktori Iskoláival aláírt együttműködési megállapodások alapján az RMKI számos vezető kutatója alapító, illetve törzstagja és oktatója ezeknek az iskoláknak, s a tanterv kialakításában is aktív szerepet játszanak.

Az RMKI-ban szinte valamennyi kutatás nemzetközi együttműködések keretében folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez, az ESA-hoz és az EURATOM-hoz kapcsolódnak, de az RMKI a koordinátora a Brookhaveni Nemzeti Laboratórium (USA) Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjénél (RHIC) az ELTE és a Debreceni Egyetem részvételével működő PHENIX-

MAGYARORSZÁG kísérleti együttműködésnek is. Kutatóik aktív részvételével az elkövetkező években is fontos eredmények várhatók a kvark-gluon plazma előállítását megcélzó PHENIX (RHIC, USA) és az ALICE, TOTEM (LHC, Svájc) nagyenergiás magfizikai kísérletekben, itt külön kiemelendő az a tény, hogy a QCD munkacsoport társ-koordinátorának két évre az RMKI kutatóját választották meg. Továbbra is fontos szerepet játszottak a neutrinó tömegét mérő KATRIN (Németország) részecskefizikai kísérletben, valamint folytatódtak a csatlakozási előkészületek a GSI/FAIR közepes energiájú magfizikai kísérletekhez is. Az RMKI kutatói 2009-ben már aktívan részt vettek a gravitációs hullámokat mérő VIRGO (Olaszország) kísérletben, melyhez az intézet a közelmúltban csatlakozott. Egyre fontosabb szerepet kap a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellarátorok) mellett, vagy azok létrehozására irányuló (pl. ITER, ELI) kutatás. Igen jelentős szerepet játszik az a nagyszámú egyéb kutatóhely is, melyekkel bilaterális vagy multilaterális kapcsolatokon keresztül folyik együttműködés. Közös kutatások a nukleáris anyagtudományban és az űrfizikában mintegy 35, részecskefizikában százat is meghaladó külföldi intézettel folynak, melyek között a megfelelő szakterület legnevesebb intézményei szerepelnek, felsorolásuk messze meghaladná a beszámoló kereteit. Ezen túlmenően azonban az eredményekben nagy szerepe volt az MTA bilaterális kapcsolatain alapuló megállapodásoknak, a TÉT együttműködéseknek, valamint az MTA–EAI (Dubna) projekteknek is, ezek megújítása az intézet prioritásai között szereplő feladat. Az RMKI a magyar fúziós programot az Euratom Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálja, s a többi magyar intézmény (KFKI AEKI, Széchenyi Egyetem, ATOMKI, BME, ELTE, Dunaújvárosi Főiskola) az RMKI közvetítésével vesz részt ebben a munkában. Ezen a területen az RMKI kutatói számos nemzetközi bizottságban tevékenykednek, s már a mostani fázisban bekapcsolódtak az ITER, a világ leendő első fúziós reaktora tervezési munkáiba. Fontos jele a nemzetközi elismertségnek, hogy a 2010-ben megrendezendő 31. ECLIM konferencia helyszínéül Magyarországot választották, a szervező bizottság elnöke az RMKI munkatársa.

Az RMKI kutatói működtetik a Cluster Magyar Adatközpontot, amely pálya- és egyéb kiegészítő adatokat szolgáltat az ESA (Európai Űrügynökség) négy, azonos műszerezettségű Cluster műholdjának tudományos adatrendszerébe.

A biofizika (számítógépes agytudomány) területén eredményes nemzetközi pályázatok alapján folytatódik az aktív, professzor- és hallgatócserét is magában foglaló együttműködés a Kalamazoo College (Michigan University, USA) kutatóival, de kiemelendők még a Brandeis University, Waltham, MA, USA és a Univeristy of Cambridge, UK kutatóival folytatott kutatások is. Kutatási együttműködési szerződést kötöttek a Pfizer gyógyszergyárral, amelynek keretében elektrofiziológiai mérési adatokat kapnak tudományos elemzési céllal.

Az RMKI számos munkatársa tisztségviselője vagy tagja különféle akadémiai bizottságoknak és testületeknek, NKTH-bizottságoknak, az Eötvös Loránd Fizikai Társulatnak, a Bolyai Kuratórium szakmai bizottságának, a hazai űrkutatás irányító testületeinek (Magyar Űrkutatási Tanács, Űrkutatási Tudományos Tanács), a MTESZ tudományos egyesületeinek, Tagjai több állandó tudományos és társadalmi bizottságnak, és számos területen aktív résztvevői a nemzetközi tudományos közéletnek is. Azon hosszú távú feladattal rendelkező testületek közül, melyekben az RMKI kutatói képviselik a magyar érdekeket, a legfontosabbak a CERN Tanácsa és bizottságai, az EURATOM Scientific and Technical Committee, EFDA Science and Technology Advisory Committee (vice-chair), a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) szakértői bizottságai, Joint Undertaking for ITER

Governing Board, EFDA Steering Committee, az Európai Fizikai Társulat (EPS), International Astronautical Academy (Board of Trustees, International Space Science Committee), COSPAR, European Science Forum on Research Infrastructures, az Európai Bizottság mellett működő FP7 Research Infrastructures programbizottság, a IUPAP, COST DC MPNS (Domain Committee for Materials, Physcial and Nanosciences), COST TDP SAB (Trans-Domain Proposals Standing Assesment Body), ESF Standing Committee for Physics and Engineering (PESC) és NUPECC, ESF Member Forum on Science Careers, European Neural Network Society Executive Committee, EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication), a Linux kernel netfilter/iptables komponensének fejlesztését végző nemzetközi munkacsoport.

Az Európai Unió 2009-ben meghozott döntése alapján Magyarországra kerül a jövő lézerfizikájában domináns szerepet betöltő új nagyberendezés és kutatóközpont (ELI). Az alakuló magyar konzorciumban az RMKI kutatói az első pillanattól fogva jelen vannak, a most induló pályázatok előkészítése megkezdődött.

Az RMKI számos munkatársa nemzetközi folyóiratok referense, több kutatója tagja nemzetközi folyóiratok szerkesztő bizottságának, nemzetközi konferenciák tanácsadó vagy programbizottságának, külföldi kutatóintézetek tudományos tanácsának és referensi bizottságainak. Az RMKI kutatóinak elismertségét nemcsak a nekik érkező számos konferencia-előadásra szóló meghívás jelzi, hanem a rangos nemzetközi bíráló-bizottsági részvételre (pl. ERC Advanced Grant Evaluational Panel, ERC Starting Grant remote evaluation, COST Proposal Evaluational Board, CNRS, stb.) szóló ismételt felkérések is.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatások anyagi feltételeit az MTA alapellátmányán kívül az EU FP6-FP7, OTKA, NKTH pályázatok, EURATOM projektek, valamint az MTA-NSF, MTA-DFG, MTA-Dubna, NKTH TéT bilaterális együttműködések által nyújtott támogatások biztosították.

Az RMKI egyik 2009-ben indult pályázati témája a NAP-VENEUS-08 (NKTH) projekt volt, melynek keretében a Budapesti Kutatóreaktornál megvalósították - magyar vállalatok nagy összegű beszállítását is biztosító - saját polarizált neutron reflektométer felépítését és próbaüzem-módjának megindítását. Ezen (az FP7 Access program keretében elérhető) berendezés a régióban egyedülálló. A NAP-VENEUS projektnek a neutronszórási berendezések technológiájával kapcsolatos eredményei (szupertükrök, illetve gázdetektorok izotópdúsított mérőgázának újrahasznosítása) elsősorban a Mirrotron Kft tevékenységében, azzal megbízásos alapon hasznosítható innovációk. A projekt financiális támogatásával kifejlesztettek egy, a világon egyedülálló, a mérési adatokat szimultán illesztő kiértékelő programrendszert. A projekt 2009-ben 2 emberévnyi új foglalkoztatást finanszírozott.

A CERN-ben folyó kutatómunka jelentős támogatást nyert a sikeres NKTH-OTKA Mobility Grant pályázatokból. Hasonlóan fontosak az európai nagyberendezéseknél (szinkrotron, ill. neutronforrás) elnyert nyalábidő-pályázatok.

A plazmafizikai kutatások súlypontját az EURATOM együttműködések és az ITER fejlesztésében való részvétel jelentik, itt az eddigi sikeres pályázatok folytatása hosszú távú folytatást garantál.

Az űrfizika-űrtechnika területén sikeres OTKA-pályázaton kívül a Magyar Űrkutatási Iroda nyújt pályázati támogatást, valamint öt ESA PECS (Program for European Cooperating States) szerződésük volt, ez utóbbiak a Rosetta, a Cluster, a Venus Express és a Bepi Colombo űrprogramokkal kapcsolatosak. Mivel Magyarország nem tagja az Európai Űrügynökségnek (European Space Agency, ESA), az ESA programokban való magyar részvételt a PECS keretében támogatja a magyar állam.

Folytatták az ICEA: Integrating Cognition Emotion and Autonomy (IST-4-027819-IP) című EU-s pályázat keretében megkezdett munkájukat, melyet az éves beszámolón ismét dicséretben részesítettek. A Magyar Ösztöndíj Bizottság pályázatán fiatal munkatársuk elnyert egy Magyar Állami Eötvös ösztöndíjat (University of Cambridge, Anglia), melynek segítségével a neves egyetemen az emberi szemmozgások tervezését tanulmányozta.

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

1. Abbiendi G, Ainsley C, Akesson PF, Alexander G, Anagnostou G, Anderson KJ, et al., (210 authors included: Csilling Á, Hajdú C, Horváth D): Sigma(-)-antihyperon correlations in Z(0) decay and investigation of the baryon production mechanism, EUR PHYS J C 64: (4)*609-625* (2009)
2. Afanasiev S, Aidala C, Ajitanand NN, Akiba Y, Alexander J, Al-Jamel A, et al., (345 authors included: Csörgő T, Ster A, Sziklai J, Zimányi J): Charged Kaon Interferometric Probes of Space-Time Evolution in Au plus Au Collisions at s(NN)=200 GeV, Phys Rev Lett 103**: (**14) (2009)
3. Anticic T, Baatar B, Barna D, Bartke J, Betev L, Bialkowska H, et al., (93 authors included: Csató P, Fodor Z, Hegyi S, László A, Lévai P, Molnár J, Palla G, Siklér F, Szentpétery I, Sziklai J, Varga D, Veres GI, Vesztergombi G,): Energy dependence of transverse momentum fluctuations in Pb plus Pb collisions at the Cern Super Proton Synchrotron (SPS) at 20A to 158A GeV, Phys Rev C 79: (4) (2009)
4. Balog J, Niedermayer F, Weisz P: Logarithmic corrections to O(a(2)) lattice artifacts, Phys Lett B 676**:** (4-5)*188-192* (2009)
5. Bíró TS, Ürmössy K: Transverse hadron spectra from a stringy quark matter, J Phys G Nucl Partic 36**:** (6)*064044* (2009)
6. de Groot F, Vankó G, Glatzel P: The 1s x-ray absorption pre-edge structures in transition metal oxides, J Phys Condens Mat 21: (10)*104207* (2009)
7. Diósi L: Quantum linear Boltzmann equation with finite intercollision time, Phys Rev A 80**:** (6)*064104* (2009)
8. Djotyan GP, Sándor N, Bakos JS, Sörlei Z: Optical phase information writing and storage in populations of metastable quantum states J Opt Soc Am B 26: (10)*1959-1966* (2009)
9. Facskó G, Németh Z, Erdős G, Kis A, Dandouras I: A global study of hot flow anomalies using Cluster multi-spacecraft measurements, Ann Geophys-Germany 27**:** (5)*2057-2076* (2009)

10. Fodor Gy, Forgács P, Horváth Z, Mezei M: Oscillons in dilaton-scalar theories, J High Energy Phys : (8) (2009)
11. Forgács P, Lukács Á: Instabilities of twisted strings, J High Energy Phys : (12)*064* (2009)
12. Hegyi S: Simple Observations Concerning Black Holes And Probability, Int J Mod Phys D 18: (14)*2269-2273* (2009)
13. Huhn Z, Somogyvári Z, Kiss T, Érdi P: Distance coding strategies based on the entorhinal grid cell system, Neural Networks 22**:** (5-6)*536-543* (2009)
14. Lévai P, Skokov VV: Strange and charm quark-pair production in strong non-Abelian field, J Phys G Nucl Partic 36: (6) (2009)
15. Majár J: Spin-spin interaction in the spin-precession equations, Phys Rev D Part Fields Grav Cosm 80: (10) (2009)
16. Saad A, Fedotova J, Nechaj J, Szilágyi E, Marszalek M: Tuning of magnetic properties and structure of granular FeCoZr-Al2O3 nanocomposites by oxygen incorporation, J Alloy Compd 471**:** (1-2)*357-363* (2009)
17. Smith HM, Fehér T, Fülöp T, Gál K, Verwichte E: Runaway electron generation in tokamak disruptions, Plasma Phys Contr F 51: (12) (2009)
18. Szabados LB: Towards the quasi-localization of canonical general relativity, Classical Quant Grav 26**:** (12)*125013* (2009)
19. Szegő K, Bebesi Z, Dobe Z, Franz M, Fedorov A, Barabash S, et al. (8 authors): O+ ion flow below the magnetic barrier at Venus post terminator, J Geophys Res 114: (2009)
20. Szepesi T, Kálvin S, Kocsis G, Lackner K, Lang PT, Maraschek M, et al. (8 authors): Investigation of pellet-driven magnetic perturbations in different tokamak scenarios, Plasma Phys Contr F 51: (12) (2009)
21. Szőkefalvi-Nagy Z, Kocsonya A, Kovács I, Hopff D, Lüthje S, Niecke M: High resolution imaging and elemental analysis of PAGE electrophoretograms by scanning proton microprobe, Nucl Instrum Meth B 267**:** (12-13)*2163-2166* (2009)
22. Ujfalussy B, Kiss T, Érdi P: Parallel Computational Subunits in Dentate Granule Cells Generate Multiple Place Fields, Plos Comput Biol 5: (9)*e1000500* (2009)
23. Ván P: Generic stability of dissipative non-relativistic and relativistic fluids, J Stat Mech-Theor E : (2009)
24. Vértesi R, Csörgő T, Sziklai J: Significant in-medium eta ' mass reduction in root s(NN)=200 GeV Au+Au collisions, Nucl Phys A 830**:** (1-4)*631C-632C* (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	211		Ebből kutató[2]:		121
PhD, kandidátus:	59	MTA doktora: 24	levelező tag: 0	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					45
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					201
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					187
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		121
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1		idegen nyelven:		57
összesített impakt faktor[6]:	332,056		összes hivatkozás száma[7]:		4057
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					2136
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 1		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	3	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 2		MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	103	poszterek száma[12]:			54
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					10
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	24	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			11
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					26
TDK munkát készítő hallgatók száma:	17	Diplomamunkát (BSc):			5
Diplomamunkát (MSc):	12	PhD-t:			23
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					682
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				921,78	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	13	Teljes saját bevétel[18]:		535,37	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				79,64	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				26,852	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				208,60	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				69,88	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				150,39	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

Bár a beszámolási időszak talán az eddigi legkritikusabb gazdasági év volt hazánkban, és a bürokrácia már-már elviselhetetlen szintre nőtt, 2009-ben az MTA MFA ismét fennállása óta legsikeresebb évét zárta.

Az MFA kísérletes kutatóintézet, azaz az intézet mintegy 5000m^2-nyi területének több mint felét nagy értékű kutató-laboratóriumok teszik ki, beleértve több tiszta-laboratóriumot (mikroelektronikai és PV kutatás) és szűrt levegőjű laborokat (nanopreparáció és analitika, valamint bio-fotonika területén). Az infrastruktúra működtetése és megújítása lassan elviselhetetlen terhet ró az intézetre. Az alapfeladatok ellátásához szükséges működési költségek és a csökkenő központi támogatás különbsége meghaladja a 200 MFt-ot! A helyzet kritikus, az infrastruktúra fenntartása és működtetése a kiváló 53 fős műszaki-kutatástámogató személyzettel csak a pályázatok terhére folytatható. Az akadozó hazai kutatásfinanszírozás helyzetében ez lassan illuzórikussá válik.

2009-ben változatlan szervezeti felállásban, hat tudományos osztályos szerkezetben működött az intézet. A vezető funkciókban csak szülési szabadság miatt történt egy változás. A választott négy fő kutatási iránnyal, (vékonyréteg, nanotechnológia, fotonika és mikrotechnológia) öt éve meghatározott stratégia, a multidiszciplináris kutatási irány mindenképpen követendőnek, és sikeresnek bizonyult. Az MFA eredményei a tudománymetriai mutatókon túl a benyújtott szabadalmakban, PhD képzési és egyéb oktatási támogatásban, a tudományos eredmények ipari hasznosításában, tanácsadásban komplex módon testesülnek meg.

A 2009-ben elnyertekkel együtt kilenc EU FP7-es pályázatuk fut, és a 2008-ban elnyert ENIAC JTI pályázatuk mellé a 2. fordulóban egy újabb ENIAC JTI pályázatot nyertek tetemes NKTH támogatással. Az év folyamán két PhD fokozattal és egy MTA Dr.-i címmel sikerült szakmailag erősödniük. Jelenleg nyolc posztdoktoruk dolgozik vezető intézményekben külföldön.

Az utánpótlás biztosítására 2009-ben is új intézményi együttműködéseket, közös labort kezdeményeztek a BME VBMK (kémiai nanostruktúrák), a PE MIK (nanoszenzorika) kutatóival. Ismét megszervezték a nagysikerű középiskolás nyári tábort „Tanuljunk egymástól!” címmel, melyen a Kárpát-medence magyar nyelvű középiskoláiból 20 diák vett részt. Az MTA elnöke felkérésére részt vettek az Arany János Gimnáziumban három demonstrációs szaktanterem tervezésében és az átalakítás műszaki vezetésében. Több mint 100 érdeklődő látogatóval a Tudomány Napi ünnepségek keretében intézeti nyílt napot tartottak.

Központi források híján jobbára saját, pályázati forrásból történő beruházásokkal folytatták a munkakörülmények javítását. A TFSolar NKFP projekt keretében új tiszta-labort alakítottak ki különleges infrastrukturális követelményekkel (klíma, zártkörű hűtés, gázellátás) szilícium vékonyréteg napelemtechnológia kutatás-fejlesztésére. Hat új labor, öt dolgozószoba, kialakításával és a 29/A technológiai épület-komplexum beléptetésének és folyosójának

rendbetételével nagyot léptek előre. Újra sikerült a különböző címeken elnyert MTA elnöki keret-támogatással több műszerfejlesztést végrehajtaniuk. Pályázati forrásokból új beszerzés egyebek közt a Picosun Oy finn céggel együttműködve megépített Atomic Layer Deposition rendszer (35 MFt), a nemzetközi tendereztetéssel beszerzés alatt álló Oxford Instruments Deep RIE berendezés (116 MFt). Az év eredménye az új tribologiai tesztlabor kialakítása (17MFt), és néhány apróbb műszer (mikroszkópok, mérőkészülékek) beszerzése is. Ezekkel a fejlesztésekkel tartható fenn pályázóképességük az új tématerületeken. Jól működött az ISO minőségbiztosítási rendszer, elkezdték az ellipszometriai laboratórium akkreditációját is.

Javult az intézet PR munkája, az év folyamán az MFA és az általa második éve irányított Integrált Mikro/nanoelektrionikai Nemzeti Technológiai Platform (IMNTP (www.imntp.hu)) irodája tíz sajtókommünikét adott ki, kollégáik több mint 25 alkalommal szerepeltek ismeretterjesztő és tájékoztató műsorokban, interjúkban az elektronikus és nyomtatott médiában, köztük több alkalommal az MTA honlapján is.

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

A kutatás 2009-ben is 6 osztályvezető irányításával, önálló témagazdálkodású kutatócsoport ill. laboratórium kereteiben folyt, *a beszámoló követi a szervezeti sémát.*

Nanoszerkezetek Osztály (12 fő, 11 kutató (ebből 6 PhD hallgató), kvt.: 27MFt, szt.:71 MFt)

Az osztály tudományos tevékenységének fókuszában a szén nanoszerkezetek kutatása, a természetes fotonikus kristályok vizsgálata és a bioinspirált mesterséges fotonikus nanoszerkezetek előállítása áll nem konvencionális litográfiás módszerekkel.

A szén nanoszerkezetek és szén alapú kompozitok témakörében elért eredményeik:

- Megvalósították az *atomi felbontású, krisztallográfiailag szelektív grafén litográfiát* STM segítségével.
- Grafén és O_2 termikus reakciójában (700^{o}C) *hexagonális piteket martak a grafén rétegbe* amivel sikerült cikk-cakk szerkezetű grafén-szalagokat és komplex szerkezeteket kialakítaniuk.
- *Sikeresen állítottak elő grafént CVD-vel* különböző, pl. Ni, hordozón ethanolból és részletesen vizsgálták a leválasztási paraméterek hatását néhány atomi rétegnyi grafit növesztésénél.
- *Modellezték az alagutazási és töltésterjedési effektusokat* komplex grafén- és szén nanocső-szerkezeteken.
- *Kémiailag funkcionalizált szén nanocső* szerkezeteket vizsgáltak. Gázérzékelési kísérleteket végeztek CNT szenzorokkal. Egyfalú szén nanocső-kötegek elektromos vezetőképességét mérve sikeresen demonstrálták különböző *gázok, gőzök* (pl, aceton) *detektálását.*
- Elektronsugaras litográfiával *kontaktáltak grafént és egyfalú szén nanocsövet*, melyeken elektromos vezetést mértek.

Természetes eredetű fotonikus kristályok és más optikailag aktív nanoszerkezetek terén az évben elért új eredmények:

– *Biológiai eredetű fotonikus kristályok nano- és mikro szerkezetét* vizsgálták, főleg lepkeszárnyakon és más, szerkezeti színnel rendelkező bogarakon.
– A taiwani Trigonophorus rothschildi bogár szerkezeti színét vizsgálva megállapították, hogy az egy *multiréteg szerkezetből adódik*, amelyet véletlenszerű eloszlású, henger alakú lyukak szelnek át a felületükre merőlegesen.
– A biológiából tanult elvek alapján *mesterséges fotonikus kristályokat konstruáltak*, multiréteg szerkezetekbe szubmikronos lyukakat fúrva fotonikus szerkezetek létrehozniuk. Eredményeiket a *J. R. Soc. Interface*-ben közölték, amelyek a BBC figyelmét is felkeltették.
– Mérési összeállítást terveztek és építettek a *lepkeszárnyak optikai reflexiójának mérésére*. Ennek során megállapították az egyes lepkefajok *egyértelmű azonosítására* is használható színkódokat.
– A lepkék pikkelyei levegőből és kitinből felépülő fotonikus nanoarchitektúrák. A helyi rend tanulmányozására egy *direkt tér algoritmust dolgoztak ki*. A módszer működését három különböző lepkeszárnyon (hosszú, közép és rövid távú renddel bíró) demonstrálták.
– Biológiai eredetű fotonikus kristályokból *kémiailag szelektív gáz érzékelőt* konstruáltak.
– *Új fotonikus nanoszerkezeteket* hoztak létre egy és kétdimenziós szerkezetekből, önszerveződő folyamattal alakítottak ki opál szerkezetű kristályokat.
– FIB nanomegmunkálás során megvizsgálták számos fizikai parameter hatását a marási sebességre; *FIB és kémiai reakció kombinációjával 3D nanolitográfiát* fejlesztettek ki.
– Ion- és elektron-nyalábbal segített rétegleválasztással készített anyagokat vizsgáltak; különböző *fém kontaktusokat vizsgáltak HOPG-n és grafénen*.

Komplex Rendszerek Osztály (9 fő, 7 kutató, kvt.: 40 MFt, szt.: 16 MFt)

Az osztály feladata kettős: komplex rendszerek kutatása a statisztikus fizika felhasználásával evolúciós játékelméleti modellekben, nemegyensúlyi rendszerekben, önszervező mintázatok kialakulásában és a népdalkincs szerkezeti analízisében, valamint a kép- és jelfeldolgozás multidiszciplináris alkalmazásainak fejlesztése. Fontosabb új eredményeik:

– *Orientált dimerek irányított rács modelljét* alkották meg a felületi növekedési folyamatok leírására együttműködve a Forschungszentrum, Rossendorf kutatóival.
– Tanulmányozták az *abszorbeáló állapotba történő fázisátalakulás* fő tulajdonságait olyan egydimenziós rendszerekben, ahol részecskehármasok hoznak létre új részecskéket.
– *Evolúciós játékelméleti modellekben* kutattak számos társadalmi dilemmát. A játékosok egy rácson (vagy gráfon) helyezkednek el, egyéni nyereményük a szomszédoktól származik, és annak mértéke attól függ, hogy *együttműködő vagy élősködő stratégiákat* követnek. Az evolúciós játékelmélet játékosai dinamikus szabályok szerint változtathatják stratégiájukat (például utánozva egy sikeresebb szomszédukat).
– Tanulmányozták azt az esetet is, amikor a játékosok *stratégia-átvételi hatékonysága* különböző. A befolyásos játékosok mozgása növelheti az együttműködők gyakoriságát még akkor is, ha ők maguk kis sűrűségben fordulnak elő a kétdimenziós rácson.
– *A tekintély fejlődése* (a sikeres tanítás vagy meggyőzés útján) bizonyult egy másik olyan lehetőségnek, amely támogathatja az együttműködés kialakulását az önző játékosok társadalmában is. Az együttműködés kialakulását támogató újabb lehetőség, ha a játékosok nem csak a stratégiát, hanem annak átvételi módját is megtanulhatják a sikeresebb társuktól.

- Egy ilyen *koevolúciós játék* során a rendszer olyan optimális állapot közelébe fejlődhet, amely legmagasabb szinten tartja fenn az együttműködést az adott körülmények (nyeremény, kapcsolatrendszer, stb.) mellett.
- A koevolúciós játékok vizsgálata megerősítette azt a korábbi elképzelést, *hogy a darwini kiválasztást magukra a modellekre is alkalmazhatják.* Régóta ismert, hogy a tisztességes magatartást a büntetés vagy büntetéstől való félelem tartja fenn. A sokszereplős társadalmi modellek számszerű vizsgálata azt mutatta, hogy ennek hatékonysága erősen függ a körülményektől, mint például a büntetés kezdeményezésének valószínűségétől, annak költségétől és az élősködő megbüntetésének mértékétől.
- Újabban olyan modelleket is vizsgálnak, ahol a játékosok egy *kis közösség* (család, munkatársak, baráti kör) érdekeit helyezik előtérbe a viselkedés meghatározásánál. Ezek a modellek természetesen segítik a közösségi tragédia elkerülését – amikor mindenki a másikon próbál élősködni –, de ennek módja erősen függ a játék nyereményeitől illetve a kapcsolatrendszertől és stratégiaválasztás módjától. Ezek a modellek világosan jelezték a térbeli modelleknél a szerepek szétválásának megjelenését, amit *munkamegosztás*ként is értelmezhetünk.
- Új számítógépes algoritmust fejlesztettek *népzenei dallamok jellegzetességeinek azonosítására*. Ez a módszer egy lényegkiemelő algoritmuson alapul, ami felismeri a dallamok tipikus ismétlődő elemeit, és ennek alapján kínál új lehetőséget a különböző népek népdalainak összehasonlító elemzésére.
  - Ezzel a rendszerrel *22 nép zenei kultúrájának tipikus motívumait határozták meg*. Az egybeesések elemzése számszerűsítve adja meg számunkra népcsoport közötti kapcsolatok erősségét, amelyek jó egyezést mutatnak a földrajzi eloszlásokkal (és a történelemmel).
  - Megkezdték a módszer alkalmazásának *kiterjesztését a nyelvek közti kapcsolatok számszerű elemzésére* is.

Az osztály mérnökei a *VIRGINIA képfeldolgozási rendszer algoritmusait* fejlesztették tovább, amelyekkel például a kerámiák porozitását mérhetik. A módszert sikerrel alkalmazzák a Paksi Atomerőmű primer körében használt szűrőpapírok ellenőrzésére szolgáló kvantitatív mikroszkóp továbbfejlesztésénél.

Vékonyréteg-fizika Osztály (23 fő, 18 kutató (ebből 5 PhD hallgató)kvt.: 70 MFt, szt.: 218 MFt)

Az osztály feladatai három, összefüggő csoportba sorolhatók: modell rendszereken derítik fel a fém, félvezető és szigetelő vékony-, és nano-rétegekben, nanokompozitokban lejátszódó szerkezetépítő folyamatokat; elektronszóródási, spektroszkópiai, diffrakció- és ionos keveredési alapkutatásokat művelnek; ipari alkalmazást ígérő kutatásokat folytatnak a kemény, súrlódáscsökkentő bevonatok, a fém nanorészecskék és nanokompozitok, félvezető eszközök és kontaktusok vizsgálatában.

- Az *FP6 INNOVATIAL projekt* keretében TiAlYN nanokompozitokban egy *új oszlopos szerkezetet tártak fel.* A nanokompozit a hcp-AlN és az fcc-TiN fázisok egymásra rétegeződésével jön létre a gyöngysorszerű, szálszerkezetű kristályok, a fázisok eltérő kontrasztja következtében. Feltárták, a HIPIMS (High Power Impulse Magnetron Sputtering) technológiával leválasztott, versengő növekedéssel kialakuló szemcséjű polikristályos TiN rétegek tribológiai paramétereinek a függését a kisülési áramtól.

- A *CORRAL FP7 projektben* különböző technikával (ALD, HIPIMS) acélra és alumíniumra leválasztott néhány 10 nm-es *korróziógátló rétegek* szerkezetét tanulmányozták.
- Az *FP6 FOREMOST projektben* szén-fém kompozit rétegeket hoztak létre (C-Co rétegrendszer). Fullerene-szerű szén nanoszerkezetek elektrondiffrakciójából és nanoklaszterek szimulált elektronszórásából *megállapították a porlasztott nanoszerkezetű rétegek rövidtávú rendjét* és nagyobb léptékű rétegfeltekeredését.
- Az *FP7 HIGH-EF projektben* a lézerrel kristályosított Si napelemek fejlesztéséhez a mag és az abszorber rétegekben a hibaszerkezetet (rétegződési hibák és ikerhatárok) tárták fel, és összehasonlították a különböző texturáló módszereket. A leválasztási és hőkezelési paraméterek optimalizálásával a homogén magképződés tartományát elkerülve sikerült a nagyméretű mag-kristályokon epitaxiálisan nagy kristályokat növeszteniük.
- A fenti projektben a szemcsék lokális elcsavarodásának a Kikuchi vonalak és azok metszéspontjai azonosításán alapuló detektálása szükségessé tette egy *új szoftver modul* megalkotását **a** *ProcessDiffraction* programjukba.
- A *RODSOL FP7-es projektben Au katalízissel növesztett Si nanoszálakat* tanulmányoztak, és igazolták, hogy a projektben kidolgozott ezüst szemcsékkel katalizált marási folyamat eredményeként visszamaradt szilícium szálak egykristályok.
- A *MORGAN FP7-es projektben* egyedülálló mintapreparációs ismereteiket használva gyémánt egykristályra MBE-vel növesztett *GaN rétegeket tanulmányoztak*. Megállapították, hogy három különböző orientációjú hordozóra növesztett rétegben is a (0001) irány merőleges a felületre. A GaN minden esetben egykristály és orientációját a gyémánthoz képest mindhárom esetben maghatározták. InAlN termikus oxidációja alkalmas arra, hogy oxigénben történő hőkezeléssel a nitrid réteg felületén oxid réteget kapjanak.
- Különféle *fém-szén nanokompozitok* közül a karbidot képző rendszerek (Ti-C, Ti-CNx) kopásálló, kemény réteget eredményeznek, míg a karbidot nem képző rendszerek (Ag) kis keménységet, kopást, ugyanakkor alacsony súrlódást mutatnak.
- Kétkomponensű rendszerekben tanulmányozták a *fázis szétválást*. Az Al-Sn és a Cu-O rendszereket összehasonlítva bemutatták, hogy önszerveződő módon milyen különböző morfológiájú rétegek jöhetnek létre. A Cu-Ag rendszerben megmutatták, hogy *a folyamat-indukálta szegregáció és a spinodális szétválás egyaránt fontos szerkezetépítő folyamat.* A folyamat részleteit leírták a létrejövő morfológiával együtt és azt összekapcsolták a réteg keménységével.
- GaN-hez elektromos kontaktusokat készítettek, melyek szerkezeti és elektromos jellemzését is elvégezték. Hőkezelt Ti/Au kontaktusban MAX fázist (Ti_2GaN) azonosítottak.
- *Molekuladinamikai számításokkal* írták le az ionbombázás hatására a felületen kialakuló barázdákat. Rámutattak, hogy az így tanulmányozott nemegyensúlyi folyamatok a kísérletileg megfigyelt nanoméretű felületi mintázatok kialakításának magyarázatát ígérik.
- A *METANANO (NKFP) projekt* keretében (nemesfém alapú innovatív termékek) meghatározták az ipari méretben (szolként és hordozóra leválasztva) gyárott nemesfém nanorészecskék méretét, szimulációval meghatározták az atomi felbontású képeket és vizsgálták a nanorészecskék stabilitását.
- *NTPCRASH (NKFP) projekt* keretében hagyományos és új gépkocsi anyagszerkezeteket, különösen szénszálakkal erősített műanyag szerkezeteket tanulmányoztak és meghatározták a súrlódási együtthatót és a kopást.

– Különféle nagyenergiájú ionokkal *implantált forsteritben* megmérték a nyomok átmérőjét. Ez az eredmény hozzájárult annak eldöntéséhez, hogy a *csillagközi térben* található jelentős mennyiségű kristályos szilikát (pl. forsterit) hogyan amorfizálódik.
– Au/SiO_2 *core/shell nano részecskéket* tanulmányoztak rácsfelbontású elektron-mikroszkópiával és ezzel hozzájárultak az előállításuk optimalizálásához. Ehhez felhasználták azt a rácsparaméterek mérésének kalibrációjához kidolgozott módszert, amely azon alapul, hogy az egyik oldalán a nanorészecskéket tartalmazó réz rostély hátoldalára referencia arany részecskéket párologtatnak.
– Az elektronspektroszkópia relatív mértékegységben kapott eredményeit a *rugalmatlan csúcs spektroszkópia* eredményeihez való illesztés segítségével abszolút egységekbe konvertálták.
– Auger mélységi profil *ab initio* szimulációja során megállapították, hogy a *határfelületek kiszélesedése az AES spektrumban* az ionbombázás keveredési hatásának köszönhető. A megfelelő fizikai paraméterekkel a szimuláció sikeresen adta vissza a bombázás előtti éles határfelületeket.
– Közepes energiájú (20 keV) Ni ionokkal bombáztak C/Ni rétegeket és az *ionbombázással segítették elő a Ni_3C réteg kialakulását* a tiszta szén és nikkel rétegek közt, éles átmenetekkel.
– Mikro RBS-sel, Auger mélységi analízissel és ellipszometriával vizsgálták azt a krátert, ami 20keV CF4 bombázás hatására alakult ki Si/Cr multirétegekben. A molekulával való bombázás ígéretesnek tűnik.

2009 során az osztályon *új tribológiai vizsgáló laboratórium*ot hoztak létre.

Mikrotechnológia Osztály (38 fő, 16 kutató (ebből 4 PhD hallgató), kvt.: 125 MFt, szt.: 522 MFt)

A legnagyobb létszámú osztály elsősorban a mintapreparáció és az eszközintegráció területén lát el MEMS és vékonyréteg napelem kutatás-fejlesztési feladatokat tekintélyes tisztaszobai infrastruktúra és technológiai háttér folyamatos működtetése mellett. Fontos feladatot lát el az oktatás támogatásában is. Az év folyamán indult új és futó legfontosabb kutatási projektek és eredményük:
– A *strukturális anyagok mechanikai és termikus tulajdonságainak vizsgálata* (OTKA pályázat) keretében tesztstruktúrákat, mikroméretű multi-réteg fűtőtest szerkezetet alkalmazva – modellszámítások és mérési eredmények kombinálásával határozták meg az egyes szerkezeti anyagok fizikai jellemezőit.
– A korábbi években *szénhidrogének detektálására kifejlesztett pellisztor* gyárthatóságának (Weszta-T Kft.) feltétele a hosszú távú stabilitás és megbízhatóság, amelynek kulcsa a katalizátor réteg megfelelő leválasztása.
– Felfüggesztett tartó mikroszerkezetek FEM szimulációs tervezése a *Casimir-effektus demonstrálására és mérésére ill. elektro-aktuálásra*, poli-szilícium alapú felületi mikromechanikai eljárással.
– *Forgó 3D egykristályos szilícium alkatrészek* előállítása a MEMS technológia és a PBW (Proton Beam Writing) technika megbízható illesztésével; a fellépő fizikai jelenségek elemzése és javított geometriai jellemzőkkel rendelkező turbina megvalósítása (OTKA pályázat).
– A komplex *3D szerkezetek degradációja ellen kopásálló* kemény, szilícium-nitrid, titán-nitrid bevonatot készítettek LPCVD és reaktív magnetronos porlasztás segítségével.

- Megkezdték a *Terahertzes forrás, érzékelő, és feldolgozó struktúrák* kutatását a membrán-technológia alkalmazásával spektrális képalkotáshoz (OTKA pályázat).
- Elektrosztatikus, mágneses és termikus aktuálási elvek használatát elemezték FEM végeselem szimulációval (deformáció, mozgatási sebesség, maradó feszültségek) és mikrofluidikában polimer technológiák alkalmazásával (PDMS, SU8) *termikusan vezérelhető szelepeket*
- valósítottak meg.
- Komplex geometriájú Si *tömbi mikrogépészeti elemek kémiai marás*i megmunkálásához:
  - anizotróp marószer alkalmazása nagy oldalarányú, merőleges falakkal rendelkező mikrofluidikai csatornarendszerekhez,
  - extrém alacsony érdességű felületeket eredményező polírozó marószer in-vitro agyi elektróda kialakításához,
  - kis görbületi sugarú geometriát eredményező marószer tapintásérzékelő szenzorok és szuperhidrofób felületek kialakítási technológiájához.
- *Bioanalitikai célú mikrofluidikai rendszerek*, mikrométeres karakterisztikus méretű csatornák, és szelepek, pumpák, stb. kutatása mind szilícium 3D megmunkálással, mind polimer technológiák alkalmazásával (PDMS, SU8).
- *Jelzésmentes fehérje-analízis kémiailag módosított, FIB-mart nanopórusokkal*, a transzport-moduláción alapuló erősítési tulajdonságok felhasználásával „egyetlen molekula" detektálási érzékenységgel (BME VBMK vezette OTKA pályázat).
- *NIR detektor eszközök* fejlesztése nanorészecskéket tartalmazó nyomdafesték azonosításában (K+F szerződés).
- *A vegyületfélvezető vékonyréteg napelemtechnológia (CIGS)* fejlesztésében az együttpárologtatási technika követelményeinek megfelelő források továbbfejlesztése és a rétegek utólagos szelenizációja folyt (OTKA pályázat).
- Az ENIAC-JTI SE2A pályázat keretében elkezdték járműbiztonsági célra *autóabroncsba szerelhető 3D erőmérőn alapuló szenzorok* kutatását.

A mikrotechnológiai tiszta-laboratórium infrastruktúrájának komoly fejlesztése valósult meg az új Si-vékonyréteg napelem technológiai CVD labor üzembeállításával (Budasolar Kft.) valamint a klíma és zártkörű hűtőrendszer rekonstrukciójával. Négy új labor és öt dolgozószoba kialakítása is megtörtént.

A tiszta-laborban üzembe állt kutatási célú technológiai berendezések, a *Süss Microtec kétoldalas maszkillesztőből, nanoimprinting-ből és egy szeletkötőből álló műszeregyüttes* 2009-ben nagyban bővítették a labor lehetőségeit.
- A nanoimprint technológia célja pár 10-100 nm-es ábrák kialakítása fotolitográfia nélkül, a *nyomóbélyegek* elkészítési technológiájának kidolgozása elektronsugaras litográfiával, illetve holografikus ábrakialakítással és szárazmarásokkal folyamatban van.
- A szeletkötő berendezéssel megvalósítottak egy *kapacitív nyomásmérő érzékelőt*.

A három dimenziós MEMS technológiának kulcseszköze a *mély reaktív ionmaró berendezés*, amellyel Si-ban a felületre merőleges falú struktúrák alakíthatók ki. Közbeszerzési eljárás során az Oxford Instruments PlasmaLab 100 típusú berendezés vásárlása megtörtént. A PICOSUN finn gyártóval együttműködve kifejlesztettek egy *atomi réteglevválasztó (ALD) berendezést*, amely a napelem projektekben is hasznosul.

Az év folyamán egy nemzetközi szabadalmat kaptak meg, és két új hazai bejelentést tettek.

Fotonika Osztály (20fő, 17 kutató, (ebből 3 PhD hallgató) kvt.: 68 MFt, szt.: 95 MFt)

Az osztály feladata roncsolásmentes vizsgálati módszerek kutatása és fejlesztése optikai (ellipszometria és Makyoh-topográfia), valamint mágneses (hiszterézis) elven, félvezető fotonikai szerkezetek és integrált optikai érzékelők, és jelzésmentes bioérzékelés kutatása optikai kiolvasással. Főbb kutatási projektek és eredmények 2009-ben:

- *A NANOMAGDYE FP7* Projekt: *"Orvosi célra alkalmazott nanoméretű mágneses részecskék detektálása"* keretében új kísérleti összeállításban 7 mm távolságból detektáltak mágneses nanorészecskéket diagnosztikai céllal, új mérőfejjel.
- Erőművi szerkezeti anyagok *degradációjának mágneses vizsgálata* (BME) és "Merőleges anizotrópiájú ötvözetfilmek és a mágneses szerkezet ionsugaras kialakítása" folyt OTKA pályázati támogatással.
- A *Makyoh topográfia* alkalmazása az *ANNA FP6* projekt, a *HYPHEN FP6* projekt és a *MORGAN FP7 projekt* keretében is sikerrel folyt, és az érzékenység növelését célzó metodikai fejlesztést egy OTKA pályázat is támogatta.
- Az *FP6 ANNA projektben* legfontosabb feladat az ellipszometria labor akkreditált laborrá fejlesztése volt, amivel egy pan-európai virtuális laboratórium részeként szolgáltatást tud nyújtani a félvezető K+F területén pályázó felhasználóknak.
- Sekély ionimplantált rétegek ellipszometriai vizsgálata folyt az *ICMET NKTH Jedlik projektben* 32nm-es generációjú mikroelektronikai technológiák integrált folyamatellenőrző mérőberendezéseinek kifejlesztése témában (Semilab)
- Elektromos és optikai elvű mérőkészülék család fejlesztése során *a PVMET NKTH Jedlik pályázatban* (Semilab) vékonyréteg napelemek gyártásközi és laboratóriumi minősítésére adaptálták a szélesszögű ellipszometriát.
- Hagyományos téma OTKA támogatással a *hullámvezetők és diffraktív optikai elemek* létrehozása ionimplantációval.
- Új OTKA pályázat keretében folyik a *nanoszemcsés szerkezetek* és vékonyrétegek ellipszometriai modellezése *bioszenzorikai* és (opto)elektronikai alkalmazásokhoz.
- Megépítettek és installáltak egy *Brewster-szög mikroszkópot* a Langmuir-Blodgett kád fölé, amely naplózza és rögzíti az ott lezajló felületi folyamatokat mikroellipszometriai lehetőséggel.
- Megtervezték a *szélesszögű ellipszométer* egy speciális változatát egy FhG IISB *cluster-tool* vákuumkamrára adaptálható kivitelben, valamint egy Toledo University (Idaho, US) vékonyréteg *napelemtechnológia-közi ellenőrzési* telepítés céljából.
- Folytatták a nagy pontosságú *interferometriás szenzor fejlesztését* a svájci Creoptix céggel együttműködésben, amivel negyedik tizedesben mutatkozó törésmutató-változás is érzékelhető (akár kéziműszer kivitelben!).
- *Kis molekulák bekötődését* vizsgálták az interferometriás módszerrel, és nagy érzékenységgel detektálták a folyamat teljes dinamikáját.
- Kiemelt témaként folyik a bioreceptorok immobilizálásával az optikai rezonanciák kutatása funkcionalizált fehérje elrendezésekben *jelölésmentes optikai érzékeléshez* OTKA posztdoktori és *Marie Curie ösztöndíj* támogatással.
- Vizsgálták a hidrogénes hőkezelés hatását *ultravékony porlasztott Si/Ge rétegszerkezetek* stabilitására.
- Makroszkopikus felületen alakítottak ki nanoszerkezeteket ion-swelling módszerrel Xe-ionimplantáció következtében, az ún. nano-Petri csészében immunglobulin spontán aggregációját érték el.

Az év során két hazai szabadalmi bejelentést tettek

2009-ben alakították ki és avatták fel a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karral közösen üzemeltetett Bioszenzorikai Laboratóriumot. A labor felszerelése folyamatban van.

Kerámiák és Nanokompozitok Osztály (17 fő, 13 kutató (ebből 3 PhD hallgató)kvt.: 67 MFt, szt.: 67 MFt)

Az osztály feladata a kiterjedt nano-preparációs és kerámia-technológiai lehetőségeket felhasználva új tulajdonságú szerkezetek, kompozitok léterehozatala és vizsgálata különös tekintettel a méreteffektusok nyújtotta lehetőségek kiaknázására.

- Svéd-magyar stratégiai kutatás-támogatással és OTKA pályázat keretében vizsgálták a *sziliciumnitrid kerámiák karbonnal* erősített (a nanofázis szén nanocső, korom, grafit ill. grafén) változatait a surlódási együtthatóra és az elektromos, termikus vezetésre.
- *Nano-hidroxiapatit* (nHAp) színtézisét végezték el természetes alapanyagokból (tojáshéj és tengeri kagyló), melyekből elektromos fonással nHAp-biopolimer hibrid-kompozitokat állítottak elő. Az anyagból készült implant in vivo kísérletekben is indukált sikeres csontosodást. (OTKA)
- Különböző előállítási módszerekkel eltérő nanoszerkezetű *volfrám oxid hidrátokat* állítottak elő, és „electrospinning”-gel kidolgozták a volfrámoxidot tartalmazó *polimer szálak előállítását* OTKA támogatással**.**
- Kolloidkémiai eljárással *monodiszperz nanoméretű Au-részecskéket* állítottak elő, majd ún *core-shell* eljárással szilika védőburkot hoztak létre a szemcsék kémiai és elektromos szigetelésére az optikai tulajdonságok megőrzése mellett.
- Nedves kémiai eljárással *vékony, hosszú,* egykristályos *ZnO szálakat* növesztettek porlasztott ZnO szubsztráton (OTKA pályázat) kompozit napelem ill. bioérzékelési céllal.
- A nedves kémiailag rendezetten növesztett *piezoelektromos* és egyben *félvezető cink-oxid* nanoszerkezetek a nano-elektromechanikai rendszerek (NEMS) alapanyagai, és fotonikus kristályok építőelemei (OTKA támogatással).
- Vertikálisan növesztett *ZnO egyedi nanorudakon áram-feszültség görbéket* regisztráltak adott AFM tű pozícióban, és elektronsugaras litográfiával készített elektromos kontaktusokkal.
- Megvalósították a 100 nm körüli vastagságú *TEM lamellák kivágását és tartóra szerelését* a LEO Cross-beam FIB berendezésben a megfelelő nanomanipulátor beszerzésével.
- Potenciális *fúziós reaktor-alkalmazások* céljára új típusú nanoporokat állítottak elő ausztenites és martenzites acél porokból különböző paraméterekkel AEKI együttműködésben.

2009-ben adták át a BME Vegyész- és Biomérnöki Karral közösen üzemeltetett Kémiai Nanoszerkezetek Laboratóriumot. Az év során befejeződött a labor felszerelése, az AIST-NT SmartSPM 1010 AFM berendezés beüzemelése.

Az intézet termelési-vállalkozási tevékenysége

- Saját fejlesztésű szilíciumnitrid kerámia szerszámok kis sorozatú gyártása.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az MFA *oktatási kapcsolatainak* eredményessége

Az MFA-ban hat emeritus és öt 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, PTE, PPKE, BMF különböző kurzusain, doktoraink tagjai a fenti egyetemek doktori iskoláinak, doktori és habilitációs tanácsának, többen a doktori iskolák alapító, ill. törzstagjai. Az intézetben működik a veszprémi Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar Nanoszenzorika Professzori Laboratóriuma, a BME VBMK-val közös Nanokémiai Laboratórium, a BMFK KKVMK-val közös Molekulasugaras Epitaxiás Laboratórium és az BME TTK-val közös Elektronsugaras Litográfiai labor. Külső támogatás nélkül rendszeres gyakorlatokat tartanak preparatív és analitikai laborjaikban a graduális és posztgraduális képzés számára. Intézetükben 2009-ben 23 hallgató folytatta PhD kutatásait. 2009-ben ketten védték meg PhD munkájukat (cum laude minősítéssel). Egy kutatójuk megvédte MTA Dr-i címét.

Részvétel a hazai tudományos közéletben

Az MFA kutatói adnak egy fő MTA doktorképviselőt, egy fő AKT tagot, egy tagot a Matematikai és Természettudományi Szakbizottságban; az MTA Vagyonkezelő Testület egy tagját és az MTA Választási Bizottság titkárát. Az MFA munkatársa közül kerül ki az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság titkára és 7 tagja, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság négy tagja, az MTA Anyagtudományi Komplex Biz. négy tagja, az MTA Orvosi Informatikai Munkabizottság egy tagja, a VEAB Egészségügyi Informatikai Munkabizottság elnöka, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagja. Az MFA delegálja az OTKA Elektrotechnikai és Elektronikai Zsűri elnökét és egy tagját, az ELFT főtitkárát, az ELFT tanács egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport titkárát, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport vezetőség egy tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat két vezetőségi tagját, Magyar Orvosi Lézer és Optikai Egyesület vezetőségi tagját, Kémiai es Kohászati Munkabizottság elnökét, az Egészségügyi Telematikai Munkacsoport egy tagját és a Magyar Anyagtudományi Egyesület titkárát.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok

Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, MICRON, Nanopages valamint a "The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy", „IEEE Sensors Journal” szerkesztőbizottsági tagja. IUPAP C13 Biz. tag, International Society of Electrocardiology vezetőségi tag, IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA Nemz. Bizottság több tagja, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, EUROSENSORS International Steering Committee tagja, ENIAC Scientific Council tagja.

A nemzetközi kapcsolatok

Az MTA MFA a World Forum of Materials Research Institutes tagja.

Az MFA kutatói közül többen rendszeres bírálók az Európai Bizottságnál és az ERC programjaiban.

Az intézményekkel való szervezett kapcsolatok teljes felsorolásától el kell tekinteni, hiszen több mint kétszáz intézményt kellene szerepeltetnünk. A rangos egyetemek (Cambridge,

NIMS -Tsukuba, Osaka, Tokyo, Tohoku-Sendai, Linköping, Erlangen, Namur, SUNY Stony Brook, Barcelona, Thessaloniki, Istambul, TU Helsinki, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center, stb.) mellett 2009-ben is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Mahle, Rolls-Royce, Renault, GE Hungary, Tateyama, Picosun Oy, Weszta-T, Állami Nyomda, Semilab, stb.

Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár) és a Sapientia Egyetemmel.

Az intézet a beszámolási évben két orosz, egy-egy belga, cseh, szlovák, lengyel, ukrán és bolgár MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápolt. A kétoldalú kapcsolatok továbbra is jól működnek, szinte kivétel nélkül közös publikációkat eredményeznek, és nagy segítséget nyújtanak nemzetközi pályázatok előkészítésénél is, tehát feltétlenül hasznosak.

TéT támogatással két szlovén, egy-egy japán, osztrák, horvát és szlovák kapcsolatuk volt. Az egyezményes együttműködés zökkenőmentesen, a KPI által kezelt TéT továbbra is sok adminisztrációval és akadozva működik.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

OTKA:
A tárgyévben hat új OTKA pályázatuk (ebből kettő NKTH finanszírozású) nyert támogatást.

NKTH:
Az intézet 2 új Jedlik Ányos pályázatot nyert természetesen magyar ipari partnerekkel együtt, napelem és közlekedésbiztonság javítása területén.

Nemzetközi pályázatok

A 2009-as év során indult európai pályázatok:

- *FP7 RODSOL*, All-inorganic nano-rod based thin-film solar cells on glass
- *ENIAC-JTI, SE2A***,** Nanoelectronics for Safe, Fuel Efficient and Environment Friendly Automotive Solutions
- *FP7 P3SENS***,** Polymer Photonic multiparametric biochemical SENSor for Point of care diagnostics
- *FP7 CONTACT***,** Marie Curie Initial Training Network for the tailored supply-chain development of the mechanical and electrical properties of CNT-filled composites
- *FP7 OSIRIS*, Towards an Open and Sustainable ICT Research Infrastructure

Díjak, címek, fokozatok

Arany Érdemkereszt kitüntetés, Főtitkári Dicséret, Doctor Honoris Causa (University of Miskolc), Bolyai Plakett (János Bolyai Postdoctoral Grant, Board of Trustees), EMRS – Spring Meeting, Outstanding Young Scientist Award (2 fő), Ferenczy György Memorial Prize (2 fő), MFA Junior Scientist Prize, MFA Prize (2 fő), Technical Diamond Diploma, BME TTK, Charles Simonyi Prize, Pócza Jenő Electron Microscopy Prize: Microscopy Society of Hungary, 2009, Best Poster Award Microscopy Conference 2009 in Graz, Genius feltalálói aranyérem.

V. Az év folyamán megjelent jelentősebb publikációk, szabadalmak

1. Ódor G, Bartosz L, Heinig KH: Mapping of (2+1)-dimensional Kardar-Parisi-Zhang growth onto a driven lattice. Phys. Rev. E 79, 021125 (2009)
2. Szabó Gy, Szolnoki A, Vukov J: Selection of dynamical rules in spatial Prisoner's Dilemma games. EPL 87, 18007 (2009)
3. Németh Á, Lábadi Z, Tóth L, Bársony I: Oscillations and power-dependent hysteresis in reactive ZnO plasma, Vacuum, 84 (1), 218-220 (2009)
4. Pongracz A, Hoshino Y, D'Angelo M, Deville Cavellin C, Ganem J.-J, Trimaille I, Battistig G, Josepovits K.V, Vickridge I: Isotopic tracing study of the growth of silicon carbide nano-crystals at the SiO2/Si interface by CO annealing, J. Appl. Phys. Vol. 106, 024302 (2009)
5. Nemes – Incze P, Tapasztó L, Darabont A, Lambin P, Biró LP: Scanning tunneling microscopy observation of circular electronic superstructures on multiwalled carbon nanotubes functionalised by nitric acid, Carbon, 47, 764-768 (2009)
6. Márk G. I, Vértesy Z, Kertész K, Bálint Zs, Biró L. P: Order-disorder effects in structure and color relation of photonic-crystal-type nanostructures in butterfly wing scales, Physical Review E 80, 051903-051903-11 (2009)
7. Pécz B, Stoemenos J, Voelskow M, Skorupa W, Dobos L, Pongracz A, Battistig G: Epitaxial 3C-SiC nanocrystal formation at the SiO2/Si interface by combined carbon implantation and annealing in CO atmosphere, J. of Applied Physics, 105(8) 083508 (2009)
8. Barna A, Kótis L, Lábár J, Osváth Z, Tóth AL, Menyhárd M, Zalar A, Panjan P: Producing metastable nanophase with sharp interface by means of focused ion beam irradiation, Journal of Applied Physics, 105(4) 044305 (2009)
9. Kozma P, Hamori A, Cottier K, Kurunczi S, Horvath R: Grating coupled interferometry for optical sensing, Applied Physics B, Lasers and Optics, (DOI 10.1007/s00340-009-3719-1), 97, 5-8 083508 (2009)
10. Petrik P, Fried M, Vazsonyi E, Basa P, Lohner T, Kozma P, Makkai Z: Nanocrystal characterization by ellipsometry in porous silicon using model dielectric function, Journal of Applied Physics, 105, 024908 083508 (2009)
11. Arató P, Balázsi Cs: „Carbon Nanotubes in Silicon Nitride," Handbook of Nanoceramics and Their Based Nanodevices, Ed. by T.Y. Tseng and H. S. Nalwa, American Scientific Publishers, 2009 January, ISBN: 1-58883-114-0, pp. 117-136.
12. Volk J, Nagata T, Erdélyi R, Bársony I, Tóth AL, Lukács IE, Czigány Z, Tomimoto H, Shingaya Y, Chikyow T: Highly Uniform Epitaxial ZnO Nanorod Arrays for Nanopiezotronics, Nanoscale Research Letters, 699-704, 083508 (2009)
13. Ádám M, Bársony I, Dücső Cs, Erőss M, Mohácsy T, Payer M, Vázsonyi É: Monolithically integrated Monocrystalline Micromechanical Elements, *European Patent* 2027058, Published: 25.11. 2009

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	134		Ebből kutató[2]:		76
PhD, kandidátus:	40	MTA doktora: 14	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					13
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					172
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					163
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		107
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:		18
összesített impakt faktor[6]:	211,24		összes hivatkozás száma[7]:		1710
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					1700
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 3		jegyzet:	2
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 3		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 2	MTA doktora: 1	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	2	külföldön:[11]			1
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	72	poszterek száma[12]:			36
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	9	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					40
TDK munkát készítő hallgatók száma:	20	Diplomamunkát (BSc):			6
Diplomamunkát (MSc):	20	PhD-t:			23
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					1800
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				588,51	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	9	Teljes saját bevétel[18]:		691,23	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				25,53	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				56,93	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				266,69	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				10,53	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				228,44	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				128,64	MFt

RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET
1053 Budapest, Reáltanoda u. 13-15, 1364 Budapest, Pf. 127.
Telefon: 483 8302, Fax: 4838-333
e-mail: ppp@renyi.hu, honlap: www.renyi.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet a nemzetközi matematikai élet jelentős központja, 2009-ben is megőrizte az évek során kivívott rangját, pozícióját a világ matematikai kutatásainak élvonalában.

Az intézet tevékenysége kilenc tudományos osztály keretei között folyik. A közelmúltban történt haláleset és nyugdíjazás miatt az önálló Információelmélet Osztály már nem működik tovább és beolvadt a Valószínűségszámítás és Statisztika Osztályba. A *Lendület program* támogatásával 2009-ben létrejött a Kriptográfiai kutatócsoport a Diszkrét Matematika Osztály keretein belül. Mindegyik osztály szoros kapcsolatban áll az általa művelt kutatási területek más vezető központjaival. Ennek köszönhetően kutatási programjukat folyamatosan a matematika fejlődése által felvetett legújabb kérdésekhez igazítják.

Az intézet munkatársai közül 2009-ben egy kutató szerzett akadémiai doktori címet. Az év végén 13 akadémikus (az átlagos statisztikai állományi létszám szerint 11), továbbá 28 (st. átl. 23) akadémiai doktor, 26 (st. átl. 25) kandidátus, illetve PhD fokozattal rendelkező kutató dolgozott az intézetben. Nagy hangsúlyt fektetnek a fiatal – PhD tanulmányaikat folytató vagy azt éppen befejező – tehetségek bevonására az intézeti kutatómunkába. 2009 folyamán további 6 új fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémiától kapott 4 új, illetve a megüresedő álláshelyeken. Az intézet kutatói a Közép-Európai Egyetemmel közösen folytatott PhD képzés keretében 10 doktorandusz munkáját irányították. Az utóbbi években kinevezéssel felvett fiatalok mellett, a korábbi években odaítélt, de még le nem járt fiatal kutatói ösztöndíjakat is beszámítva, 2009-ben is 17 fő ígéretes tudományos kutatói utánpótlás nevelésére volt az intézetnek lehetősége.

Az intézet munkatársai – a megelőző évekhez hasonló számban – 2009 során 166 dolgozatot publikáltak, amelyből 163 tudományos publikáció, 3 pedig ismeretterjesztő. A tudományos publikációk közül 3 szerkesztett mű, 1 akadémiai doktori értekezés, 7 PhD értekezés, 4 könyv, 3 tudományos könyvfejezet, 20 önálló konferencia-kiadványban, 125 pedig referált folyóiratban világnyelven jelent meg. Ebből a 125-ből 114 külföldi folyóiratban, 11 pedig nemzetközileg elismert hazai angol nyelvű kiadványokban került publikálásra.

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

Algebra Osztály

- Higmannak az unitrianguláris mátrixok csoportja konjugáltosztályainak számáról szóló sejtését vizsgálták. Megállapították, hogy a sejtés általánosítása tetszőleges minta-részcsoportokra nem érvényes, ami arra utalhat, hogy nagy dimenziókra az eredeti sejtés sem igaz.
- Megmutatták, hogy minden kellően nagy véges egyszerű csoport generálási gráfjában van Hamilton-kör.

– Bebizonyították azt az 1966-ból származó sejtést, ami a *G* csoport elemeihez tartozó fixpont-terek dimenziójának átlagára ad felső becslést. A tételnek számos alkalmazását is adták.
– Belátták, hogy egy végesen prezentált amenábilis csoportban véges indexű részcsoportok végtelen láncának a generátorszám-növekedése szublineáris a részcsoport indexére nézve.
– Belátták, hogy ha reguláris gráfok egy fedőtornya expander család, akkor vagy a torony minden elég nagy eleme páros gráf, vagy a torony elemei egyenletes korláttal el vannak választva a párosságtól.
– Kidolgoztak egy konstrukciót, amely egy tetszőleges tegez reprezentációit parametrizáló modulusteret sűrű nyílt részsokaságként beágyazza egy páros tegez megfelelő modulusterébe.
– Megfogalmaztak egy tételt, amely a kibővített Dynkin-féle tegezeket jellemzi az összes tegezek között az említett modulusterek simasági tulajdonságai által.
– Egy közelmúltbeli általános invariánselméleti eredmény segítségével meghatározták a multiszimmetrikus polinomok algebrájának generátorai közötti relációk minimális rendszerét a három-dimenziós esetben. Továbbá tetszőleges dimenzióban alsó becslést adtak a szükséges relációk fokára.
– A Lie-algebrák tekinthetők speciális Leibniz-algebráknak, ezért vizsgálandó, hogy mi a kapcsolat a Lie- és a Leibniz-kohomológiák és -deformációk között. Jól használható elegendő feltételeket adtak arra, hogy a két kohomológia megegyezzék, majd két példán explicit módon jellemezték a nem-Lie deformációkat.
– Egy meglepő mátrixkonstrukció segítségével jellemezték az aritmetikai varietást generáló véges minimális algebrák bi-kongruencia monoidjait szolgáltató inverz monoidokat (az MTA-Észt TA együttműködés keretében).
– Lokálisan egységelemes félcsoportokra számos Morita-invariáns tulajdonságot találtak (az MTA-Észt TA együttműködés keretében).
– Igen sikeresen folyik a dél-afrikai TéT-, valamint a bolgár és az észt MTA-együttműködésük (ezek keretében több dolgozat megírása van folyamatban), és bíztató eredmények vannak a vietnámi MTA-együttműködésben is.

Algebrai Geometria és Differenciál-topológia Osztály

– Osztályozták azokat a Seifert fibrált 3-sokaságokat, melyek feszes kontakt struktúrát hordoznak.
– Kontakt 3-sokaságokban levő Legendre és transzverz csomók egy, a csomó Floer homológiájában levő invariánsát definiálták. Az invariáns segítségével több, a korábbi technikákkal nem felfedezhető jelenség létezését bizonyították be.
– Belátták, hogy Heegaard-Floer homológiák legegyszerűbb verziójának egy stabil változata kombinatorikusan definiálható.
– Szimplektikus geometria segítségével osztályozták azon súlyozott homogén szingularitásokat, melyeknek racionális homológia simítása létezik.
– Bebizonyították, hogy egy Lie-típusú véges egyszerű csoport tetszőleges generátorrendszeréből képzett hatványok mérete minden esetben exponenciális ütemben növekszik mindaddig, míg el nem éri a csoport méretét. Az eredménynek már a jelenlegi formájában is számos alkalmazása van: jól használható bizonyos számelméleti szita-módszerekben, és expander gráfok konstrukciójában.
– Belátták, hogy minden algebrai csoport Helly-dimenziója véges. Megmutatták, hogyan használható a Helly-dimenzió egy tetszőleges (algebrai) csoporttérhatásban a pályák

hálójának leírásához. A tételnek érdekes és hasznos következményei vannak az invariáns-elméletben.
- Szingularitás csomók Seiberg-Witten invariánsaira adtak műtét formulákat. Ezek segítségével bizonyították a „splice-quotient" szingularitásokra a Seiberg-Witten Invariáns Sejtést.
- Megfogalmazták a Denef-Loeser Monodrómia Sejtés általánosítását (differenciál formákkal bővítve), és az algebrai görbék esetében igazolták is az általános sejtést.
- Egy régebbi sejtést megcáfolva bebizonyították, hogy komplex hiperfelület szingularitások szignatúrája nem fél-folytonos.
- Rács-kohomológiára két egzakt sort állítottak fel, amelyek ezek számolásában és alkalmazásaiban kulcsértékűek.
- A geometria csoport eredményesen használta fel az osztrák, francia és spanyol TéT támogatásokat, elsősorban szingularitások klasszifikációja területén folytatott közös kutatásokra, illetve ehhez kapcsolódó témákban.

Algebrai Logika Osztály

- Megadtak véges sok azonosságot, amik ún. pozitív műveleteket és az identitás konstanst használják, igazak a relációk között, és minden más ilyen típusú azonosság levezethető belőlük.
- Tovább vizsgálták az általuk korábban felállított AccRel nevű elméletet, ami a speciális relativitáselmélet gyorsuló megfigyelőkkel való kibővítése. Csak ennek az elméletnek az axiómáiból kiindulva bizonyították, hogy egyenletesen gyorsuló megfigyelő életútja hiperbola.

Analízis Osztály

- Meghatározták, milyen rendben közelíthetők konvex felületek a *d*-dimenziós térben konvex többváltozós polinomok szintfelületeivel.
- A klasszikus Kantorovich operátor egy új, súlyozott változatát definiálták, ami több szabadságot enged a Jacobi súly paramétereire, és bizonyították a megfelelő konvergencia tételeket. A Jacobi súly paramétereire kiróható feltételeket vizsgálták a súlyozott Hermite-Fejér interpoláció konvergenciájával kapcsolatban.
- Ciklikus csoportok nem-periodikus parkettázásait vizsgálták. Általános algoritmust adtak ezen parkettázások megtalálására, ha a csoport mérete legfeljebb két különböző prímhatvány szorzata. Speciálisan, karakterizálták a 144 elemű ciklikus csoport összes ilyen parkettázását. Ennek a feladatnak az az érdekes motivációja, hogy kortárs zeneszerzők használnak egyes művekben ilyen – úgynevezett Vuza – kánonokat.
- Megvizsgálták a kvantum-információelméletben híres MUB-6 problémát, azaz hogy létezik-e komplex 6 dimenzióban 7 darab páronként torzítatlan ortonormált bázis.
- Bevezették a gyakorlati szempontból hasznos kvázipozitív kvadraturákat. Konvergencia eredményeket is sikerült belátni a már definiált „jó" pontrendszerekre.

Diszkrét Matematika Osztály

- Gráfok határértékének definiálásával, vizsgálatával és alkalmazásának segítségével eredményket értek el a következőkkel kapcsolatban:
  - sűrű gráfok sorozatának határérték-objektumai;
  - ritka gráfok határértéke és ritka gráfsorozatok tulajdonságainak tesztelése;

  - a matematikai logika (pl. ultraszorzat) módszereinek segítségével a regularitási lemma különböző változatainak bizonyítása;
  - konstans idejű algoritmus létezésének bizonyítása gráf párosítási számának meghatározására.
- Extremális gráfokra, hipergráfokra és mátrixokra vonatkozó tételeket bizonyítottak:
  - Ramsey-elméleti tételek a regularitási lemma segítségével;
  - extremális tételek Berge-köröket nem tartalmazó hipergráfokra;
  - extremális gráf- és hipergráfelméleti eredmények alkalmazása a számelméletben;
  - sajátérték-becslések adott részgráfokat nem tartalmazó gráfsorozatokra, extrém tételek javítása a sajátérték-technika segítségével;
  - a magas dimenzójú hiperkocka adott hosszúságú kört nem tartalmazó részgráfjainak sűrűségére vonatkozó becslés, ami egy régi sejtés megoldását is adja;
  - fák beágyázásra vonatkozó tételek különböző feltételeknek eleget tevő gráfokban.
- Véletlen geometriai objektumokra vonatkozó tételeket, illetve geometriai centrális határeloszlás tételeket bizonyítottak. Nem-euklideszi norma esetében is sikerült bebizonyítani Jarnik konvex rácspoligonokra vonatkozó klasszikus tételét.
- A lokális lemma algoritmikus változatára vonatkozó tételeket bizonyítottak.
- Aszimptotikusan meghatározták különböző matematikai objektumok számát az Erdős-Kleitman-Rothschild elméletben öröklődő gráftulajdonság esetében, illetve bizonyos speciális csoportokra.
- Végtelen gráfokra általánosították a dominálo halmazokra vonatkozó véges gráf tételeket.
- Metszettételeket bizonyítottak véges halmazok részhalmazaira vonatkozóan.
- Fontos eredményeket bizonyítottak kódelméletben és kereséselméletben, például meghatározták az összes olyan kódot, amiben minden páronkénti távolság 3.
- Tételeket bizonyítottak paraméteres görbeseregek tipikus és atipikus illeszkedési struktúráira.
- Bebizonyították Connes beágyazási sejtését és a Lueck-Sauer-Wegner-féle általánosított determináns sejtést bizonyos speciális csoporthatások esetében.
- Pszeudovéletlen számsorozatokra vonatkozó tételeket bizonyítottak.
- Élkritikus hipergráfok jellemzését adták különböző tulajdonságok esetében.

Geometria Osztály

- Sikerült bebizonyítaniuk egy adott kromatikus számú gráfok metszési számáról szóló nevezetes sejtést abban az esetben, amikor a kromatikus szám legfeljebb 17.
- Páros pontú ponthalmazok speciális töröttvonallal való körbejárhatóságáról bizonyítottak fontos eredményeket tetszőleges, illetve véletlen ponthalmazok esetén.
- Alsó becslést bizonyítottak síkbeli ponthalmazok blokkoló halmazainak méretére.
- Gráfok speciális kromatikus számainak kapcsolatáról bizonyítottak pozitív, illetve negatív eredményeket, hogy azok egymáshoz képest mekkorák lehetnek, illetve hogy egymás függvényével hogyan becsülhetők.
- Bebizonyították az erős polarizációs sejtést, ha a vektorok egy síkban vannak. Emellett belátták, hogy a sejtésre nézve lokálisan extremális, nem elfajuló vektorrendszer szükségképpen ortonormált.
- Általánosították Erdős Pál üres konvex halmazokról szóló Ramsey-típusú eredményét, amikor a pontok helyett konvex lemezek szerepelnek.
- Vizsgálták konvex testbe dobált n véletlen pont konvex burkának átlagszélességét, ha a konvex test határára az eddigieknél kevésbé erős megkötéseket teszünk. Sikerült a konvex

testtől való átlagszélességkülönbség aszimptotikáját meghatározni. A szórás rendjét is meghatározták, és a nagy számok erős törvényének teljesülését is sikerült igazolni erre a problémára.
- Sikerült jobb hibatagot adni két alapvető affin invariáns egyenlőtlenségnek, a Blaschke-Santalo és az affin izoperimetrikus egyenlőtlenségeknek stabilitási változatára.
- Alsó becslést adtak az n dimenziós térben egy gömbrács sűrűségére, ha az minden k dimenziós affin alteret metsz.
- Belátták, hogy a legalább három dimenziós térben, bármely adott lapterületekkel rendelkező konvex poliéderek térfogatának infinuma nulla.

Halmazelmélet és Topológia Osztály

- Sikerült olyan nem első megszámlálható kompakt tér létezésének konzisztenciáját belátni, amelyben nincs olyan konvergens sorozat, aminek hossza az első nem-megszámlálható rendszám. Emellett átfogó eredményeket értek el kompakt terek konvergencia- és karakter-spektrumainak vizsgálatában.
- Ismert, hogy egy kompakt tér metrizálható, ha minden olyan altere metrizálható, melynek mérete az első nem-megszámlálható számosság. Megmutatták, hogy ugyanez az állítás lokálisan kompakt terekre már független a halmazelmélet szokásos axiómáitól. Ezzel egy 15 éve nyitott problémát oldottak meg.
- Folytatták számosságsorozatok kompakt szétszórt terek számosságsorozataiként való reprezentálhatóságának vizsgálatát.
- Elemi részmodellek láncait használva új bizonyítást adtak Nash-Williams klasszikus felbontási tételeire.
- Egy igen divatos, Fields-medálos matematikusok által is vizsgált területen megmutatták, hogy fraktálhalmazok metszetének mértéke nagyon nem stabil.
- Sikerült a kétváltozós folytonos merev függvények teljes leírását megadniuk.
- Sikerült Vaught 1961-es sejtését igazolni elméletek egy újabb osztályára, mely szerint, ha egy elsőrendű T elméletnek megszámlálhatónál több, páronként nem izomorf megszámlálható modellje van, akkor T-nek kontinuum sok ilyen modellje is van.
- Robinson és Łoś egy klasszikus eredménye szerint az elsőrendű rezolúciós kalkulus a paramodulációval kiegészítve cáfolat-teljes bizonyítási rendszert alkot. Sikerült e jól ismert tételre új, egyszerű bizonyítást találni.

Számelmélet Osztály

- Folytatták a prímszámok eloszlására vonatkozó vizsgálatokat. Igazolták, hogy ha a Bombieri-Vinogradov tétel valamilyen 1/2-nél nagyobb kitevővel igaz, akkor létezik egy d szám (amelyre korlát adható) úgy, hogy van akármilyen hosszú számtani sorozat olyan p prímekből, hogy $p+d$ is prím, azaz van általánosított ikerprímekből álló akármilyen hosszúságú számtani sorozat. Ha az Elliott-Halberstam sejtés igaz, akkor ez a d egy 2 és 16 közti páros szám.
- A klasszikus Fourier-analízisből ismert Poisson-féle összegzési formula (amely szerint egy valós függvény egész helyeken felvett értékeinek az összege megegyezik a függvény Fourier-transzformáltjához tartozó hasonló összeggel) egy általánosítását adták. Az új formulában az egészek szerepét egy másik diszkrét halmaz (a hiperbolikus Laplace-operátor sajátértékei), a Fourier-transzformált szerepét egy nemrég felfedezett integráltranszformált (a Wilson-transzformált) játssza. A legfontosabb új jelenség az automorf formák elméletében fontos hármasszorzat integrálok felbukkanása a formulában.

– Burgess-típusú szubkonvex becslést igazoltak csavart Hilbert moduláris L-függvényekre, megjavítva ezzel Cogdell-Piatetski-Shapiro-Sarnak és Venkatesh idevágó eredményeit. Közvetlen alkalmazásként az eddigieknél hatékonyabban lehet becsülni pozitív definit ternér kvadratikus formák előállításszámait egy teljesen valós számtest egészei felett.
– Megvizsgálták, hogy ha egy halmazban az összegek és különbségek száma közül az egyik közel van a lehetséges maximumhoz, a másik milyen messze lehet tőle.

Valószínűségszámítás és Statisztika Osztály

– Megmutatták, hogy magasabb dimenzióban két részecske diffúziója anyagcsere mellett Brown mozgások keveréke.
– Az úgynevezett kétdimenziós fésűn történő véletlen bolyongásra erős invariancia elvet és iterált logaritmus tételt bizonyítottak.
– Meghatározták a független végtelen szórású valószínűségi változók megnyírt részletösszegeinek aszimptotikus viselkedését.
– Gauss változók polinomjairól pár éve helytelen bizonyítással jelent meg egy tétel, a tételre most jó bizonyítást adtak.
– Sztochasztikus kapcsolatok mérésére új mérőszámot vezettek be, amely csak akkor nulla, ha függetlenség áll fenn.
– Becslést adtak többdimenziós mértékek relatív entrópiájára a mértékek lokális specifikációi alapján.
– Kidolgozták az arányos és gyorsított hazárd ráta modellek egyesítését és azt alkalmazták a Nemzeti Rákregiszter adataira.

Alkalmazások

A Rényi Intézet fő profilja a matematikai elméleti alapkutatások végzése, az intézetben folytatott kutatási témák többségének nincs közvetlen alkalmazott kutatási iránya. Azonban a már korábban is létező, főleg a Diszkrét Matematika és a Valószínűségszámítás és Statisztika Osztályokhoz köthető kutatócsoportok, azaz a bioinformatikai, adatbázis kutatási, információelméleti és a matematikai immunológiai kutatócsoportok továbbra is működnek és hasznos eredményeket érnek el. A Diszkrét Matematika Osztály (és más osztályok) számos tagjának kutatási témái közé tartozik a nagy (véletlen) hálózatok kutatása. Ezen belül egy 2008-ban befejeződött NKTH kutatás-fejlesztési program keretében felmerült konkrét alkalmazási téma keretében kutatták a véletlenszerűen szerveződő kommunikációs hálózatok atipikus részgráfjainak a meghatározását.

Az akadémiai *Lendület program* keretében benyújtott és elnyert kriptográfiai pályázat új lendületet adott a korábban már megkezdett titkosírási, értelemszerűen nagyobb részt alkalmazott kutatások folytatásához. A pályázat támogatásával és a belső erők átcsoportosításával létrehozott 11 tagú kutatócsoport a második félévben jött létre és egymás kutatásai ilyen irányú eredményeinek és a lehetséges kutatási témák megismerése után máris fontos eredményeket ért el a különböző titokmegosztási protokollok, az ún. anonym broadcast protokollok és az ujjlenyomat kódok vizsgálatának területén.

Az intézetben folyó bioinformatikai kutatások a korábbi intenzitással folytatódtak. 2009 volt az intézet EU FP6-os „Hungarian Bioinformatics” Transfer of Knowledge projektjének a legaktívabb éve, számos külföldi kutató látogatott az intézetbe 2-4 hónap időtartamra és a nyár folyamán 3 nemzetközi konferenciát is szerveztek phylogenetika, protein struktúra előrejelzés és komparatív genomika témakörökben (utóbbi a RECOMB CG nemzetközi

konferencia-sorozatban az első olyan konferencia volt, amit a régióban szerveztek). A korábbi kutatási témaköröknek, a látogatók és a konferenciák kutatási témáinak megfelelően a fő kutatási irányok továbbra is a genom-átrendeződések tanulmányozására, szekvencia-illesztések és evolúciós törzsfák kapcsolatának vizsgálatára és új statisztikai módszerek kidolgozására irányultak. Az együttműködés sikere jól megmutatkozott az ezekben a témákban a látogatókkal közösen írt számos cikkben is.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Kapcsolatok felsőoktatási intézményekkel

Az intézet kutatói számos budapesti és néhány vidéki felsőoktatási intézmény (pl. ELTE, BME, Debreceni Egyetem, Szegedi Tudományegyetem) munkájában vettek részt állandó oktatóként, különösen nagy részt vállaltak a felsőbb éves matematikus, illetve fizikus hallgatók és doktoranduszok részére tartott előadások tartásában. Az intézet és a Közép-Európai Egyetem (CEU) közös, angol nyelvű matematikus PhD és MSc programja hetedik évébe lépett. Jelenleg 21 PhD és 12 MSc hallgatója van a tanszéknek. A program tanárait, azaz a CEU Matematika Tanszékének tagjait az együttműködés keretében továbbra is nagyobb részt az intézet adja, munkatársai a két félév folyamán 25 kurzust oktattak. Valamennyi egyetem hallgatóit számba véve 2009-ben intézeti témavezető irányításával 29 PhD hallgató, 18 szakdolgozó (MSc) és 2 tudományos ösztöndíjas dolgozott. Az intézet dolgozói közül kerül ki a Budapest Semesters in Mathematics – főleg amerikai diákok részére szervezett angol nyelvű matematikus részképzési program – tanárainak többsége is. 2009-ben az intézet 39 munkatársa, a kutatók 58%-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben. Az intézet kutatói által 2009-ben tartott egyetemi tanórák száma meghaladta a 3900-at.

Az intézet a korábbi hagyományokat folytatva 2009-ben is fogadott négy egyetemi kollégát vendégkutatóként összesen 15 hónapra. Kiválasztásukban jelentős szerepet játszott, hogy témájuk kapcsolódjon az intézet kutatási profiljához. Sajnálatos, hogy az egyre nehezedő gazdasági helyzetben ezt a tevékenységet várhatóan csak minimális szinten tudják folytatni a jövőben, hacsak erre, az Akadémia által is megcélzott feladatra, nem biztosítanak elkülönített forrásokat.

Hazai kapcsolatok

Folytatódtak az intézeti kutatócsoportok heti rendszerességű szakmai szemináriumai, melyek többsége túlmutat az intézet keretein, az egész hazai matematikai kutatás fő irányaira igen jelentős hatással vannak.

Az intézet kutatói a matematikai közéleti feladatok vállalásából hagyományosan jóval számarányukon felül veszik ki részüket. A jelentősebb tisztségek közé tartoznak az MTA Jelölőbizottságában, az MTA Matematikai Osztályában, ennek bizottságaiban, az AKT-ben és a Matematikai és Természettudományi Szakbizottságában, az OTKA bizottságaiban, a Magyar Akkreditációs Bizottságban, a Bolyai János Matematikai Társulat vezetőségében és ezen keresztül a MTESZ-ben való részvétel. A Bolyai János Matematikai Társulat elnöke, a Bolyai Kutatási Ösztöndíj Kuratórium elnöke, az MTA Fiatal Kutatói Testület matematika szakterületi koordinátora, az MTA Matematikai Tudományok Osztályának elnökhelyettese, az MTA Matematikai Bizottság elnöke és titkára, a Matematikai Osztály Doktori Bizottságának

elnöke és alelnöke, a CEU Matematika Doktori Bizottság elnöke és alelnöke, az OTKA Matematika Zsűri elnöke, valamint a Magyar Felsőoktatási Akkreditációs Bizottság Matematika Képzési Ági Bizottság elnöke valamennyien az intézet kutatói.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet kutatói hagyományosan nagyon széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Az együttműködés elsősorban közös publikációkban, kétirányú látogatásokban, közös projektekben, konferenciák közös szervezésében nyilvánult meg. Az intézet munkatársai 2009-ben 29 nemzetközi konferencia vagy workshop szervezésében vettek részt, melyek közül 12-nek maga a Rényi Intézet adott helyet. Ezek az együttműködések általában nem igényeltek intézményes formát, ugyanakkor eredményességüket mutatja például a nagy számú közös cikk.

Mind az MTA kétoldalú egyezményes, mind a TéT kapcsolatok keretében megvalósult utazások eredményesen szolgálták a tudományos együttműködést, keretükben sikeres közös kutatások folynak, hasznos információcserére és időnként konferencia részvételre nyílik lehetőség.

Az intézet kutatói 2009-ben 10 nemzetközi tudományos bizottsági tagságot, 78 nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagságot mondhattak magukénak, 233 előadást tartottak nemzetközi konferenciákon, sokat közülük meghívott, illetve plenáris előadóként.

2009-ben az intézet két EU-s pályázat keretében 16 vendégkutatót fogadott, összesen 33 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 2009-ben – konferencián résztvevőket nem is számítva – meghaladta a félszázat.

A teljesen vagy részben az intézet által szervezett nemzetközi tudományos tanácskozások időrendi sorrendben az alábbiak voltak:

- Workshop on Combinatorial Geometry, 2009. február 6.
- Paul Turán Memorial Lectures, 2009. február 17–19.
- Lecture Series on Epstein-Barr Virus, 2009. április 21–27.
- 6th Japanese-Hungarian Symposium on Discrete Mathematics and Its Applications, 2009. május 16–19.
- Surface Singularities and Related Topics, 2009. június 6–7.
- Algorithmic and Combinatorial Geometry, 2009. június 15–19.
- Phylogenetics 2009, 2009. június 22–25.
- 8th Summer School in Potential Theory, 2009. július 6–12.
- Protein Structure Prediction Workshop, 2009. augusztus 26–29.
- 3rd Workshop in Fourier Analysis and Related Fields, 2009. szeptember 17–23.
- Seventh Annual RECOMB Satellite Workshop on Comparative Genomics, 2009. szeptember 27–29.
- Asymptotic Results in Probability and Statistics, 2009. november 5–7.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Hazai pályázatok

Az intézeti kutatócsoportok a korábbi évekhez hasonlóan jól szerepeltek a hazai OTKA pályázatokon, ennek ellenére, főleg a 2009-ben már erősen érzékelhető gazdasági válság, és ezzel összefüggésben a pályázati lehetőségek, illetve az általuk elosztott anyagi források szűkülése miatt az ezen hazai projektekből származó összbevétel nem érte el a közvetlenül megelőző korábbi két év bevételeinek szintjét. Továbbra is elmondható, hogy az intézet kutatói szinte kivétel nélkül résztvevői különböző OTKA projekteknek, illetve az intézet adja be matematikából a legnagyobb számú OTKA projekt tervet.

2009-ben sem voltak az egyes OTKA felhívásokon kívül olyan lényeges hazai pályázati lehetőségek, amelyekre matematikai alapkutatási projektekkel pályázni lehetett volna. Az NKTH TECH09 őszi kutatási felhívása, melyre az intézet több témával is készült pályázni, végül megváltozott kiírással csak 2010-ben került meghirdetésre.

Így különösen értékes volt az intézet részére az akadémiai *Lendület program* keretében meghirdetett és elnyert kriptográfiai kutatási pályázat, mely ugyan elsősorban alkalmazási irányultságú, de nem jár vele az azonnali konkrét alkalmazási eredmények elérésének és bemutatásának kényszere, és 3+2 éves futamideje a matematikai kutatások kifutásának szokásos időtartamához sokkal közelebb áll, mint a tipikus kutatás-fejlesztési projektek 1-3 éves futamideje.

Nemzetközi pályázatok

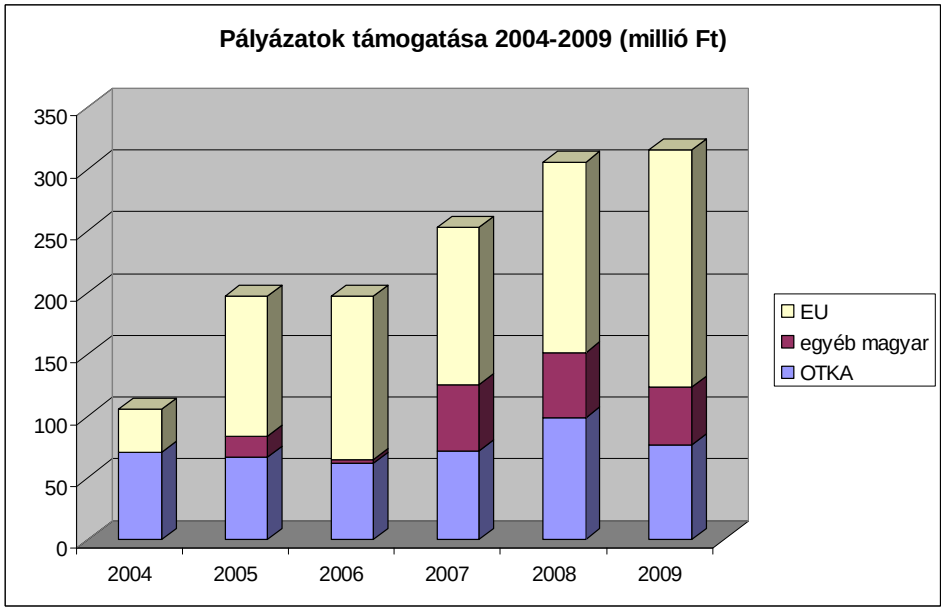
Továbbra is főleg a 2004-ben és 2005-ben indult EU FP6 kutatói mobilitási projektek, az ún. Transfer of Knowledge projektek tették ki az intézetben a futó nemzetközi projektek legnagyobb részét. A projektek támogatásával hosszabb távra érkező külföldi tudósok eredményesen vettek részt az intézeti kutatásokban, előadásaikkal, konzultációikkal új nemzetközi együttműködési lehetőségeket nyitottak meg. Sajnálatos módon ezen projektek közül az utolsó előtti 2009-ben lejárt, az utolsó pedig 2010 őszén fog, és a 7. Keretprogramban az ilyen típusú mobilitási pályázatok megszűntek. A kifutott, ill. kifutóban lévő pályázatok részbeni utófinanszírozása miatt azonban ezek a projektek 2009-ben még jelentős mértékben hozzájárultak az intézet költségvetéséhez.

Új típusú pályázati elemként jelentek meg a European Research Council ún. Starting Independent Researcher és Advanced Investigators Grant-jei, melyek alapvetően a még kevésbé tapasztalt, ill. tapasztalt tudós vezetésével létrehozott kis kutatói csoportok kutatásainak segítését célozzák meg hosszabb távra, jelentősebb, projektenként akár több millió eurós támogatással. Ennek megfelelően viszonylag kevés projektet támogatnak és igen nagy a verseny. Így, bár az intézet kutatói igen nagy aktivitással vesznek részt ezeken a pályázatokon (fordulónként 2-5 pályamű kerül benyújtásra), 2009-ben nem lehet beszámolni a 2008-as eredményhez hasonló sikerről (amikor a Rényi Intézet kutatóprofesszora által vezetett és annak további munkatársait magába foglaló csapat „Gaps between primes and almost primes. Pattern in primes and almost primes. Approximations to the twin prime and Goldbach conjecture” című pályázata 5 évre l.376.400 euró támogatást nyert). Mégis nagy sikernek könyvelhető el, hogy az intézet egy kutatója bejutott a 2009-es Advanced Grant pályázat második fordulójába.

Kisebb nagyságrendű, de mégis fontos pályázati lehetőség az egyéni PEOPLE (korábban Marie Curie) pályázati forma, melynek segítségével 4 kutató kezdte meg kutatási projektjét a Rényi Intézetben 2009 folyamán részben hosszabb idejű (1-2 éves) munkalátogatás keretében, részben – a fiatalabb magyar korosztály esetében – a reintegráció (hazatelepülés) első fázisaként.

Bár a korábbi dinamikus növekedés az elnyert hazai és nemzetközi pályázatok eredményességében megtorpant, (sőt, a hazai pályázati bevételek esetében kisebb csökkenés következett be), összességében, a hazai és nemzetközi lehetőségek jelentős szűkülése ellenére, részben a még mindig növekvő európai pályázati bevételeknek, részben a Lendület programnak köszönhetően, a pályázati összbevételek még kis mértékben meghaladták a 2008-as szintet, és elérték a közvetlen akadémiai támogatások 70%-át, ill. az intézet 2009. évi összbevételének több mint 40%-át. Mivel az intézet alapvető közfeladatainak ellátásához, sajnálatos módon, a közvetlen akadémiai támogatások egyre kevésbé járulnak hozzá – és ezen belül is 2009-ben jelentős csökkenést mutattak – az intézet egyre nagyobb mértékben van ráutalva a pályázati bevételekre. Azonban már itt fel kell hívni a figyelmet, hogy a hazai és nemzetközi pályázati lehetőségek ismeretének birtokában teljesen biztosra vehető, hogy a növekedési tendencia 2010-ben meg fog törni és a pályázati bevételek jelentős visszaesésére számíthatunk.

Az alábbi diagram mutatja a pályázati bevételek alakulását az elmúlt 6 év folyamán.



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

1. Abért M, Glasner Y: Generic groups acting on regular trees, Transactions of the American Mathematical Society 361(7): 3597-3610 (2009)
2. Ambrus G, Bárány I: Longest convex chains, Random Structures & Algorithms 35(2): 137-162 (2009)

3. Berkes I, Weber M: On the convergence of $\sum c_k f(n_k x)$, Memoirs of the American Mathematical Society 201(943): 1-72 (2009)
4. Csáki E, Csörgő M, Földes A, Révész P: Random walk local time approximated by a Brownian sheet combined with an independent Brownian motion, Annales de l'Institut Henri Poincaré Probabilités et Statistiques 45(2): 515-544 (2009)
5. Kim H, Toroczkai Z, Erdős PL, Miklós I, Székely LA: Degree-based graph construction, Journal of Physics A-Mathematical and Theoretical 42(39): 392001 (2009)
6. Benko D, Kroó A: A Weierstrass-type theorem for homogeneous polynomials, Transactions of the American Mathematical Society 361(3): 1645-1665 (2009)
7. Jaming P, Matolcsi M, Révész SzGy: On the extremal rays of the cone of positive, positive definite functions, Journal of Fourier Analysis and Applications 15(4): 561-582 (2009)
8. Csűrös M, Miklós I: Streamlining and large ancestral genomes in Archaea inferred with a phylogenetic birth-and-death model, Molecular Biology and Evolution 26(9): 2087-2095 (2009)
9. Némethi A, Okuma T: On the Casson invariant conjecture of Neumann-Wahl, Journal of Algebraic Geometry 18(1): 135-149 (2009)
10. Petz D, Szántó A, Weiner M: Complementarity and the algebraic structure of four-level quantum systems, Infinite Dimensional Analysis Quantum Probability and Related Topics 12(1): 99-116 (2009)
11. Goldston DA, Pintz J, Yildrim CY: Primes in tuples I, Annals of Mathematics 170(2): 819-862 (2009)
12. Bonami A, Révész SzGy: Integral concentration of idempotent trigonometric polynomials with gaps, American Journal of Mathematics 131(4): 1065-1108 (2009)
13. Ruzsa IZ: Sumsets and entropy, Random Structures & Algorithms 34(1): 1-10 (2009)
14. Balogh J, Bollobás B, Simonovits M: The typical structure of graphs without given excluded subgraphs, Random Structures & Algorithms 34(3): 305-318 (2009)
15. Simonyi G, Tardos G, Vrecica ST: Local chromatic number and distinguishing the strength of topological obsructions, Transactions of the American Mathematical Society 361(2): 889-908 (2009)
16. Lisca P, Ozsváth P, Stipsicz AI, Szabó Z: Heegard Floer invariants of Legendarian knots in contact three-manifolds, Journal of the European Mathematical Society 11(6): 1307-1363 (2009)
17. Harari D, Szamuely T: Galois sections for abelianized fundamental groups, Mathematische Annalen 344(4): 779-800 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	89		Ebből kutató[2]:		67
PhD, kandidátus:	25	MTA doktora: 23	levelező tag: 5	rendes tag:	6
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					17
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					166
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					163
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		102
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:		43
összesített impakt faktor[6]:	94,245		összes hivatkozás száma[7]:		1507
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					1130
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	4	könyvfejezet: 3		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 4	MTA doktora: 1	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	233	poszterek száma[12]:			0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			78
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					39
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát (BSc):			0
Diplomamunkát (MSc):	18	PhD-t:			29
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					3944
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				474,28	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	12	Teljes saját bevétel[18]:		294,65	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				77,35	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				7,124	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				53,65	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				137,83	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				18,69	MFt

SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

1111 Budapest, Kende u. 13-17,
Telefon: 279-6000, Fax: 466-7503,
e-mail: sztaki@sztaki.hu, honlap: www.sztaki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az informatika területe legalábbis Janus-arcú. Egyszerre figyelhető meg egyik oldalról a szinte már felfoghatatlan bonyolultságú és teljesítőképességű hardware (pl. sok ezer processzoros chipek), a világháló által keletkezett, komplex elosztott hardver és szoftver együttes, az eddig nem kezelhető problémák potenciális megoldhatósága, másrészről pedig az új számítástechnikai eszközök pillanatokon belül történő tömegtermékké válása.

Az intézet a minden bizonnyal a hosszútávon egyedül gyümölcsöző megoldást követi: erős hangsúlyt helyez a matematikai és mérnöki irányultságú alapkutatási tevékenységre, hiszen csak ezáltal őrizhető meg az a többször bizonyított képesség, hogy a SZTAKI szinte azonnal képes – sokszor proaktív módon is – reagálni az informatika terén szinte naponta jelentkező újabb és újabb kihívásokra. Csak néhányat kiemelve: érzékelő számítógépek és távjelenlét, új típusú ember-gép kapcsolatok, komplex rendszerek modellezése, irányítása, felügyelete és diagnosztikája, elosztott számítási architektúrák, Grid-rendszerek, nagysebességű hálózatok és biztonsági kérdéseik, mobil kommunikáció, új WWW-technológiák, globalizált vállalatok informatikája, de a sort folytathatnánk tovább. A felgyorsult világ bizonyos területeken a múltban megszokottól sokszor eltérő kutatási attitűdöt, szervezettséget és ezek kapcsán az eredmények másfajta értékelését követeli meg.

A nemzetközi mércével mérhető alapkutatási eredményekre építik az itthon és külföldön is hasznosítható informatikai fejlesztéseket és a magas szintű tanácsadási tevékenységet, egy olyan kiválósági központot célozva, mely vonzó témákat és körülményeket biztosít a tehetséges fiatalok Ph.D. tanulmányához, alkotó tevékenységük megkezdéséhez.

Az összetett tevékenység megfelelő méretű, összetételű és ütőképességű kutató-együtteseket igényel. Az intézet vezetése 2009 elején célul tűzte ki, hogy a témák integrálásával, és megfelelő, a különböző tevékenységeket jellegüknek megfelelő támogatásával igyekszik a kutatókat nagyobb, a feladatok szélesebb körét átfogni képes egységek létrehozására ösztönözni. A nagyobb lélegzetű feladatoknak megfelelő kutatói közösségek létrehozásának ugyanakkor természetes módja hazai és nemzetközi együttműködések, konzorciumok, virtuális laboratóriumok, stb. alapítása és működésük biztosítása.

Ugyanakkor, azzal is tisztában kell lenni, hogy a hazai piac egyrészt sok esetben még nem elég érett a legújabb eredmények átvételére, másrészt pedig méretében igen kicsi. Következésképpen, eredményeik felhasználása tekintetében is szükségszerűen nemzetközi méretekben gondolkoznak.

A nagy hagyományokkal rendelkező, jelenleg is sikeresen művelt témáik közül kiemelt hangsúlyt szántak a következő, az európai és hazai kutatási prioritásokkal összhangban lévő területeknek:

– A celluláris hullámszámítások és érzékelő számítási rendszerek, bionika.
– Az elektronikus jármű és járműirányítás.

– Az autonóm, egymással kooperáló, önálló intelligenciával rendelkező egységekből álló komplex rendszerek (pl. termelési hálózatok).
– A hagyományos és a megújuló energiaforrások automatizálási, informatikai problémái.
– Új, több ezer processzoros számítógépek algoritmikus problémái.
– Elosztott (pl. grid) számítási struktúrák.
– Az internet következő generációi; mobil kommunikáció; az adatbányászat és információ-visszakeresés.

Az intézet által művelt témák a következő, egymással részben átlapolódó területek szerint csoportosíthatók: 1) Matematika és számítástudomány, 2) Informatika, 3) Automatizált irányítási rendszerek. Cél a mérnöki, matematikai és számítástudományi területen elért eredmények integrálása a problémamegoldásokban és rendszerfejlesztésekben. Az intézet hagyományosan nyílt szellemi közege tudja fenntartani azt a belső hidat, amely az elméleti alapkutatástól a prototípus-fejlesztésekig, alkalmazásokig, illetve rendszer-integrálásokig létrejött.

A következőkben is a fenti hármas felosztás szerint kerülnek felsorolásra az intézet 2009-es legfontosabb eredményei.

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

Matematika és számítástudomány

A matematika és számítástudomány területén azokat a témákat kezelik súlypontilag, melyek megalapozhatják az informatika és az automatizálás jelenleg is nyitott, előtérbe került problémáinak megoldását. Így koncentrálnak például a komplex rendszerek modellezésére, elemzésére, beleértve például a nagyméretű (extremális) gráfokat, az adatbányászatot, a sztochasztikus rendszereket, az operációkutatást, az algebrai kutatásokat, illetve a biológiai motivációjú számítástudományt.

Az algebrai kutatások terén vizsgálták a többváltozós algebrai egyenletrendszerek strukturális tulajdonságait. Az egyenletrendszer és a gyökök olyan jellemzőivel foglalkoztak, amelyek globális módszerekkel, a gyökök meghatározása nélkül is számíthatók. Különösen többszörös megoldásokat tartalmazó egyenletrendszerekhez közeli egyenletrendszereknél (pl. a mérések útján nyert (kissé) hibás adatokból felállított közelítő egyenletrendszerek) fontosak ezek a módszerek. Vizsgálták a véges testek feletti polinomok felbontására szolgáló determinisztikus algoritmusokkal szorosan kapcsolatban álló kombinatorikai struktúrákat, amelyek az asszociációs sémák magasabb dimenziós általánosításaiként foghatók fel. Ezek vizsgálatával sikerült javítaniuk a felbontó algoritmusok hatékonyságán. Vizsgálták geometriai struktúrák egy pont híján való fedéseit, és sikerült bizonyítaniuk ezek méretére az affin síkokra érvényes Brouwer-Schrijver tételhez hasonló jelenséget. Foglalkoztak halmazrendszerekre vonatkozó eredmények vektorterekre vonatkozó analogonjainak vizsgálatával is, és több társszerzővel sikerült igazolnunk a Hilton-Milner tétel q-analogonját.

Adatbányászat és Web-keresés terén az intézet nemzetközi hírnevét öregbíti a Knowledge Discovery and Data Mining (KDD) Cup 2009 versenyén nagyon szoros versenyben elért kiemelkedő helyezésük. Web Spam szűréssel kapcsolatban is a világ legerősebb kutató helyei közé került az intézet. A kutatás nemzetközi elismertségét jelzi, hogy az ECML/PKDD 2010 konferencia Discovery Challenge feladatának az Internet archívumok számára nyújtott

tartalom minőség-előrejelzését választották, és az MTA SZTAKI-t kérték fel a rendezvény szervezésére.

Sztochasztikus rendszerek, pénzügyi matematika: Új eredményeket értek el folytonos idejű lineáris sztochasztikus rendszerek statisztikai vizsgálatában: a rekurzív maximum likelihood (RML) módszer egy pontos off-line közelítését dolgozták ki. Kimutatták egy ARX rendszer paraméterbecslésének konvergenciáját és aszimptotikus hatékonyságát egy ún. certainty equivalence adaptív bemenet tervezés mellett. A rejtett Markov témakörben kvantált Gauss AR(1) folyamatra bizonyítottak egyenletes nagyszámos törvényét. Továbbá lényegesen megjavították egy randomizált EM módszer hatékonyságát egy kvantált Gauss lineáris regressziós becslésével kapcsolatban. Pénzügyi matematikai vonatkozásban megmutatták, hogy a GARCH modellek alkalmazhatók pénzügyi piacok szerkezeti változásainak detektálására. Meglepő eredményeket értek el az arbitrázs akadályainak, illetve lehetőségének elemzésében.

Operációkutatás: A páros összehasonlítás mátrixokra vonatkozó legkisebb négyzetes feladat megoldására adtak egy lokális kereső algoritmust. A sajátvektor módszert kiterjesztették a nem teljesen kitöltött páros összehasonlítás mátrixokra, így a korábbinál lényegesen kevesebb számú összehasonlításból is lehetővé válik a döntéshozói preferenciák feltérképezése és számszerűsítése. Az ortonormalitási feltételek melletti optimalizálás feladatát d.c. (difference of convex) programozási feladat alakjára írták át, kihasználva a szereplő függvények két konvex függvény különbségeként való kezelhetőségét. A feladat megoldására egy korlátozás és szétválasztás alapú módszert adtak. A kvadratikus feltételek melletti konvex optimalizálás terén kifejlesztett speciális módszereik a numerikus tapasztalatok szerint jelentősen túlszárnyalhatják a legnevesebb kereskedelmi szoftvereket is.

A biológiai motivációjú számítástudományi kutatásaik során fontos eredményeket értek el a biológiai indíttatású számítások elméletéhez tartozó membránszámítások területén, megadva minimális méretű és funkcionalitású, de a Turing gépekével azonos számítási erejű modellosztályokat. További fontos eredményük az ún. általánosított kommunikáló membrán rendszerek maximális számítási erejű alosztályainak meghatározása. Eredményeik hozzájárulnak azon elvek meghatározásához, melyek útmutatást adnak bonyolult számítási architektúrák felépítésére egyszerű elemekből.

Kombinatorikus számítástudomány, gráfelmélet: Megoldották a klikkszínezési problémát a kis fokszámú karommentes gráfokban, elméleti és algoritmikus értelemben egyaránt. Adott súlyok mellett alsó és felső becslést találtak összegmentes halmazok nagyságára. Optimális algoritmusokat adtak intervallumrendszerek korlátozó feltételek melletti partícionálására. Halmazrendszerek és komplementereik dominálására vonatkozóan erős egyenlőtlenségeket bizonyítottak.

Az egyes főbb területek mind tematikai, mind személyi szempontból átlapolódnak, összességében a matematika-számítástudomány témakörben 42 kutatói besorolású humán (lásd Kjt.) és 22 nem kutatói besorolású humán dolgozik az intézetben. A becsült intézeti ráfordítás mintegy 604 millió Ft volt, melynek 37%-a pályázati forrás. A K+F feladatokat többek között a T-Online, a Fornax, az Econet.hu, a Magyar Telekom, az AEGON, és hazai kis- és középvállalkozások együttműködésével végzik.

Informatika

Hagyományaik szerint úttörő jellegű szerepet játszanak a celluláris érzékelő és hullám számítási rendszerek terén, ahol – környezetünkben elég ritka módon – az algoritmikus

kutatásokon túlmenően az új architektúrák áramkör-tervezéséhez is hozzájárulnak. Kiemelkedő hangsúlyt helyeznek az elosztott számítási rendszerek kutatására, az új generációs web kifejlesztésére, a grid rendszerekre, valamint elméleti eredményeik bevezetésére, gyakorlati alkalmazására.

A celluláris érzékelő és hullám számítási rendszerek témakörében 2009-ben a legfontosabb eredményeik az alábbiak voltak:

- Új elméleti eredmények a téridőbeli dinamika, a Kilo-processzoros tömbszámítógépek, illetve a Virtuális és Fizikai Celluláris Gépek megvalósíthatósága területein:
  - Az 1D celluláris automatákon új téridőbeli jelenségeket ismertek fel a Period 1, Period 3, és Period 6 szabályok területén;
  - Új eljárásokat adtak a nemlineáris téridőbeli dinamikák számítógéppel segített bizonyítására;
  - Homogén nagy virtuális és kisméretű fizikai processzortömbökön történő algoritmus-megvalósítások konstruktív módszereit fejlesztették ki és elvégezték összehasonlító elemzésüket.
- TeraHz-es érzékelő és processzáló architektúrákat elemeztek és megtervezték áramköreiket.
- Az MIT Lincoln Laboratory 3 rétegű technológiájára megtervezték a VISCUBE 3D vertikális integrált áramköri vizuális processzor rendszer architektúra legfontosabb áramköreit, valamint elkészítették az architektúra szimulációs és teszt környezetét.
- FPGA architektúrákon dolgozták ki a Virtuális és fizikai celluláris architektúrákat és FIFO alapú lokális vezérlési modulokat vezettek be. Alapelveket dolgoztak ki kilóprocesszoros architektúrák elosztott, adatvezérelt lokális vezérlési stratégiájára.
- Sikerrel zárták le digitális holografikus vízminőség ellenőrző mintarendszerük kidolgozásának első fázisát és tesztelését külső vízmintákon. A 3D-s nagy felbontású, nagy látóvolumenű digitális mikroszkóprendszerek (DHM) egyetlen holografikus felvétellel ugyanakkora felbontás mellett kb. 1000-szer nagyobb térfogatról rögzítenek információt, mint a hagyományos mikroszkópok. A vízbiológiai alkalmazásokhoz a rendszer kiegészült egy olyan tanítható morfológiai adatbázissal, amely tartalmazza az ivóvizekben, ivóvíz-bázisokban előforduló ártalmas és indikátor jellegű (algák, férgek stb.) mikroszervezeteket. Erre az adatbázisra épül az alakfelismerő, osztályozó szoftverrendszer. A rendszer segítségével a jelenleg csak szakaszosan végzett manuális mikroszkópiai vizsgálatokat automatikus, folyamatos felügyelet váltja ki, amely a víz által hordozott biológiai eredetű közegészségügyi kockázatokat minimálisra csökkenti.

Elosztott események elemzése: Videó-tartalom visszakeresésére szolgáló moduláris eszköztárt fejlesztettek ki, mely alkalmas annotációs bejegyzések és vizualizációs interfészek kezelésére, felhasználóbarát webes lekérdezési felületen keresztül. Rejtett Markov modelleken alapuló, folytonos állapottéren értelmezett matematikai modellt készítettek a város közlekedés ütemességének és fennakadásainak, valamint a zónák közötti statisztikai összefüggések modellezésére videó folyamok adatainak kiértékelésével. Automatizált eljárást adtak apró objektumok felismerésére és szokatlan mozgásuk detektálására légi felvételeken.

A Grid-rendszerek kutatása jórészt a következő EU projektek keretében történt: EU FP6: CancerGrid, EU FP7: EDGeS (melynek az intézet a koordinátora), EGEE-III, ETICS-II, SEE-GRID-SCI, S-CUBE. A sokrétű kutatás eredményei közül néhány:

- Az S-CUBE kiválósági hálózaton (Network of Excellence) keresztül az intézet egy jelentős, Európában meghatározó szoftvertechnológiai közösség részévé vált. Az eddigi

konkrét eredmények közül kiemelendő az SLA alapú virtualizált szolgáltatás biztosításához szükséges architektúra kidolgozása, mely három területet, SLA egyeztetés (negotiation), bróker és metabróker, illetve dinamikus szolgáltatáslétesítést foglal magában.

– Az EDGeS projekt keretében továbbfejlesztették a 3G Bridge (Generic Grid-Grid Bridge) szolgáltatást, ami lehetővé teszi tetszőleges service és desktop grid rendszer integrálását. Ebben az évben kiterjesztették a 3G Bridge-et egy az Open Grid Forum ajánlása alapján készült BES plugin-nal, ami lehetővé teszi a 3G Bridge szolgáltatás közvetlen használhatóságát mindazon grid rendszerek számára, amik maguk is támogatják a standard BES interfészt. A 3G Bridge szolgáltatás alkalmazhatóságát jól bizonyítja, hogy az EU és Dél-Amerika közös EELA-2 projektje a 3G Bridge segítségével valósította meg az európai gLite és a brazil OurGrid grid rendszerek integrálását.
– A korábbi években kidolgozott és ma már Európa számos országában intenzíven használt P-GRADE grid portált választotta az ETH Zürich kutatóintézet a SwissGrid felhasználói felületének. E munka keretében megoldották a P-GRADE portál integrálását lokális klaszterekkel és az ARC grid köztesréteggel. Folytatódott a MIMOS kutatóintézettel elkezdődött együttműködés is, melynek célja a Grid Malayzia számára adaptálni a P-GRADE portált. Ennek keretében integrálták az EGEE-ben kifejlesztett grid elszámoló rendszert a P-GRADE portálba, illetve SLA támogatással is kiterjesztették a P-GRADE portált.

Az elosztott rendszerek témakörben 2009-ben Web-alapú szoftver technológia kutatásokra és kísérleti fejlesztésekre, így digitális könyvtári rendszerek és szolgáltatások kialakítására, csoportszoftver (groupware) és környezeti intelligencia (ambient intelligence) fejlesztésekre koncentráltak:

– Kiemelkedő sikerrel zárták a japán RICOH nagyvállalattal közös, 3 éves kutatás-fejlesztési projektjüket, melynek utolsó évében
  – Újgenerációs, információ-megosztó rendszereket (mint pl. az elektronikus levelezés alternatívái) fejlesztettek ki, főként olyan, a kreatív tudáskezelés területén dolgozók számára, akik párhuzamosan több kontextusban dolgozva, egymástól nagyon különböző információkat menedzselnek.
  – Kontextus-tudatos (context awareness) technológiákat és valós-idejű, webes csoportmunka-kiszolgáló rendszerek azon szolgáltatásait integrálták, melyekhez optimális jelenlét-információ (awareness) kezelése kapcsolódik.
– A BREIN (Business objective driven reliable and intelligent Grids for real business) EU FP 6 nemzetközi projekt keretében alap- és alkalmazott kutatási eredményeket értek el a Grid témakörben ontológia építés, szolgáltatás integrációs modell és módszertan kialakítás területein. Elsősorban szemantikus web-technológiák segítségével oldották meg web-szolgáltatások SLA (service level agreement) kezelését, az ágens-technológia alapú grid/cloud szolgáltatások monitorozását és erőforrás adaptációját.

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.

Szemantikus integráció: Egy fogalmi szintre is kiterjedő, elosztott, virtuális adatbázis kezelésen alapuló, új információintegrációs technológiát alakítottak ki és részt vettek kísérleti alkalmazásában. Kidolgozták ebben a környezetben a web szolgáltatások integrációs

technológiáját és alkalmazták digitális könyvtári források integrálásában OpenURL technológia alkalmazásával.

Részben eLearning technikákra alapozva fejlesztették ki a Pocket Guide turistaszoftvert, amely számos hazai elismerést ért el (Magyar Termék Nagydíj, az ITD Hungary Zrt. exportfejlesztési különdíja, az INNOSTART által kitűzött Magyar Termék Nagydíj pályázat "Leginnovatívabb Termék" elismerő címe, Magyar Minőség Háza Díj, eFestivál Innovatív tartalom különdíj). Ez az innovatív eszköz sikeresen integrálja magában a városkaluz, az audioguide és a navigációs rendszerek funkcionalitását, lehetővé téve a külön felkészülés nélküli városnézést.

A könyvtári informatika terén továbbfejlesztették két könyvtár-automatizálási programcsomagjukat: a KisTékát a kisebb, a Magyar Termék Nagydíjjal kitüntetett HunTékát pedig közepes és nagyobb méretű könyvtárak számára. A programok úgynevezett ASP (Application Service Provider), vagy divatosabb elnevezéssel, cloud-computing változatát előszeretettel használják a kisebb könyvtárak. 2009-ben olyan tekintélyes oktatási intézményekben került bevezetésre a HunTéka, mint a Semmelweis Egyetem Központi Könyvtára, vagy a Miskolci Egyetem Könyvtára. Összességében már több mint 245 könyvtár használja a rendszereket, mind határainkon belül, mind kívül.

A marketing informatikája: az amerikai Global Market Insite (GMI) céggel 2000 óta folytatott együttműködés keretében 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 is. Magyarország piacvezető közvélemény- és piackutató cége, az Ipsos Zrt. Számára egy közel másfél éves fejlesztési projekt keretében készült el a MédiaNavigátor 3 (MN3) elnevezésű szoftverrendszer.

Szintén kiemelt tevékenységi területük a hálózatbiztonsági rendszerek és felügyeletek fejlesztése. Az Internet Szolgáltatók Tanácsa által anyagilag is támogatott munka során – Hun-CERT (Computer Emergency Response Team) néven – hálózatbiztonsági feladatokat látnak el (2009-ben több mint 150 – a magyar hálózatot érintő, külföldről bejelentett – hálózatbiztonsági incidens kezelésében vettek részt.

A tágabb értelemben vett informatikai témakörben mintegy 40 kutatói besorolású egyén (valamint további 23 nem kutatói besorolású egyén) dolgozik az intézetben. A becsült intézeti ráfordítás 610 millió Ft volt, melynek 44%-a pályázati forrás. A gazdasági hasznosítás, illetve hasznosítási képesség tágabb tématerületenként a következőképpen összegezhető:

- Celluláris érzékelő és hullám számítási rendszerek: a potenciális felhasználási területek (orvosi, ipari, űrkutatási, hadi, stb.) igen sokrétűek.
- Grid rendszerek: Az intézet részt vesz a különböző irányultságú, legfontosabb európai és hazai kutatási, felhasználási projektekben. Külön aláhúzandó a malajziai és a kazahsztáni hasznosulás, valamint az, hogy az ETH Zürich kutatóintézet a P-GRADE grid portált választotta a Swissgrid felhasználói felületének. A magyar kapcsolatokban igen jelentős az Econet NyRt-vel és az e-Group Kft-vel folytatott közös K+F munka az asztali gridek és a hálózati szolgáltatások területén.
- Elosztott rendszerek: A SZTAKI – RICOH már említett kutatási-fejlesztési szerződés első, három éves periódusa az intézet közelmúltbeli egyik sikertörténete. A projekt rendkívüli eredményességét jelzi, hogy eddig 6 (4 Japán, 2 USA) közös szabadalmi bejelentés került benyújtásra.

– A marketing informatikája: A GMI és az Ipsos Zrt. együttműködésekben megszerzett know-how-t hasznosítják a német Leyhausen GmbH, az angol BrainJuicer és az EMI amerikai piackutató cégekkel kötött fejlesztési szerződéseikben.
– Elosztott események elemzése: A lakott és a természeti környezet biztonságának növeléséhez és kényelmesebbé tételéhez járulnak hozzá az automatizálható videó megfigyelő és visszakereső rendszereik, valamint a légikép-összehasonlító eljárásaik.
– A Pocket Guide turistaszoftver kapcsán elnyert innovációs díjak jelzik, hogy a termék esetleges értékesítése jelentős gazdasági haszonnal kecsegtet.
– A könyvtári informatika terén az intézet termékskálája kiemelkedően eredményes, elég csak a rendszert alkalmazók több mint 245-ös számát megemlíteni.

A hasznosításokat részben az intézet látja el, részben – szerződések alapján – informatikai kisvállatok 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. Alapkutatásaikban megalapozzák mind a folytonos, mind a diszkrét rendszerek terén végzett kutató-fejlesztő tevékenységüket. Eredményeiket elsősorban az energia- és a járműipar, valamint a termeléssel foglalkozó vállalatok és azok hálózatai hasznosítják, de sikeresek például orvosi alkalmazásaik is.

A rendszer- és irányításelmélet terén a következő kiemelendő eredmények születtek:

– A nemlineáris rendszerek irányításelméletéhez kapcsolódva az időinvariáns geometriai rendszerelmélet eszközeit kiterjesztették állapotfüggő paraméterű lineáris modellstruktúrákra (LPV és qLPV modellek). Eredményeket kaptak bizonyos qLPV rendszerosztályok dinamikus rendszerinvertáláson alapuló szabályozó tervezésére. Az eredményeket atomerőműben és járműirányítási feladatok megoldásában alkalmazták. Új eredmények jöttek létre az átkapcsolást végző irányítórendszerek (switching systems) irányíthatósági vizsgálatára, valamint az ilyen rendszerek irányíthatósági és stabilizálhatósági tulajdonságainak kapcsolatára vonatkozóan.
– Az LPV és qLPV modellosztályokra vonatkozó irányítási feladatok dualizálásával fontos eredményeket kaptak hasonló rendszerekre vonatkozó szűrési és detektálási feladatok megoldásában.
– Erőfeszítések történtek egy vezető nélküli, földi és légi jármű (UAV) irányításával és navigációval foglalkozó kutatólaboratórium felállítására. A laboratórium eszközbázisán végrehajtandó kutatási program a University of Minnesota Aerospace Department munkatársaival közösen kerül kialakításra, amelyhez egy US kutatási támogatás is hozzájárul.
– Új eredmények születtek jelek matematikai modellezésében a nemstandard ortogonális bázisok és wavelet reprezentációk alkalmazására. Az eredményeknek jelentős szerepük van orvostudományi célú képfeldolgozási módszerek kifejlesztésében.
– Kidolgozták a robotok interneten keresztüli programozásának elveit. Ennek megfelelően elkészült a 3D Internet első alkalmazásának tekinthető VirCA (Virtual Robot Collaboration Arena) rendszer alapja, mely magját képezi az általuk kezdeményezett és szervezett majd 15 rangos intézettel közösen megalapított iSpace Laboratory Network nevű világhálónak. A VIRCA rendszerben megvalósították az RT middleware és ICE kvázi szabványokat, valamint megkezdték az eddigi TP model-transzformációval kapcsolatos tudományos rendszer- és irányításelméleti, valamint infokommunikációs eredményeikre támaszkodó

sztenderd kommunikációs rendszer tervezését és implementálását.

- A TRUCKDAS projektben végzett tevékenység az intelligens jármű-irányítási kutatásokban hozott új eredményeket. A korszerű járműfedélzeti irányítórendszerek hibatűrő kialakításának tervezési kérdései, a jármű flották koordinált irányítása, az intelligens vezető nélküli járműirányítási problémák, a szenzorfúziós módszerek alkalmazása (pozíció, mozgásadat és videó információk kombinálása), az elektronikus fék, kormány és menetstabilizátor alkalmazásának integrált módszerei adják a kutatás fő irányait. Módszerek kerültek kidolgozásra oszlopban haladó haszonjárművek irányítására annak érdekében, hogy az irányítási célok a járműoszlop menetstabilitásának biztosítása mellett minél kisebb üzemanyag felhasználásával legyen megvalósítható.
- A CORNEA projekt a szaruhártya új, nagypontosságú, klinikai szemészeti gyakorlatban alkalmazható topográfiai vizsgálati módszereinek kidolgozásával kapcsolatban hozott új eredményeket. Elkészült a módszer helyességét és pontosságát reprezentáló kísérleti mintarendszer. A mérési elv és kísérleti módszer továbbfejlesztésben, a klinikai tesztek lebonyolításában továbbra is döntő jelentőségű a Semmelweis Egyetem Szemészeti Klinikájával kialakított hosszú távú együttműködés.
- Az intézet korábbi kutatásai során szoros együttműködést alakított ki számos, a repülőgépes technológiák kidolgozásában érintett kutató-fejlesztő intézettel, iparvállalattal és egyetemi tanszékkel. Ezen kapcsolatok révén, alapvetően az AIRBUS repülőgépgyártó fejlesztési igényeit kielégítendő és a köré tömörülve, jött létre 8 európai partner közreműködésével az ADDSAFE elnevezésű FP7 projekt, amely a repülésbiztonság növelését hibadetektálási módszerek alkalmazásával és azok repülőgép építési technológiákba integrálásával és ipari meghonosítása révén kívánja elérni.

A folyamatrendszerek és irányításuk témakörben 2009-ben született eredmények közül kiemelendők a következők:

- Optimáláson alapuló eljárást dolgoztak ki, amely alkalmas a nemlineáris pozitív rendszerek egy nagyfontosságú osztálya, a reakció-kinetikai hálózatok különböző feltételeknek eleget tevő realizációinak meghatározására. Az eljárással a fenti rendszerosztály realizációtól független dinamikai strukturális tulajdonságai (pl. stabilitása) könnyen meghatározhatókká váltak.
- A nemlineáris folyamatrendszerek modellezése és irányítása területén elért elméleti eredmények alkalmazásával továbbfejlesztették a Paksi Atomerőmű primerkörének egyszerűsített dinamikus modelljét, amely most már a reaktor hőmérsékletfüggő reaktivitását és mérgeződési jelenségeit is leírja. Az éjszakai le- és hajnali felterhelési tranziensek során mért adatok segítségével a paraméterbecslést is elvégezték. Ez a modell lehet az alapja a primerköri szabályozók együttes újratervezésének (rekonstrukciójának).

A geometriai modellezés és számítógépes látás területén elért eredmények közül kiemelendők:

- Új, precíz módszert dolgoztak ki több felvétel alapján történő, variációs 3D rekonstrukcióra.
- Kidolgoztak egy új ígéretes önkalibrációs eljárást, amely merev tárgyakról készült videofelvételekből kiszámítja a kamera paramétereit, és elvégzi a teljes 3D rekonstrukciót.
- Megmutatták, hogy a kötegelt behangolás hatékonyan alkalmazható fotometrikus sztereó pontosítására.
- Módszert dolgoztak ki mérnöki objektumok felületi hibáinak detektálására és a felületek korrekciójára reflexiós vonalak alapján.

– Megtervezték és elkészítették a prototípusát az új geometriai elveken alapuló térdprotézisnek.

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:
– Az eMULT EU projekt kapcsán ágens-alapú, tudásbázisú rendszer kidolgozásában vesznek részt a szétszerelő és alkatrész-kereskedő KKV-k támogatására. Implementáltak és üzembe helyeztek egy kísérleti multi-ágens hálózatot több KKV kiszolgálására.
– A SCULPTOR nevű EU projektben újfajta, présszerszám nélküli lemez megmunkálási technológiák irányítási algoritmusait fejlesztették ki.

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 valósidejű kezelésére, különös tekintettel az informatika, az operációkutatás és a tudásalapú módszerek legújabb irányzataira, egyensúlyt teremtve az optimálás, autonómia és kooperáció terén. 2009-es főbb eredményeik:
– Vegyesértékű programozás és tabu keresés együttes alkalmazásával megoldást adtak nagyméretű, ipari gyakorlatnak megfelelő termelésütemezési problémákra.
– A matematikai és korlátozás programozás eszköztárát bővítették olyan általános módszerekkel, melyek különösen alkalmasak vegyes értékű lineáris és hierarchikus (kétszintű) problémák megoldására, illetve összeg típusú kritériumok szerinti optimalizálásra. A kétszintű (ún. bilevel) programozás ütemezési feladatokra történő alkalmazásában értek el új eredményeket.
– Rugalmas gyártórendszerek tervezésének gördülő horizontú, sztochasztikus programozás alapú módszerét fejlesztették ki.
– Termelési hálózatok terén koordinációs mechanizmusokat fejlesztettek ki az igények bizonytalanságából származó kockázatok megosztására.
– Termelési hálózatok egy komplexitás-modelljét adták nemzetközi együttműködés keretében.
– Olyan informatikai megoldásokat alakítottak ki, melyek kis- és középméretű vállalkozások részére is lehetővé teszik aktív azonosítók (pl. RFID-k) használatát termelési-logisztikai rendszerekben az átláthatóság biztosítására mind a vállalati határokon belül, mind azokon túlmutatva.
– Szélerőmű-farmok diagnosztikájára, valamint javítás-, illetve karbantartás-ütemezésére fejlesztettek ki új megközelítéseket.

Itt külön kiemelkedő a SZTAKI és a HITACHI cég kutatás-fejlesztési együttműködése melynek kapcsán az intézet munkatársai részt vesznek a japán cég számítógépes merevlemez részegységeket gyártó kaliforniai és japán gyárainak termelésirányítási rendszereinek fejlesztésében, termelőrendszer-viselkedés adaptív előrejelzése témakörben. A SZTAKI által kidolgozott modell, illetve a HITACHI-val közösen erre épített számítógépes rendszer alapján együttes szabadalom-benyújtás történt Japánban. A projekt sikerességét bizonyítja, hogy a SZTAKI közreműködésével a HITACHI további gyáraiban is adaptálni kívánja az eredményeket.

A témakör művelőinek másik kiemelkedő sikere, hogy 2009-ben döntés született arról, hogy – német kezdeményezésre – 2010-től kezdve az intézet keretein belül megkezdi működését a

„Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont". A Projektközpont megcélzott főirányához (digitális, valósidejű vállalatok és hálózataik) tartozó, már pontosított területek (termeléstervezés és –optimálás, kooperatív termelési és logisztikai struktúrák tervezése és menedzsmentje, termelő és szolgáltató vállalatok informatikája) kétségtelenné teszik, hogy Projektközpont tevékenysége szorosan kapcsolódik a magyarországi gazdasági- és a vonatkozó K+F prioritások jelentős részéhez.

Az automatizált irányítási rendszerek témakörben mintegy 49 kutatói besorolású munkatárs, valamint további 25 nem kutatói besorolású munkatárs dolgozik az intézetben. Az intézeti ráfordítás 744 millió Ft-ra tehető, melynek 51 %-a pályázati forrás. A gazdasági hasznosítás, illetve hasznosítási 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 intézet részt vesz az atomerőmű meglévő 4 blokkja üzemidő hosszabbításának irányítástechnikai, műszaki szakértői tevékenységében. Ennek során alapvető feladata az erőmű folyamatirányító rendszerének vizsgálata az üzemidő hosszabbítás, a biztonságos és gazdaságos üzemeltetés követelményeinek szempontjából. A szakértői munka egyik kiemelt területén közreműködnek az erőmű folyamatirányító rendszerének számítógép-, adat- és hálózatbiztonságot veszélyeztető események elhárítására felállított projektben is.
  Az intelligens gépjármű-irányítási kutatás mind a hazai autóipar, mind az egyre fontosabbá váló logisztika szempontjából kiemelkedő fontosságú téma.
  A jövőre nézve is alapvető fontossággal bír részvételük az AIRBUS valós fejlesztési igényeinek megfelelően létrehozott ADDSAFE FP7-es projektben.
– Mérnöki és üzleti intelligencia, számítógéppel integrált gyártás, digitális vállalatok, termelési hálózatok informatikája: A létrehozott rendszerek, melyek a mindennapos használat során is beváltak, nem iparág-specifikusak, több hazai vállalatnál is felhasználhatók, akár telepített formában, akár elektronikus szolgáltatásként. A kutatás-fejlesztési eredményeket alkalmazó legfontosabb hazai vállalatok: GE Hungary ZRt, Paksi Atomerőmű Zrt, AUDI Motor Hungaria Kft, Robert Bosch Kft, Knorr Bremse Fékrendszerek Kft. Európai kutatási projektek keretében vezető ipari cégekkel dolgoznak együtt (Bosch, BMW, VW, Siemens, Continental automotive, Finn Posta, stb.). Itt is kiemelendő a K+F együttműködés a Hitachi Production Engineering Research Laboratory (PERL) kutatóközponttal, valamint a „Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont" létrehozásának ténye.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Nemzetközi kapcsolatok

Az EU által adományozott Centre of Excellence kitüntető címükhöz méltóan szerepeltek az EU V. és VI. Keretprogramjaiban, ahol egyenként több mint 30 projektben, illetve kiválósági hálózatban vettek/vesznek részt, és projektvezetői feladatokat is ellátnak. Az EU VII. Keretprogramja keretében eddig 13, támogatást nyert projektben résztvevők (csak a 2009 év végéig megítélt projekteket számítva), több esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak. A

programok keretében Európa legkiválóbb cégeivel dolgoznak együtt az informatika-, az autó-, az energia- és a repülőgépgyártás területéről.

A SZTAKI - elsőként a régióból - 16 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. Több éves előkészítő munka és kutatási együttműködés eredményeként 2009-ben döntés született arról, hogy – német kezdeményezésre – 2010-től az intézet keretein belül megkezdi működését a „Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és –informatika Projektközpont". A két fél egymást részben átfedő, részben kiegészítő kutatás-fejlesztési és konzultációs potenciálja egyedi lehetőséget nyújt mind kellő hatékonyságú kutató-fejlesztői tevékenység végzésére, mind az eredmények gyakorlati átültetésére, határainkon belül és kívül egyaránt. Várakozásuk szerint a Fraunhofer-Társaság széleskörű elismertsége jelentős segítséget nyújt az MTA SZTAKI-nak – és a Projektközponton keresztül más akadémiai kutatóintézeteknek és az egyetemeknek – a közép-európai, különösen a német tulajdonú vállalatokkal történő kapcsolatfelvételben, és K+F együttműködés kialakításában. A SZTAKI volt a kezdeményezője a Central European Grid Consortium létrehozásának is, melynek célja a Közép-Európai országok Grid kutatásainak és infrastruktúra fejlesztéseinek összehangolása.
A SZTAKI közelmúltjában egyedülállóan sikeresek a japán RICOH, illetve HITACHI cégekkel folytatott K+F együttműködések. Az előbbi három év alatt 6, az utóbbi egy év alatt 1, a szerződő felekkel közös japán, illetve USA-beli szabadalmi bejelentést eredményezett.
Az intézet munkatársai eredményesen működnek a témakör legjelentősebb nemzetközi tudományos szervezetek (CIRP, IEEE, IFAC, IFIP, stb.) vezetésében és munkabizottságaiban. Számos munkatársuk tagja vezető nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának.
Az intézet több kutatóját kérték fel közreműködésre a VII. Keretprogram fő irányainak kialakításában, valamint részvételre az EU és az USA (National Science Foundation) közti együttműködési témák kidolgozása során. Az MTA kétoldalú egyezményes és a TéT kapcsolatok keretében megvalósult utazások különösen az alapkutatási fázisban igen hasznosak, a kutatók élnek is a lehetőséggel.

Részvétel a hazai felsőoktatásban

Az egyetemi graduális és posztgraduális oktatást az intézet továbbra is a kutatási tevékenység fontos velejárójaként és a jövőépítés elengedhetetlen feltételeként kezeli. Rendszeres oktatási tevékenységet folytatnak a következő hazai felsőoktatási intézményekben: BME, ELTE, CORVINUS, Pannon Egyetem, PTE, ME, PPKE, CEU. Az együttműködési formák sokrétűek: kutatók teljes, vagy egészállású egyetemi foglalkoztatása, kihelyezett tanszékek, egyetemi tanszékek vezetése, közreműködés informatikai karok létrehozásában.

A Magyar Info-Bionikai Központot az elektronika-informatika és a biológiai tudományok területén (különös tekintettel a neurobiológiára) a Magyar Tudományos Akadémia 6 kutatóhelye és 6 egyetemi kutatólaboratórium működteti. Szintén a SZTAKI kezdeményezésével jött létre a Magyar Grid Kompetencia Központ (MGKK) a BME, ELTE és NIIFI részvételével, később csatlakozott az RMKI is.

Sokéves együttműködés újabb jeleként, a Regionális Egyetemi Tudásközpontok keretében, a SZTAKI részt vesz a BME által vezetett Elektronikus jármű és járműirányítási tudásközpont projektben. Szintén kiemelendő az intézet szerepe a Mobil kommunikációs kutatás-fejlesztési központ és innovációs centrum című, a BME-vezetésű NKTH projektben.
Átlagosan mintegy 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.

Az intézet által szervezett jelentősebb tudományos rendezvények

A 2009 évi Európai Irányítástechnikai Konferencia (ECC'09) az EUCA-hoz (European Union Control Association) tartozó konferencia-sorozat elemeként az MTA SZTAKI szervezésével ezúttal Budapesten került megrendezésre 2009. augusztus 23-26 között. Az ECC kétévente megrendezett konferencia a rendszer és irányításelméleti tudományok legrangosabb európai megnyilvánulási fóruma. A konferencián elhangzott előadások a rendszer és irányításelmélet és azok ipari alkalmazásainak legújabb, nemzetközi érdeklődésre számot tartó eredményeit mutatták be. A konferencia erős hangsúlyt fektetett a tudományterület legaktuálisabb kérdéseire, mint pl. az elosztott rendszerek irányítási kérdéseire, a nagy-megbízhatóságú és autonóm rendszerekre és azok irányításának problémáira. A rendezvény magas szakmai színvonalát nagy szakmai tekintéllyel bíró nemzetközi programbizottság és a hagyományosan igényes peer-review rendszer garantálta. A konferencia szakmai programjának középpontjában 8 plenáris előadás állt, további 24 speciálisan válogatott meghívott szekcióban összesen 120 meghívott előadó által írt közlemény került bemutatásra. A konferencián bemutatott összes tudományos hozzájárulás száma elérte a 730-at. Az előadók 5 kontinens 57 országát képviselték.

Közel 700 kutató vett részt a Budapesten, 2009. május 10 és 15 között megrendezett The Eighth International Conference on Autonomous Agents and Multiagent Systems (AAMAS) konferencián. Az AAMAS konferenciasorozat 2002-ben indult három, magasra tartott konferencia egyesítéseként. Az egyesített konferencia célja, hogy egyetlen, magas színvonalú, nemzetközileg elismert archivált fórumot biztosítson az autonóm ágensek és multi-ágens rendszerek minden szempontra kiterjedő elméleti és gyakorlati kutatásának.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2009-ben is jelentős számú, az EU által támogatott projektjük indult, melyek keretében többségében kiemelkedő egyetemekkel, kutatóintézetekkel és több esetben világhírű cégekkel dolgoznak együtt. Az alábbiakban a 2009-ben indult nemzetközi projektek mellett néhány, más, már futó projekt is bemutatásra kerül, több, hazai támogatású projekttel együtt:

ADDSAFE: Advanced Fault Diagnosis for Safer Flight Guidance and Control

A statisztikák adatai szerint 1993 és 2007 évek között a polgári repülésben bekövetkezett balesetek 16%-áért az ún. irányításvesztés (Loss of Control - LOC) jelensége tehető felelőssé. Ezt a repülés biztonságára nézve rendkívül veszélyes jelenséget általában valamilyen emberi mulasztás, pilótahiba, egyéb technikai eredetű ok, vagy külső környezeti hatások okozhatják. A LOC jellegű hibák, még emberi mulasztások és pilótahibák esetében is, a fedélzeti

irányítórendszerek valamilyen nem kívánt módusú működésével, a beavatkozó szervek és az érzékelők hibáival hozhatók összefüggésbe. Ezért alapvető fontosságú ezeknek a hibáknak időben történő észlelése és elhárítása.
Az ADDSAFE projekt általános célja a rendszerek matematikai modellje ismeretén alapuló hibadetektálási módszerek, algoritmusok kidolgozása, amelyek képesek a repülőgépek aktív biztonsági mutatóinak növelésére és a fejlesztési/gyártási költségek csökkentésére. A projekt az akadémiai kutatások nyomán rendelkezésre álló modern detektálási módszereknek ipari technológiákba illesztésével és a velük szintézisben kidolgozott új tesztelési eljárások meghonosításával foglalkozik, valamint javaslatokat ad egy új hatósági bizonyítványolási rend kialakítására.

TRUCKDAS: Vezetéstámogató elosztott rendszerek innovációja haszongép-járműves platformra

A TRUCKDAS projekt a Knorr-Bremse Fékrendszerek Kft. irányításával, az MTA SZTAKI, az Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont (EJJT) és a TRIGON Kft. részvételével szerveződött. A projekt általános célkitűzése aktív biztonsági és vezetőtámogató funkciók kutatása és fejlesztése. A projekt a járművet egy biztonságkritikus elosztott valósidejű hálózatnak tekinti, amelyben az egyes elemek közötti kommunikációval segített együttműködés valósítja meg a szükséges járműfunkciókat. Ez alapján a jármű biztonságos működése érdekében több program került megfogalmazásra. A kormányzási beavatkozás és a hajtáslánc fejlesztése feladatban a kormányzási nyomaték, illetve a szöghozzáadás lehetőségének megteremtésével a hajtáslánc irányításának optimalizálása érhető el. A hajtáslánc megfelelő irányítása lehetőséget teremt az adaptív sebességtartó automatika és ütközésmérséklő rendszer, a kameraalapú sávlehagyásra figyelmeztető és sávtartást támogató rendszer, továbbá a kormány- és fékrendszer integrálásán alapuló menetstabilizáló rendszer haszonjárműves platformon való létrehozására. A projekt legfontosabb programja az oszlopban haladó haszonjárművek irányítása, ami az egyedi járműveken alkalmazott irányítórendszerek összehangolásával, a járműveken rendelkezésre álló fedélzeti érzékelők jeleinek feldolgozásával, valamint a járművek közötti intenzív kommunikációval érhető el. A projekt fontos célja, hogy az új járművezető-támogató funkciók segítségével a haszongépjárművekre jellemző szigorú gazdaságossági feltételek és üzemeltetési körülmények között is balesetszám-csökkentő hatást érjen el.

EOARD: Switching Systems: Controllability and Design. (Air Force Office of Scientific Research, Air Force Material Command)

A kutatás hibrid rendszerek irányíthatósági kérdéseivel foglalkozott, különös tekintettel lineáris bimodális rendszerek irányíthatóságára. Mátrixalgebrai eszközökkel leírható irányítási feltételek születtek és a stabilizálhatóság problémája is megvizsgálásra került. Az elméleti eredményeket gyakorlati példák demonstrálták, és azok egy nagysebességű szuperkavitációs jármű (HSSV) irányításában kerültek alkalmazásra.

EDGeS: Enabling Desktop Grids for e-Science

A projekt célja az EGEE szervíz grid integrálása BOINC és XtremWeb alapú desktop grid rendszerekkel és ezzel olyan nagy grid infrastruktúra létrehozása és működtetése, amivel új, rendkívül nagy számításigényű alkalmazások is végrehajthatók lesznek a gridben. Ennek a projektnek a SZTAKI PERL laboratóriuma a koordinátora.

S-CUBE: Software Services and Systems Network

A projekt célja a SOA és grid technológiák, illetve ezek ötvözésének a kutatása. A PERL feladata a grid brókerezési és monitorozási problémák vizsgálata, valamint a virtualizáció és ennek alapján az automatikus-szolgáltatás létrehozás kidolgozása.

ETICS-2: eInfrastructure for Testing, Certification and Integration of Software – Phase 2

A CERN által vezetett projekt célja olyan grid middleware és komplex szoftvertesztelési technikák kidolgozása, valamint a kapcsolódó infrastruktúra kiépítése, melyek – többek között – lehetővé teszik a különböző grid szolgáltatások gyors és hatékony tesztelését és automatikus minőségi tanúsítását. A PERL feladata a WS-PGRADE portál továbbfejlesztése a tesztelés magas szintű támogatása érdekében.

EGEE-III: Enabling Grids for E-SciencE-III (EGEE-III)

Ez a projekt az EGEE-II folytatása, melyben a SZTAKI szerepe jelentősége megnőtt. Az oktatási aktivitásuk mellett létrehozták a GASuC (Grid Application Support Center) szolgáltatást (http://www.lpds.sztaki.hu/gasuc/). Az EGEE-ban még másik 5 hasonló célú központ alakult és ezeket a SZTAKI koordinálja.

SEE-GRID-SCI: SEE-GRID eInfrastructure for regional eScience

Az SEE-GRID-2 projekt folytatásaként létrejött projekt keretében szerepük meteorológiai és geofizikai alkalmazásfejlesztés, továbbá a grid oktatás támogatása.

Új generációs közösségi WEB szolgáltatások és alkalmazások támogatása biztonságos, üzleti-alapú GRID platformmal

Nemzeti Technológia Program projekt, melynek célja a WEB2 szolgáltatások és desktop grid rendszerek előnyeinek integrálása, valamint az FP7-es EDGeS projekt eredményeinek hazai meghonosítása. A projektben kiemelt szerepet kap a kutatási eredmények hasznosítása és üzleti alapra helyezése.

Energy efficiency in large scale distributed systems

A COST akció az alternatív energiahatékonyságot növelő megoldások kutatásával foglalkozik az elosztott nagyléptékű számítási rendszerek területén, mivel azok egyre több számítási és tárolási erőforrást integrálnak egybe és ezáltal az energiafelhasználásuk is exponenciálisan növekszik. A magyar résztvevő alapvetően a Grid alapú alkalmazások fejlesztését támogató eszközeinek, valamint brókering megoldásaival kapcsolatos kompetenciát fejleszti tovább és terjeszti az akció segítségével.

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 autóipari beszállítók, akik maguk is világméretű hálózattal rendelkeznek (Continental, ZF Friedrichshafen). A kutatás-fejlesztés egyik iránya olyan moduláris termékstruktúra kialakítása, amely lehetővé teszi a gépjárművek minél későbbi, egyedi igényeknek megfelelő konfigurálását. Az MTA SZTAKI jelenleg a másik témában vesz részt, amely célja olyan,

kooperáción alapuló hálózat menedzselési módszerek és kommunikációs infrastruktúra kidolgozása, melyek alacsony raktárkészletek mellett is biztosítják a hálózat minden rétegében a végtermék-gyártóktól elvárt igen magas, közel 100%-os kiszolgálási szintet. A kutatás során az intézet hozzájárult a kommunikációs protokollok és egy, az adott területre jellemző közös fogalmi rendszer – ún. számítógépes ontológia – kidolgozásához, valamint részt vett együttműködési mechanizmusok kidolgozásában.

LiWA: Enrichment tools for Web archive

A projekt célja a Web tartalom archiválását „élővé" tenni. A Web tartalom hosszú távú megőrzése szolgálhat például tudományos vagy piackutatási célokat, vagy dönthet szerzői jogvitában, stb. A tartalom megőrzése iránt növekvő igényt mutatnak mind a könyvtárak, mind az archiváló szervezetek, mind a kialakulóban levő piacorientált szolgáltatások. A Web tartalom bizonyos sajátosságai, gyors dinamikája, illékonysága, formátum és szolgáltatás variánsai nagy kihívást jelentenek a megőrzés, archiválás területén. A projekt keretében átlépik a „fagyasztott" pillanatkép megőrzésének kereteit, és a pillanatfelvételek megőrzésén túl olyan „élő" Web archívumot kívánnak létrehozni, amely

1. hosszú távú interoperabilitást valósít meg az archívumok fejlődése mellett,
2. tiszta minőségű, lényegtelen „zajtól" mentes információt tartalmaz,
3. a formátumok széles választékát öleli fel.

A LiWA projektben az MTA SZTAKI szerepe a Web spam szűréssel kapcsolatos részfeladat vezetése, és szövegbányászati feladatok elvégzésében is közreműködnek. Hozzájárulásukat a Web spam szűréssel, a képi és szöveges keresőrendszerekkel kapcsolatos kutatásaik alapozták meg. Európai szintű siker, hogy résztvevői az FP7 Digital Libraries első felhívás 9 támogatást nyert STREP pályázata közül kettőnek.

JUMAS: Judicial Management by Digital Libraries Semantics

A projekt fő célja videó események detektálása és indexelése, illetve keresőrendszer komponensek integrálása egy közigazgatási multimédia dokumentumkezelő rendszer létrehozásának céljából.

TEXTREND: Intelligens szövegbányász alkalmazásplatform

A pályázat két, egymásra épülő célja (1) az integrált TEXTrend Platform eszköztár és szolgáltatási bázis létrehozása, ill. (2) az eszköztár demonstrációs alkalmazásainak kidolgozása a gazdasági és szakpolitikai döntéshozatal különböző területein. A TEXTrend platform célja a weben található dinamikus és óriási mennyiségű információ mély elemzése valamely specifikus területen, mint például a tudomány, vagy a gazdasági élet. Ez alatt az értendő, hogy szemben a szokásos kivonatolási vagy egyszerűen indexelési szolgáltatásokkal, a weben elérhető adathalmazból minőségileg új információt nyernek ki, aminek az előállítása egyenesen lehetetlen lenne pusztán emberi erőforrást felhasználva. Jó példa a trendek elemzése, ahol a cél az, hogy nagy mennyiségű dokumentumból (blogok, cikkek, stb) meghatározzuk, sőt megjósoljuk a közvélekedés vagy érdeklődés jellemzőit, vagy időbeli változását. Egy másik példa látens (pl. szociális) struktúrák felderítése és egy szempillantás alatt áttekinthetővé tétele automatikus szövegfeldolgozás, hálózatokat kezelő algoritmusok, és vizualizáció segítségével, pl. egy terület hatalmi és befolyási hálózata esetében. A sort sokáig lehetne folytatni. Ezek a mély információk a megfelelő területeken felbecsülhetetlen értékkel bírhatnak. Gondoljunk a politikai vagy gazdasági döntéshozatalra, vagy a tudomány-finanszírozás kérdésére.

MEDUSA: Multi sEnsor Data fusion grid for Urban Situational Awareness

Feladat a szenzorhálózatok és elosztott számítási struktúrák használatának kidolgozása a városi felügyeleti tevékenység segítéséhez, riasztási rendszer kialakításához. A 3D GIS (Geographical Information System) alapú rendszer segíti a parancsnoki döntéselőkészítést.

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 fejlesztett, tesztelt és dokumentált újszerű, nyílt forráskódú megoldásokat nyújtanak a termékek és adataik nyomon követésére. A projekt eredményeként olyan nyílt forrású szoftver-platform jött létre a termékek és adataik nyomon követésére, amely nem igényel költséges kezdeti beruházást, együtt használható a már meglevő, elterjedt, de kevésbé fejlett rendszerekkel, kicsi fejlesztés- és karbantartásigénye pedig nem követeli meg nagy szakembergárda állandó foglalkoztatását. A KKV-knak továbbá lehetőséget ad arra, hogy hozzáférjenek a szállítmányozó cégek árukövető infrastruktúrájához és RFID-olvasóihoz.

RELIAWIND: Reliability-focused research on optimizing wind energy systems design, operation and maintenance

A projekt célja a megújuló energiaforrások terén egyre jelentősebb szerepet betöltő szél-erőművek, szélerőmű farmok megbízhatóságának növelése, különös tekintettel a tengerre telepített rendszerekre, ahol a szervízelési és karbantartási munkálatok sokkal nagyobb költségkihatással bírnak, mint a szárazföldi telepek esetén. Az iparág legjelentősebb európai szereplőivel (GAMESA, HANSEN, ABB, SKF, stb.) együttműködve a SZTAKI feladata az intelligens felügyeleti és diagnosztikai rendszerek kifejlesztése.

VFF: Holistic, extensible, scalable and standard Virtual Factory

A projekt célja új koncepciójú Digitális Gyártás modellező rendszer kifejlesztése, amely a mai megoldásoknál gyorsabban és hatékonyabban támogatja a gyártási folyamatok tervezését, irányítását, átkonfigurálását vagy javítását. A projekt során kifejlesztésre kerülő új rendszer a tervezés alatt lévő, vagy meglévő termelési rendszerekre, mint önálló termékekre tekint, és azok teljes életciklusa alatt támogatja a komplex, valós rendszer dinamikus modellezését és életszerű elemzését, optimalizálását. A projekt további fontos célkitűzése, hogy a projekt eredményeit a kis és közepes vállalatok számára is elérhetővé tegye, melyek mindeddig kimaradtak a Digitális Gyárral kapcsolatos drága és bonyolult technológiák használatából. A SZTAKI az Audi Magyarországgal együttműködve dolgozik esemény-orientált szimuláció integrációján a projekt keretében kifejlesztendő VFF keretrendszerbe, valamint a logisztikai optimalizáló modul kifejlesztésében és tesztelésében.

EJJT*: Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont*

Az MTA SZTAKI a BME által vezetett Elektronikus Jármű és Járműirányítási Tudásközpont (EJJT) tevékenységében több vonatkozásban is meghatározó szerepet tölt be. Ilyenek a kommunikációs hálózaton alapuló rendszerirányítás, a kooperatív járműirányítási kísérletek, a gépjárművek aktív komponenseinek funkcionális integrálási lehetőségeinek vizsgálata és a hibatűrő fedélzeti elektronikus C-By-Wire típusú rendszerarchitektúráinak kutatása. Az intézet idevonatkozó tevékenységei során szoros együttműködést alakított ki a konzorciumi partnerekkel, így ipari vállalkozásokkal és egyetemi tanszékekkel.

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, Audi, Magyar Telekom, MOL, Paksi Atomerőmű, Knorr Bremse, Bosch, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékot jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el. Tengerentúli kooperációik pedig egészen új távlatokat nyitnak.

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

Publikációk

1. Bacsó G, Tuza Z: Clique-transversal sets and weak 2-colorings in graphs of small maximum degree. Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science 11 (2) : 15-24. (2009)
2. Benedek C, Szirányi T, Kato Z, Zerubia J: Detection of object motion regions in aerial image pairs with a multilayer Markovian model. IEEE Transactions on Image Processing 18 (10) : 2303-2315. (2009)
3. Benedek C, Szirányi T: Change detection in optical aerial images by a multilayer conditional mixed Markov model. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing 47 (10) : 3416-3430. (2009)
4. Bokor J, Szabó Z: Fault detection and isolation in nonlinear systems. Annual Reviews in Control 33 : 113-123. (2009)
5. Edelmayer A, Bokor J, Szabó Z: Inversion-based residual generation for robust detection and isolation of faults by means of estimation of the inverse dynamics in linear dynamical systems. International Journal of Control 82 (8) : 1526-1538. (2009)
6. Felszeghy B, Hegedűs G, Rónyai L: Algebraic properties of modulo q complete l-wide families. Combinatorics, Probability & Computing 18 (3) : 309-333. (2009)
7. Friedl K, - Ivanyos G, - Santha M, - Verhoeven Y: On the black-box complexity of Sperner's Lemma. Theory of Computing Systems 45 : 629-646. (2009)
8. Gerencsér L, Hjalmarsson H, Martensson J: Identification of ARX systems with non-stationary inputs - asymptotic analysis with application to adaptive input design. *Automatica* 45 : 623-633. (2009)
9. Gyárfás A, Sárközy G, Szemerédi E: Stability of the path-path Ramsey number. Discrete Mathematics 309 : 4590-4595 (2009)

10. Havasi, Szlávik Z, Szirányi T: The use of vanishing point for the classification of reflections from foreground mask in videos. IEEE Transactions on Image Processing 18 (6) : 1366-1372. (2009)
11. Isern D, Moreno A, Sánchez D, Hajnal Á, Pedone G, Varga L: Agent-based execution of personalised home care treatments. Applied Intelligence (doi: 10.1007/s10489-009-0187-6) : 1-26. (2009)
12. Karacs K, Prószéky G, Roska T: Cellular wave computer algorithms with spatial semantic embedding for handwritten text recognition. International Journal of Circuit Theory and Applications 37 (10) : 1019-1050. (2009)
13. Kárpáti P, Szkaliczki T, Böszörményi L: Designing and scaling distributed VoD servers. Multimedia Tools and Applications 41 (DOI: 10.1007/s11042-008-0219-y) : 55-91. (2009)
14. Kis T: Scheduling multiprocessor UET tasks of two sizes. Theoretical Computer Science 410: 4864-4873. (2009)
15. Kocsárdi S. Nagy Z. Csík Á. Szolgay P: Simulation of 2D inviscid, adiabatic, compressible flows on emulated digital CNN-UM. International Journal of Circuit Theory and Applications 37 (4) : 569-585. (2009)
16. Kós G, Ligeti P, Sziklai P: Reconstruction of matrices from submatrices. Mathematics of Computation 78 (267) : 1733-1747. (2009)
17. Kovács A, Brown K, Tarim S: An efficient MIP model for the capacitated lot-sizing and scheduling problem with sequence-dependent setups. International Journal of Production Economics 118 : 282-291. (2009)
18. Kukla T, Kiss T, Kacsuk P, Terstyánszky G: Integrating open grid services architecture data acces and integration with computational grid workflows. Philosophical Transactions of the Royal Society - A 367 : 2521-2532. (2009)
19. Lázár A, Vidnyánszky Z, Roska T: Modeling stimulus-driven attentional selection in dynamic natural scenes. Int J. of Circuit Theory and Applications 37 (1) : 3-30. (2009)
20. Lázár K, Csuhaj Varjú E, Lőrincz A, Vaszil G: Dynamically formed clusters of agents in eco-grammar systems. Int J of Foundations of Comp Sci 20 (2) : 293-311. (2009)
21. Miklós I, Novák Á, Satija R, Lyngsoe R, Hein J: Stochastic models of sequence evolution including insertion-deletion events. Stat. Methods in Med. Res. 18 (5) : 453-485. (2009)
22. Monostori L, Kis T, Váncza J, Kádár B, Erdős G: Real-time, cooperative enterprises for customised mass production. Int J of Comp Integrated Manufacturing 22(1): 55-68. (2009)
23. Nagy S, Petres Z, Baranyi P, Hashimoto H: Computational relaxed TP model transformation: restricting the computation to subspaces of the dynamic model. Asian Journal of Control 11 (5) : 461-475. (2009)
24. Németh E, Bartha T, Fazekas C, Hangos K: Verification of a primary-to-secondary leaking safety procedure in a nuclear power plant using coloured Petri nets. Reliability Engineering and System Safety 94 (5) : 942-953. (2009)
25. Péni T, Kulcsár B, Bokor J: Included L2 norm improvement by interpolating controllers for discrete-time LPV systems. European Journal of Control 15 (5) : 545-559. (2009)

26. Rásonyi M, Schachermayer W, Warnung R: Hiding a drift. Annals of Probability 37: 2459-2479. (2009)
27. Szabó Z: Geometric control theory and linear switched systems. European Journal of Control 15 (3-4) : 249-259. (2009)
28. Szederkényi G: Comment on "identifiability of chemical reaction networks" by G. Craciun and C. Pantea. Journal of Mathematical Chemistry 45 : 1172-1174. (2009)
29. Ueda K, Takenaka T, Váncza J, Monostori L: Value creation and decision-making in sustainable society. CIRP Annals-Manufacturing Technology 58 (2) : 681-700. (2009)
30. Vámos T: Social, organizational, and individual impacts of automation. In: Springer handbook of automation. Berlin, Springer, 2009, pp. 71-92. (Ed.: Nof, S.)

Szabadalmi bejelentések

1. Kagawa M, Kovács L; Micsik, A.; Pataki, B.: Collaboration system, method, program, Japan, March 17, 2009, Lajstromszám: JP 2008-068141. (A SZTAKI-RICOH együttműködés alapján)
2. Kagawa M, Kovács L; Micsik, A.; Pataki, B.: Collaboration system, method, program, Japan, Augustus 25, 2009, Lajstromszám: JP 2008-214879. (A SZTAKI-RICOH együttműködés alapján)
3. Kagawa M, Kovács L; Micsik, A.; Pataki, B.: System for assisting collaborative activity, USA, September 17, 2009, Lajstromszám: US 2009/0235182 A1. (A SZTAKI-RICOH együttműködés alapján)
4. Lengyel A, Nonaka Y; Kádár, B.; Monostori, L.: Self-building production simulation systems, Japan, 2009, Lajstromszám: JP 2009-163373. (A SZTAKI-HITACHI együttműködés alapján)
5. Matsuno Y, Kovács L; Pataki, B.: Contents management system, method, program, Japan, February 27, 2009, Lajstromszám: JP 2009-046110. (A SZTAKI-RICOH együttműködés alapján)
6. Stejic, Z, Kovács L: Object linkage system, method, program, Japan, March 17, 2009, Lajstromszám: JP 2008-068096. (A SZTAKI-RICOH együttműködés alapján)
7. Stejic Z, Kovács L: Object linking systems, object linking method and recording medium, USA, September 17, 2009, Lajstromszám: US 2009/0234884 A1. (A SZTAKI-RICOH együttműködés alapján)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	283		Ebből kutató[2]:		140
PhD, kandidátus:	66	MTA doktora: 18	levelező tag: 0	rendes tag:	7
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					8
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					69
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					298
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					298
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		63
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	10		idegen nyelven:		30
összesített impakt faktor[6]:	72,816		összes hivatkozás száma[7]:		2291
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					2291
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 12		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 6,33		MTA doktora: 1,66	levelező tag: 0	rendes tag:	0,33
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	159		poszterek száma[12]:		0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					55
TDK munkát készítő hallgatók száma:	22		Diplomamunkát (BSc):		19
Diplomamunkát (MSc):	31		PhD-t:		50
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					3654
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				1188,34	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	16		Teljes saját bevétel[18]:	1446,78	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				62,31	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				258,76	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				18,117	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				678,08	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				5,07	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				424,44	MFt

SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest, Konkoly-Thege M. út 29-33.,Postacím: 1525 Budapest, Pf. 49
Telefon: 392-2212, Fax: 392-2215
e-mail: szfki@szfki.hu, honlap: www.szfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Alapkutatások végzése az elméleti és kísérleti szilárdtestfizika (kondenzált anyagok fizikája, nanoszerkezetek, vékonyrétegek és felületek fizikája), továbbá az elméleti és kísérleti optika (optikai kristályok fizikája, nemlineáris és kvantumoptika, lézerfizika) területén. *Alkalmazott kutatások* végzése (új anyagok előállítása és vizsgálata, új anyagvizsgáló módszerek fejlesztése, optikai kristályok és vékonyréteg eszközök előállítása és alkalmazása, valamint a lézerek fejlesztése és alkalmazása). Az alaptevékenységhez illeszkedő *új metodikák* fejlesztése. Graduális és posztgraduális *szakemberképzés*.

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

Erősen korrelált rendszerek

Ismeretes, hogy egy és két dimenzióban léteznek olyan gerjesztések, amelyek törtszámú kvantumszámmal jellemezhetőek. Háromdimenziós anyagok esetén ezek létezése mindmáig kérdéses. Green függvényes Monte-Carlo módszer és a perturbációs technika segítségével közvetlen numerikus bizonyítékot találtak olyan kvantum folyadék fázisnak a létezésére, amelyikben tört kvantumszámú gerjesztés lehetséges. Ez a kvantum dimer modell gyémánt rácson. Megmutatták, hogy ebben a folyadék fázisban a törtszámú monomer gerjesztések szétválasztásához szükséges energia eltűnik, és az energiaspektruma megegyezik a 3+1 fázisú kvantum elektrodinamika Coulomb fázisáéval.

Komplex rendszerek

Egy olyan, *L* hosszúságú kvantum Ising láncot vizsgáltak a kritikus pontban, ahol a láncot egy lokalizált, vagy kiterjedt hiba két részre osztja. Meghatározták a két rész közötti összefonódási entrópiát mind egyensúlyi esetben mind annak kvencselés utáni időfüggését. Azt találták, hogy lokalizált hiba esetén az entrópia a lánc hosszának logaritmusával illetve a kvencselés óta eltelt időnek a logaritmusával növekszik egy olyan effektív központi töltésnek megfelelően, amely a hiba erősségének folytonos függvénye.

A diagonális és a nem-diagonális hosszú távú rend egyidejű jelenlétének lehetőségét vizsgálták bizonyos boson rendszerekben. Orosz fizikusok korábbi javaslata szerint, ilyen koherens kristály állapot létezhet elegendően nagy sűrűségek esetén, ha az integrálható párpotenciál Fourier komponensének vannak negatív komponensei is. Ezt az eredetileg a Hartree közelítésen alapuló javaslatot igazolták periodikus átlagtér kölcsönhatás esetére.

Elektronállapotok fémekben

Az 5d átmeneti fémek felületi feszültségének és a felületi rétegek relaxációjának szisztematikus elméleti vizsgálatát végezték el a sűrűség funkcionál módszerével. A számolások azt mutatják, hogy minden felületre a rétegek összehúzódása lép fel a köbös Pt és Au (111) felületén kívül, ahol a 4d fémekhez hasonlóan gyenge kiterjedés jelenik meg.

Eredményeik azt mutatják, hogy a szoros pakolású felületek relaxációja az 5d sorozatban a betöltési szám növekedésével csökken. A felületi feszültség, mint az atomszám függvénye, a relaxált, szoros pakolású felületekre a felületi energiához hasonló függést mutat.

Az egzakt muffin-tin pályák módszerén alapuló ab initio teljes energiaszámítással meghatározták a lapcentrált köbös fázisban a $Pd_{1-x}Ag_x$ rendezetlen ötvözet rugalmas tulajdonságait. Az összetétel rendezetlenségét a koherens potenciálközelítéssel tárgyalták. Meghatározták mind az egykristály, mind a polikristályos állapot rugalmas állandóit és a Debye hőmérsékletet a teljes koncentráció tartományban ($0<x<1$). Megmutatták, hogy a Pd-Ag ötvözet rugalmas paramétereinek az összetételtől való függése jelentősen eltér mind az egyszerű lineáris, mind a parabolikus viselkedéstől.

Nem-egyensúlyi ötvözetek

Nanoszerkezetek kiindulási alapjául szolgáló amorf ötvözetek mágneses tulajdonságainak nyomásfüggését vizsgálták szupravezető kvantum interferométer (SQUID) magnetométer segítségével. A nyomás hatására szokatlanul nagy változásokat figyeltek meg az amorf Fe-Mn-B ötvözetek Curie hőmérsékletében és telítési mágnesezettségében, amelyek egy nagyságrenddel nagyobbak, mint az az elméleti számítások alapján várható.

Fe-Ag granuláris ötvözetek és nem-összefüggő multirétegek mágneses tulajdonságait vizsgálták SQUID magnetométer és külső mágneses térben végzett Mössbauer mérések segítségével. Szuperparamágneses viselkedést figyeltek meg, a nagy mágnesterű adatok analízisével meghatározták a mágneses szemcsék méretét. Ennek növekedésével magyarázható a részecskék blokkolási hőmérsékletének gyors növekedése növekvő Fe koncentrációval.

A mágneses vékonyrétegekben zajló folyamatok feltárása a gyakorlatban egyre nagyobb jelentőséggel bíró mágneses nanoszerkezetek kialakítása és alkalmazása szempontjából fontos.

Különleges szén nanoszerkezetek kutatása

A kutatások három anyagcsaládra koncentráltak, ezek: fullerénalapú vegyületek, szén nanocsövek és grafénrétegek. Fullerén-kubán kokristályok rotor-sztátor szerkezeteinek új tagjait állították elő a kubán molekula módosított változataival. Az AC_{60} polimerek mechanokémiai dimerizációját vizsgálták. Folytatták a szupramolekuláris szerkezetek rezgés-spektroszkópiai vizsgálatát, ezen belül a hidrogénkötések azonosítását hőmérséklet- és koncentráció-függő infravörös mérésekben, valamint a szén nanocsövek felületére kötő vezető polimerek infra- és Raman-spektroszkópiai jellemzését. Ugyancsak vizsgálták új módszerekkel előállított orientált grafénrétegek optikai tulajdonságait.

Fázisátalakulások elméleti vizsgálata

A heterogén kristálynukleáció fázistér modelljét kiterjesztették binér ötvözetek leírására. A módszer hatékonyságát komplex polikristályos megszilárdulási morfológiák esetén mutatták meg, pl. shish-kebab szerkezet, oszlopos-ekviaxiális átalakulás ill. binér ötvözetek front-részecske kölcsönhatása. Diffúziós időskálán működő sűrűségfunkcionál elméletet alkalmaztak a tércentrált köbös, lapcentrált köbös és szorosan pakolt hexagonális szerkezetek kristályosodásának leírására. A munka során éles lapokkal határolt egyensúlyi formákat, ill. a kétdimenziós nukleáció diffúzió-kontrollált kristálynövekedésével konzisztens réteg-szerkezeteket figyeltek meg.

Egyedi molekulák szerkezetének vizsgálata

Máig megoldatlan feladat az egyedi, nem-kristályos biológiai molekulák szerkezetének meghatározása. A csoport bekapcsolódott az Európai Szabadelektron Lézer építésére és tudományos felhasználásának előkészítésére szerveződött nemzetközi együttműködésbe. Ennek keretében kifejlesztettek egy speciális molekuladinamikai programcsomagot, amely a minta lézerimpulzusban való viselkedését írja le. Tisztázták a molekulák inhomogenitásának hatását a Coulomb-robbanásra. A mérések feldolgozására a szimmetria felhasználásával új eljárást dolgoztak ki. Ennek segítségével megmutatták, hogy reális kísérleti paraméterekkel 10^6 2D diffrakciós kép elég lehet a mérések osztályozására, ami a 3D adatok előállításához szükséges.

Eredményeik eddig nem hoztak közvetlen gazdasági hasznot, a továbbiakban azonban hozzájárulhatnak olyan alkalmazásokhoz, amelyeknek már jelentős társadalmi-gazdasági haszna van.

Rádiófrekvenciás spektroszkópia

Széles jelű ^{1}H-NMR-rel ki lehet mutatni az igazi rendezetlen fehérjék nagy hidratációs potenciálját. Ez a technika alkalmas a tömbi víz megfagyasztását követően a hidratációs víz mennyiségének megmérésére. Széles jelű ^{1}H-NMR-t használtak a teljes C-terminális prolinban gazdag szakasz és három fragmensének a szerkezeti jellemzésére. A hidratációs réteg nagy vízmennyisége bizonyítékul szolgált a fehérjefragmensek nyitott és nagymértékben oldószernek kitett természetére, vagyis a teljes prolinban gazdag szakasz igazi rendezetlen voltára.

Meghatározták a globuláris fehérje ubikvitin nem megfagyó/hidratációs víz fajhőjét differenciális pásztázó kalorimetriás és széles jelű ^{1}H-NMR adatok kombinációját felhasználva. Megállapították, hogy az ubikvitin és hidratációs rétege termodinamikai értelemben úgy viselkedik, mint egymással nagymértékben összekapcsolt, egyetlen fázis.

Több különböző magas hőmérsékleti szupravezető anyag mikrohullámú felületi impedanciájának és vékonyrétegeken mért mágneses ellenállásának elemzésével megmutatták, hogy ezekben az anyagokban a disszipáció más hatványkitevővel függ a mágneses tértől, mint a „klasszikus” szupravezetőkben. Ez az eredmény a magas hőmérsékletű szupravezetők nagy mágneses térbeli alkalmazása szempontjából is jelentős.

Elektrolitikus nanoszerkezetek

Folytatódott az MTA ATOMKI-val korábban megkezdett együttműködés az elektrokémiai úton leválasztott minták reverz mélységprofil-analízisében. Elektrolitikus FeCoNi ötvözetekről kimutatták, hogy a leválás kezdeti szakaszában eddig nem vizsgált zónaképződés történik, és a tömbi összetétel csupán mintegy 150 nm-es mintavastagság után áll be. A kezdeti zónaképződés az ötvözet komponenseinek leválási preferenciájával, míg az állandósult összetétel kialakulása a kiindulási anyagok véges transzportsebességével magyarázható. A kezdetben leváló réteg vastartalma igen nagy, a hordozótól távolodva azonban gyorsan csökken, és párhuzamosan a nikkel tartalom megnő. Korrelációt lehetett kimutatni a tömbi leválás szakaszában az egyes ötvözőelemek koncentrációjában fellépő fluktuációk között.

Sor került Co-Ag/Ag multirétegek elektrokémiai leválasztással történő előállítására és magnetotranszport sajátságaik vizsgálatára is. Co-Ag ötvözet képződése nem volt

tapasztalható, és a két fém eltérő rácsparaméterei miatt nem képződött hosszú távon rendezett rétegeket tartalmazó anyag sem. A Co-Ag/Ag multirétegek mágneses ellenállása 0,5-2 % között volt. A mágneses ellenállás szuperparamágneses járulékának aránya összhangban volt a szerkezetvizsgálatból kapott adatokkal.

A 2009. év során folytatták egy speciális izokémikus ásványreakció – a gránát bomlása nanométeres szemcseméretű, féregszerű összenövést mutató anortit-ortopiroxén-spinel fázisegyüttessé (szimplektitté) – kutatását. Ennek alapján modellezték a mozgó reakciófront mentén történő diffúzió-kontrollált fázisszétválás sebességét és a képződő szimplektit mikroszerkezetét.

Fémtechnológia és mágnesség

A metallurgiai kutatások keretében az amorf képződési hajlam (GFA) mellett vizsgálták a tiszta, egyfázisú, nagyentrópiájú ötvözetek képződési hajlamát (HEA-FA). Az irodalmi és saját adatok feldolgozása azt mutatja, hogy a képződési feltételek ellentétesek. Az amorf szerkezet kialakításához szükséges feltétel a nagy atomi átmérő különbség és a közepes képződési entalpia, míg az egyfázisú, nagyentrópiájú ötvözet esetében kis értékű mind az atomátmérők eltérése, mind a keveredési entalpia. Kísérleti ötvözeteket állítottak elő a képződési entalpia versus atomi méretkülönbség diagrammok alapján. Új, nagy melegszilárdságú amorf $Al_{60}Ti_{20}(Fe\text{-}Ni\text{-}Co)_{20}$ és nagyentrópiájú (TiZrHfVNb) ötvözeteket állítottak elő.

Mágnesteres hőkezelő berendezéssel vizsgálták a keresztirányú indukált anizotrópiák létrehozásához szükséges aktiválási energiát. Meghonosították az ipari partnernél (Tommy Invest Electronics Kft) a mágnesteres hőkezelési technológiát, amivel a megrendelő igénye szerint lehet változtatni a hiszterézis görbe alakját.

Digitális lock-in technikára alapozva, 1 mg-os minták egyidejű termomágneses és DTA mérésére alkalmas kísérleti eszközt fejlesztettek ki, amivel a mágneses és termikus átalakulások egyazon felfűtés – lehűlés ciklus folyamán vizsgálhatók. A berendezés szabadalmaztatása folyamatban van.

Komplex folyadékok

Új eljárást dolgoztak ki a központi aromás gyűrűn deutériummal jelzett banán alakú folyadékkristály molekulák előállítására.

Flexoelektromos domének és elektrokonvekciós mintázatok közötti átmenetet figyeltek meg 0,1 Hz alatti frekvenciákon. Megadták a jelenség elméleti leírását. Banán és rúd alakú nematikus folyadékkristályok elegyeiben feltérképezték az elektrokonvekciós mintázatok koncentrációfüggő morfológiai változásait.

Elektromos és mágneses térrel indukált szerkezeti változásokat figyeltek meg mágneses szén nanocsövekkel elegyített folyadékkristályban.

Meghatározták a folyadékkristály felületi átorientálásának relaxációs idejét polietil-metakrilát filmen. Kimutatták a fénnyel keltett optikai anizotrópiát azo-festékkel dópolt polimer filmben.

Feltérképezték a bifenil irányított megszilárdulása során fellépő mintázatok jellemzőit.

Kísérleteik alapján magyarázatot adtak a durva lejtőn lefolyó szemcsés anyagokban megfigyelt hosszanti instabilitások kialakulására.

A fenti kutatások a jelenségek mélyebb megértését szolgálják, az új anyagok előállításával kapcsolatos eredmények hordozhatnak potenciális alkalmazási lehetőséget.

Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban

Az atomi felbontású neutron holográfia módszerét alkalmazták hidrogén tartalmú kristályok szerkezetének háromdimenziós képi megjelenítésére. A holografikus mérésekben alkalmazható két módszer – belső detektoros és belső forrásos holográfia – esetére, ill. kombinációjával kidolgozták az ú.n. dupla rekonstrukciós eljárást, amivel minimálisra lehet csökkenteni a mért képen a nem holografikus effektusok torzító hatását. A Budapesti Kutatóreaktor egyik termikus neutronnyalábjára telepített háromtengelyű spektrométert speciálisan holografikus mérésekre kialakítva, méréseket végeztek ammónium-klorid, és palládium hidrid egykristályokon. Mint ismeretes, általában a hidrogén atomok szerkezeti elhelyezkedésének vizsgálatára igen szűkösek a lehetőségek, ezért nagy jelentőségű a neutron holográfia alkalmazhatósága.

Az ammónium-klorid szobahőmérsékleten CsCl szerkezetű. A hidrogének első szomszédja a nitrogén atom, amely 1,03 Å távolságra van tőle. Mivel a köbös elemi cellában nyolc lehetséges hidrogén pozíció van, a rekonstruált képen a hidrogénnek nyolc nitrogén első szomszédja jelenik meg köbös szimmetriával. Az elemi cellában a kétszer négy hidrogén mindegyikének három hidrogén első szomszédja van. Ezek helyét, ill. a klór ionok távolságát határozták meg nagy pontossággal. A palládium nagy hidrogén-befogadó képességének köszönhetően az energiagazdálkodás szempontjából fontos rendszer. Az fcc kristályrácsba a hidrogén oktaéderes és tetraéderes rácsközi helyre tud beülni. A hidrogén szobahőmérsékleten és az alatt oktaéderes intersticiális helyre épül be, azaz a kocka alakú elemi cella közepébe és él közepeire. Az atomi felbontású holografikus rekonstrukcióval minden eddigi mérésnél pontosabban sikerült megállapítani a hidrogének pozícióit.

Neutronszórás

Az XCl_4 (X: C, Si, Ge, Sn) összetételű molekuláris folyadékok szisztematikus szerkezetvizsgálata során, amely neutron- és röntgendiffrakciós kísérleteket és az ezeken alapuló fordított Monte Carlo (RMC) modellezést tartalmazott, kiderült, hogy e folyadékokban (különösen a széntetrakloridban) lényegesen hosszabb távú orientációs korrelációk találhatók, mint azt a korábbi becslések jósolták. Diffrakciós kísérletek és molekuláris dinamikai (MD) szimulációk egy újszerű kombinációjával megmutatták, hogy CsCl vizes oldatában az ionok hidrátszférájának leírására az MD elég pontos eredményeket szolgáltat, azonban – meglepő módon – a víz-víz korrelációk MD-ből származó képe nem hozható konzisztenssé a diffrakciós adatokkal. Neutron és röntgendiffrakciós, valamint EXAFS kísérleti adatok RMC elemzése alapján kizárták, hogy a DVD alapanyag $Ge_2Sb_2Te_5$-ben – az utóbbi időben jelentős publikációkban javasolt – nagyméretű üregek volnának. Urántartalmú boroszilikát üvegek szerkezetének neutron- és röntgendiffrakción alapuló RMC modellezése jelentős U-Si korrelációk jelenlétére utal; ennek alapján feltételezik, hogy az U részt vesz az amorf hálózat kialakításában. Neutron- és röntgen-pordiffrakciós, valamint 2 és 800 K között elvégzett mágneses mérések azt jelzik, hogy az $YCrO_3$ és a $YFeO_3$ szilárd oldatot alkotnak, amelyben erősen frusztrált mágneses kölcsönhatások találhatók.

Lézerfény és szilárd anyag – főként nemlineáris – kölcsönhatásai

Elméletek: Kifejlesztettek egy új nagy teljesítőképességű elméleti módszert vékony fém nanorétegek óriás elektromágneses terű felületi plazmonokkal indukált felharmonikus sugárzásának leírására. A módszer alapján kísérleti eredményeik kielégítő pontossággal értelmezhetők.

A részecskék kétdimenziós (például grafénbeli) hullámmechanikai terjedésekor sérülő Huygens-elv és a kvantumos anti-centrifugális interferencia-erő fellépését a megfelelő Wigner-függvények analitikus meghatározása alapján értelmezték.

A nagyintenzitású nemlineáris indukált Compton-szóráskor keletkező foton-elektron összefonódást elsőként mutatták ki elméletileg. Meghatározták a végállapoti kvantumrendszer maradék entrópiáját.

Kísérletek: Femtoszekundumos technológiára irányuló kísérleteket hajtottak végre saját építésű unikális hosszú-rezonátoros titán-zafír oszcillátorukon, mely nagyságrendekkel nagyobb impulzusenergiát szolgáltat, mint a rövid-rezonátorú standard titán-zafír rendszerek. Elsőként teszteltek ún. nagydiszperziójú (a standart csörpölt tükröknél két nagyságrenddel nagyobb diszperziót szolgáltató) tükröket a rezonátoron belül. Megmutatták továbbá, hogy az impulzusenergia 200-ról 500 nJ értékre növelhető az oszcillátor akusztooptikai cavity-dumping-je útján. Folytatták a néhány-ciklusos lézerimpulzusokkal keltett és a felületi plazmonokkal erősített elektron-gyorsítás vizsgálatát. Sikerült megmutatniuk, hogy a keV tartományba eső energiájú elektronok még ezen extrém paraméterekkel bíró folyamatban is kelthetők (amikor az elektronok csupán néhány femtoszekundumot töltenek a gyorsító térben).

A Max Planck Institute for Quantum Optics-tól ajándékba kapott, STM-vizsgálatokra épülő laboratóriumot működésbe állították saját budapesti laboratóriumukban. Elkezdték e berendezés használatát az aranyfelületen nyerhető STM jelek időbeli tulajdonságainak vizsgálatával.

Gázlézerek és gázkisülések

Poros plazma kísérlet épült, amely segítségével erősen kölcsönható sokrészecske kettősréteg hullámdiszperziós tulajdonságait határozták meg. Molekuladinamikai szimulációs módszerekkel vizsgálták az erősen kölcsönható rétegelt, két- és három-dimenziós sokrészecske-rendszerek szerkezeti, transzport és kollektív dinamikai tulajdonságait, valamint a kétdimenziós rendszer szilárd-folyadék fázisátalakulásának sajátosságait. Részecske-szimulációs módszerrel tanulmányozták rádiófrekvenciás gerjesztésű plazmákban az elektronok és ionok dinamikáját, kimutatták, hogy kettős frekvenciájú táplálás esetén a felületekre érkező ionok energiája és fluxusa egymástól közel függetlenül hangolható. Elektrolitkatódos atmoszferikus kisülésben meghatározták a plazma elektron és gázhőmérsékletének térbeli eloszlását, valamint emissziós spektroszkópia segítségével meghatározták a kisülési plazmában az aktív vegyületek elhelyezkedését. Meghatározták a biomedikában és nanotechnológiában alkalmazott aktív részecskék töltéseloszlását mikrohullámú kisülésekben és utókisülésekben kinetikus és 3D hidrodinamikai modellek segítségével. Ezen kutatások részint fizikai alapjelenségek jobb megértését, másrészben egyes ipari eljárások (a mikroelektronika és a környezetvédelem területén) optimalizálását segítik.

Lézeralkalmazások, amorf vékonyrétegek

Az osztály tevékenyen részt vett az Extreme Light Infrastructure (ELI) Európai Projekt előkészítő fázisában, melynek eredményeképpen az attoszekundumos lézeres kutatási központ Magyarországon fog felépülni. A projekt méreteit jól tükrözi, hogy 13 európai ország összefogásából született, és célja a világ legnagyobb teljesítménysűrűségű (>1025 W/cm^2) lézerének létrehozása. Az osztályon folyó széleskörű lézeres kutatások közül az alábbi kísérleti alkalmazások lettek kifejlesztve az ELI projekthez: interferometrikus módszer optikai felületek minősítéséhez nanométeres felbontásban, vibráció analízis, bevonatok és kristályok minősítése lézeres fényszórással, különleges bevonatok készítése.

Elkészült a négycsatornás aeroszol analizátor ipari változata, mellyel az aeroszolok részecskeméret meghatározása mellett azok törésmutatóját (valós és komplex rész egyaránt) is meg lehet határozni. Az eszköz a mobil laboratóriumba lett installálva, mellyel több mérési kampányban is részt vett. Megkezdődött továbbá egy új, részecskesebességet és méreteloszlást mérő műszer fejlesztése, amely a méreteloszlás meghatározás alsó határát a 50-500 nm tartományba tolja ki. A készülék prototípusa, a hozzá tartozó adatfeldolgozó szoftverrel elkészült.

Nanokristályos gyémánt felületére felvitt arany nanoklaszterek katalitikus hatást mutattak a levegőben található szén-monoxid oxidációs folyamata során. A rendszer katalitikus aktivitását felületerősített Raman szórás és infravörös spektroszkópia segítségével sikerült igazolni. Az alkalmazott nanokristályos gyémánthordozó reprodukálhatóan előállítható tiszta hordozó felületet biztosít, és ez által jelentősen hozzájárul a katalitikus folyamat mechanizmusának tisztázásához. A nanokristályos gyémánt-arany katalizátor fontos gyakorlati jelentőséggel bír, és az üzemanyagcelláktól kezdve a szenzorokig számos potenciális alkalmazási lehetősége van.

Femtoszekundumos lézertechnika

Diszperziós lézertükrökkel kapcsolatos kutatásaik folytatásaként megmutatták, hogy a nagyreflexiójú dielektrikum vékonyréteg tükrök reflexiós csoportkésleltetése és a bennük felépülő állóhullámú elektromágneses térben tárolt energia között arányosság áll fenn. Ezt különböző vékonyréteg szerkezeteken végzett numerikus számításokkal támasztották alá. A vizsgált szerkezetek között volt negyedhullámú tükör, ultra-szélessávú csörpölt tükör, Gires-Tournois interferométer (GTI) tükör, illetve többüreges GTI (MCGTI) tükör.

Nemrégiben, a Furukawa Electric Technológia Intézet Kft.-vel és az R&D Ultrafast Lasers Kft.-vel közös projekt keretében a csoport olyan újszerű szilárd vagy légmagos photonikus bandgap szálakat tervezett, melyek több tíz vagy akár több száz nanométer széles tartományban nulla vagy a hagyományos szálakhoz képest fordított diszperzió-meredeksséggel rendelkeznek a szál magasabbrendű módusaiban. 2009-ben ennek folytatásaként olyan fotonikus bandgap szálakról számoltak be, melyek ugyanezt a szál alapmódusában valósítják meg. Az új, fordított diszperziós-meredekségű optikai szálak szállézerekben és száloptikai parametrikus oszcillátorokban (FOPO) történő alkalmazása elősegítheti olcsó és stabilan működő, optikai szál alapú femtoszekundumos fényforrások kifejlesztését, amit az R&D Ultrafast Lasers Kft. vezette kutatás-fejlesztési konzorcium is célul tűzött ki.

Optikai vékonyrétegek

BK7 üvegből és Suprasil 1 ömlesztett kvarcüvegből készített nagyméretű lézeroptikai elemek szuperpolírozási technológiáját fejlesztették ki, különös tekintettel az ELI programban való részvételre. Megkezdték nagyméretű optikai elemek ionosan segített elektronsugaras bevonását, ugyancsak az ELI programmal összhangban. Nagy görbületi sugarú dielektrikum lézertükrök kutatását-fejlesztését végezték hosszú rezonátorú Ti-zafír lézerekben történő alkalmazásokhoz. Az eddigi gyakorlatnak megfelelően a feladatok megoldásában és hasznosításában minden esetben az Optilab Kft. az üzleti partner.

Optikai egykristályok növesztése és minősítése

$YAl_3(BO_3)_4$:Yb,Tm (YAB) kettősen adalékolt kristályokat növesztettek flux módszerrel. A kristályokban lumineszcencia mérésekkel energiaátadást azonosítottak Tm→Yb és Yb→Tm irányokba. A 975 nm-es gerjesztés után (Yb $^2F_{5/2}$-szint) két nagyobb energiájú Tm-emissziót ($^3H_4 \rightarrow {}^3H_6$, $^1G_4 \rightarrow {}^3H_6$) figyeltek meg (fel-konvertálás), amelyek intenzitásfüggéséből 2- és 3-fotonos folyamatokat azonosítottak. Kettősen adalékolt (Eu,Tb) gadolinium aluminium borátot (GAB) állítottak elő szilárd fázisú szintézissel. A különböző Eu és Tb tartalmú anyagokból flux módszerrel egykristályokat növesztettek, és megállapították a koncentráció határokat a trigonális huntit szerkezet megőrzésére.

Meghatározták a Li_2O-B_2O_3-Y_2O_3 hármas rendszerben a $Li_6Y(BO_3)_3$ (LYB) kristályosodási tartományát. Más tartományokban Y_2O_3, $Li_3Y_2(BO_3)_3$, $Li_3Y(BO_3)_2$, Y_3BO_6 és YBO_3 fázisokat azonosítottak. Meghatározták a nemlineáris optikai állandók abszolút értékeit β-BaB_2O_4 kristályokon infravörös és látható tartományokban.

Kristályaikat THz-es alkalmazásokhoz az M.I.T. Lincoln Laboratory Lexington MA, USA és a Center for Free Electron Laser Science, Hamburg, míg elektrooptikai modulátor céljára a S.A.R.L. DIDA CONCEPT, Aboué, Franciaország részére értékesítették.

Optikai kristályok karakterizációja és hibahelyeinek vizsgálata

Jelentős eredményeket értek el a nemlineáris optikai anyagok, főleg oxidkristályok és optikai rendszereik vizsgálatában és optimalizálásában, elősegítve azok gyakorlati alkalmazását. $YAl_3(BO_3)_4$ (YAB) kristályokban transzmissziós elektrondiffrakcióval és elektronsugaras mikroanalízissel meghatározták a diszlokáció-sűrűséget és az újabban kimutatott planáris mikrozárványok szennyező tartalmát. Eu^{3+} és Tb^{3+}-mal kettősen adalékolt gadolínium alumínium borát (GAB) kristályokban megfigyelték az egyes ionok elektron-átmeneteinek felhasadását és eltolódását, mely a másik ritkaföldfém adalék által okozott lokális szimmetria változásnak tulajdonítható. Kongruens és Mg-mal adalékolt $LiNbO_3$ kristályokban meghatározták a kis polaronok eddig ismeretlen abszorpciós hatáskeresztmetszetét, beleértve a lyukpolaronokat, a szabad és - antisite helyen - lokalizált elektron-polaronokat, valamint az utóbbi kettőből képződött bipolaronokat. Ezek az adatok döntő jelentőségűek a fotorefrakciós és holografikus alkalmazásokhoz. Sztöchiometrikus $LiNbO_3$-ban az OH rezgési sáv paramétereinek anomális hőmérsékletfüggése különböző fononcsatolási módusok létezését mutatta. Egy 980 nm-es infravörös diódalézerből, függvénygenerátorból, akuszto-optikai deflektoron alapuló szuperfinom hullámhossz szkennerből és egy kétcsatornás 200 MHz-es oszcilloszkópból álló optikai rendszert építettek koherens sugárzási folyamatok létrehozására $LiNbO_3$:Yb kristályban. Cu^+ és Ag^+ centrumok fotoemisszióját figyelték meg kettősen adalékolt – szövet-ekvivalens termolumineszcens dozimáterként és neutron detektorként használható – $Li_2B_4O_7$:Cu,Ag egykristályokban.

Befejezték a kémiai gőzfázisú leválasztással növesztett és N^+ valamint Ar^+ ionokkal implantált SiO_2 multirétegekből álló Bragg-rácsok tervezésének és elkészítésének első fázisát. Sík hullámvezetőket hoztak létre N^+ ionok implantálásával CaF^2 kristályokban és erbiummal adalékolt tellurit üveg mintákban. Az üveg-hullámvezetők minőségét kisebb energiájú második implantálással javították: az így létrehozott vastagabb gátréteg elnyomja a szivárgó módust még a $\lambda = 1500$ nm körüli telekommunikációs hullámhosszaknál is.

Kvantumoptika és kvantuminformatika

Megmutatták, hogy ultrahideg atomok mozgásához csatolt optikai rezonátor sugárzási mezőjének kvantumos fluktuációi jelentősen felerősödnek egy olyan mechanizmus következtében, amely analóg az instabil rezonátorú lézerekben megismert Petermann-zajfaktorral. Ez a többlet zaj az atomok Bose-Einstein kondenzátumának lényeges kiürüléséhez vezet hosszú időskálán egy stabil optikai rezonátorban. Az egydimenziós kvantumos bolyongást elektronoknak félvezető spintronikai kvantumgyűrűk kétdimenziós hálózatán történő transzportja révén javasolták megvalósítani. Ebben a rendszerben az érme szabadsági fokot az elektron spinje képviseli, míg a bolyongó diszkrét pozíciójának a hálózat egyik dimenziója menti gyűrűk címkéje felel meg. A javasolt elrendezésben a gyűrűkben Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás van jelen, melynek erőssége külső elektromos térrel hangolható. A rendszer geometriája és az egyes gyűrűkbeli, megfelelő értékű spin-pálya kölcsönhatás erősségek biztosítják az érmedobás, valamint a lépésoperátor megvalósítását.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok

Az intézet kutatásai során széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésre támaszkodik. Történelmi előzmények, tematikai hasonlóságok és a közös infrastruktúra használata folytán legszorosabb kapcsolatai a telephelyen működő akadémiai intézetekkel vannak. A telephely közös feladatai közül az intézet működteti a közös műszaki könyvtárat. Az intézet tagja a Budapesti Neutron Központnak, mely a telephely több intézetével együttműködve tevékenykedik a kísérleti atomreaktor hasznosításán. Az intézet munkatársai 6 csatornát használnak anyagszerkezeti kutatások céljaira és anyagvizsgálatra.

Az elmúlt év jelentős sikere, hogy az EU Extreme Light Infrastructure (ELI) program egyik nagy infrastrukturális beruházása, az attoszekundumos lézer berendezés Szegeden épül meg. Az ELI projektben való magyar részvételt az intézet koordinálja. A nem szokásos feladatok sikeres megvalósítása érdekében szorosan együttműködik a projekt hazai részvevőivel, elsősorban az NKTH-val, a Szegedi Egyetemmel, a Pécsi Egyetemmel és az MTA Részecske- és Magfizikai Kutatóintézettel. A projekt keretében rendszeresen szervez workshopokat és képviseli Magyarországot nemzetközi tanácskozásokon.

Felsőoktatás

A hazai kapcsolatok fontos részét képezi a felsőoktatásban való részvétel. Az intézet munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtestfizika és az optika tárgykörében. Különösen szoros a kapcsolat az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME TTK-n folyó mérnök-fizikusképzéssel, továbbá a PTE Fizikai Intézetében folyó oktatással. Az intézet egyik kutatóprofesszora a Pécsi Egyetem fizikai doktori iskolájának vezetője. Munkatársaival együtt jelentős szerepet vállal az elméleti fizika és az informatika pécsi oktatásában.

2009-ben az intézet 52 kutatója vett részt az egyetemi oktatásban, összesen 1953 órában, rendes és speciális előadások tartása, továbbá szemináriumok és laborgyakorlatok vezetése formájában. Az intézetben 9 diplomamunka készült el és 8 PhD értekezést védtek meg. Egy kutató lett az MTA doktora. 46 doktori ösztöndíjas dolgozott disszertációja elkészítésén. Az intézet kutatói részt vettek 3 egyetemi tankönyv, továbbá 1 tankönyv fejezet megírásában.

Nemzetközi kapcsolatok

A nemzetközi kapcsolatok alapját főleg az EU 7. keretprogramjához tartozó és egyéb nemzetközi projektek, kétoldalú akadémiai és TéT egyezmények és informális kapcsolatok képezik. Az intézet jelenleg 10 EU-s projekt megvalósításán dolgozik, közülük a legjelentősebb a már említett Extreme Light Infrastructure. Utóbbi előkészítő szakaszában 13 ország vesz részt. Ugyancsak intenzív együttműködésben folynak a neutron spektroszkópiai kutatások. A budapesti kutatóreaktornál több ország kutatói végeznek kutatásokat felhasználói rendszerben, ehhez az EU jelenetős támogatást nyújt. Az intézet tagja a francia székhelyű Institute Max von Laue - Paul Langevin kutatóközpontnak (ILL). Ez lehetőséget teremt arra. hogy magyar kutatók használhassák az ILL unikális nukleáris berendezéseit.

Az intézet kutatói számos mobilitás típusú tematikus nemzetközi együttműködésben vesznek részt. Az MTA egyezményeken alapuló kétoldalú tematikus együttműködések elsősorban az akadémiai intézetekkel való kapcsolattartást teszik lehetővé. Kétoldalú akadémiai megállapodások alapján 14 ország kutatóival 30 témában folytattak közös tematikus kutatásokat.

A TéT együttműködések a külföldi egyetemekkel folytatott közös kutatásokat segítették elő, de hasznosnak bizonyultak a PhD képzésben megvalósuló együttműködések szempontjából is. Az intézet 2009-ben 5 ország 5 kutatócsoportjával folytatott közös kutatásokat TéT együttműködések keretében.

A fenti együttműködéseket egészíti ki egy MTA-NSF és két nemzetközi együttműködésben megvalósuló OTKA projekt, továbbá két bilaterális egyezmény alapján folytatott kutatás is. A német Max-Planck-Institut für Quantenoptik (München-Garching) intézettel sikeres kutatások folynak az ultragyors fény-anyag kölcsönhatások kísérleti és elméleti vizsgálata terén. A Service de Physique de l' État Condensé (CEA-Saclay, Franciaország) egyik vezető munkatársa irányítja az intézetben folyó alacsonyhőmérsékletű kutatásokat. Az együttműködés keretében grafén mintákat állítottak elő és megmutatták, hogy a minták mutatják az egyréteges grafénre jellemző kvantált Hall–effektust.

A fentieken kívül az intézetnek a kutatás minden területén informális kapcsolatai vannak európai és tengerentúli egyetemekkel és kutatóintézetekkel. A 2009-ban megjelent idegen nyelvű publikációk zömében az egyik társszerző külföldi. Az intézet munkatársai nemzetközi rendezvényeken 123 tudományos előadást tartottak és 78 posztert mutattak be.

A kapcsolattartás formái közé tartoztak a rövid idejű látogatások, a hosszabb idejű külföldi ösztöndíjak és munkavállalások, vendégkutatók fogadása, továbbá közös workshopok és iskolák szervezése.

A hosszabb idejű külföldi munkavállalások és ösztöndíjak különösen a fiatal kutatók szakmai fejlődése, nemzetközi kapcsolataik építése szempontjából fontosak. A kutatók külföldi munkavállalása az előző évekhez hasonlóan alakult: 17 kutató töltött hat hónapot meghaladó időt külföldön, közülük 8 több mint egy évet.

Az intézetben 12 külföldi vendégkutató dolgozott összesen 22 hónapot, egy hónapnál hosszabb tartózkodás formájában. Hét amerikai egyetemi hallgató végezte nyári gyakorlatát

az intézetben, A gyakorlat után részt vettek a *1st NSF-OTKA Symposium for Complex Fluids* (Eger, 8-10 July, 2009) workshopon, melyen az NSF ill. OTKA támogatással folytatott complex folyadék kutatásokat tekintették át. Rajtuk kívül a hazai, német, szerb, portugál kutatók vettek részt a tanácskozáson.

Az intézet két további workshop szervezésében vett részt. A *4th Reverse Monte Carlo Conference* (Budapest, 29 September - 3 October, 2009) több mint 50 résztvevője áttekintette a terület jelenlegi helyzetét, olyan hagyományos témákból kiindulva mint az üveg és folyadék állapot szerkezete egészen az újabb témákig, mint például a neutron kisszögű szórási adatok értelmezése. Az *ESF COST D35 WG 13/05 workshopon* speciális folyadékkristályokon folyó kutatások állását tekintették át.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatások anyagi fedezetét – az alapellátáson túlmenően – főleg a korábban elnyert hazai és nemzetközi, továbbá vállalati megbízások biztosították. 2009-ben sajnos csak kevés új pályázat indult. A pályázatok éves bevétele összesen 403 MFt-ot tett ki, mely összeg legnagyobb hányadát az EU által finanszírozott nemzetközi (38 %), illetve a kormányzati projektek (NKTH, NAP, TéT) (37%) alkották. Ezt követték az OTKA projektek (25 %).

A nemzetközi projektek nagy része a 2007-ben indult EU 7. Keretprogramjához kapcsolódott. Az intézet 2009-ben 4 új projektet nyert el, összesen 1009 ezer € összegben. Legnagyobb támogatásban (536 €) az *Engineered self-organized multi-component structures with novel controllable electromagnetic functionalities* című projekt részesült, mely különleges mikroszerkezetű eutektikumok képződésének tanulmányozására irányul. Ugyanez a kutatócsoport több éve nemzetközileg elismert kutatásokat folytat fémolvadékok különböző körülmények között végbemenő megszilárdulása területén, az Európai Űrkutatási Ügynökség (European Space Agency, ESA) és az EU finanszírozásával. 2009-ban egy újabb ESA projekt kidolgozását kezdték el (*Numerical investigation on dendritic mushy zone).*

Jelentős támogatásban részesült két nukleáris projekt is. A *CHARISMA* projekt a kulturális örökség tárgyainak neutronfizikai módszerekkel történő vizsgálatára irányul (18 konzorciumi tag). Az *Integrated Infrastructure Initiative for Neutron Scattering and Muon Spectroscopy* projekt keretében 21 intézmény működik együtt nukleáris berendezések közös használatában.

2009-ben csökkent a kormányzati forrásból megvalósuló (NKTH, NFÜ) új projektek száma és a támogatás összege is. A csökkenés részben a pályázási lehetőségek csökkenésével függ össze. Az intézet 2009-ben két új NKTH pályázatot nyert el. Az egyik pályázat a korábban meghirdetett NAP program folytatása (*Visegrádi együttműködés neutron spektroszkópiai módszerek fejlesztésére és alkalmazására multidiszciplináris kutatásokban – VENEUS*) (141 MFt). A másik projekt az intézetben folyó ultrarövid lézerimpulzusok fejlesztéséhez és alkalmazásához kapcsolódik *(Új szállézeres technológián alapuló szálintegrált nemlineáris mikroendoszkóp fejlesztése farmakológiai és diagnosztikai vizsgálatokhoz).*

Az alapkutatások finanszírozása főleg OTKA támogatással történt. 2009-ben az intézet kutatói 40 OTKA projekt megvalósításán dolgoztak. Az OTKA projektek éves árbevétel közel 100 MFt-ot tett ki.

Az elmúlt három évben az elnyert új OTKA projektek száma és támogatása a következőképpen alakult: 2007-ben 11 új projekt 132 MFt, 2008-ban 6 új projekt 93 MFt, 2009-ben 6 új OTKA projekt összesen 122 MFt értékben. Az új OTKA projektek közül a támogatás közel felét két projekt nyerte el (*Alagutazó mágneses ellenállás ferromágneses*

nanoszerkezetekben és *Fotonikus kristályszálak tervezése és alkalmazása femtoszekundumos optikai szállézerekben, erősítőkben valamint optikai parametrikus oszcillátorokban).* Az utóbbi projekt szorosan kapcsolódik az ELI programhoz is.

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

1. Mund C, Legeza Ö, Noack RM: Quantum information analysis of the phase diagram of the half-filled extended Hubbard model, Phys Rev B, 79, 245130/1-7, 2009
2. Lante V, Rousochatzakis I, Penc K, Waldmann O, Mila F: Field-induced magnetoelastic instabilities at level crossings in antiferromagnetic molecular wheels, Phys Rev B, 79, 180412/1-4, 2009
3. Iglói F, Szatmári Zs, Lin Y-C: Entanglement entropy with localized and extended interface defects, Phys Rev B, 80, 024405/1-9, 2009
4. Sütő A: A possible mechanism of concurring diagonal and off-diagonal long-range order for soft interactions, J Math Phys, 50, 032107/1-12, 2009
5. Zólyomi V, Vitos L, Kwon SK, Kollár J: Surface relaxation and stress for 5d transition metals, Journal of Physics: Condensed Matter, 21, 095007/1-5, 2009
6. Asker C, Vitos L, Abrikosov IA: Elastic constants and anisotropy in FeNi alloys at high pressures from first-principles calculations, Phys Rev B, 79, 214112/1-9 2009
7. Balogh J, Bujdosó L, Kaptás D, Kemény T, Vincze I, Kovács A, Tóth L: Interface properties in sequence permutated Fe–B–Ag multilayers, J Appl Phys, 105, 104303/1-8, 2009
8. Bortel G, Faigel G, Tegze M: Classification and averaging of random orientation single macromolecular diffraction patterns at atomic resolution, J Struct Biol, 166, 226–233, 2009
9. Tegze G, Gránásy L, Tóth GI, Podmaniczky F, Jaatinen A, Ala-Nissila T, Pusztai T: Diffusion-controlled anisotropic growth of stable and metastable crystal polymorphs in the phase-field crystal model, Phys Rev Lett, 103, 035702-1-4, 2009
10. Tanaka S, Takezoe H, Éber N, Fodor-Csorba K, Vajda A, Buka Á: Electroconvection in nematic mixtures of bent-core and calamitic molecules, Phys Rev E, 80, 021702/1-8, 2009
11. Börzsönyi T, Ecke RE, McElwaine JN: Patterns in flowing sand: Understanding the physics of granular flow, Phys Rev Lett; 103, 178302/1-4, 2009
12. Tompa K, Bánki P, Bokor M, Kamasa P, Lasanda G, Tompa P: Interfacial water at protein surfaces: wide-line NMR and DSC characterization of hydration in ubiquitin solutions. 1, Biophysical Journal, 96, 2789-2798, 2009
13. Bakonyi I, Simon E, Tóth BG, Péter L, Kiss LF: Giant magnetoresistance in electrodeposited Co-Cu/Cu multilayers: origin of the absence of oscillatory behavior, Phys Rev B, 79, 174421/1-13, 2009
14. Bartók A, Csik A, Vad K, Molnár G, Tóth-Kádár E, Péter L: Application of surface roughness data for the evaluation of depth profile measurements of nanoscale multilayers, J Electrochem Soc, 156, D253-D260, 2009
15. Kolano-Burian A, Kolano R, Varga LK: Magnetically induced anisotropy in Co rich Finemet type nanocrystalline alloys, J All Comp, 483, 560-562, 2009

16. Barna IF, Imre AR, Rosta L, Mezei F: Two-phase flow model for energetic proton beam induced pressure waves in mercury target systems in the planned European Spallation Source, Eur Phys J B, 66, 419–426, 2008
17. Székely NK, Jancsó G: Small-angle neutron scattering and volumetric studies of dilute solutions of dimethylpropyleneurea in heavy water, J Phys Chem A, 113, 2207-2211, 2009
18. Pothoczki Sz, Temleitner L, Jóvári P, Kohara S, Pusztai L: Nanometer range correlations between molecular orientations in liquids of molecules with perfect tetrahedral shape: CCl_4, $SiCl_4$, $GeCl_4$ and $SnCl_4$, J Chem Phys, 130, 064503/1-7, 2009
19. Mile V, Pusztai L, Dominguez H, Pizio O: Understanding the structure of aqueous cesium chloride solutions by combining diffraction experiments, molecular dynamics simulations, and reverse Monte Carlo modeling, J Phys Chem B, 113, 10760-10769, 2009
20. Kroó N, Farkas G, Dombi P, Varró S: Nonlinear processes induced by the enhanced, evanescent field of surface plasmons excited by femtosecond laser pulses, Opt Express, 16, 21656-21661, 2008
21. Dombi P, Rácz P, Lenner M, Pervak V, Krausz F: Dispersion management of femtosecond laser oscillators with highly dispersive mirrors, Opt Express, 17, 20598-20604, 2009
22. Dombi P, Rácz P, Bódi B: Surface plasmon-enhanced electron acceleration with few-cycle laser pulses, Laser and Part Beams, 27, 291-296, 2009
23. Derzsi A, Hartmann P, Korolov I, Karácsony J, Bánó G, Donkó Z: On the accuracy and limitations of fluid models of the cathode region of dc glow discharges, J Phys D: Appl Phys, 42, 225204/1-12, 2009
24. Csikvari P, Somogyi A, Veres M, Hárs Gy, Tóth A: Investigation of the combined effect of argon addition and substrate bias on the growth of ultrananocrystalline diamond layers, Diamond Rel Mater, 18, 1459-1465, 2009
25. Szymanski WW, Nagy A, Czitrovszky A: Optical particle spectrometry - problems and perspectives, J. of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 110, 918-929, 2009
26. Kerekes A, Nagy A, Czitrovszky A: Experimental flow and deposition studies with hollow bronchial airway models, Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery, 22, 175-176, 2009
27. Krata A, Kontozova-Deutsch V, Bencs L, Deutsch F, Van Grieken R: Single-run ion chromatographic separation of inorganic and low-molecular-mass organic anions under isocratic elution: Application to environmental samples, Talanta, 79, 16-21, 2009
28. Kovács L, Mazzera M, Beregi E, Capelletti R: Infrared absorption spectra of pure and doped $YAl_3(BO_3)_4$ single crystals, Applied Physics B, 94, 273-277, 2009
29. Merschjann C, Schoke B, Conradi D, Imlau M, Corradi G, Polgár K: Absorption cross sections and number densities of electron and hole polarons in congruently melting $LiNbO_3$, J Phys Condens Matter, 21, 015906/1-6, 2009
30. Kálmán O, Kiss T, Földi P: Quantum walk on the line with quantum rings, Phys Rev B, 80, 035327/1-8, 2009
31. Szirmai G, Nagy D, Domokos P: Excess noise depletion of a Bose-Einstein condensate in an optical cavity, Phys Rev Lett, 102, 080401/1-4, 2009

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

Az intézet neve: MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Átlaglétszám[1]:	171		Ebből kutató[2]:		114
PhD, kandidátus:	54	MTA doktora: 29	levelező tag: 1	rendes tag:	4
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					44
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					225
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					220
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		138
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:		21
összesített impakt faktor[6]:	381,069		összes hivatkozás száma[7]:		3643
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					3233
Magyarul könyv[8]/atlasz:	3	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 9		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 8	MTA doktora: 1	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	123		poszterek száma[12]:		78
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	37	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			13
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					52
TDK munkát készítő hallgatók száma:	7	Diplomamunkát (BSc):			8
Diplomamunkát (MSc):	19	PhD-t:			46
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					1953
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				798,14	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	15	Teljes saját bevétel[18]:		545,33	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0,667	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				99,31	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				150,53	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				55,454	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				135,05	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				17,98	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				87,01	MFt

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI
TÁMOGATOTT KUTATÓCSOPORTOK

BME ALKALOIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Huszthy Péter, az MTA 11010
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.
Telefon: 463-1071, Fax: 463-3297
e-mail: huszthy@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Folytatni kívánják gyógyszeripari együttműködésben a különböző indol-származékok és biológiailag jelentős természetes anyagok és azok származékai előállítását. Tovább vizsgálják az új, citosztatikus hatású vegyületek szintézisét, melynek során a vindolint és a vinblasztint az eddigiektől eltérő helyeken D-, ill. L-aminosavakkal kapcsolják össze. Előállítják a galanthamin, dezmetoxi-galanthamin és dezmetoxi-likoramin szintézisének kulcsintermedierjeit és a fontosabb *Amaryllidaceae* alkaloidok új származékait. *Források: OTKA 2 M Ft, Richter Gedeon Nyrt. megbízás: 13 M Ft*

A korábbiakban sikerrel alkalmazott konvergens és biomimetikus aszpidoszpermán- és *pszeudo*-aszpidoszpermánváz felépítési stratégiával racém alkaloidok nyerhetők. A további cél a természetben megtalálható optikailag aktív molekulák (alkaloidok) szintézise. A tervezett munkának egyik racionális lehetősége a királis szintézisstratégia alkalmazása. Az ismert lehetőségek közül a választás a királis segédpartner beépítésével történő megvalósításra esett. Királis segédpartnerként a D-glükózból több lépésben kialakított molekulát választották, melyet a szubsztrátként alkalmazott triptamin származékba építettek be. A monoszacharid egységet tartalmazó szubsztrátot a továbbiakban alkalmasan kiépített aldehídekkel kívánják reakcióba vinni. *Forrás: Richter Gedeon Nyrt. megbízás: 13 M Ft*

Folytatják az új fényvédő hatású anyagok kutatását.*Forrás: ISDIN 8,3 M Ft.*

Eljárásokat dolgoznak ki új több gyűrűs izokinolin, kinolin, naftofurán és oxazinopiridazin vázas vegyületek előállítására. Az új anyagokat sejtnövekedést gátló hatásra és a szerotonin rendszert befolyásoló hatásra vizsgálják. Folytatják a korszerű növényvédelemben felhasználható új anyagok előállítására irányuló kutatásaikat.*Forrás: Bayer CropScience és Bábolna Környezetbiológiai* Központ *6,5 M Ft*

Folytatni kívánják biokatalizátorok fejlesztését és alkalmazását szerves szintézisekhez, főként fontos királis intermedierek tiszta enantiomerként történő előállítására. A szakaszos reaktorokban történő kivitelezés mellett fejleszteni kívánják a hatékony, környezetbarát biotranszformációk alkalmazását folyamatos reaktor-rendszerekben is. A modern reaktortechnikák segítségével integrált kemoenzimatikus rendszereket is fejleszteni kívánnak. Megfelelő molekuláris genetikai és mikrobiológiai háttér felhasználásával a kereskedelmi biokatalizátorok alkalmazása mellett új biokatalizátorokat is fejlesztenek (pl. nagy-hatékonyságú szűrések, rekombináns enzimek előállítása és módosítása). Mind a kémiai reakciókat, mind az enzimműködés/receptor kötés mechanizmusait modern számítási módszerek segítségével (átmeneti állapot számítások *ab initio*/DFT szinten, protein modellezés, QM/MM számítások aktív centrumon/receptor-kötőhelyen belül) is tanulmányozni kívánják.*Források: OTKA 1,9 M Ft, NKFP 25,0 M Ft*

Folytatják a piridin, akridin, akridinon és diarilfoszfinsav egységet tartalmazó új koronaéter alapú szelektív szenzormolekulák és hatékony szelektormolekulák előállítását. Ezek a ligandumok a biológiai szempontból fontos szervetlen és szerves ionok analitikájában és elválasztásában nyerhetnek széleskörű alkalmazást. Ugyancsak folytatják a várhatóan fontos

biológiai aktivitással rendelkező új 5,7-diazaindol származékok szintézisét. *Források: OTKA 8,2 M Ft, EGIS 2 M Ft*

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

A rákellenes terápiában alkalmazott vinblasztin vindolin komponensét az eddigiektől eltérően nem L-, hanem D-aminosavval kapcsolva sikerült olyan új származékot szintetizálni, amely más daganatos sejtvonalon is citotoxikus hatást mutatott. *5 fő, ebből 1,3 kut.csop. tag. Források: OTKA 1 M Ft, Richter Gedeon Nyrt. 13 M Ft*

Az előző évben előállított és a galanthaminhoz hasonló szerkezetü *Amaryllidaceae* alkaloidokra jellemző benzofurobenzazepin tetraciklus további reakciói során egy anomális átrendeződést figyeltek meg, mely során ciklopentanoizokinolin származékok keletkeztek.

4 fő, ebből 1,3 kut.csop. tag. Források: OTKA 1 M Ft, Richter Gedeon Nyrt. 13 M Ft

Eljárásokat dolgoztak ki új fényvédő hatású anyagok előállítására. Új, one-pot módszert fejlesztettek ki a több gyógyszer, növényvédőszer, és fényvédő anyag szerkezeti egységeként szereplő benzotriazinok szintézisére. Egyszerű eljárásokat alkalmazva új, várhatóan sejtnövekedést gátló hatású furo[3,2-*f*]kinolin-, pirano[3,2-*f*]kinolin-, spiro-1,2'-furo[3,2-*f*]kinolin-, és nafto[2,1-*b*]furán-származékokat állítottak elő. Vizsgálták és feltárták az aril-geranil-éterek új összetett átrendeződéseinek mechanizmusát. Sikeresen alkalmazták a mikrohullámú hőközlést a termikus reakciók kiváltására. A feltárt új átrendeződésekkel nagyszámú többgyűrűs új heterociklusos vegyületcsoportot állítottak elő. *3 fő, ebből 0,5 kut.csop. tag. Forrás: ISDIN, Bayer, Bábolna 14,8 M Ft*

Új biokatalizátorok előállítását valósították meg fonalasgombák perliten végzett szilárd fázisú és hagyományos reaktoros fermentációjával. Vizsgálták saját és kereskedelmi lipázok módosítását újszerű fém-alginátos és kompozit adszorpciós/szol-gél rögzítési módszerek felhasználásával. A kifejlesztett és kereskedelmi biokatalizátorokat kinetikus rezolválások és aszimmetrikus reakciók segítségével nagy enantiomer tisztaságú termékek előállítására használták fel. Vizsgálták racém szekunder alkoholok és aminok folyamatos reaktorokban végzett dinamikus kinetikus rezolválását melyből szabadalmat nyújtottak be. QM/MM számításokkal tisztázták a tirozin ammónia liáz és a vele működésbeli rokonságot mutató más MIO-enzimek működésének pontos mechanizmusát. *5 fő, ebből 1 kut. csop. közreműködő. Forrás: OTKA 1,9 M Ft, NKFP 25,0 M Ft*

Számos, a kiralitáscentrumokon alkilcsoportot tartalmazó diarilfoszfinsav egységet tartalmazó enantiomertiszta lipofil koronaétert állítottak elő. Ezek alkalmasak lehetnek élettani szempontból fontos racém protonált primer aminok, aminosavak és származékaik rezolválására víz-diklórmetán-víz folyadékmembrán rendszerben végzett enantiomer szelektív transzport révén. Olyan új akridinon és akridin fluorofor egységet tartalmazó koronaétereket állítottak elő, amelyek makrogyűrűjében szekunder aminocsoport van. Ez utóbbi funkciós csoporthoz stabil gyököt tartalmazó egységet kapcsoltak, így un. kettősen (fluoreszcens és spin) jelölő szenzormolekulákat állítottak elő, melyek fontos alkalmazást nyerhetnek az analitika számos területén. A piridingyűrű 4-es helyzetében *N*-alkilamino-csoportot tartalmazó új enantiomertiszta koronaétereket állítottak elő, majd ezeket olyan funkcióval rendelkező oldallánccal látták el, amelyek alkalmassá teszik azokat arra, hogy kovalens kötésekkel szférikus HPLC minőségű szilikagélhez rögzíthessék. A kapott királis állófázisok élettani szempontból fontos vegyületek racemátjainak rezolválását teszik lehetővé. Számos,

várhatóan fontos biológiai aktivitással rendelkező, új 5,7-diazaindol származékot állítottak elő. *5 fő, ebből 3 kut.csop. tag. Források: OTKA 8,2 M Ft, EGIS 2 M Ft*

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Együttműködő partnereik: Richter Gedeon Nyrt, MTA KKKI, BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Servier új bp-i kutatóintézete, Bábolna Környezetbiológiai Központ, Bábes-Bolyai Egyetem (Románia), Beira Interior Egyetem (Portugália), az ISDIN Gyógyszergyár (Spanyolország), és a Bayer CropScience Kutató Központtal (Németország). A citosztatikus hatású vegyületeket az MTA-ELTE Peptidkémiai és az MTA-SE Peptidbiokémiai Kut. Csop. vizsgálta. Az új biokatalizátorok fejlesztésében a Fermentia Kft és BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszékével, a biokatalizátorok folyamatos üzemű reaktorokban történő alkalmazásainak fejlesztésében a ThalesNano Zrt-vel, az enzimrögzitési technikák továbbfejlesztésében a Department of Organic Chemistry, Politehnica University of Timisoara (Románia), az ammónia-liáz enzimek tanulmányozása kapcsán az ELTE Szerves Kémia Tanszékével és az Institute of Organic Chemistry, University Karlsruhe (Németország) kutatócsoportjaival működtek együtt. A koronaéter alapú királis állófázisok tesztelését és az enantiomertiszta makrociklusok CD spektroszkópiai vizsgálatát az ELTE Kémiai Int., a kettősen jelölő szenzormolekulákkal végzett méréseket pedig a Pécsi Tud. Egyetem kutatóival együttműködve végezték.
A kut.csop.-ból 5 fő minden félévben kötelező tantárgyakat ad elő, 4 fő pedig minden félévben laboratóriumi gyakorlatokat vezet.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Folytatták a K68734, K62654 és a PD71910 sz. OTKA kutatásokat. 2008-2010-re elnyert "Környezetbarát technológiák kidolgozása nagyhatékonyságú átfolyásos laboratóriumi reaktorok fejlesztésével és alkalmazásával" c. Jedlik pályázaton (430 M Ft) az NKFP 07 A2 FLOWREAC konzorciumban (ThalesNano Zrt, BME Szerves Kém. és Techn. Tanszék, ComerGen Zrt, ComGrid Kft, MOL Nyrt, Pannon Egyetem, Szerves Kém. Int. Tanszék) a kutatócsoport együttműködő tagjának részvételével 75 M Ft támogatás áll rendelkezésre.

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

1. Herke, K., Hazai, L., Hudák, M. Sz., Ábrahám, J. Sánta, Zs., Háda, V., Szántay, Cs., Jr., Szántay, Cs.: Synthesis of the tetracyclic skeleton of the galanthamine-type *Amaryllidaceae* alkaloids *ARKIVOC (xi):* 235-246 (2009)
2. Móczár, I., Huszthy, P., Maidics, Z., Kádár, M., Tóth, K.: Synthesis and optical characterization of novel enantiopure BODIPY linked azacrown ethers as potential fluorescent chemosensors *Tetrahedron 65:* 8250-8258 (2009)
3. Kertész, J., Huszthy, P., Kormos, A., Bertha, F., Horváth, V., Horvai, G.: Synthesis of new optically active acridino-18-crown-6 ligands and studies of their potentiometric selectivity toward the enantiomers of protonated 1-phenylamine and metal ions *Tetrahedron Asymmetry 20:* 2795-2801 (2009)

4. Farkas, R., Törincsi, M., Kolonits, P., Aolonso, O. J., Novák, L.: One-pot synthesis of benzotriazoles and benzotriazole 1-oxides by reductive cyclization of *o*-nitrophenylazo compounds with benzyl alcohol *Heterocycles 78:* 2579–2588 (2009)
5. Oudia, A., Mészáros, E., Jakab, E., Simoes, R., Queiroz, J., Ragauskas, A., Novák, L.: Analytical pyrolysis of biodelignification of cloned *Eucalyptus globolus* (EG) clone and *Pinus pinaster* Aiton kraft pulp and residual lignins *J. Anal. Appl. Pyrolysis 85:* 19-29 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	10			Ebből kutató[2]:			7
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	4	levelező tag:	0	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							8
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							8
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			5
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	3			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	10,396			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							194
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	7	poszterek száma[12]:					7
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							9
TDK munkát készítő hallgatók száma:	11	Diplomamunkát(BSc):					7
Diplomamunkát(MSc):	7	PhD-t:					7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							1749
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						32,90	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:				71,10	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						14	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						25	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						32,10	MFt

BME ANYAGSZERKEZETI ÉS MODELLEZÉSI KUTATÓCSOPORT

Hargittai István, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Gellért tér 4.
Telefon: 463-1286, Fax: 463-4052
e-mail: istvan.hargittai@gmail.com

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Különböző szervetlen vegyületek (fém-halogenidek, átmenetifém komplexek) szerkezeti, termodinamikai és rezgési paramétereinek meghatározása. Szacharidok szerkezeti és rezgési tulajdonságainak felderítése. Lámpákban használatos volfrámszál gyártási technológiájához kapcsolódó kutatások: köztitermékek szerkezetének és szilárdtestkémiai reakcióinak vizsgálata. Új anyagátadási műveletek optimalizáló modelljének és algoritmusának megalkotása, fejlesztése.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Molekulaszerkezet kutatások. Felkérésre összefoglaló dolgozatot készítettek a kiemelkedő hatásfaktorú *Accounts of Chemical Research* folyóirat számára a csoportban az elmúlt tíz év során a fém-halogenidek kutatásában elért eredményekről. Folytatva az elektron-rezgési kölcsönhatások vizsgálatát, kimutatták a króm-difluorid molekulában a dinamikus Renner-Teller effektust, valamint azt, hogy a magashőmérsékletű gőzben több elektronállapothoz tartozó molekulák vannak egyidejűleg jelen. A lantanida-halogenidek vizsgálatával további bizonyítékot szolgáltattak arra, hogy dimerjeik szerkezete függ a 4f elektronpálya betöltöttségétől. Megállapították, hogy a mátrix-izolációs spektroszkópiai kísérlet körülményei között kölcsönhatás lép fel a diszprózium-tribromid molekula és a mátrix atomjai között, ami a gázfázisban sík lantanida-trihalogenid molekula alakjának megváltozásához vezet a mátrixban. A periódusos rendszer 12. csoportjának fém-dihalogenidjeiről megállapították, hogy a higany-dihalogenidek szerkezete minden szempontból eltér a cink- és kadmium-dihalogenidek szerkezete alapján várttól, elsősorban a relativisztikus hatás következtében a higany molekuláiban. Összefüggést találtak a gázfázisú és kristályos fázisú szerkezetek között. Az eredményeket 5 fő kutató és egy szaktechnikus érte el (2+1 fő TKI). Ezekre a kutatásokra 6 MFt-t fordítottak (ebből 600 eFt-t pályázati forrásból).

Komoly elismerésnek számít, hogy a Springer kiadó megjelentette Hargittai Magdolna és Hargittai István közös könyvének, a *Symmetry through the Eyes of a Chemist*-nek, harmadik, átdolgozott változatát. A könyv a szimmetria kémiai jelentkezéseit tekinti át és tudományos folyóiratokban megjelent számos elismerő recenzió mellett az is jelzi a sikerét, hogy már eddig is több helyen használják egyetemi tankönyvként vagy segédkönyvként.

Kvantumkémiai számításokkal meghatározták a szabad α-D-glükóz molekulák lehetséges szóba jövő konformerjeinek rezgési erőterét, normálkoordináta analízissel pedig az alaprezgések összetételét. Mátrix-izolációs FT-IR spektrumok alapján azonosítottak két domináns és négy kisebb mennyiségben jelen levő konformert a gázfázisban uralkodó konformációs egyensúlyban. Kvantumkémiai modellezéssel elvégezték a hialuronan poliszacharid diszacharid építőelemeinek (β-D-glükuronsav + N-acetil-β-D-glükózamin) konformációs analízisét, melynek során meghatározták a gázfázisban és a vizes oldatban legstabilabb konformereket. Kimutatták a glükuronsav karboxilcsoportjának domináns (de

nem kizárólagos) szerepét az egyes konformereket stabilizáló másodlagos kölcsönhatásokban. A protonálódás és sóképzés éppen ezt a funkciós csoportot érinti, így e folyamatok jelentősen átrendezhetik a konformerek stabilitási sorrendjét. Az eredményeket 3 fő (1 fő TKI) érte el 1,8 MFt kutatócsoporti ráfordítással, beleértve 1,0 MFt pályázati forrást.

Meghatározták kadmium és cink halogenidek 3,5-dimetil-pirazol-1-karboxamidínium-nitráttal képzett komplexeinek kristályszerkezetét, termikus és rezgési spektroszkópiai tulajdonságait. Kvantumkémiai számítások segítségével kimutatták a vonzó elektrosztatikus erők és a ligandumról a fémre történő σ-típusú donálás meghatározó voltát a komplexek stabilizálásában. Az eredményeket 6 fő (1 fő TKI) érte el, 800 eFt kutatócsoporti (ebből kb. 200 eFt pályázati) ráfordítással.

Anyagszerkezeti kutatások. Jelentős eredményeket értek el azokban az alapkutatásokban, amelyeket a fényforrásokban használt volfrámfém előállításának fejlesztése érdekében végeztek. A volfrámfémgyártás több, korábban nem értelmezett szilárdtestkémiai reakcióját, fázisátalakulását sikerült megmagyarázniuk. Részletesen felderítették az $(NH_4)_xWO_{3-y}$ vegyület és a K^+ ion közötti ioncsere reakciót. Ahhoz, hogy a volfrámhuzaloknak megfelelő legyen az izzó- vagy halogénlámpákban a stabilitása (magas hőmérsékletű kúszási szilárdsága), a volfrámgyártás egy köztitermékébe K^+ iont kell bejuttatni, és erre az egyik legkedvezőbb az $(NH_4)_xWO_{3-y}$ vegyület. Kimutatták, hogy az ioncsere reakció során a K^+ ion nemcsak a szemcsék felületén kötődik meg, hanem az $(NH_4)_xWO_{3-y}$ kristályszerkezetébe is beépül, és ezzel jelentősen hozzájárul az $(NH_4)_xWO_{3-y}$-ból készült volfrámhuzal stabilitásához. Az eredmények alapján javaslatokat tettek a General Electric Hungary ZRt. részére a volfrámgyártás fejlesztésére, a hatékonyság növelésére. Az eredmények egy része ipari titkot képez. Az eredményeket 6 fő (1 fő TKI) érte el, 1.2 MFt kutatócsoporti ráfordítással.

Vegyipari műveletek modellezése. A hibrid folyamatokban egyre elterjedtebb ún. pervaporációs műveletet modellezték. A pervaporáció modellezésére alkalmas Rautenbach-modell használatához a rendszert leíró megbízható paraméterek szükségesek. Kísérleti adatokon alapulva nemlineáris matematikai modellel elvégezték a paraméterek illesztését, majd szimulációs szoftver segítségével ellenőrizték ezek pontosságát, alkalmazhatóságát. Víz–etanol és víz–etanol–2-propanol elegyek vizsgálatával bebizonyították, hogy a legkönnyebben átmenő komponens (víz) paraméterei 1%-os pontossággal mindkét rendszerben megegyeznek. Ezek alapján a későbbiekben többkomponensű pervaporációs rendszerek modellezése során kevesebb kísérleti munka és kevesebb anyag felhasználásával remélik pontos eredmények elérését. A munkában 3 fő (1 fő TKI) vett részt 1 MFt kutatócsoporti (ebből kb. 100 eFt pályázati) ráfordítással.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Fontosabb külföldi együttműködéseik:
- JRC, Institute for Transuranium Elements (Németország): aktinida kutatások
- University of Geneva (Svájc): aktinida kutatások
- University of Minnesota and Supercomputing Institute (USA): aktinida kutatások
- B. Verkin, Institute for Low Temperature Physics and Engineering (Ukrajna): Szacharidok mátrix-izolációs FT-IR vizsgálata
- University of Novi Sad (Szerbia): átmenetifém komplexek kutatása
- Matrix Biology Institute, Edgewater (USA): poliszacharidok szerkezeti kémiája
- Massey University, Auckland (Új-Zéland): fémhalogenid kutatások

– University of Catania, Catania (Olaszorszag): lantanida kutatások
– Washington State University, Pullman (USA): lantanida kutatások
– L'Aquilai Egyetem és Római Egyetem (Olaszország): szubsztitúciós hatások szerkezetei következményeinek vizsgálata
– University of Antwerp (Belgium): nitrogén-kalkogén tartalmú molekulák elméleti vizsgálata

Fontosabb hazai együttműködéseink:

– KFKI Atomenergia Intézet, Budapest: fém-halogenid kutatások
– Szerkezeti Kémia Intézet, MTA-KK, Budapest: fényforrásipari volfrámkutatás
– Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Atomfizika Tanszék, BME, Budapest: fényforrásipari volfrámkutatás
– NMR Laboratórium, Pannon Egyetem, Veszprém: fényforrásipari volfrámkutatás
– General Electric Hungary: fényforrásipari volfrámkutatás
– Szerves Kémiai Tanszék, ELTE, Budapest: enzimkatalizált reakciómechanizmus vizsgálatok

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

– FP7 211690: Aktinida oxidok és karbidok molekuláris és termodinamikai jellemzőinek meghatározása. E pályázat teszi lehetővé nagy számítási idő igényű aktinida kutatásainkat.
– Marie Curie Reintegration Grant: Ösztrogén bioszintézisének és metabolizmusának modellezése kvantumkémiai és kombinált kvantumkémiai/molekulamechanikai modellezéssel. A projekt 2009 végén kezdődött.
– OTKA K-60365: Magas hőmérsékletű szervetlen molekulák szerkezetvizsgálata, melyből sikeres fémhalogenid kutatásaikat valósítják meg.
– OTKA K-75972: Aktinida vegyületek vizsgálata kvantumkémiai számításokkal; az FP7 pályázatban nem szereplő aktinida vegyületek kutatásának finanszírozására.

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

1. Hargittai M, Hargittai I: Symmetry through the Eyes of a Chemist, Third Revised Edition, Springer, 2009, xii + 520 pp.
2. Hargittai M: Structural effects in molecular metal halides, Accounts of Chemical Research 42(3): 453-462 (2009)
3. Donald KJ, Hargittai M, Hoffmann R: Group 12 dihalides: structural predilections from gases to solids, Chemistry – a European Journal 15: 158-177 (2009)
4. Kovács A, Ivanov AYu: Vibrational analysis of α-D-glucose trapped in Ar matrix, The Journal of Physical Chemistry B 113: 2151-2159 (2009)
5. Szilágyi IM, Madarász J, Pokol G, Hange F, Szalontai G, Varga-Josepovits K, Tóth AL: The effect of K^+ ion doping on the structure and thermal reduction of hexagonal ammonium tungsten bronze, Journal of Thermal Analysis and Calorimetry 97: 11-18 (2009) (ICTAC Young Scientist Award előadásanyaga)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	8			Ebből kutató[2]:			6
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1	levelező tag:	1	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							30
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							18
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			17
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	49,81			összes hivatkozás száma[7]:			292
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							190
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	8			poszterek száma[12]:			4
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					6
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát(BSc):					0
Diplomamunkát(MSc):	1	PhD-t:					1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							684
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						36	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:				8	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						4	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						2	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						2	MFt

BME FÉMTECHNOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

Ginsztler János, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Goldmann tér 3.
Telefon: 463-2954; Fax: 463-3250
e-mail: matsci@eik.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

- Az endovaszkuláris terápiában alkalmazott implantátumok anyagainak és bevonatainak kutatása.
- A növelt hőmérsékleten üzemelő szerkezeti anyagok szemcsehatárain lezajló folyamatok kutatása.
- A fémmátrixú kompozithuzalok és szintaktikus fémhabok fejlesztése.
- A faipari fűrészlapok gyártásában alkalmazható lézersugaras technológiák kutatása.

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

- Az értágítóbetétek hazai gyártójával közösen kifejlesztették a Sanocor sztentek poliuretán bevonatait, és elemezték ezek hatóanyag-megkötési és leadási tulajdonságait. Az eredményt 10 fős kutatócsoport érte el, akik közül 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 2,8 MFt. Együttműködő partnerek: Minvasive Kft., CVI Kht., Boston Scientific Kft., Biotronik Hungária Kft.
- Az ausztenites acélok szemcsehatár-tulajdonságainak tanulmányozásával igazolták, hogy termomechanikus kezelésekkel a szemcsehatárok korróziós ellenállása jelentősen fokozható.
  Az eredményt 43 fős kutatócsoport érte el, akik közül 2 fő dolgozott a kutatócsoportban. A kutatási témában PhD-értekezést védett meg a kutatócsoport egyik tagja. A becsült intézeti ráfordítás összege 0,9 MFt. Partnerek: ELTE Általános Fizika Tanszék.
- Meghatározták az alumínium mátrixú szintaktikus fémhabok mechanikai és mikroszerkezeti jellemzőit, és új eljárást dolgoztak ki a nyomásos infiltrálás tényezőinek mérésére. A kutatási témában megvédett PhD-értekezés témavezetője a kutatócsoport tagja. Az eredményt 5 fős kutatócsoport érte el, akik közül 2 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 2,0 MFt. Együttműködő partnerek: MTA KK, Bay-Nano Intézet.
- Ipari és kutatási partnerekkel közösen elemezték a faipari szalagfűrészlapok élettartam-növelési lehetőségeit. Az eredményt 5 fős kutatócsoport érte el, akik közül 3 fő dolgozott a kutatócsoportban. A becsült intézeti ráfordítás összege 1,6 MFt. A fejlesztés eredményeként a versenyképesség érdemi javulása és gazdasági hasznon várható az A-LAP Kft.-nél, a legnagyobb hazai szalagfűrészlap-gyártónál.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A hazai kutatási partnerek körében intenzív együttműködésben álltak a következő kutatóhelyekkel: a BME számos tanszéke, MTA KK Röntgendiffrakciós Csoport, MTA SZFKI Lézeralkalmazási Osztály, Bay-ATI, Bay-LOGI, Bay-Nano.

Szoros együttműködés alakult ki a kutatási feladatok végrehajtásában a következő ipari partnerekkel: Minvasive Kft., CVI Kht., Lasersystems Kft., A-LAP Kft.

A nemzetközi együttműködések terén megerősítették a kapcsolatot a temesvári ISIM hegesztési kutatóintézettel. Magyar–francia TéT pályázat keretében felerősítették a kapcsolatot az INSA de Lyon MATEIS kutatóintézettel.

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet vállaltak a BME ATT oktatási tevékenységében: ennek keretei között több tantárgy előadásait gondozták a nappali és a doktori képzésben, valamint a hegesztőszakmérnök képzésben.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2008. év végi döntéssel Magyar–francia TéT pályázatot nyert el a kutatócsoport vezetője, amely közös kutatás témája: Ni-szegény duplex korrózióálló acélok kutatása.

2009. év végi döntéssel a kutatócsoport vezetője CK jelű OTKA-NKTH pályázatot nyert el a nagy melegszilárdságú acélok élettartam-növelése témakörben.

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

1. Gaál Z: Speciális szemcsehatárok arányának módosítása acélokban, PhD ért., 2009, p. 94
2. Magasdi A: Eutektoidos acélszalagok hegesztett kötéseinek fáradása, PhD ért., 2009, p. 94
3. Ginsztler J, Kiss I, Németh J: A Mérnöktovábbképző Intézet 70 éve, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2009, p. 145
4. Gaál Z, Szabó Péter J, Ginsztler J: AISI 304 típusú acél szemcsehatárainak tudatos módosítása, Műszaki Szemle K-2009 (Különszám): 124-129 (2009)
5. Prohászka J, Mamalis AG, Gaál Z: The cause of the uncertainty of the elastic limit, CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology 2(1): 70-74 (2009)
6. Prohászka J, Mamalis AG, Gaál Z: The Effect of the Elastic and Plastic Anisotropy on the Elastic-Plastic Deformation Region, Journal of Machining & Forming Technologies 2(3-4): 1- (2009)
7. Dobránszky J, Major L, Ginsztler J, Dévényi L: Koszorúér-tágítóbetétek anyagai és gyártástechnológiája, Műszaki Szemle K 2009 (Különszám): 93-96 (2009)
8. Szabadíts P, Puskás Zs, Dobránszky J: Flexibility and trackability of laser cut coronary stent systems, Acta of Bioengineering and Biomechanics 11(3): 11-18 (2009)
9. Orbulov I, Dobránszky J, Németh Á: Microstructural characterisation of syntactic foams, Journal of Materials Science 44(15): 4013-4019 (2009)
10. Sándor T, Dobránszky J: Comparison of penetration profiles of different TIG process In: SSW 2009 Papers Online (Ed.), KCI Publishing, Maastricht, 2009, pp 1-16

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Fémtechnológiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	8			Ebből kutató[2]:			4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							14
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							14
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			2
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	4			idegen nyelven:			2
összesített impakt faktor[6]:	2,169			összes hivatkozás száma[7]:			29
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							29
Magyarul könyv[8]/atlasz:	1			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	2	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	5			poszterek száma[12]:			6
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	5			Diplomamunkát(BSc):			1
Diplomamunkát(MSc):	3			PhD-t:			5
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							840
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						23,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		9,9	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						9,9	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

BME FIZIKAI GEODÉZIA ÉS GEODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT

Ádám József, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
Telefon: 463-3222 Fax: 463-3192
e-mail: jadam@sci.fgt.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Föld nehézségi erőterének globális meghatározása és vizsgálata műholdas gravimetria, gradiometria és földfelszíni gravimetriai, Eötvös-inga mérések segítségével
A nehézségi erőtérnek az ország területén legjobban illeszkedő megoldását számolták. A kvázigeoid LKN kollokációval végzett meghatározásába gravimetriai, GPM98CR geopotenciális modell, Eötvös-inga, függővonal-elhajlás, DTM és GPS/szintezési adatokat vontak be. A korábbi megoldásaikhoz képest újdonság, hogy az Eötvös-inga mérések mellett bevonták a GPS/szintezési adatokat, amelyeket nagy súllyal szerepeltettek.
A nehézségi erőtér regionális és lokális vizsgálataival kapcsolatban kidolgoztak egy eljárást a potenciálfüggvény 3D-s inverziójára, mely lehetővé teszi Eötvös-inga adatok, nehézségi gyorsulás mérések, DTM és függővonal-elhajlás adatok együttes felhasználását.
Az Eötvös-inga mérések terepi korrekciójának számítását vizsgálták a Schweydar-féle numerikus integrálási eljárással és a derékszögű prizmamodellel egy Kecskemét környéki teszt területen.

A földi nehézségi erőtér időbeli változásainak vizsgálata gravimetriai műholdak, földfelszíni gravimetriai és Eötvös-inga mérések alapján
A GRACE műhold bő hét évre vonatkozó adataiból a sarki jégtakaró olvadásával kapcsolatban végeztek számításokat. Eredményeik szerint a grönlandi jég olvadási sebessége az antarktiszinál legalább egy nagyságrenddel intenzívebb, ami elkerülhetetlenül az ottani jég végleges pusztulásához vezet. Az Antarktisz esetében a jégolvadás mértéke jóval csekélyebb, azonban ennek üteme felgyorsulóban van.

A GNSS-technikával történő helymeghatározás pontosítása
A troposzféra integrált vízgőztartalmának becslésére több fizikai modellt vetettek össze, melyek között újonnan levezetett lokális modellek is szerepeltek. A becsült vízgőztartalom értékeket rádiószondás mérésekkel, valamint egy jelentős nyári zivatarfront evolúciójával is összevetették egy nyári és egy téli időszakra. Eredményeik azt mutatták, hogy az integrált vízgőztartalom mintegy 2 mm-es középhibával határozható meg GPS adatok alapján.
A beszámolási időszakban megvalósították a hazai és a környező országok mintegy 30 EUREF és IGS állomásának automatikus közel valósidejű feldolgozását, így gyakorlatilag óránként meghatározzák a troposzféra okozta késleltetést, amelyet adatbázisban fognak tárolni az egyes állomásokra.

A felszínmozgás monitorozása GPS- és radaros földmegfigyelő műholdak segítségével
A beszámolási időszakban a GPS geodinamikai kéregmozgás és deformációs eredményeiket és szeizmológiai adatokat együttesen értelmezték, ezek alapján veszélyeztetettségi becslést végeztünk. Elvégezték közép-európai kooperációban a CEGRN közép-európai GPS adatok integrált kiértékelését. A 2009-ben az MGGA geodinamikai hálózatot teljes országos lefedettségben újramérték és szélső pontossággal feldolgozták. Elemezték és gyakorlatban is tesztelték az OGPSH mozgásvizsgálati alkalmazhatóságát. Terepi méréseket végeztek a mozgásadatok összehasonlítására az OGPSH és az MGGA geodinamikai hálózat között, eredményeiket bemutatták, publikálták.

Elkészítettek egy PS-InSAR webes információs rendszert az eredmények kezelésére. A mesterséges műholdradaros szórópontjaikon az ENVISAT műhold észleléseire 'ascending' és 'descending' módú észlelését végzik, valamint további tesztelésekre még két hasonló mesterséges műholdradar reflektáló-pontot gyártottak. Folytatták a GPS-PS-InSAR validációt egy jelentős PS-InSAR módszerrel detektált felszínmozgás-anomália GPS-es monitorozásával, amely során kiderült, hogy igen jelentős technogén mozgásanomália pár éves időskálán is jelentősen változhat, ami a monitorozás szükségességét mutatja a 2 éves időskálán.

A VLBI-technika alkalmazásai

Rádió-interferometriás (VLBI) kutatásaik fő célpontjai az aktív galaxismagok (kvazárok), amelyek közül a legpontosabb égi vonatkoztatási rendszert (ICRF) kijelölő objektumokat is kiválasztják. Az ICRF hivatalos újradefiniálása 2009-ben történt meg. Ehhez kapcsolódóan is vizsgálták a kvazárok pozíciójának kismértékű változásait, ezeknek a lehetséges összefüggését a nagyfelbontású rádiószerkezettel.

Publikálták a napi időskálán belüli jelentős fényességváltozásokat mutató J1128+5925 kvazárról az amerikai VLBA hálózattal készült méréseik eredményét. Európai VLBI Hálózat (EVN) segítségével megállapították, hogy a J1218+2953 jelű, gravitációs lencsehatást létrehozó, de optikailag azonosítatlan rádióforrás egy aktív maggal rendelkező, nagytömegű galaxis. Ugyancsak az EVN-nel vizsgáltak két távoli, z>3 vöröseltolódású, ritka, magdominálta hármas szerkezetet mutató kvazárt, valamint a legtávolabbi (z>4,5) ismert rádiókvazárok közül ötöt.

Részt vettek a következő generációs űr-VLBI mesterséges holdak (a japán ASTRO-G és az orosz RadioAstron) programjának előkészítésében is, beleértve a potenciális geodéziai alkalmazások előzetes vizsgálatát.

Az Algol hierarchikus hármas csillagrendszer esetében, optikai interferometriás mérések bevonásával meghatározták a belső, szoros kettős rendszer pályájának térbeli orientációját.

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

A nehézségi erőtér ismerete a geodéziai referenciarendszerek alapját adja, fontos eszköze a nyersanyagkutatásnak, időbeli változásából pedig a globális felmelegedés jeleire lehet következtetni (Kutatói team: 5 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 4 fő).

A troposzféra integrált vízgőztartalmának GNSS-technikával történő meghatározása kutatásaink alapján is egyre fontosabb eszköze lesz a meteorológiai előrejelzéseknek. (Kutatói team: 5 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 1 fő).

A PS-InSAR technológia alkalmas az emberi tevékenység okozta felszínmozgás észlelésére sűrűn lakott területeken is, így eredményeit a gazdaság és a társadalom számos területen hasznosíthatja, pl. építmények, városok nagypontosságú mozgás- és stabilitásvizsgálata számára. (Kutatói team: 2 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

A kvázi-inerciális vonatkoztatási rendszer (ICRF) egyre pontosabb ismerete valamennyi Földről végzett csillagászati és felsőgeodéziai észlelés számára nélkülözhetetlen. (Kutatói team: 2 fő, ebből a kutatócsoport tagja: 2 fő).

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Ádám J., Rózsa Sz., Tóth Gy. – International Association of Geodesy (IAG), Communication and Outreach Branch (COB)
Ádám J., Földváry L., Laky S., Rózsa Sz., Tóth Gy., Völgyesi L., Zaletnyik P. – BME Általános- és Felsőgeodézia Tanszék, oktatás
Frey S. – Joint Institute for VLBI in Europe (JIVE), Dwingeloo, Hollandia, VLBI Space Observatory Programme-2 (VSOP-2) Európai Munkacsoport tagság.
Grenerczy Gy. – CEGRN Consortium titkár; Consortium Governing Board tagság; GMES Terrafirma Magyarország képviselő.
További együttműködések: Max Planck Rádiócsillagászati Intézet, Müncheni Műszaki Egyetem (IAPG, TUM), Kyotoi Egyetem (KUGI és DPRI), Grazi Műszaki Egyetem, Kalsruhei Egyetem, Stuttgarti Egyetem, Japan Aerospace Exploration Agency (JAXA), Institute of Space and Astronautical Science (ISAS), ELTE Csillagászat Tanszékével, valamint az Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Nemzetközi:
ESRIN/Contract no. 19366/05/I-EC, EU-ESA GMES Terrafirma H2 fázis. 2007-ben kezdődött, 2009-ben lezárult.
ESA PECS E.A. No. 98112: Multisensor monitoring of land subsidence and hazards, introduction and applications of InSAR in Hungary. 2009-ben kezdődött, 2013-ig tart.

Hazai:
OTKA K72515: Kompakt extragalaktikus objektumok vizsgálata rádió-interferométeres technikával. 2008-ban kezdődik, 2012-ig tart.
OTKA F68497: A Pannon medence és környezete nagyszerketeti egységeinek jelenkori kinematikája GPS mérések alapján. 2007-ben kezdődött, 2012-ig tart.
OTKA: K-76231: Eötvös-inga mérések geodéziai alkalmazása. 2009-ben kezdődik, 2012-ig tart.
OTKA: K-72806: Faye-anomáliák meghatározásának pontossági vizsgálata. 2008-ban kezdődött, 2010-ig tart

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

1. Bús Z, Grenerczy Gy, Tóth L et al.: Active crustal deformation in two seismogenic zones of the Pannonian basin - GPS versus seismological observations, Tectonophysics 474: 343-352 (2009)
2. Caporali A, Aichhorn C, Becker M et al. (incl. Grenerczy Gy): Surface kinematics in the Alpine-Carpathian-Dinaric and Balkan region inferred from a new multi-network GPS combination solution, Tectonophysics 474: 295-321 (2009)
3. Érdi B, Forgács-Dajka E, Nagy I et al.: A parametric study of stability and resonances around L4 in the elliptic restricted three-body problem, Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy 104(1-2): 145-158 (2009)
4. Frey S, Gabányi K, Asaki Y: Identification of Potential Weak Target Radio Quasars for ASTRO-G In-Beam Phase-Referencing, Publications of the Astronomical Society of Japan 61(1): 123-127 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	5		Ebből kutató[2]:		4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					42
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					37
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		9
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	16		idegen nyelven:		12
összesített impakt faktor[6]:	32,106		összes hivatkozás száma[7]:		20
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					14
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 0		MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	5		poszterek száma[12]:		8
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					8
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4		Diplomamunkát(BSc):		4
Diplomamunkát(MSc):	0		PhD-t:		1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					2200
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				22,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0		Teljes saját bevétel[18]:	18,30	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				11,9	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				1,5	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				4	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				5,5	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				0	MFt

BME GÉPEK ÉS JÁRMŰVEK DINAMIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Stépán Gábor, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 5.
Telefon: 463-1369, Fax: 463-3471
e-mail: stepan@mm.bme.hu; honlap: www.mm.bme.hu/~gjd

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Gépek és járművek stabilitási- és rezgésvizsgálata kapcsán a forgácsolás közben fellépő rezgések és a – járművek stabilitásvesztésének kialakulásában kulcsszerepet játszó – gumiabroncs rezgések analízise volt a két legfontosabb feladat. Új eredmény a korábbi stabilitásvizsgálati módszerek csavart élű marószerszámra történő kiterjesztése, valamint a szerszám rezgésével kapcsolatos forgácsvastagság változás pontosabb figyelembe vétele mind a dinamikai, mind a kontunuummechanikai modellben. A gumikerék modellel kapcsolatos elméleti, numerikus és kísérleti vizsgálatok arra az eredményre vezettek, hogy a kerék és a talaj érintkezési felületén kis megcsúszások következnek be. A létrejövő mikro-rezgések megnövelik a kerék gördülési ellenállását, fokozzák a melegedését és kopását, emellett befolyásolják az abroncs tapadását, rontva a jármű stabilitását.

A elektronikus menetstabilizáló rendszerek és a modern fékberendezések *számítógépes szabályozás*sal működnek. Ebben a témakörben a digitális hatásokhoz köthető nemlinearitások következtében kialakuló kaotikus rezgések, valamint a folytonos és diszkrét idejű szabályozó rendszerek együttműködése során adódó jelenségek modellezése volt a két fő feladat. Az elméleti eredményeket egy digitális szabályozású, ún. alulaktuált és redundáns szerviz robot pálya menti pozíciószabályozásának kidolgozása során sikerült alkalmazni.
Járműalkatrészek tönkremenetelének vizsgálata kapcsán folytatódott az ún. Portevin-Le Chatelier (PLC) hatás tanulmányozása. A lefolytatott vizsgálatok alapján a PLC hatás kialakulásában az ún. negatív rate-dependence jelenség szerepe az elsődleges. Az anyagmodellezés terén a feltételes Lagrange derivált és a Ljapunov-féle stabilitás feltételeinek együttes figyelembevételével kapcsolatos kutatások álltak a vizsgálatok fókuszában.

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

Forgácsolási eljárásokat széles körben alkalmaznak a gépkocsi-, vonat-, és repülőgépgyártásban, melyek automatizált gyártósorai megkövetelik ezen eljárások előre tervezhetőségét. A kutatócsoportban folyó munka fő célja a megmunkálási eljárások optimalizálása, melyek így termelékenyebbé és gazdaságosabbá válhatnak. A 2009-es év egyik új eredménye a hullámos élű marószerszámok stabilitásvizsgálatának kidolgozása. Ilyen szerszámokat elsősorban nehezebb forgácsolási tulajdonságú anyagok (titán, nikkel alapú ötvözetek) megmunkálására használnak. Az elért eredmények szerint ezek a szerszámok sokkal stabilabbak, mélyebb megmunkálásra képesek mint a hagyományosak, és alkalmazásuk előnyös könnyen megmunkálható anyagok (pl. alumínium) esetén is. A marási modellek továbbfejlesztésének másik iránya az erőgerjesztett rezgések vizsgálata. A szakirodalomban ezeket a rezgéseket általában elhanyagolják, pedig nagy hatással vannak a szerszámél pályájára. A kutatók által felállított modellben a forgácsvastagság számítása nemlineáris, ún. állapotfüggő-időkéséses egyenletekre vezet, így a periodikus pályák megtalálása is külön feladat. A probléma megoldására egy számítógépes algoritmus készült az irodalomban megtalálható módszerek továbbfejlesztésével. A vizsgálatok során egy új típusú

stabilitásvesztési jelenséget sikerült kimutatni. Az eredmények felhasználásával elkerülhetőek az eddig ismeretlen instabil paramétertartományok. Egy ehhez kapcsolódó kutatási téma az esztergálás vizsgálata. A legújabb eredmények szerint két különböző okból is keletkezhet kaotikus rezgés esztergálás során: egyrészt a kés anyagtól való elválása során alakulhat ki nagy amplitúdójú rezgés (ún. chatter) és kaotikus viselkedés, másrészt a forgácstő képlékeny deformációja is vezethet kis amplitúdójú kaotikus felületi egyenetlenség megjelenéséhez.

A közúti balesetek nagy része visszavezethető a járművek stabilitási problémáira. Mivel a stabilitásvesztés szoros kapcsolatban áll a gumikerék által okozott rezgésekkel, ezért ez a témakör a járműdinamika egyik legintenzívebben kutatott területe. A beszámolási évben a kutatócsoport tagjai egy továbbfejlesztett gumikerék modellt vizsgáltak numerikus módszerekkel, figyelembe véve a kerék-talaj érintkezési felületén kialakuló megcsúszásokat is. Az eredményekből kiderült, hogy az elmélet által megjósolt szűk instabil tartományok miért nem érzékelhetők a mérések során: a létrejövő csúszások meggátolják a nagy amplitúdójú rezgések kialakulását, ám egy állandó mikro-csúszásokkal teli állapothoz vezetnek. A kialakuló mikro-rezgések megnövelik a kerék gördülési ellenállását, valamint fokozzák a kerék melegedését és kopását. A bekövetkező teljesítményveszteségeket numerikusan és kísérletileg – a kerék hőmérsékletének mérésével – is sikerült kimutatni, a korábbi elméleti eredményekkel összhangban. 2009-ben elkezdődött egy gerjesztett súrlódásos oszcillátor kísérleti vizsgálatával kapcsolatos munka. A kísérletek célja a kényszerrezgések súrlódásos mechanikai rendszerekre (pl. fékekre) gyakorolt hatásának a tanulmányozása. A jelenlegi eszközökkel az akadozó csúszás jelenségét már ki lehet mutatni. A munka következő fázisában a matematikai modellnek megfelelő gerjesztést kell megvalósítani.

Járműalkatrészek tönkremenetelével kapcsolatosan folytatódott a Portevin-Le Chatelier jelenség vizsgálata. A jelenség során az anyag feszültség-alakváltozás diagramja szakaszosan folytonossá válik, ami a felületi minőség drasztikus romlásához vezet a nagy deformációval járó technológiák (pl. forgácsolás) alkalmazásakor. A jelenséget a szakirodalom két eltérő módon tárgyalja. Általában a mikromechanikai hatásokat tartják a lényegesebbnek (dynamic strain ageing). Ezzel szemben a kutatócsoportban folytatott vizsgálatok szerint inkább az ún. negatív rate-dependence jelenség szerepe az elsődleges. Az anyagmodellezés terén folytatódtak a feltételes Lagrange-derivált és a Ljapunov-féle stabilitás feltételeinek együttes figyelembevételével kapcsolatos kutatások. Az eredmények alapján megtehető a korábbi egytengelyű eset többtengelyű általánosítása.

Számítógéppel szabályozott nemlineáris dinamikai rendszerekben a folytonos és diszkrét idejű részek együttműködésének szabatos leírása elengedhetetlen a korszerű szabályozási rendszerek továbbfejlesztéséhez. 2009-ben folytatódott a diszkretizálásból adódó anticipatív hatásoknak és a késleltetésnek az egymásra kifejtett hatásával kapcsolatos munka, valamint a digitális hatások következtében kialakuló kaotikus rezgések vizsgálata. A beszámolási évben történt az ACROBOTER projekt keretében megvalósuló szerviz robot pálya menti pozíciószabályozásának kidolgozása is. Az elsődleges problémát az jelenti, hogy a robot alulaktuált (under-actuated) és redundáns, azaz több lehetőség is van a kívánt mozgás biztosítására, de nincs minden szabadsági foknak megfelelő beavatkozási lehetőség. A kidolgozott szemi-analitikus algoritmus pontos numerikus számítást tesz lehetővé, biztosítva a szabályozás valós idejű futtatásának lehetőségét. A módszer jól használható mobil robotok, vezető nélküli repülőgépek (UAV) és más speciális járművek irányítására is. A kutatócsoport munkatársai részt vettek az ACROBOTER projekt keretében benyújtott két szabadalmi leírás

elkészítésében is. A szabadalmak a köteleken felfüggesztett teherhordó berendezések kötélzetének kialakítására, valamint a lengő teher mozgatására tesznek javaslatot. Jellemző alkalmazásaik a kötél- és kábel felfüggesztésű robotok, katasztrófavédelmi mentő rendszerek, darurendszerek.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

- *Felsőoktatási kapcsolatok*: BME; Pécsi Tudományegyetem; McGill University; University of British Columbia; University of Bristol; Michigan State University; University of Arizona; New Mexico State University; Slovak University of Technology in Bratislava
- *Folyóirat szerkesztőbizottsági tagságok:* Periodica Polytechnica, Meccanica, J. Vibration and Control, J. of Nonlinear Science, J. of Computational and Applied Mechanics, Phil. Transactions of the Royal Society, Int. J. of Aerospace Engineering, Physica D, Mechanism and Machine Theory
- *Konferencia bizottsági tagságok:* IUTAM Symposium on „Dynamics Modeling and Interaction Control in Virtual and Real Environments"; CASYS2009; Finno-Ugric International Conference of Mechanics
- *Tisztségek nemzetközi szervezetekben:* Secretary, IFToMM Technical Comm. of Nonlinear Oscillations; CISM Scientific Council; IUTAM Symposium Committee

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Két folyamatban lévő OTKA pályázat mellett folytatódott az EU FP6-os program keretében az ACROBOTER projekt. A nemzetközi részvétellel folytatott kutatás célja egy új típusú szervizrobot kifejlesztése. A projekttel kapcsolatos munka 2010-ben zárul.

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

1. Orosz G., Wilson R.E., Szalai R., Stépán G.: Exciting traffic jams: Nonlinear phenomena behind traffic jam formation on highways, *Physical Review E* 80(4), 046205 (2009)
2. Pálmai Z., Csernák G.: Chip formation as an oscillator during the turning process, *Journal of Sound and Vibration*, 326, pp. 809-820, (2009)
3. Petrov N., Szekeres A.: Non-classical thermoelasticity, *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 39(4), pp. 3-10, (2009)
4. Takács D., Orosz G., Stépán G.: Delay effects in shimmy dynamics of wheels with stretched-string like tyres, *European Journal of Mechanics Solid A* 28, pp. 516-525, (2009).
5. Takács D., Stépán G.: Experiments on quasi-periodic wheel shimmy, *Journal of Computational and Nonlinear Dynamics* **4**(3), (2009)
6. Kovács L. L.; Insperger T.; Galambos P., Stépán, G.: Experiments on the stability of digital force control of robots, in: Awrejcewicz, J. (ed.), Modeling, Simulation and Control of Nonlinear Engineering Dynamical Systems – State-of-the-Art, Perspectives and Applications, Springer, pp. 191-199, (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7		Ebből kutató[2]:			7
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora: 1	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]						1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:						4
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:						11
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:						11
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:			3
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:			6
összesített impakt faktor[6]:	4,921		összes hivatkozás száma[7]:			36
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:						36
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0	jegyzet:		0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	2	jegyzet:		0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag: 0			
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]				0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	11	poszterek száma[12]:				0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:						0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:				7
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:						7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát(BSc):				5
Diplomamunkát(MSc):	0	PhD-t:				2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:						1120
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:					25,30	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:			18	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:					0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					3,80	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]					0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					14,20	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:					0	MFt

BME IRÁNYÍTÁSTECHNIKAI KUTATÓCSOPORT

Keviczky László, akadémikus
1111 Budapest, Goldmann György tér 3.
Telefon: 463-2870; Fax: 463-2871
e-mail: keviczky@sztaki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Robusztus rendszeridentifikációs kutatások. Elméleti és gyakorlati módszerek kidolgozása folyamatok optimális irányítására. Az elméletileg elérhető legjobb (határ-optimális) szabályozók kutatása. Predikciós irányítási algoritmusok lineáris és nemlineáris rendszerek irányítására, az irányítási algoritmusok hatékonyságának növelése. Kutatás a változó struktúrájú nemlineáris rendszerek területén. A nemlineáris hatások vizsgálata a bifunkciós folyamatokra az állapotváltozóktól függő módon felépítésüket változtató rendszerekben. Komplex rendszerek modellezési és irányítási módszereinek kutatása. Intelligens alakfelismerő, adatbányászó rendszer fejlesztése.

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

A racionális ortogonális bázisfüggvények alkalmazása a jelek és rendszerek modellezésében valamint a rendszer identifikációban igen sikeres volt mind az elmélet, mind az alkalmazások szempontjából. A csoport foglalkozott ennek a kutatási iránynak a kiterjesztésével, amely a hiperbolikus Lie-csoportokon való harmonikus analízis eszközeinek felhasználását tette szükségessé. Definiálták az ún. Blaschke–“wavelet”-eket és kidolgozták az ehhez kapcsolódó Blaschke–Fourier transzformációt. Érdekessége ennek a modellezésnek, hogy kapcsolatba hozható a Bólyai–Poincare féle hiperbolikus geometriával. Kezdeti eredmények vannak a jelterekről a rendszerterekre való kiterjesztésben is, egyszerű esetre kidolgozták a hiperbolikus Lie–csoportok, mint állapottér feletti rendszerelmélet néhány alap feladatát. Ez utóbbiak alkalmazása a kvantum irányítási és számítási módszerek tanulmányozásában játszhat komoly szerepet.

Számos alkalmazásban (pl. bizonyos szabályozási feladatoknál, kép- és hangfeldolgozásnál, idősorok analízisénél, stb.) nemcsak a kimenőjel, hanem a bemenőjel is zajos. Az olyan modelleket, amelyekben valamennyi jelkomponens zajos - az angol terminológiában - errors-in-variables (EIV) modelleknek nevezik. A feladat megoldására algoritmust adtak meg a Koopmans-Levin módszer kiterjesztésével. A módszert kidolgozták polinomiális nemlinearitásokkal leírható zajos nemlineáris rendszerek identifikációjára is.

A predikciós irányítási algoritmusok egyre inkább alkalmazást nyernek az ipari gyakorlatban. Lineáris rendszerek irányítására on-off predikciós szabályozások algoritmusainak kidolgozására került sor. Nemlineáris rendszerek irányítására a parametrikus kvadratikus Volterra modellen alapuló predikciós algoritmust dolgozták ki.

Egy plenáris előadásban elhangzottak szerepelnek a nemlineáris hibadektálás differenciál algebrai és geometriai elméletére koncentráltan. Kiemelten foglalkoztak a University of Minnesota kutatóival való kollaboráció keretében kidolgozott LPV detektálással, amely a referenciák szerint az egyik leghatékonyabb módszernek tekinthető. Járműdinamikai alkalmazásokat mutatnak be publikációkban.

Az LPV modellosztály alkalmas arra, hogy nemlineáris feladatokat úgy tudjunk átírni ilyen alakba, hogy hatékony numerikus módszereket tudjunk a megoldásokhoz alkalmazni. Az LPV

rendszerelmélet és irányítás területén a csoport a kezdetektől aktív. Publikációk a modellvalidációtól az LPV Hinf irányítás korlátozott bemenőjellel való megvalósításáig mutatják be az eredményeket.

A működő sokváltozós rendszerek tervezése ma sem lezárt folyamat. Először sikerült a Youla- és KB-parametrizálás alapján többváltozós rendszerekre vonatkozó szabályozó (MIMO) tervezési algoritmust kidolgozni. A UAV autonóm rendszerek útvonal követési irányításához kapcsolódva mutatták be a zajbecslésre és követő szabályozásra kidolgozott módszereket.

A csoport egyik legsikeresebb irányítási rendszere a Paksi Atomerőmű négy blokkján üzemelő primerköri nyomás szabályozó rendszer. Ez számítógéppel irányított, hibrid, nemlineáris, elosztott hálózaton keresztül irányított rendszer. Az alkalmazható hálózati protokolloknak a rendszer stabilitásra való hatását elemezték. Az éjszakai le- és hajnali felterhelési tranziensek során mért adatok segítségével a paraméterbecslést is elvégezték. A primerköri dinamikus modellt kibővítették a főbb hűtőközeg vesztéssel járó meghibásodási módok leírásával, és az ily módon kapott hibrid modellt színezett Petri háló alakú formára alakították. Ily módon végezték el a gőzfejlesztő csöveinek törésével keletkező primer-szekunderköri átfolyás kezelésére kidolgozott PRISE eljárás verifikációját.

Kiemelkedő új eredményt értek el az inherensen nemlineáris pulzus szélesség modulációs inverterek által generált szubharmónikusok elméletében.

A komplex, nagyméretű folyamatrendszerek dinamikus modellezésére használatos többléptékű (multi-scale) modellezési módszerre alapozva kidolgoztak egy olyan diagnosztikai módszert, amely a rendszerről rendelkezésre álló meghibásodás hatáselemzés (FMEA), valamint veszély és működőképesség analízis (HAZOP) információk felhasználásával prediktív diagnosztikára és veszteség-megelőzésre is képes. A kidolgozott eszközöket és módszereket egy intelligens diagnosztikai keretrendszerbe integrálva folyamatos és félfolyamatos vegyipari technológiákra alkalmazzák egy nemzetközi, ausztrál-magyar kutatási együttműködés keretében.

Továbbfejlesztették az intelligens alakfelismerő rendszert, mind hardver, mind pedig szoftver vonatkozásában. A kutatás célkitűzése egy olyan intelligens alakfelismerő rendszer kialakítása, amely lehetővé teszi egyszerűen kezelhető és tanítható gyakorlati rendszerek megvalósítását. A rendszer elméleti hátterét egy Bayes valószínűségi hálón alapuló algoritmus alkotja. Kifejlesztettek egy FPGA áramkörön megvalósított, sok egyszerű feldolgozó elem párhuzamos működéséből álló egységet. A kutatás során megmutatták, hogy a kialakított rendszer hogyan alkalmazható robotikai rendszerek gépi látómoduljának kialakítására.

Új eljárást dolgoztak ki mechatronikai rendszerek nemlineáris súrlódási és kotyogási jelenségeinek modellezésére, hibrid irányítására és kaotikus jelenségeinek tanulmányozására. Az elmélet helyességét szimulációval demonstrálták.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport tagjai részt vettek a 2009-ben Budapesten rendezett European Control Conference (ECC) szervezésében. A konferencia alatt az EUCA (European Union Control Association) a kutatócsoport vezetőjét választotta meg a következő két évre elnökének.

A csoport egy akadémikus tagját az IEEE-IES Eugene Mittelmann Achievement Award-dal tüntette ki.

A kutatócsoport tagjai közül már hárman is az MTA levelezőtag jelöltjei között szerepeltek.

A Kölni Műszaki Főiskola Folyamatszabályozási Tanszéke és az MTA-BME szabályozás-technikai kutatócsoportja együttműködésében PhD kutatást irányítanak a predikciós irányítások témakörében. A PhD munka házi vitájára 2009 májusában került sor.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

- OTKA K-71762 Autonóm földi, légi és vízi robotok irányításelmélete és mesterséges intelligencia eszközei 2008-10. A kutatócsoportból 1 fő vett részt.
- OTKA T-68370 Robusztus becslési és irányítási algoritmusok 2007-11. A kutatócsoportból 2 fő vett részt.
- EU Leonardo Projekt CZ/6/B/PP 2006-09. E-learning distance interactive practical education. 2006-09. A kutatócsoportból 2 fő vett részt.
- OTKA K67625 Control and diagnosis of nonlinear systems based on first engineering principles 2007-11. A kutatócsoportból 1 fő vett részt.
- ARC LP0776636 (Australian Research Council) A multiscale-multifunctional approach to advanced diagnosis and operator performance in complex process systems 2008-11. A kutatócsoportból 1 fő vett részt.
- OTKA K72338 Káosz elméleti kutatás véges számú teljesítmény kapcsolókat tartalmazó, nemlineáris, dinamikus, szabályozott rendszerekben 2008-11. A kutatócsoportból 2 fő vett részt.
- EGT (Európai Gazdasági Térség)/Norvég Finanszírozási Mechanizmusok. Pályázat HU0121-GAN-00064-E-V1 Biomassza és geotermális energiaforrások integrált hasznosítása: modell kiserőmű komponenseinek és tervének lépcsőzetes megvalósítása. 2009-11. A kutatócsoportból 2 fő vett részt.

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

1. Németh E, Bartha T, Fazekas Cs, Hangos K.M.. Verification of a primary-to-secondary leaking safety procedure in a nuclear power plant using coloured petri nets. Journal of Reliability Engineering and System Safety, 94(5), pp. 942–953, 2009.
2. Stumpf P, Varga Z, Bartal P, Járdán R. K, Nagy I. Effect of Subharmonics on the Operation of Ultrahigh Speed Induction Machines, 35th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (IECON), Porto, Portugal, pp. 431-436, 2009.
3. Bokor J.: Fault detection and isolation in nonlinear systems. 7th IFAC Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety of Technical Processes. SAFEPROCESS. Barcelona. Spain, 2009. pp. 1-11.
4. Vajk I., Hetthéssy J, Bars R. Chapter 10. Control Theory for Automation - Advanced Techniques. In: S. Y. Nof (Ed.), Springer-Verlag, Handbook of Automation.2009. pp. 173-198
5. Gruber, J.K., Bordons C, Bars R, Haber R. Nonlinear predictive control of smooth nonlinear systems based on Volterra models. Application to a pilot plant. International Journal of Robust and Nonlinear Control. www.interscience.wiley.com, DOI:1549, 2009.
6. Márton L., Lantos B.: Control of mechanical systems with Stribeck friction and backlash. Systems and Control Letters 58:(2) pp. 141-147, 2009.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Irányítástechnikai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:		7
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	4	levelező tag:	0	rendes tag: 3
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]						3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:						1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:						40
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:						40
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:		3
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:		37
összesített impakt faktor[6]:	5,0119			összes hivatkozás száma[7]:		278
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:						278
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0	jegyzet:		0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	2	jegyzet:		0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	3	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag: 0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]				0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	32	poszterek száma[12]:				1
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:						0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	26	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:				8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:						9
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3	Diplomamunkát(BSc):				9
Diplomamunkát(MSc):	9	PhD-t:				10
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:						45
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						14,80 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:				4 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0 MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						4 MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0 MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0 MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0 MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0 MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0 MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0 MFt

BME KONDENZÁLT ANYAGOK FIZIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Jánossy András, az MTA tagja
1111 Budapest Budafoki út 8. l. lh. 1. em.
Telefon: 463-1391; Fax: 463-3819
e-mail: atj@szfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatás elsősorban alapkutatás jellegű és a kölcsönható kondenzált anyagok kísérleti, elméleti és számítógépes vizsgálatára irányul. A fő területek

I. Mágneses félvezetők,
II. Molekuláris elektronika,
III: Mezoszkópikus és alacsony dimenziójú vezetők és mágnesek
IV. Hálózatok és szemcsés rendszerek.

Az I. II. és III. az EU 7. Keretprogram *Nanoszerkezetek fizikája* témacsoport „Nanotudományok és Nanotechnológiák" területéhez kapcsolódik. A IV. téma az MTA „Természettudományi Prioritásai" közé tartozik.

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

Az elektronok spin-állapotának vezérlése várhatóan jelentős szerephez jut a jövő elektronikai fejlesztéseiben. A legtöbb spintronikai eszköz koncepciója az elektron-spinek nano-skálán történő manipulációján alapul, így a kapcsolódó kvantumfizikai folyamatok megértése elsődleges jelentőségű. A kutatócsoport ezen a területen 2009-ben *mágneses rétegszerkezetek* spintronikai jelenségeit vizsgálta, ehhez a témához kötődik a spin élettartam illetve diffúzió kísérleti vizsgálata szerves rétegszerkezetekben.

Andrejev-spekroszkópia alkalmazásával, a spin-polarizáció közvetlen mérésével, különböző nem mágneses fémekre meghatározták az egyik legfontosabb spintronikai anyagi paramétert, a spin diffúziós hosszat. Megmutatták, hogy a vezetési elektronok spin-polarizációját néhány nanométeres felbontással érzékelő eszköz egyúttal alkalmas atomi szintű mágneses jelenségek tanulmányozására is. Nagyobb méretskálán – de még mindig a szubmikronos tartományban – kidolgozták a mágneses szerkezet meghatározásának új elveken alapuló SPM módszerét (scanning probe microscopy), amely a kvantummechanikai koherencia jelenségektől származó jel detektálásával gyors és folyamatos pásztázást tesz lehetővé. Ezeknek az eredményeknek a publikálása folyamatban van.

A kutatócsoport kiterjesztette a komplex mágneses rendszerek kísérleti vizsgálatát a spin és rács-szabadsági fokok kölcsönhatásának tanulmányozására. A spin-rendeződéshez kapcsolódó kristálytér szimmetria változását ion-szelektív magnetooptikai Kerr-effetus méréssel (MOKE) határozták meg. A molekuláris elektronika területén – a korábbi kísérleti eredményekhez kapcsolódóan – elméletileg tanulmányozták a nanoobjektumok rezgési módusainak elektrontranszportra gyakorolt hatását.

A spintronikai alkalmazások szempontjából fontos az elektronok fáziskoherenciájának hosszú idejű megőrzése. A fém rétegek spin élettartamának közvetlen mérési módszere a vezetési

elektron spin rezonancia (CESR). Az ESR vizsgálatokat kiterjesztették szerves molekula kristályokra is, amelyekben 1 atom vastagságú szigetelő és szerves fém réteg váltakozik. Ezek a vizsgálatok réteges szerves közel kétdimenziós fémek és félvezetők spin élettartamát meghatározó mechanizmusok feltárására irányultak. Új módszert dolgoztak ki a rétegek közötti spindiffúzió kvantitatív mérésére. A munkáról több nemzetközi konferencián számoltak be. Meghatározták egy prototípus szerves gyenge ferromágnes a κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)]$_2$Cl mágneses sajátrezgéseinek frekvencia-mágneses tér módus diagrammját, ami egyértelmű bizonyítékát adta annak, hogy az egy molekula vastag szerves mágneses rétegek mágneses szempontból függetlenek. Technikai fejlesztésként a mm hullámú ESR spektrométerhez nagy, 15 kbar nyomásig működő nyomáscellát helyeztek üzembe, illetve a nyomás mérését lehetővé tevő optikai spektrométert szereztek be. Az új berendezéssel teszt elektron spin rezonancia méréseket végeztek. Új nagystabilitású szupravezető mágnestápegységet szereztek be.

Elméleti kutatásokat végeztek a mezoszkópikus rendszereken, melyek a szilárdtestfizikai kutatások egyik leggyorsabban fejlődő területe. A szén különleges gömbszerű molekulái, *a fullerének*, számos nagyon érdekes mágneses és elektromos tulajdonsággal rendelkező vegyületet alkotnak. A Pármai Egyetem és a Cambridge-i Egyetem kutatóival együttműködve megmutatták, hogy a Li_4C_{60} fullerén polimer egy újfajta ionos vezető, amelynek nagy ionos vezetőképességét a szerkezet különlegessége teszi lehetővé.

A szemcsés anyagok mindenütt jelen vannak és technológiai szerepük óriási, tanulmányozásuk az utóbbi másfél évtizedben lendült fel a számítási lehetőségek látványos javulásának köszönhetően. Az SZFKI kísérleti kutatóival együttműködve kimutatták a nyírási sávok törésének és visszaverődésének jelenségét különböző súrlódású szemcsés anyagok határrétegén. Jelentős előrehaladást értek el a kvázistacionér nyírás elméleti leírásában. A komplex rendszerek vizsgálata során felmerült problémák megoldása érdekében módszert dolgoztak ki a hátványfüggvény aszimptotikájú eloszlások lecsengését jellemző exponens becslésére, valamint az aszinkron jelek közötti korrelációk pontos mérésére. Hatványfüggvénnyel leírható viselkedést találtak a tőzsdei ajánlati könyv számos jellemzőjénél nagy árváltozások után és ennek kvalitatív magyarázatára modellt dolgoztak ki.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatómunkát nemzetközi együttműködések keretében végzik. A *kísérleti szilárdtestfizikában* fontos együttműködést alakítottak ki Y. Tokura csoportjával (University of Tokyo, Japan). *Az elméleti szilárdtestfizikában* együttműködnek a Bonni Egyetemmel (J. Kroha), és a University of British Columbia (I. Afflek), a madridi CSIC (F. Guinea), a müncheni LMU (J. van Delft) is szoros együttműködő partnereik közé tartozik. *A szemcsés anyagok fizikájában* fő partnerük a Duisburgi Egyetem (D. E: Wolf). A komplex rendszerek vizsgálatánál a Helsinki Műegyetem (K. Kaski) és a torinoi ISI (S. Fortunato) említendő. Az ionos fullerén vezetők terén az együttműködés a Dipartimento di Fisica, Universita` di Parma, kutatóival volt sikeres. A réteges szerves vezetők elektron spin rezonancia vizsgálatában az Institute of Physics of Complex Matter, FBS, Swiss Federal Institute of Technology (EPFL), Svájc (Forró L.) kutatóival dolgoztak együtt.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport MTA támogatásán kívül OTKA pályázatok fedezték a működési költségeket. A „Spin-polarizáció nanoszerkezetekben” címmel nagy összegű OTKA kutatási (NK) pályázat keretében a nanoszerkezetek spin-polarizációjának lokális vizsgálatát sikeresen végezték. A „Multifrekvenciás elektron spin rezonancia erősen korrelált fémekben és szupravezetőkben” NK60984 OTKA 2009 pályázatot májusában befejezték. A felújított spektrométerrel szerves vezetőkön kutatási programot indítottak, az eredményeket neves tudományos szaklap közölte.

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

A kutatócsoport tagjai a 2009-as évben több nemzetközi konferencián tartott előadást eredményeiről és számos tudományos közleményt jelentetett meg neves referált nemzetközi folyóiratokban. Alább néhány közlemény sorolunk fel.

1. Riccò M, Belli M, Mazzani M, Pontiroli D, Quintavalle D, Jánossy A, Csányi G: Superionic Conductivity in the Li_4C_{60} Fulleride Polymer. Phys. Rev. Lett. 102, 145901 (2009)
2. Antal Á, Fehér T, Jánossy A, Tátrai-Szekeres E, Fülöp F: Spin Diffusion and Magnetic Eigenoscillations Confined to Single Molecular Layers in the Organic Conductors κ-(*BEDT-TTF*)$_2$*Cu*[N(*CN*)$_2$]*X* (*X*=*Cl*,*Br*). Phys. Rev. Lett. 102, 086404 (2009)

3. Börzsönyi T, Unger T, Szabó B: Shear zone refraction and deflection in layered granular materials. Phys. Rev. E 80, 060302(R) (2009)

4. Dóra B, Halbritter A: Temperature-dependent conductance of deformable molecular devices. Phys. Rev. B 80, 155402 (2009)

5. Bordács S, Varjas D, Kézsmárki I, Mihály G, Baldassarre L, Abouelsayed A, Kuntscher CA, Ohgushi K, Tokura Y: Magnetic-order-induced crystal symmetry lowering in ACr_2O_4 ferrimagnetic spinels. Phys. Rev. Lett. 103, 077205 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	8		Ebből kutató[2]:		5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					13
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					13
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		13
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:		0
összesített impakt faktor[6]:	51,005		összes hivatkozás száma[7]:		222
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					201
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 1		MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0		külföldön:[11]		0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	19		poszterek száma[12]:		10
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					14
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2		Diplomamunkát(BSc):		3
Diplomamunkát(MSc):	2		PhD-t:		8
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					1858
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				35,60	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	2		Teljes saját bevétel[18]:	82,5	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				63,1	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				17	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				2,4	MFt

MTA-BME MŰSZAKI ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Horvai György, az MTA levelező tagja
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.
Telefon: 463 4056, Fax: 463 3408
honlap: www.aak.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése.
Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások.

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

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése

– Gazda-vendég rendszerek szenzorok előállításához

Optikai szenzorok fejlesztése céljából új típusú, akridon fluoreszcens jelzőegységet tartalmazó bis(azakoronaéter) szenzormolekulák spektroszkópiás viselkedését, különböző fémionokkal alkotott komplexeinek a sztöchiometriáját és stabilitási állandóját vizsgálták. A vegyület fluoreszcens viselkedését a fényindukált elektronvándorlás (PET) mechanizmus alapján értelmezték.

– Molekuláris lenyomatú polimerek (MIP-ek) előállítása, jellemzése

A korábban nagy áteresztőképességű MIP szintézisre és tesztelésre kidolgozott (multiwell) szűrőtálcás rendszert sikerrel alkalmazták egy új feladatra, szilárd fázisú extrakciós (SPE) mintaelőkészítésre. A szűrőtálca membránjain β-blokkoló gyógyszerekre szelektív MIP-eket állítottak elő, és optimalizálták az SPE mintaelőkészítést ezen anyagoknak doppinganalitikai célra vizeletből történő meghatározására.

Homogén méreteloszlású szemcsés MIP-eket állítottak elő kevés oldószert tartalmazó polimerizációs elegyekből mindenféle stabilizátor hozzáadása nélkül, nagyon viszkózus oldószer alkalmazásával [1]. Az így készült MIP-ek szelektivitási tulajdonságai hasonlóan jók voltak, mint a precipitációs polimerizációval készülteké, de előállításuk gazdaságosabb a kis oldószerigény miatt.

A fehérjékre szelektív, felületi kötőhelyekkel rendelkező elektropolimerizációval készült mikrorudakkal [2] kapcsolatos munkát két irányban folytatták tovább: a) mágneses nanorészecskéket tartalmazó polimer nanorudakat állítottak elő, amely lehetővé teszi ezek mágneses térrel való manipulálását; b) a felületi molekuláris lenyomatok kialakításának elvét sikeresen ötvözték fotolitográfiás eljárással és a molekuláris felismerést biztosító mikroszerkezeteket közvetlenül SPR chipek felületén állították elő, ezáltal lehetővé téve a bekötődési kölcsönhatások valós idejű, jelölés nélküli meghatározását.

– Ciklodextrin zárványkomplexek tanulmányozása

A Lippia sidoides olaj extraktum - ciklodetrin rendszerek stabilitás vizsgálatakor megállapították, hogy a maltodextrin-gumiarábikum hordozó visszatartó képessége nagyobb, mint a ciklodextriné és a visszatartó képesség a gumiarábikum mennyiségével növekszik [3]. A termoanalitikai vizsgálatok eredményeit molekuladinamikai szimulációk is alátámasztották.

Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások

– Szelektív megkötésre alkalmas ligandumokat alkalmazó szenzorok

Ionszelektív elektródokkal esetenként a fluoreszcenciás módszerekkel azonos kimutatási határral lehet ionokat meghatározni. A rendkívül kis kimutatási határok (pM-nM)

biztosításához szükséges az ionszelektív membránban fellépő transzport folyamatok ismerete és pontos kontrollja. Az egyik legperspektivikusabb ionszelektív konstrukció a szilárd belső elvezetések alkalmazásán alapul, amelyek minőségbiztosítási kritériumait kidolgozták [4]. Nemzetközi együttműködésben meghatározták a különböző ionszelektív membránok (PVC, poliakrilát és szilikon gumi) vízfelvételét [5], és kidolgoztak egy nem stacionárius feltételezésen alapuló matematikai modellt, amellyel az ionszelektív elektródok válaszmechanizmusa általánosan értelmezhető [6]. Módszert dolgoztak ki lipofil ioncserélők és ionoforok diffúzió állandójának, külön-külön és együttes meghatározására ionszelektív membránokban kronopotenciometriás tranziensek alapján.
Új potenciometriás detektálási módszert dolgoztak ki ELISA típusú immunoassay mérésekhez, amely az enzim reakcióban felszabaduló lipofil anionok mérésén alapul [7]. A miniatürizált anioncserélő elektródok alkalmazásával egy méréstechnikailag egyszerű és költséghatékony eljárást vezettek be. A prosztata specifikus antigén modellrendszeren végzett kísérletek bizonyították, hogy az új potenciometriás immunoassay az optikai detektálásnál jobb teljesítményparaméterekkel rendelkezik.

Másodlagos kölcsönhatások szerepének vizsgálata kondenzált fázisok illetve határfelületeik szerkezeti és termodinamikai tulajdonságainak kialakításában számítógépes szimulációs módszerekkel illetve mérésekkel
Elsőként adtak koherens elméleti értelmezést annak a kísérleti ténynek, hogy a piridingyűrű metilezése rontja a vízzel való elegyedési tulajdonságokat [8]. Arra a meglepő következtetésre jutottak, hogy a jelenleg rendelkezésre álló kölcsönhatási modellek egyike sem képes azt a mindennapi kísérleti tényt reprodukálni, hogy az aceton korlátlanul elegyedik vízzel. Megállapították, hogy az acetonitril vizes oldatainak határfelületén az acetonitril adszorpció nem korlátozódik az első molekuláris rétegre, továbbá értelmezték a komponensek felületi orientációs viselkedését. Kimutatták, hogy a víz-diklórmetán határfelület mindkét fázisban csak a legelső molekuláris réteg tulajdonságaira van hatással, a folyadékfázisok burkolófelülete nagy mértékben független, egyes helyeken a két fázis között akár 0.5-1 Å széles üres térrész is előfordulhat. Azt találták, hogy a vízmolekulák adszorpciója magnetit (Fe_3O_4) nanorészecskék határfelületén a gócképződéshez hasonló mechanizmussal megy végbe: több molekuláris réteg egyidejűleg (és nem egymást követően) épül ki. A víz stabil adszorpciós rétege legalább öt molekuláris réteg vastagságú. Megállapították, hogy a GM1 gangliozid molekulának DOPC membránban melyek a preferált állásai. A halotán altatószer hatásának nagy nyomáson történő eltűnését a membrán apoláros belső részében tapasztalt aggregátumképződéssel tudták megmagyarázni.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A magyar és külföldi tudományos akadémiák közötti kétoldalú együttműködés
- Magyar-Észt: modellfehérjékre, avidinre imprintelt vezető polimer mikrorudakba mágneses nanorészecskéket építettek be. (1 közlemény)
- Magyar-Olasz: epesav sók kétlépcsős aggregációját szimulálták. (1. közlemény)

Tét-ek
- Magyar-francia TéT (FR-18/2007): „Anesztetikumok aggregációs viselkedésének és hatásmechanizmusának vizsgálata lipid membránokban” (1. közlemény)
- Magyar-portugál Tét (PT-20/2007): „Ópiumszármazékok kölcsönhatásainak vizsgálata biológiai membránokban” (közlemény előkészületben)

Marie Curie projekt 7 európai kutatóhellyel és három céggel: Két Ph.D. részvétele Téli Iskolán Izraelben, Nyári Iskola és Nemzetközi Tudományos Találkozó szervezése Budapesten.

Kutatási együttműködések más egyetemekkel

– Abo Akademi University, Finnország; UFRJ, Rio de Janeiro Állami Egyetem, USP, Sao Paulo Állami Egyetem, USC, Sao Carlos Állami Egyetem, UFRN, Natali Állami Egyetem, Brazília; Univ. of Silezia, Lengyelország, Memhis University, USA

Oktatás egyetemeken

– A csoport minden tagja aktívan oktat a BME-n, egy a fenti brazil egyetemeken is.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Chemically Modified Synthetic Nanopores for Label-Free Detection of Biomolecular Interactions, OTKA (NF pályázat)
Mycotoxin és allergén fehérje specifikus aptamerek izolálása és alkalmazása, (OTKA)
Nanomaterials for Application in Sensors, Catalysis and Emerging Technologies, EU (MC)
Határfelületi rendszerekben lejátszódó molekuláris folyamatok vizsgálata (OTKA)
Molecular Catalysis and Photocatalysis at Soft Interfaces: Towards Chemical Fuel Cells (COST)

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

1. Horváth V, Lorántfy B, Tóth B, Bognár J, László K, Horvai G: Preparation of terbutylazine imprinted polymer microspheres using viscous polymerization solvents, Journal of Separation Science 32(19): 3347-3358 (2009)
2. Menaker A, Syritski V, Reut J, Öpik A, Horváth V, Gyurcsányi RE: Electrosynthesized Surface-Imprinted Conducting Polymer Microrods for Selective Protein Recognition, Advanced Materials 21(22): 2271-2275 (2009)
3. Fernandes LP, Oliveira WP, Sztatisz J, Szilágyi M, Novak C: Solid State Studies on Molecular Iclusions of Lippia Sidoies Essential Oil Obtained by Spray Drying, Journal of Thermal Analysis and Calorimetry 95(3): 855-863 (2009)
4. Lindner E, Gyurcsányi ER: Quality control criteria for solid-contact solvent polymeric membrane ion-selective electrodes, Journal of Solid State Electrochemistry 13: 51-68 (2009)
5. Sundfors F, Lindfors T, Höfler L, Bereczki R, Gyurcsányi RE: FTIR-ATR Study of Water Uptake and Diffusion through Ion-Selective Membranes Based on Poly(acrylates) and Silicone Rubber, Analytical Chemistry 81(14): 5925-5934 (2009)
6. Höfler L, Bedlechowicz I, Vigassy T, Gyurcsányi RE, Bakker E, Pretsch E: Limitations of Current Polarization for Lowering the Detection Limit of Potentiometric Polymeric Membrane Sensors, Analytical Chemistry 81(9): 3592-3599 (2009)
7. Szűcs J, Pretsch E E, Gyurcsányi RE: Potentiometric enzyme immunoassay using miniaturized anion-selective electrodes for detection, Analyst 134(8): 1601-1607 (2009) (HOT ARTICLE minősítést kapott)
8. Darvas M, Jedlovszky P, Jancsó G: Free Energy of Mixing of Pyridine and Its Methyl-Substituted Derivatives with Water, As Seen from Computer Simulations, Journal of Physical Chemistry B 113(21): 7615-7620 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	5			Ebből kutató[2]:			5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	2	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							29
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							29
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			28
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	90,492			összes hivatkozás száma[7]:			542
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							380
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	12	poszterek száma[12]:					7
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					4
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát(BSc):					4
Diplomamunkát(MSc):	8	PhD-t:					9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							926
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						19,40	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:				39	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						20,5	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						1	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						12	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						5	MFt

BME SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIA KUTATÓCSOPORT

Faigl Ferenc, az MTA doktora
1111 Budapest, Budafoki út 8.
Telefon: 463 3652; Fax: 463 3648
e-mail: ffaigl@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A munkatervnek megfelelően a kutatócsoport tagjai négy főbb területen végeztek kutatómunkát 2009-ben:

- Enantioszelektív reakciók vizsgálatához új királis difunkciós vegyületek előállítása és tesztelése modell-reakciókban.
- Optikai izomerek elválasztási módszereinek kutatása, a korábban előállított atropizomer dikarbonsav reszolválószerkénti alkalmazásának vizsgálata.
- Poláris fémorganikus vegyületek regio- és sztereoszelektív reakcióinak kutatása, N-heterociklust tartalmazó királis vegyületek új szintézisének kidolgozása.
- Kemo- és sztereoszelektív funkcionalizálási módszerek kutatása elsősorban gyógyszeripari fontosságú vegyülettípusok körében.

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

- Az optikailag aktív metil 1-(2-metoxikarbonil-6-trifluormetilfenil)pirrol-2-karboxilát szelektív hidrolízisét követő savamidképzéssel olyan új félészter-félamid-származékhoz jutottak, amelynek savamid funkcója az észter érintetlenül hagyásával aminná volt redukálható. Ezt követően az észter csoportra fenil-lítiumot addícionálva egy új királis aminoalkoholt állítottak elő, amely organokatalizátorként nyerhet felhasználást.
  Sikeresen megvalósították az 1-(2-trifluormetilfenil)pirrol α,α'-helyzetű dibrómozását, majd a brómatomok fémorganikus reagensekkel történő konszekutív cseréjét és így új atropizomériát mutató 1-fenilpirrol-származékokat állítottak elő. Ugyanezen módszerrel szintetizáltak egy új, optikailag aktív monofoszfin-származékot is, amely átmenetifém-katalizátorok királis ligandumaként nyerhet felhasználást.
  (R)-1,1'-binaftalin-2,2'-diolból nitrogéntartalmú királis koronaétersorozatot állítottak elő tanszéki kooperációban és ezeket katalizátorként használva védett foszfoglicin Michael-addiciójában néhány Michael akceptorral kíváló enantiomerfelesleget (ee 96%) sikerült elérni. Ezzel új lehetőség nyílik biológiailag aktív aminofoszfonsavak sztereoszelektív szintézisére.
  A természetes borkősavból készített TADDOL-ból több lépésben egy új organokatalizátort állítottak elő, melyet ugyancsak enantioszelektív reakciókban kívánnak felhasználni.
- A rezolválási folyamatok kutatása során megállapították, hogy a diasztereomer sók, vagy komplexek frakcionált kristályosításakor a kinetikus kontrollnak is szerepe lehet. Tanulmányozták a diasztereomerek frakcionált kristályosításánál a kétféle hatás (kinetikus és termodinamikus) valamelyikének a kizárási lehetőségét és kísérletekkel bizonyították, hogy mind kinetikus, mind termodinamikus kontroll alatt végzett kristályosítás biztosíthatja a kedvező enantiomer elválasztást. Az előbbiek alapján rokon szerkezetű racém aminosav észterek reszolválását oldották meg *N*-acetil-fenilglicinnel. A fenilglicin-metilészter új másodrendű aszimmetrikus transzformációját is megvalósították a

csoportban korábban előállított atropizomer dikorbansavval. Rendszerezték a nem racém enantiomerkeverékek elválasztási módszereit és ezt angol nyelvű összefoglaló közleményben (review) publikálták.
A foszfolén-oxidok reszolválására korábban kidolgozott két reszolválási eljárást (molekula és koordinációs komplex képzésen alapuló reszolválás) kiterjesztették további 5- és 6-tagú P-királis ciklusos vegyületek enantiomerjeinek elválasztására.
Ipari együttműködés keretében két gyógyszergyár részére négy új reszolválási eljárást dolgoztak ki. Mindegyik eljárás szabadalomképes új módszer. Kettő ezek közül egy angina pectoris kezelésére használható generikus készítmény fejlesztéséhez kapcsolódik, a másik két királis vegyület originális gyógyszerkutatásban kiválasztott hatóanyagok szintézisének kulcsintermedierjei és a csoport által kifejlesztett eljárásokkal üzemi kísérleti gyártásokat terveznek.
A reszolválási projekteken három MTA-csoport tag, egy doktoráns, két hallgató és két egyetemi alkalmazott dolgozott. A témában két PhD értekezés került benyújtásra, egy sikeres védése 2009-ben megtörtént, a másik dolgozat védésére 2010-ben kerül sor.

– A poláris fémorganikus vegyületek regio- és sztereoszelektív reakcióinak vizsgálata során megállapították, hogy benzilaminometil-csoportot tartalmazó királis oxiránok fémorganikus bázisok jelenlétében enantioszelektív módon azetidin-származékokká rendezhetők át. Az irodalomból eddig nem ismert új reakció gyakorlati jelentőségű lehet biológiailag aktív azetidin-származékok hatékony előállításában.
A CNR (Firenze)-MTA együttműködésben folyó kutatások keretében hatékony új módszereket dolgoztak ki egy tritiloximetil-csoportot tartalmazó királis oxetán-származék szelektív gyűrűnyitására és/vagy detritilezésére.
Ipari együttműködés keretében új eljárást fejlesztettek ki pszichotróp hatású vegyületek előállításához használható diketonok előállítására Heck-reakcióval. Emellett új, szabadalomképes eljárást dolgoztak ki egy generikus gyógyszerkészítmény intermedierjének szintézisére lítiumorganikus reagens alkalmazásával.

– A kemo- és sztereoszelektív funkcionalizálási módszerek kutatásához kapcsolódóan vizsgálták aromás nitrilek szelektív hidrogénezését primer aminokká. Különböző, hordozós nemesfém-katalizátorokkal (pl. Pt/C, Rh/C, Ru/C) végzett kísérletek azt mutatták, hogy a primer aminra vonatkoztatott szelektivitás max. 70% és az újabb katalizátorok aktivitása is sokkal kisebb, mint a palládiumé. A szignifikáns szelektivitásbeli különbség nagy valószínűséggel ezen fémek jelentősen eltérő adszorpciós tulajdonságaival magyarázhatóak.
Kidolgozták a 7-dezoxi-*transz*-dihidronarcislasin, egy jelentős citosztatikus hatással rendelkező fenantridon alkaloid sztereoszelektív totálszintézisét, amely során ciklusos, telített nitrovegyületek hidrogénezését is megvalósították. Az eredményeket nemzetközi folyóiratokban megjelent közleményekben és két konferencián mutatták be.

– A csoport prémiuméves kutatója xiloxán aminoszármazékok tartósan színezését oldotta meg kovalensen kötött heterobifunkciós reaktív azoszínezékekkel.

Az alapkutatásokban megszerzett új ismereteket nemcsak tudományos közleményekben publikálták, hanem ezen felismeréseket kamatoztattak több új, szabadalomképes reszolválási eljárás és fémorganikus gyűrűzárási módszer kidolgozásakor. Ezek méretnövelése az ipari partnereknél megkezdődött. Az új eljárások alkalmazása csökkentheti a gyógyszerszintézisek kapcsán fellépő környezeti terhelést, az előállított gyógyszerek javíthatják a rászoruló betegek

életminőségét, ugyanakkor nagyban hozzájárulnak az ipari partnerek nyereséges működéséhez, a hazai munkahelyek megőrzéséhez.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport minden tagja szoros együttműködésben dolgozik a befogadó tanszék oktatóival és kutatóival, és intenzíven részt vesznek az oktatómunkában. A szerkezet-meghatározásokhoz elengedhetetlen spektroszkópiai hátteret a BME Szervetlen és Analitikai Tanszékével és az MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézetével kialakított együttműködés biztosítja. 2009-ben a Chinoin-nal (Sanofi-Aventis), a Richter Gedeon Rt-vel és az EGIS Rt-vel kötött K+F szerződéses munkákban vettek részt a csoport tagjai. A fémorganikus területen több éve sikeres együttműködést folytatnak a CNR Firenzei intézetével. A kutatócsoport vezető a EU COST D40 akció Management Committee magyar tagja, a liszaboni székhelyű Hovione gyógyszergyár és a BME VBK közötti együttműködés magyar koordinátora.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport tagjai témavezetőként és/vagy kutatóként öt OTKA pályázat teljesítésében vettek részt. Emellett sikeresen oldottak meg négy ipari K+F szerződéshez kapcsolódó feladatot. A tárgyévben is sikeresen folytatódott a CNR-MTA kétoldalú együttműködés kutatási programja.

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

1. Faigl F, Vas-Feldhoffer B, Kubinyi M, Pál K, Tárkányi G, Czugler M: Efficient Synthesis of Optically Active 1-(2-Carboxymethyl-6-ethylphenyl)-1H-pyrrole-2-carboxylic Acid, A New Atropisomeric 1-Arylpyrrole Derivative, TETRAHEDRON-ASYMMETRY 20: 98-103 (2009)
2. Farkas F, Thurner A, Kovács E, Faigl F, Hegedűs L: Hydrogenation of O-protected hydroxyoxetanes over palladium: An efficient method for a one-step ring opening and detritylation reaction, CATALYSIS COMMUNICATIONS 10: 635- (2009)
3. Toth J, Somfai B, Blasko G, Dancso A, Tőke L, Nyerges M: Intramolecular 1,3-Dipolar Cycloaddition of Azomethin Ylides Leading to Pyrido[2,3-b]quinolines, SYNTHETIC COMMUNICATIONS 39: 2258-2270 (2009
4. Jászay Zs, Pham Troung S, Németh G, Bakó P, Petneházy I, Tőke L: Asymmetric synthesis of Substituted □-Amino Phosphonates with Chiral Crown Ethers an Catalysts, SYNLETT, 1429-1432 (2009)
5. Faigl F, Vas-Feldhoffer B, Kudar V, Czugler M, Pál K, Kubinyi M: Synthesis and Optical Resolution of 1-[(3-Carboxy-1,1'-biphenyl)-2-yl]-1H-pyrrole-2-carboxylic Acid, CHIRALITY 21: 905-910 (2009)
6. Bereczki L, Bombicz P, Balint J, Egri G, Schindler J, Pokol G, Fogassy E, Marthi K: Optical Resolution of 1-(1-Naphthyl)ethylamine by its Dicarboxylic Acid Derivatives: Structural Features of the Oxalic Acid Derivative Diastereomeric Salt Pair, CHIRALITY 21: 331-338 (2009)
7. Mayer ZA, Kállay M, Kubinyi M, Keglevich Gy, Ujj V, Fogassy E: Assignment of absolute configurations of chiral phospholene oxides by UV/CD spectroscopy using TD-DFT quantum chemical calculations and singular value decomposition approach for the analysis of the spectra, J. Mol. Struct.-Theochem 906: 94-99 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7		Ebből kutató[2]:		7
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora: 1	levelező tag: 0	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					23
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		16
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1		idegen nyelven:		5
összesített impakt faktor[6]:	28,699		összes hivatkozás száma[7]:		239
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					186
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 1		MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0		külföldön:[11]		0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	1		poszterek száma[12]:		4
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5		Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					6
TDK munkát készítő hallgatók száma:	4		Diplomamunkát(BSc):		6
Diplomamunkát(MSc):	2		PhD-t:		6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					1048
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				19,40	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0		Teljes saját bevétel[18]:	18,20	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				6,70	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				11,5	MFt

BME SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Tóth Bálint, az MTA doktora
1111 Budapest, Egry József u. 1.
Telefon: 463-1101, Fax: 463-1677
e-mail: balint@math.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A beszámolási időszak a kutatócsoport tevékenységének tizenegyedik éve, egyben a harmadik pályázati ciklus harmadik éve. Az új pályázati ciklussal alapvetően új korszak kezdődött a kutatócsoport életében. A kutatócsoportban PhD-vel rendelkező illetve egy PhD védés előtt álló, a tudományos pályán komoly eredményeket elért, nemzetközileg is ismert kutatók dolgoznak a kutatócsoport alkalmazásában, akik eredményeiket rangos nemzetközi fórumokon publikálják és adják elő. Az új tagoknak a csoport keretében végzett munkája ebben az évben is számos publikációt eredményezett.. Ez a beszámoló kizárólag a tagoknak az eredeti pályázati kutatási tervnek megfelelő munkájáról szól.

A kutatócsoport keretében – a pályázatnak megfelelően – négy fő területen folyik alapkutatás: Kölcsönható részecskerendszerek aszimptotikus vizsgálata, Dinamikai rendszerek sztochasztikus viselkedése, Időben fejlődő véletlen gráfok valamint Információelmélet és matematikai statisztika.

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

Időben fejlődő véletlen gráfok:

A kutatás véletlen a gráfok elméletét vizsgálja. Az elmúlt években a nagy komplex hálózatok (mint például az internet vagy a szociális hálózatok) elméletét különösen nagy érdeklődés övezi, ami a matematika ezen ágát is fellendítette. A véletlen gráfok elmélete eredendően interdiszciplináris: a valószínűségszámítás, a kombinatorika és a statisztikus fizika fogalmait egyaránt használja.

2009-ben ebben a témában két cikkünk jelent meg és további két cikk került beküldésre.

A két megjelent cikk témája a mean field (átlagtér) erdőtűz-modell és a mean field fagyott perkolációs modell, melyeknek a definíciója igen hasonló: mindkét esetben a dinamikus Erdős-Rényi véletlen gráfot módosítjuk oly módon, hogy a nagy összefüggő komponenseket elpusztítjuk, ily módon teremtve versengést összeolvadás és porladás közt. Mindkét modell vizsgálatának fő módszere a komponensnagyság-sűrűségek időbeli fejlődésének az ú.n. Smoluchowski-féle összeolvadási differenciálegyenlet-rendszer megfelelő módosításával való közelítése. A mean field erdőtűz-modellel kapcsolatos legfőbb eredmény a modell önszerveződő kritikus viselkedésének bizonyítása. A fagyott perkolációs modellel kapcsolatos legfőbb eredmények az elpusztított komponensek tipikus nagyságának aszimptotikáját jellemzik.

A két beküldött cikk kiindulási alapja a sűrű gráfok Lovász és Szegedy által bevezetett limeszfogalma. A limeszfogalmat sikerült kiterjeszteni multigráfokra, azaz párhuzamos-és

hurokéleket tartalmazó gráfokra. A bizonyítás fő eszköze David Aldous végtelen, felcserélhető táblázatokra vonatkozó reprezentációs tétele. A kutatócsoport vizsgálatának fő tárgya egy időben fejlődő, véletlen multigráf, az ú.n. élátkötős modell: minden lépésben a multigráf egy egyenletesen választott élének egy végpontját átkötjük, az új végpontot a lineáris preferenciális kötődés szabálya szerint választva. A modellt a sűrű gráfok limesz-elméletének segítségével írjuk le oly módon, hogy a limeszobjetunként előálló ú.n. multigrafonok időbeli fejlődésének teljes jellemzését adjuk. A modell legérdekesebb tulajdonsága az, hogy a fokszámok és a párhuzamos élek száma különböző időskálán fejlődik, és emiatt a modellen a statisztikus fizikusok által "aging"-nek, azaz öregedésnek nevezett jelenség figyelhető meg.

Ezek a dinamikus véletlen gráf-modellek tisztán tudományos szempontból azért érdekesek, mert statisztikus fizikai jelenségek precíz vizsgálatához adnak keretet, mindazonáltal valódi nagy komplex hálózatok leírásában is segítséget nyújthatnak.

Információelmélet és matematikai statisztika:

Egy univerzális becslési eljárás került kidolgozásra mely a következő nulláig még hátralévő időt becsli a stacionárius és ergodikus folyamat első n megfigyelése alapján.

Az algoritmus konzisztens becslést ad, de csak körültekintéssel választott pillanatokban, megállítási időkben. Ha a folyamat felújítási folyamat, akkor ezen pillanatok sűrűsége egy, azaz majdnem minden pillanatra ad becslést.

A módszer: Részletesebben, legyen egy stacionárius és ergodikus bináris folyamat. A következő nulláig még hátralévő idő lesz érdekes, miután megfigyelésre került n darab kimenetel. Azaz, az 1 futamok hossza érdekes az n-edik pozíciótól kezdve. A cél ennek a futamnak a feltételes várhatóértékét megbecsülni a folyamatot leíró eloszlás ismerete nélkül. Követelmény az eljárástól, hogy pontonként konvergáljon (ahogy n tart a végtelenhez), ezért nem tehető becslés minden időpillanatban, hanem csak bizonyos megállítási időpillanatokban. Ha a folyamat felújítási folyamat, akkor azon pillanatok sűrűsége, melyen becslésre kerültek egy, de ha nem, akkor sokkal ritkábban lehet becsülni.

Valójában módszerük két algoritmust használ és két megállítási időt, melyek közül az egyik felújítási folyamatokra működik, a másik pedig minden ergodikus folyamatra. Egy teszt segítségével lehet kiválasztani, hogy a használandó algoritmust.

Lehetséges ipari alkalmazásként azonosítható a nulla, mint egy rendszer hibás állapota, az egy pedig, mint a jó állapot. Ebben az esetben módszerrel a rendszer következő hibájáig még hátralévő időt lehet becsülni.

Kölcsönható részecskerendszerek aszimptotikus vizsgálata
A hiperbolikus skálatörvényű mikroszkopikus rendszerek hirdrodinamikai viselkedésének matematikai tárgyalása komoly kihívást jelent, mert a diffúzív feladatokkal ellentétben, itt direkt módszerek nem használhatóak a hidrodinamikai határátmenet igazolására. Korábbiakban több modell esetében sikerült a kompenzált kompaktságnak a parciális differenciálegyenletek elméletéből ismert módszerét mikroszkopikus modellekre kiterjeszteni és alkalmazni. Most a kompenzált kompaktságot a relaxációs mechanizmusból adódó becslésekkel kombinálják, és ezzel sikerült új, hatékony módszert kidolgozni a fizikai szempontból különösen érdekes hiperbolikus rendszerek vizsgálatára, az eredmény leírása megtörtént, közlésére 2010-ben kerül sor.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport tagjai kiterjedt kapcsolatokkal rendelkeznek a következő hazai matematikai műhelyekkel: MTA Matematikai Kutatóintézete, ELTE Matematika Tanszékcsoportjai, MTA SZTAKI. A csoport tagjainak nemzetközi kapcsolatai is számottevőek. Hangsúlyosan kiemelkedőek a franciaországi (Paris, Clermont-Ferrand, Lyon), izraeli (Jeruzsálem) és angol (Oxford) kapcsolatok.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A tárgyévben a kutatócsoport tagjai az alábbi OTKA pályázatokban érintettek: K75143, PD 73609.

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

(A kutatócsoport tagjai aláhúzva.)

1. Ráth B, Tóth B: Erdős-Rényi random graphs + forest fires = Self-Organized Criticality Electronic Journal of Probability 14:1290-1327 (2009)
2. Ráth B: Mean field frozen percolation Journal of Statistical Physics vol. 137, no. 3, pp. 459-499 (2009)
3. Morvai G, Weiss B: Estimating the residual waiting time for binary stationary time series. ITW 2009. IEEE Information Theory Workshop on Networking and Information Theory, Volos, Greece, 10-12 June 2009 pp. 67 - 70 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Sztochasztika Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	5		Ebből kutató[2]:		5
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					3
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					3
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		2
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:		1
összesített impakt faktor[6]:	2,752		összes hivatkozás száma[7]:		0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					7
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	5	poszterek száma[12]:			0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát(BSc):			0
Diplomamunkát(MSc):	0	PhD-t:			1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					49
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				14,6	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:		1,40	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				1,40	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				0	MFt

BME VÍZGAZDÁLKODÁSI KUTATÓCSOPORT

Somlyódy László, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.
Telefon: 463 1530, Fax: (1) 463 3751
e-mail: somlyody@vkkt.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A fenntartható vízgazdálkodás területén a kutatócsoport 2009-ben a következő témakörökkel foglalkozott: (a) az EU Víz Keretirányelv hazai megvalósításával kapcsolatos feladatok; (b) a hazai vízgazdálkodás stratégiai fontosságú feladatai, (c) 2050-ig szóló vízmennyiségi-vízminőségi forgatókönyvek elemzése; (d) árvízi és belvízi kockázatok elemzése; (e) a települési vízgazdálkodás K+F+I kérdései; (f) a nem-pontszerű tápanyagterhelés vízgyűjtő léptéken történő meghatározása; (g) felszíni vizek eutrofizálódásának vizsgálata magyarországi vízfolyásokon és a Balaton Keszthelyi-medencéjében.

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

A kutatócsoport szorosan együttműködik a BME Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszékével, amelynek keretében működik. A munkák a fentebb említett témakörökben ezen együttműködés keretében közösen folytak.

A vízgazdálkodás kiemelkedő 2009. évi feladata volt az ország *vízgyűjtő-gazdálkodási tervének (VGT)* elkészítése, az EU vízpolitikájának megfelelően. A vízzel kapcsolatos tevékenységekre nézve meghatározó jelentőségű terv EU támogatású projekt (KEOP 2.5.0) keretében készült. A tanszék feladata: szakmai irányítás, a vizek állapotértékelése, a jó állapot elérése/fenntartása érdekében szükséges intézkedések meghatározása/ütemezése, részvétel a gazdasági elemzésekben és a társadalmi egyeztetéseken. (2009. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 35,4 millió Ft. Résztvevők: a kutatócsoport vezetője, 2 tagja és 1 támogató tag).

A víz az ország jövője szempontjából stratégiai jelentőséggel bír. A VGT önmagában azonban nem ad megoldást a vízgazdálkodás összes problémájára. Szükség van ezért az egyéb szektorokkal együtt megvalósuló integrált *stratégiai elemzésekre* is, ahogyan azt az MTA elnöksége kezdeményezte. Egységes módszertant követve 6 témakörben készültek alapozó tanulmányok, amelyek az átfogó javaslatokkal 2010-ben kötetben fognak megjelenni. Különös hangsúlyt kapott az éghajlatváltozás, a területfejlesztés, a vízminőség és a szélsőségek. (Saját finanszírozás. A témát a kutatócsoport vezetője koordinálja, az egyes témakörök kidolgozásában a munkacsoport egy tagja és három támogató tagja vesz részt.)

A területfejlesztéshez szorosan kapcsolódó problémakör *az árvízzel, a belvízzel és aszállyal kapcsolatos kockázatok és károk kezelése*. Ezt irányelvekben szabályozza az EU. Az utóbbi évek szélsőséges időjárása és az okozott károk felhívták a figyelmet arra, hogy a hagyományos védekezési módszerek nem nyújtanak elegendő biztonságot és drágák: a három kockázati elem átlagosan évente mintegy 40 milliárd Ft költséget/kárt okoz. Új megközelítésre van szükség, amely a vízvisszatartás különböző formáin alapul: talajban, lokális mélyedésekben, holtágakban, a régi ártér mélyfekvésű területein, tározókban. Ennek tudományos megalapozását szolgálja a WateRisk projekt (NKTH, TECH-08-02). 2009-ben kijelölték az elemzés mintaterületeit, elkészültek az adatbázisok, valamint a hosszú és rövid távú tervezést támogató matematikai eszközök. (2009. évi költségvetés alvállalkozók nélkül

36,4 Millió Ft. A projekt irányítója a kutatócsoport támogató tagja, résztvevő a kutatócsoport 1 tagja).
Az EU 6. keretprogramja által finanszírozott *SCENES projekt* célja Európa vízkészleteire vonatkozó vízminőségi-vízmennyiségi forgatókönyvek elemzése. A kutatócsoport feladata a Felső-Tisza vízgyűjtőjére a korábban kidolgozott forgatókönyvekhez tartozó, várható vízkészlet-változások értékelését szolgáló adatbázis és korszerű modellezési módszer kialakítása. Az ún. GEO-4 forgatókönyveket a jövőkép kialakításában domináns szerepet játszó tényező – a vízpolitika, a piac, a fenntarthatóság vagy a biztonság – határozza meg. (2009. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 11,5 millió Ft. A projekt irányítója a kutatócsoport támogató tagja, a kidolgozásban a kutatócsoport 1 tagja vett részt).
A Balaton Keszthelyi-medencéjében felállított automatikus *fitoplankton mérőállomás* 2007 óta a világ egészére kiterjedő limnológiai mérőhálózat (GLEON) elemeként működik. A továbbfejlesztés célja 2009-ben az elsődleges fitoplankton termelés nagy gyakoriságú mérésének megoldása volt. A távlati cél annak tisztázása, hogy hogyan befolyásolják a környezeti viszonyok az elsődleges termelést, milyen változások várhatók a globális klímaváltozás hatására. A mérési eredményeket a honlapon a nagyközönség is folyamatosan nyomon követheti a www.vkkt.bme.hu/balaton címen. (Finanszírozás saját és tanszéki forrásokból, 2 millió Ft értékben. A kutatócsoport 2 tagja foglalkozott ezzel a kutatással).
Az OTKA keretében végzett, a Tiszára és a Zala vízgyűjtőjére kiterjedő *fitoplankton kutatás* alapján az a következtetés vonható le, hogy a fitoplankton bioamasszáját elsősorban a tartózkodási idő (TI) határozza meg. A folyó méretével növekszik a tápanyagok jelentősége, de csak a Duna Dunaföldvár alatti szakaszán válik a foszfor korlátozó tápanyaggá. A tápanyag csökkentés hatása egyre kisebb a folyók hosszának csökkenésével, és 100 km alatt gyakorlatilag eltűnik. A kisebb vízfolyásokon épült tározók visszatartják a tápanyagot, viszont – a TI növekedése miatt – jelentősen növelik az alga mennyiségét. Gyakorlati következmény, hogy a tápanyag-kibocsátás csökkentése önmagában nem hatékony beavatkozás a vízfolyások trofitásának javítására. A vízhálózatot integráltan kell vizsgálni, és azokon a „forró pontokon" kell beavatkozni, ahol a teljes rendszer trofitása a tápanyagokon keresztül érdemben befolyásolható. Az elemzésekről részletek találhatók a kiemelt témákat bemutató kötetben. (A projekt 2009. évi költségvetése 3,1 millió Ft. A kutatásokat a kutatócsoport két tagja végezte).
Az eutrofizálódás mérséklése érdekében szükséges VGT-intézkedések között kiemelt fontosságú a mezőgazdasági eredetű *diffúz foszfor terhelések csökkentése*. Alapvető annak ismerete, hogy hol találhatók az erózió szempontjából legérzékenyebb területek, az összegyülekezés során milyen mértékű a visszatartás, és melyek az érzékenynek minősülő tározók vízgyűjtőterületei. A 2008-ban fejlesztett PhosFate modell alkalmazásával 517 darab dombvidéki vízfolyásra elvégzett vizsgálat a forrásterületek erózióvédelmének és a partmenti puffer zónák kialakításának együttes alkalmazását mutatta ki hatékony beavatkozásként. Az erózióvédelemnek első lépésben a kritikus 1 mm/év értéknél nagyobb mértékű talajveszteségű területekre (országosan kb. 440 eha) kell koncentrálnia, ezen belül is a tározókkal rendelkező vízfolyások térségeire, amelyet kiegészít a partmenti pufferzónák rendszere.
Nemzeti Víztechnológiai Platform (NKTH – NTP/08) célja a fenntartható települési vízgazdálkodás K+F+I stratégiájának megalapozása. 2009-ben a Platform tematikus munkacsoportjainak háttértanulmányai, kérdőíves felmérés, mélyinterjúk, SWOT és forgatókönyv elemzések felhasználásával 25 éves távlatra Stratégiai Kutatási Terv készült, nevesítve azokat a problématerületeket, amelyekben hazai fejlesztések szükségesek (elsősorban a rekonstrukció és az energiatakarékos technológiai megoldások területén). (2009. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 10,6 millió Ft. Résztvevők: a kutatócsoport vezetője és két támogató tagja).

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A nemzetközi együttműködésben megvalósuló SCENES projekt kidolgozásában 2009-ben a munkacsoport 1 tagja és 1 támogató tagja vett részt.
A kutatócsoport vezetője elnöke a Magyar Szennyvíztechnikai Szövetségnek, tagja a következő testületeknek: Scientific Committee of the Stockholm World Water Conference, External Advisory Panel of Public Utility Board of Singapore, UN World Water Assessment Technical Advisory Committee, Kutatási és Tudománypolitikai Tanács, Editrorial Board of Ecohydrology and Hydrobiology. Egy-egy kutató tagja a következő szervezeteknek: IPCC vízzel foglalkozó munkacsoportja, EU COST Action 869 2. számú munkacsoportja, Global Lake Ecological Observatory Network (GLEON) nemzetközi mérőhálózat (ez utóbbinak a kutatócsoport intézményi tagja is).
Oktatási és kutatási kapcsolatok 14 külföldi egyetemmel (Bécs, Graz, Karsruhe, München, Zürich, Varsó, Prága, Lyngby, Trondheim, Cornell, Brüsszel, Gent, Massachusetts, Florida, Ankara), valamint a IIASA-val és a Kínai Tudományos Akadémia Wuhani Hidrobiológiai Intézetével létesültek. A hazai kapcsolatok túlnyomóan a projektek végrehajtásához kötődnek. Szoros együttműködés alakult ki az MTA kutatóhelyeivel (Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézet, Földrajztudományi Kutatóintézet, Balatoni Limnológiai Kutatóintézet, Duna Kutató Állomás), a Budapesti Corvinus Egyetemmel, a Debreceni Egyetemmel, a Szegedi Tudományegyetemmel, a Szent István Egyetemmel és a Veszprémi Egyetemmel, a VITUKI-val, a Környezetvédelmi és Vízügyi Igazgatóságokkal, Nemzeti Park Igazgatóságokkal.
*Kínai-magyar TÉT projekt (*CN-4/07) keretében két kínai vendégkutató látogatott Magyarországra a Kínai Tudományos Akadémia Wuhani Hidrobiológiai Intézetéből; négy magyar kutató pedig 2 hetet töltött Kínában. A projekt vezetője magyar részről a kutatócsoport tagja.
Előadások: a különböző szakmai fórumokon 2009-ben a kutatócsoport vezetője, tagjai és a támogató tagok 14 tudományos (ebből 8 külföldön) és 6 ismeretterjesztő előadást tartottak.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2008-ban a kutatócsoport a Tanszék által elnyert 1 FP6-os, 1 EU-támogatású hazai (KEOP), 2 NKFP, 1 OTKA projekt kidolgozásában vett részt. A pályázatok összes 2009-re jutó költségkerete összesen 146,9 millió Ft, alvállalkozók nélkül 97,0 millió Ft volt. Részletek a II. fejezetben és pályázatok adatbázisában találhatók.

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

1. Istvánovics V. (2009) Eutrophication of Lakes and Reservoirs. In: Gene E. Likens, (Editor) Encyclopedia of Inland Waters. Volume 1, pp. 157-165 Oxford: Elsevier.
2. Kovács, Á., Zs. Kozma, V. Istvánovics and M. Honti (2009) Phosphorus retention patterns along the Tisza River, Hungary. Water Science and Technology 59, 391-397.
3. Balogh, E.: Szakirodalmi áttekintés a hazai belvizekről. Hidrológiai Közlöny, 2009/4., MHT, Budapest. pp53-55
4. Koncsos, L. – Balogh, E.: Dynamic modelling of flow control aiding sustainable land management in Bodrogköz. Thaiszia – Journal of Botany, Supplement, Kassa, Szlovákia. pp 527-542

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	4			Ebből kutató[2]:			2
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	1	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							8
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							6
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			1
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	2			idegen nyelven:			1
összesített impakt faktor[6]:	1,24			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							47
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0		könyvfejezet:	1		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0		könyvfejezet:	1		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	8			poszterek száma[12]:			0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0			Diplomamunkát(BSc):			1
Diplomamunkát(MSc):	4			PhD-t:			2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							85
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						26,40	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		146,4	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						3,10	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						66,8	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						65	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						11,5	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

DE HOMOGÉN KATALÍZIS KUTATÓCSOPORT

Joó Ferenc, az MTA rendes tagja
4010 Debrecen, Pf. 7
Telefon: 52-512900, Fax: 52-512915
e-mail: fjoo@delfin.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

- Úligandumok és katalizátorok szintézise és jellemzése
- Szén-dioxid hidrogénezése; hidrogén-karbonát katalízis
- Rögzített komplex katalizátorok vizsgálata.
- Biológiai membránok módosítása katalitikus hidrogénezéssel fluoreszkáló katalizátorokkal.

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

Új vízoldható N-heterociklusos karbének (NHC) prekurzorait állították elő a) a szubsztituált 1,3-imidazol váz felépítésével; b) az 1,3-imidazol megfelelő N-szubsztituciójával; c) a katalízisben jelentős szerepet játszó ismert imidazólium sók (Imes, Simes) szulfonálásával. Utóbbiak Au(I) komplexeinek alkalmazásával alkinek katalitikus hidratálását valósították meg.

Nemzetközi együttműködésben számos vegyes ligandumú Ru(II)-acetonitril-foszfin tipusú komplexet állítottak elő, közülük többnek a szerkezetét egykristály röntgendiffrakciós módszerrel is meghatározták. Megállapították, hogy a $[RuCl(NCMe)_4(P\textit{i}Pr_3)]BF_4$ komplex vizes oldatban könnyen akválódik és a képződő $[Ru(H_2O)(NCMe)_4(P\textit{i}Pr_3)](BF_4)Cl$ akva liganduma lúgos közegben deprotonálódik majd a megfelelő amidát kompleszé izomerizálódik. Ennek megfelelően a $[Ru(H_2O)(NCMe)_4(P\textit{i}Pr_3)](BF_4)Cl$ komplex jó aktivitással katalizálja az acetonitril hidratálását acetamiddá.

Nemzetközi együttműködésben különféle allil-alkoholok redox izomerizációját vizsgálták homogén vizes oldatokban ill. vizes-szerves kétfázisú rendszerekben Ru-komplex katalizátorok alkalmazásával. (Az allil-alkoholok redox izomerizációja a karbonilvegyületek előállításának 100% atomhatékonyságú, környezetbarát módja.) Részletesen megvizsgálták az új, vízoldható $[RuClCp(mPTA)_2](CF_3SO_3)_2$ és [RuClCp(HdmPTA)] (mPTA=N-metil-1,3,5-triaza-7-foszfa-adamantán kation, HdmPTA=monoprotonált N,N'-dimetil-1,3,5-triaza-7-foszfa-adamantán kation) komplexek katalitikus felhasználását vizes rendszerekben. Az allil-alkoholok redox izomerizációját az 1-okten-3-ol mellett számos más szubsztrátumra is kiterjesztették. Megállapították, hogy a katalízis körülményei között a $[RuClCp(mPTA)_2](CF_3SO_3)_2$ komplex akválódik és a megfelelő akvakomplexet szilárd állapotban is izolálták. A $[Ru(OH_2-\square O)(Cp)(mPTA)_2](OSO_2CF_3)_3.(H_2O)(C_4H_{10}O)_{0.5}$ lényegesen nagyobb aktivitással katalizálta 1-okten-3-ol redox izomerizációját, mint a klorokomplex. Felismerték, hogy ezek a félszendvics-Ru(II) komplexek vizes oldatban kölcsönhatásba lépnek az alaklmazott foszfát puffer komponenseivel, ami a pH-tól függően erősen inhibiálja a redox izomerizáció folyamatát. Ez a felismerés igen lényeges, mivel a

vizes közegű fémorganikus katalízisben leggyakrabban éppen foszfát puffert használnak az állandó pH biztosítására.

Ugyancsak az Almeríai Egyetem kutatóival együttműködésben megvizsgálták az már korábban előállított, oldat- és szilárd fázisban egyaránt jól jellemzett $[RuCl_2(dmso)_2(pta)_2]$ (pta = 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán) komplex fotokémiai aktivitását. Sikerült előállítaniuk egy új, kétmagvú Ru(II) komplexet, mely $[RuCl_2(dmso)_4]$ és 3 ekvivalens pta vizes oldatában megvilágítás hatására képződik. A $[Ru_2Cl_3(pta)_6]Cl$ összetételű komplexet oldatfázisban multinukleáris NMR-spektroszkópia (^{1}H-, ^{31}P-, ^{13}C-NMR ill. 2D NMR) segítségével jellemezték, és egykristályként történt elkülönítését követően molekulaszerkezetét röntgenkrisztallográfiával is meghatározták. A komplex katalitikus tulajdonságait tekintve megállapították, hogy a korábban ismert Ru(II) pta vegyületeknél sokkal aktívabb katalizátora az alfa,béta-telítetlen karbonilvegyületek modelljeként szolgáló fahéjaldehid hidrogénezésének. Az új $[Ru_2Cl_3(pta)_6]Cl$ katalizátorral a fenilacetilén sztirollá való hidrogénezése csak kis mértékben játszódik le, viszont a komplex katalizálja az acetilén kapcsolási reakcióit több érdekes vegyületet eredményezve.

Folytatták a biológiai membránok modelljéül szolgáló foszfolipid liposzómák hidrogénezését és deuterálását Ir- és Pd-alapú oldható katalizátorokkal elsősorban ^{1}H- és ^{2}D-NMR-spektroszkópiát alkalmazva a folyamatok követésére. A biomembránok katalitikus hidrogénezése hozzájárulhat az un. membrán lipid-terápia kifejlesztéséhez. Megkezdték annak tanulmányozását, hogy milyen kapcsolat van a szélsőséges agroökológiai körülmények között tenyésztett haszonnövények növekedési képessége (általában stressztürése) és biomembránjaik összetétele között. Etilén-diamin és ciklohexán-diamin danzilezésével új fluoreszkáló ligandumokat állítottak elő. Vizsgálták e ligandumok és $[\{RuCl_2(p\text{-cimol})\}_2]$ reakcióját és megállapították, hogy a kialakuló félszendvics-komplexek katalitikus aktivitást mutatnak acetofenon és fenilacetilén hidrogénezésében.

A szén-dioxid hidrogénezésével nyert hangyasav a hidrogén tárolásának megfelelő anyaga lehet, s ezzel hozzájárulhat az un. hidrogén-alapú gazdaság megvalósításához. Ugyanakkor a bontás során képződő szén-dioxid közvetlenül nem hidrogénezhető vissza hangyasavvá, csak aminok jelenlétében, vagy karbonát ill. hidrogénkarbonát sók formájában. A formiát-sók közvetlen katalitikus bontása azonban alig ismert. A Kutatócsoportban megállapították, hogy egyes vízoldható Ru(II)-foszfinkomplexek jó aktivitást mutatnak vizes oldatban a HCO_2^- katalitikus bontásában hidrogénre és hidrogénkarbonátra. Távlatilag ezek az eredmények gyakorlati alkalmazást nyerhetnek.

Az ismertetett kutatásokban a kutatócsoport három kutatója, egy fiatal kutató továbbá a kutatócsoport-vezető és a DE Fizikai Kémiai Tanszéknek a csoporthoz társult három (a kutatócsoporti pályázatban is nevesített) munkatársa vett részt. A teljes ráfordítás a kutatócsoport költségvetésében (zömmel bérekre) biztosított 15 MFt-ot is beleértve mintegy 22 MFt.

Az eredmények alapján két PhD értekezés készült el, melyek megvédésére 2009. év folyamán sor került.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A biológiai membránok vizsgálatát az MTA SZBK Biokémiai Intézete munkatársaival, a rögzített fémkomplexek katalitikus tulajdonságainak kutatását részben a Thales

Nanotechnology Rt. részben pedig a Szegedi Tudományegyetem munkatársaival együttműködésben végezték.
MTA-CSIC támogatással a Zaragozai Egyetem (Spanyolország) munkatársaival végeztek közös kutatásokat. Az Almeríai Egyetem (Spanyolország) kutatóval folytatott együttműködéshez tartozó kutatócseréket az OTKA IN 78040 kiegészítő pályázat tette lehetővé.
Korábbi nemzetközi kapcsolatainkra építve (és új partnerekkel kiegészülve) pályázatot nyújtottunk be az EU FP 7 Marie Curie Akciók FP7-PEOPLE-ITN-2009 felhívásra vaskomplexek felhasználása a homogén katalízisben témakörben (FeCat, konzorciumvezető: Bristoli Egyetem); a pályázat elbírálása folyamatban van.
- A Kutatócsoport munkatársai 2009-ben is részt vettek a Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék oktatómunkájában, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével (átlagosan 4 óra/fő/hét).

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatások dologi kiadásait döntő részben a K 68482 ny.sz. NKTH-OTKA pályázat fedezte. Rövid idejű kutatócserék finanszírozásával jelentősen segítette a nemzetközi együttműködéseket az MTA-CSIC (Debrecen – Zaragoza) támogatás és az OTKA IN 78040 pályázati támogatás.
A 2009. év kiemelkedő pályázati eseménye, hogy a Kutatócsoport részt vett egy sikeres NFÜ TÁMOP pályázatban (TÁMOP-4.2.2-08/1-2008-0012; CHEMIKUT; Kémiai és biotechnológiai alapkutatások vízzáró rétegek és talajvizek halogénezett szénhidrogén szennyezőinek eltávolítására), melynek tudományos vezetője a Kutatócsoport vezetője. A teljes támogatási összeg 330 MFt 24 hónapra, ebből a DE Fizikai Kémiai Tanszék és benne a Kutatócsoport 64 MFt-ot használhat fel. A megoldandó feladat halogénezett szénhidrogének lebontása katalitikus hidrogénezéssel.

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

1. M. Martín, H. Horváth, E. Sola, Á. Kathó, F. Joó: Water-Soluble Triisopropylphosphine Complexes of Ruthenium(II): Synthesis, Equilibria, and Acetonitrile Hydration. Organometallics, 28, 561-566 (2009)
2. Joó F: Új utak a homogén katalízisben, Magyar Kémiai Folyóirat, 115, 49-53 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-DE Homogén Katalízis Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	3			Ebből kutató[2]:			3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							2
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							2
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			1
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	3,8150			összes hivatkozás száma[7]:			161
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							155
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0	jegyzet:	0		
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0	jegyzet:	0		
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	2	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	4	poszterek száma[12]:					10
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							3
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát(BSc):					7
Diplomamunkát(MSc):	1	PhD-t:					3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							360
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						14,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:				19	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						6,20	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						12,80	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

DE SZÁMELMÉLETI KUTATÓCSOPORT

Győry Kálmán, az MTA rendes tagja
4010 Debecen, Pf. 12.
Telefon: (52) 512-900/22751 Fax: (52) 536-914
e-mail: gyory@math.klte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Debreceni Egyetemen egy nagyobb létszámú számelméleti kutatócsoport működik, melynek tagjai közül hat fő volt TKI állományú, részmunkaidőben foglalkoztatott kutató. Az alábbi beszámoló csupán az akadémiai támogatásban részesült kutatók, és a Debreceni Egyetem alkalmazásában álló kutatócsoport-vezetőnek és társ-pályázónak a tevékenységére vonatkozik.

A kutatócsoport kutatási témája: „Diofantikus számelmélet és alkalmazásai". Kutatásaikat elsősorban a következő területek vizsgálatára koncentrálták: ismeretlen fokszámú binom Thue-egyenletek megoldására szolgáló hatékony algoritmusok kidolgozása, alkalmazások szuperelliptikus egyenletekre, általánosított Fermat-típusú egyenletek és alkalmazásaik számtani sorozatokban található teljes hatványokra, az algebrai számok teste feletti tórusz részsokaságaira vonatkozó Lang-Bogomolov sejtés fontos speciális esetekben való effektív bizonyítása, S-egységegyenletekre és elliptikus egyenletekre vonatkozó korábbi effektív eredmények, módszerek és algoritmusok jelentős mértékű általánosítása, élesítése illetve finomítása, S-egységek lineáris kombinációinak vizsgálata, valós együtthatós kontraktív polinomokhoz hozzárendelt diszkrét dinamikus rendszerek kezdőértékeinek vizsgálata, a számelmélet kriptográfiai alkalmazásai.

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

A kutatócsoport tagjai szinte valamennyi vizsgált területen fontos új eredményeket értek el. Kiemelkedőbb eredményeik a következők:

Meghatározták binom Thue-egyenletek, valamint ternér egyenletek egy-egy széles osztályának összes megoldását abban az általános esetben, amikor a kitevők is ismeretlenek, az együtthatók pedig ismeretlen S-egységek. A ternér esetben 11-nél nagyobb prím kitevőkre speciális esetként kapták Wiles híres tételét a Fermat-féle egyenletre vonatkozóan. Alkalmazásként áttörést értek el egy régi probléma vizsgálatában. Megmutatták, hogy $3<k<35$ esetén k-tagú számtani sorozat elemeinek a szorzata nem lehet teljes hatvány. Elsőként sikerült effektív bizonyítást adniuk az algebrai számok teste feletti tóruszokra vonatkozó Lang-Bogomolov sejtésre a tórusz bizonyos fontos részsokaságai esetén, ami jelentős alkalmazások előtt nyitott utat. Lényegesen hatékonyabbá tették az LLL-algoritmus S-egység egyenletekre és elliptikus egyenletekre vonatkozó alkalmazását. Megoldották Recaman egy több mint 30 éves számelméleti problémáját. A kutatócsoport elméleti kutatásainak közvetlen gazdasági-társadalmi hasznosíthatóságát is alátámasztva, index formák kriptográfiai alkalmazásának lehetőségét vizsgálták. Javaslatot tettek egy index formákra alapozott hash függvény használatára, melyről belátták, hogy ütközésmentes. Az általuk bevezetett hash függvény lavina hatását számítógépes kísérletekkel vizsgálták.

A társ-pályázó akadémiai levelező tagságra való jelölését a Matematikai Tudományok Osztálya magas szavazati aránnyal támogatta. A kutatócsoport két tagja benyújtotta az akadémiai doktori értekezését, egy-egy tagja pedig habilitált illetve PhD fokozatot szerzett.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport kutatóhelyi támogatásban részesült tagjai szoros együttműködésben dolgoznak egymással, valamint más debreceni és budapesti számelméletes kollégákkal. Széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Közös kutatásokat folytattak holland, osztrák, német, angol, lengyel, francia, indiai, japán, és mexikói matematikusokkal. A nemzetközi együttműködésből *hat* közlemény született az V. részben felsorolt *tizennégy* publikáció közül.

A csoport tagjai (részben TéT pályázatok keretében) rövidebb-hosszabb tanulmányúton vettek részt és előadásokat tartottak a Grazi és Berlini Műszaki Egyetemen, a Leideni Egyetemen, a Valparaiso Egyetemen (USA), a Tokyoi, Kyotoi, Niigatai és a Kinki Egyetemen, valamint a mexikói Morelia Egyetemen.

Közös kutatások végzése céljából egy-egy hétre Debrecenbe látogattak külföldi kollégák, valamint osztrák ösztöndíjjal egy éves időtartamra egy kolléga.

Az év során a csoport tagjai számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon Bonnban, Kyotoban, Saint-Etienne-ben, Norwichban (Anglia), Trebicben, Hradec nad Moravicíben (Csehország) és Debrecenben.

A kutatócsoport tagjai tevékenyen részt vesznek a Debreceni Egyetemen folyó oktató és egyéb munkákban.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport tagjai témavezetőként illetve közreműködőként a következő hazai és nemzetközi pályázatokban vettek részt:

OTKA T67580 OTKA F68872 (témavezető: Rakaczki Csaba), OTKA K75566

Magyar-horvát TéT (témavezető: Pethő Attila), Magyar-mexikói TéT (témavezető: Pintér Ákos), Magyar-japán TéT

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

1. Ádám ZS, Hajdu L, Luca F: Representing integers as linear combinations of S-units, Acta Arithmetica 138: 101-107 (2009)
2. Bérczes A, Evertse JH, Győry K: Effective results for linear equations in two unknowns from a multiplicative division group, Acta Arithmetica 136: 331-349 (2009)

3. Bérczes A, Evertse JH, Győry K, Pontreau C: Effective results for points on certain subvarieties of tori, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 147: 69-94 (2009)
4. Bérczes A, Járási I: On the application of index forms in cryptography, Periodica Mathematica Hungarica 58: 35-45 (2009)
5. Győry K, Hajdu L, Pintér Á: Perfect powers from products of consecutive terms in arithmetic progression, Compositio Mathematica 145: 845-864 (2009)
6. Hajdu L: Optimal systems of fundamental S-units for LLL-reduction, Periodica Mathematica Hungarica 59: 79-105 (2009)
7. Hajdu L: Számtani sorozatok multiplikatív tulajdonságú halmazokban, MTA doktori értekezés, 2009
8. Hajdu L, Kovács T: Parallel LLL-reduction for bounding the integral solutions of elliptic equations, Mathematics Of Computation 78: 1201-1210 (2009)
9. Hajdu L, Schinzel A, Skalba M: Multiplicative properties of sets of positive integers, Archiv Der Mathematik 93: 269-276 (2009)
10. Hajdu L, Tengely Sz: Arithmetic progressions of squares, cubes and n-th powers, Functiones Et Approximatio Commentarii Mathematici 41: 129-138 (2009)
11. Hajdu L, Tengely Sz, Tijdeman R: Cubes in products of terms in arithmetic progression, Publicationes Mathematicae-Debrecen 74: 215-232 (2009)
12. Liptai K, Luca F, Pintér Á, Szalay L: Generalized balancing numbers, Indagationes Mathematicae-New Series 20: 87-100 (2009)
13. Pethő A: On the boundary of the closure of the set of contractive polynomials, INTEGERS 9: 311-325 (2009)
14. Pintér Á: On a class of diophantine equations related to the numbers of cells in hyperplane arrangements, Journal of Number Theory 129: 1664-1668 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-DE Számelméleti Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	6		Ebből kutató[2]:		6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					14
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					14
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		9
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:		4
összesített impakt faktor[6]:	5,249		összes hivatkozás száma[7]:		109
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					100
Magyarul könyv[8]/atlasz:	1	könyvfejezet: 0		jegyzet:	1
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	42	poszterek száma[12]:			0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			9
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát(BSc):			22
Diplomamunkát(MSc):	5	PhD-t:			6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					1530
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				13,70	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:		7,40	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				7,40	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				0	MFt

DE SZÉNHIDRÁTKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Antus Sándor, az MTA levelező tagja
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Telefon: (52) 512-900/22471; Fax: (52) 453-436
e-mail: antuss@tigris.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Debreceni Egyetem-MTA Szénhidrátkémiai Kutatócsoport főleg alapkutatásokkal foglalkozik, amelynek során kémiai és jelentős hányaddal biokémiai, gyógyszerkémiai és immunológiai törvényszerűségek felismerésére is törekszik. Természetesen figyelemmel kíséri a természetes szerves vegyületek szintézismódszereit és szerkezetük vizsgálatát. A kutatócsoport egyik fontos kutatási területe a biológiai szabályozási és felismerési folyamatokban fontos szerepet játszó, negatív töltésű szénhidrátok szulfonsav mimetikumainak előállítása. A kutatócsoport másik célkitűzése a biológiailag aktív természetes anyagok, főleg az O-heterociklusok izolálása, szerkezet-felderítése és szintézise, ez utóbbi munka során gyógyszerek fejlesztését elősegítő hatás-szerkezet összefüggések felismerése.

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

A munkatervükben megadottak szerint a tárgyévben is folytatták a biológiailag aktív szénhidrátok és természetes eredetű O-heterociklusos vegyületek kémiája területén végzett kutatásaikat. A munkát széles körű hazai és nemzetközi együttműködés keretében végezték. Legfontosabb eredményeik az alábbiak:

- Újabb királis, optikailag aktív O-heterociklusos származék előállítására került sor. Pterokarpán származékok szintézisét valósították meg deuterált 2H-kroménekből és a gyűrűzárás mechanizmusára tettek javaslatot.
- Nemzetközi együttműködés (Department of Organic Chemistry, University Paderborn/Germany) keretében folytatták antifungális és antibaktericid hatású O-heterociklusok izolálását, szerkezetfelderítését és szintézisét. E kutatások alaptudományi jelentőségükön túlmenően a hatás-szerkezet összefüggések megállapítása kapcsán új farmakoforok tervezését is lehetővé teszik.
- Glikogén foszforiláz enzim gátlására alkalmas új típusú 1,4-benzodioxán vázas inhibitorok szintézisét és szerkezetvizsgálatát valósították meg, amelyek alkalmasak lehetnek a kettes típusú diabetes kezelésére.
- Előállítottak különböző potenciális dopaminerg sajátságú apomorfin származékot. Hatékony szintézisutat dolgoztak ki oripavidin előállítására, amelyet felhasználtak 2-szubsztituált apomorfinok szintézisére. Megvalósították 2,3-tiazolo- és izotiazolo apomorfinok, valamint 6,7-tiazolo-endomorfinánok szintézisét és szerkezetfelderítését.
- Előállították a véralvadásgátló tulajdonságú heparin-pentaszacharid szulfonsav analogonjainak diszacharid fragmenseit. Enzimgátlási vizsgálatok szerint a szintetikus szulfonsavmimetikumok a természetes származékokkal azonos mértékben gátolták az 1. típusú foszfatázt.

– Megvalósították a *Dictyostelium discoideum* amőba citoplazmájából izolált pentaszacharid három feltételezett regioizomerjének szerkezetbizonyító szintézisét. A sejtfelszíni glikoproteinek és glikolipidek szénhidrát részének bioszintézise máig sem teljesen tisztázott folyamat, ennek pontosabb megértésében segíthet az amőba-eredetű pentaszacharid szerkezetének felderítése.

– Előállítottak különböző fenil- és etil-2-O-szulfonil-1-tio-α-D-manno és β-D-glükopiranozidokat és vizsgálták viselkedésüket különböző tio-nukleofilekkel (NaSPh v. NaSMe) szemben.

– Elágazó láncú arabinogalaktán tetra- és hexaszacharid szintézisét valósították meg. A vegyületek β-(1→6) kötésű galaktopiranozil láncból épülnek fel, s minden második galaktóz egység hordoz egy arabinofuranóz egységet. A szintetizált vegyületeket ELISA-teszteben használják *Echinacea purpurea* sejtkultúrából izolált arabinogalaktánok szerkezet-meghatározására.

– Előállították szénhidrátok dioxán- és dioxolán-típusú (9'-antracenil)-metilén acetál származékait és tanulmányozták védőcsoportként való alkalmazhatóságukat. A (9'-antracenil)-metilén származékok hidrogenolitikus reakcióit DFT (Density Functional Theory) módszer és magas hőmérsékletű molekuladinamikai-szimuláció segítségével értelmezték.

– Kvantumkémiai és FMO módszerekkel tanulmányozták antibiotikum származékok Diels-Alder reakcióinak regioszelektivitását, valamint molekuladinamikai és szemiempirikus vizsgálatok segítségével meghatározták egy jelentős antivirális aktivitással rendelkező gyógyszerjelölt molekulatérfogatát.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport eredményesen együttműködött az alábbi intézetekkel: Department of Chemistry, University of Paderborn; Institut für Mikrobiologie, TU Braunschweig; Dipartimento di Chimica Industriale, Universita di Pisa; DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék; DE OEC Gyógyszerészi Kémia Tanszék; MTA-DE Thrombosis és Haemostasis Kutatócsoport; DE Fizikai Kémiai Tanszék Röntgendiffrakciós Laboratóriuma; Institute of Organic Chemistry, University of Hannover; Department of Pharmaceutical Biology, University of Kiel; Department of Oral Biology, University of Medicine and Dentistry of New Jersey.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport az elmúlt évben jelentős támogatást kapott az OTKA-tól.
T 049436: 4.455 eFt, melyből készletbeszerzés 3.290 eFt; NI 61336: 22.100 eFt, melyből készletbeszerzés 1.441 eFt; K 62802: 4.000 eFt, melyből készletbeszerzés 1.540 eFt; NK 48798: 8.000 eFt, melyből készletbeszerzés 3.100 eFt; PD 73064: 3.284 eFt, melyből készletbeszerzés 1.600 eFt.

Jelentős eredmények születtek a véralvadásgátló szénhidrátszármazékok szulfonsav mimetikumainak kutatása területén. Előállították a heparin pentaszacharid szulfonsavtartalmú diszacharid fragmentumait. Megvizsgálták szénhidrátok dioxán- és dioxolán-típusú (9-antracenil)metilén acetáljainak részleges és teljes redukcióját és védőcsoportként való

hasznosíthatóságukat. Számos antibakteriális hatású természetes anyag izolálását és szerkezetfelderítését végezték el. Új szintézismódszert dolgoztak ki *Candida albicans* ellen hatásos O- és C-prenilezett flavanonok szintézisére, és különböző *Candida* törzseken végzett vizsgálatokkal fontos hatás-szerkezet összefüggéseket állapítottak meg. Megvalósították a *Montes engleri*-ből izolált gombaellenes flavanon totálszintézisét.

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

1. Z.B. Szabó, M. Herczeg, A. Fekete, Gy. Batta, A. Borbás, A. Lipták, S. Antus: Synthesis of three regioisomers of the pentasaccharide part of the Skp1 glycoprotein of *Dictyostelium discoideum*.Tetrahedron:Asymm. 20, 808-820 (2009)
2. M. Herczeg, L. Lázár, A. Borbás, A. Lipták, S. Antus: Toward Synthesis of the Isosteric Sulfonate Analogues of the AT-III Binding Domain of Heparin. Org. Lett. 11(12), 2619-2622 (2009)
3. S. Qin, K. Krohn, U. Flörke, B. Schulz, S. Dräeger, G. Pescitelli, P. Salvadori, S. Antus, T. Kurtán: Two New Fusidilactones from the Fungal Endophyte *Fusidium* sp. Eur. J. Org. Chem. 2009, 3279-3284 (2009)
4. I. Kock, S. Dräeger, B. Schulz, B. Elsässer, T. Kurtán, Á. Kenéz, S. Antus, G. et al.: Pseudoanguillosporin A and B: Two Isochromanes Isolated from the Endophytic Fungus *Pseudoanguillospora*. Eur. J. Org. Chem. 2009, 1427-1434 (2009)
5. A. Fekete, A. Borbás, S. Antus, A. Lipták: Synthesis of 3,6-branched arabinogalactan-type tetra- and hexasaccharides for characterization of monoclonal antibodies. Carbohydr. Res. 344(12), 1434-1441 (2009)
6. Z. Czakó, L. Juhász, Á. Kenéz, K. Czifrák, L. Somsák, T. Docsa, P. Gergely, S. Antus: Synthesis and glycogen phosphorylase inhibitory activity of N-(β-D-glucopyranosyl)amides possessing 1,4-benzodioxane moiety Bioorg. Med. Chem. 17(18) 6738-6741 (2009)
7. A. Sipos, S. Berényi, S. Antus: First Synthesis and Utilization of Oripavidine - Concise and Efficient Route to Important Morphinans and Apomorphines. Helv. Chim. Acta, 92, 1359-1365 (2009)
8. A. Lipták, L. Lázár, A. Borbás, S. Antus: Reactions of Phenyl and Ethyl 2-*O*-Sulfonyl-1-thio-β-D-manno and β-D-glucopyranoside with Thionucleophyles. Carbohydr. Res. 344, 2461-2467 (2009)
9. Zs. Jakab, A. Mándi, A. Borbás, A. Bényei, I. Komáromi, L. Lázár, S. Antus, A. Lipták: Synthesis, regioselective hydrogenolysis, partial hydrogenation, and conformational study of dioxane and dioxolane-type (9'-anthracenyl)methylene acetals of sugars. Carbohydr. Res. 344, 2444-2453 (2009)
10. Z. Czakó, T. Docsa, P. Gergely, L. Juhász, S. Antus: Synthesis and Glycogen Phosphorylase Inhibitory Activity of Functionalized 1,4-Benzodioxanes. Pharmazie, 17, 801-807 (2009)
11. Zs. Fejes, A. Mándi, I. Komáromi, A. Bényei, L. Naesens, F. Fenyvesi, L. Szilágyi, P. Herczegh: Synthesis of a pericosine analogue with a bicyclo[2.2.2]octene skeleton, Tetrahedron, 65, 8171-8175 (2009)
12. G. Pintér, Gy. Batta, S. Kéki, A. Mándi, I. Komáromi, K. Takács-Novák, et al: Diazo Transfer-Click Reaction Route to New, Lipophilic Teicoplanin and Ristocetin AglyconDerivatives with High Antibacterial and Anti-influenza Virus Activity: An Aggregation and Receptor Binding Study, J. Med. Chem., 52, 6053-6061 (2009)

13. VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	6		Ebből kutató[2]:		5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					22
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					22
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		18
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	2		idegen nyelven:		0
összesített impakt faktor[6]:	46,754		összes hivatkozás száma[7]:		122
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					47
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	1	poszterek száma[12]:			3
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát(BSc):			5
Diplomamunkát(MSc):	3	PhD-t:			7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					0
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				26,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:		41,80	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				41,80	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				0	MFt

ELTE EGERVÁRY JENŐ KOMBINATORIKUS OPTIMALIZÁLÁSI KUTATÓCSOPORT

Frank András, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C
Telefon: 3812169, Fax: 3812148
e-mail: frank@cs.elte.hu, honlap:www.cs.elte.hu/egres

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Az Egerváry Kutatócsoport kutatási területe az operációkutatáson belül a kombinatorikus optimalizálás strukturális és algoritmikus kérdései. A kutatócsoport fő célja tovább erősíteni a magyar hagyományt a témával foglalkozó kutatók együttműködésének elősegítésével, valamint fiatal kutatóknak és egyetemistáknak a kutatásba és nemzetközi kapcsolatokba történő bevonásával. A csoport által a kutatási eredmények publikálására létrehozott ISSN 1577-4451 számú EGRES Technical Report sorozatban 2009-ben 13 új publikáció jelent meg, ezek közül 4 szerzői a csoport TKI állományú kutatói. A nemrég létrehozott EGRES Quick Proof sorozatban, amelyben főleg rövidebb lélegzetű munkák szerepelnek, 5 publikáció született. A csoport 2009-ben született eredményei közül számosat fogadtak el olyan rangos konferenciákon, mint az EuroComb, illetve a 2010-ben megrendezésre kerülő IPCO, STOC, és SODA konferenciák. Fontos megemlíteni, hogy a csoport TKI állományú kutatói közül kettő is az év folyamán fejezte be doktori értekezésének elkészítését.

A csoport aktívan részt vesz a kombinatorikus optimalizálás nemzetközi életében, ezen belül egy fontos feladata a Hatodik Magyar-Japán Diszkrét Matematikai Szimpóziumon való részvétel volt, melynek a csoportvezető volt az egyik társszervezője és 6 előadás hangzott el a kutatócsoport munkatársaitól. Ezen felül 2009 június 5-6-án a csoport FA60 címmel kétnapos konferenciát szervezett, amelyen a kutatócsoport tagjain kívül 9 nemzetközi hírű professzor is előadott.

A kutatócsoport kiemelt feladatának tekinti a felsőoktatási képzésben való részvételt, tagjai 2009-ben is részt vállaltak az ELTE matematikus, alkalmazott matematikus és informatikus képzésében. A hetente megtartott Egerváry Szemináriumon, aminek fő célja a kombinatorikus optimalizálás legújabb eredményeinek feldolgozása, több egyetemi hallgató és doktorandusz adott elő.

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

Az alábbiakban a csoport beszámolási évben elért kutatási eredményei szerepelnek területekre lebontva, a szerzők és publikációk számával.

Hálózatok összefüggősége: A csoport 6 tagja összesen 10 dolgozatot írt ebben a témában. Régóta megközelíthetetlennek bizonyult például az irányítatlan gráfok pontösszefüggőségének optimális növelése, amiben a csoport egyik tagja idén jelentős előrelépést tett: megoldotta az eggyel való növelés kérdését. Ehhez kapcsolódik a korlátozott *b*-párosítások elmélete, amelynek egy jó leírását adta korlátos fokú gráfokban a csoport két kutatója. Az élösszefüggőség-növelés témakörében megemlítendő, hogy a csoport egyik tagja francia matematikusokkal együttműködve megoldotta a hipergráfok élösszefüggőségének olyan növelését, amikor az új gráfélek csak egy előre adott partíció különböző osztályai között futhatnak.

Merevség: A csoport 3 tagja több más kutatóval együttműködve összesen 8 publikációt írt a témában. Egyik dolgozatukban megmutatják, hogy tetszőleges dimenziószám mellett a merev kábel-rugó címkézés létezése ekvivalens a rúdszerkezet redundáns merevségével, és ennek segítségével 2 dimenzióban erre algoritmikus karakterizációt adtak.

Párosítások, fokszámkorlátos részgráfok: A csoport 2 kutatója írt 1-1 cikket ebben a témakörben. Egyikük dolgozatában jó karakterizációt adott több fokszámkorlátos részgráf-feladatra.

Stabil párosítások: 5 dolgozat született a csoport 3 kutatójának és szerzőtársaiknak munkája alapján. Kidolgozásra került például a stabil folyamok elmélete, ami a stabil párosítások egy természetes általánosítása.

A csoport által kezdeményezett több éves nagyszabású vállalkozás a LEMON diszkrét programozási és modellezési programkönyvtár fejlesztése. 2008 októberében jelent meg a LEMON első stabil verziója, és a 2009-es évben is sok új algoritmus és adatszerkezet implementációja készült el.

A csoport 2009 őszén létrehozta az EGRES Open nevű online nyitott probléma gyűjteményt (http://www.cs.elte.hu/egres/open). Jelenleg több mint hatvan kérdés szerepel benne a kombinatorikus optimalizálás és gráfelmélet területéről. Célja, hogy a területen dolgozó matematikusok együttműködésének nemzetközi fórumává váljon, illetve a kutatásba bekapcsolódni vágyó diákok számára kiindulópontként szolgáljon.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az ELTE Operációkutatási Tanszékén a csoport tagjai több tárgy oktatásában vettek részt (Egészértékű Programozás, Operációkutatás, Kombinatorikus Optimalizálás). Ezen túl a kutatócsoport szoros kapcsolatokat ápol az ELTE Számítógéptudományi Tanszékével és a BME Számítástudományi és Információelméleti Tanszékével, melyek kutatói rendszeresen részt vesznek a csoport szemináriumán.

Nemzetközi együttműködés keretében a kutatócsoport tagjaival közös kutatásokban részt vettek amerikai, brit, francia, szlovák, japán matematikusok. A csoport 5 tagja részt vett a 2009 szeptember-októberében Berlinben tartott *Combinatorial Optimization at Work* című doktori kurzuson. Érdemes kiemelni, hogy a három hetes kurzus végén a részvevők záróvizsgát tettek, ahol a több mint száz részvevő közül a legjobb és a negyedik legjobb teljesítményt a csoport két tagja mutatta fel.

A csoport részt vesz egy közös kutatási projektben a France Telecommal, melynek célja heterogén hálózatok optimalizálási kérdéseinek vizsgálata, különös tekintettel a probléma játékelméleti vonatkozásaira.

A csoport tagjai az év során számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon: EuroComb (Bordeaux), Hatodik Magyar-Japán Diszkrét Matematikai Szimpózium (Budapest), FA60 konferencia (Budapest), Discrete Mathematics and Optimization Seminar (McGill University, Montreal), Oberwolfach Workshop on Combinatorial Optimization (Oberwolfach), Graph Theory 2009 (Fredericia).

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A csoport kutatói részt vesznek az ELTE és a France Telecom R&D 2007 végén kezdődött három éves kutatási projektjében, melynek témája optimális routing heterogén hálózatokban. Ez a csapat 2009-ben a probléma több változatának a megoldhatóságát vizsgálta, illetve megfogalmaztak egy játékelméleti változatot is.

A csoportvezető K60802 számú OTKA pályázatának fontos célja a kutatócsoport kutatásainak elősegítése; 2009-ben a csoport tagjainak több külföldi konferencia-részvételét ez a pályázat finanszírozta. A kutatócsoport egyes tagjai részt vettek az OTKA NK67867 illetve K69027 pályázatokban is.

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

A kutatócsoport egy tagja 2009-ban Akadémiai Ifjúsági Díjat kapott. A kutatócsoport egy másik fiatal kutatója pedig a Junior Prima Díjat vehette át 2009-ben. A legfontosabb publikációk felsorolása az alábbiakban olvasható.

1. Frank A, Király T: A survey on covering supermodular functions In: Research Trends in Combinatorial Optimization (Ed. Cook WJ, Lovász L, Vygen J), 2009, pp 87-126
2. Király T, Pap J: A note on kernels and Sperner's Lemma, Discrete Applied Mathematics 157(15): 3327-3331 (2009)
3. Bernáth A, Király T: Covering skew-supermodular functions by hypergraphs of minimum total size, Operations Research Letters 37(5): 345-350 (2009)
4. Cechlárová K, Fleiner T: Stable roommates with free edges In: 6th Japanese-Hungarian Symposium on Discrete Mathematics and Applications (Ed.), Budapest, 2009, pp 60-64
5. Jordán T, Recski A, Szabadka Z: Rigid tensegrity labelings of graphs, European Journal of Combinatorics 30: 1887-1895 (2009)
6. Jordán T, Szabadka Z: Operations preserving the global rigidity of graphs and frameworks in the plane, Computational Geometry-Theory And Applications 42: 511-521 (2009)
7. Jordán T, Jackson B: A sufficient connectivity condition for generic rigidity in the plane, Discrete Applied Mathematics 157: 1965-1968 (2009)
8. Szabó J: Good characterizations for some degree constrained subgraphs, Journal of Combinatorial Theory Series B 99: 436-446 (2009)
9. Dvorak Z, Jendrol S, Kral D, Pap G: Matchings and non-rainbow colorings, Siam Journal on Discrete Mathematics 23: 344-348 (2009)
10. Frank A: Rooted k-connections in digraphs, Discrete Applied Mathematics 157: 1242-1254 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	3			Ebből kutató[2]:			3
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							16
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			8
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			8
összesített impakt faktor[6]:	6,609			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							0
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	1
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	15	poszterek száma[12]:					0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							8
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát(BSc):					1
Diplomamunkát(MSc):	2	PhD-t:					2
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							74
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						12,75	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:				15,5	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						6,60	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						8,90	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

ELTE ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Horváth Zalán, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1.A
Telefon: 372-2546, Fax: 372-2509
e-mail: zalanh@ludens.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A csoport kutatásai a korábbi hagyományokra támaszkodva a részecskefizika, valamint a statisztikus fizika területén folytak. A feladat egyrészt a megkezdett kutatási témák eredményes folytatása, másrészt pedig új kutatási területeknek a bevonása volt.

A kutatócsoport tagjai aktívan vesznek részt az egyetemi oktatásban, diplomamunkások és doktoranduszok vezetésében. Számos eredmény született az Elméleti Fizikai Tanszék oktatóival, valamint más intézmények kutatóival való együttműködés alapján. A csoport tagjai alapkutatással foglalkoznak, melyek társadalmi hasznossága a világ, ezen belül a fizikai rendszerek viselkedésének jobb megértése révén jelenik meg, gazdasági hasznossága pedig részben csak közvetetten, részben pedig csak viszonylag hosszú idő múlva nyilvánul meg.

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

Részecskefizikai kutatások

A csoport egy tagja más intézmények kutatóival kollaborációban foglalkozott az AdS/CFT megfeleltetéssel. Maldacena 1998-ban megfogalmazott sejtése értelmében a tízdimenziós $AdS_5 \times S^5$ görbült háttéren mozgó szuperhúr ekvivalens a négydimenziós N = 4 szuperszimmetrikus SU(N) mértékelmélettel. Ez a dualitás erős-gyenge típusú, vagyis az erősen csatolt mértékelméletet gyengén kölcsönható húrelméletre, míg az erősen kölcsönható húr mozgását perturbatív mértékelméletre képezi le. Szerencsére az $N \to \infty$ határesetben a modellek integrálhatónak bizonyultak, ennek felhasználásával a húrelméletet az erős csatolású tartományban szisztematikusan közelítve sikerült olyan mennyiséget egzaktul kiszámolni, melyet össze lehetett hasonlítani egy perturbatív mértékelméleti számolással. A húrelmélet oldalon kifejezték a sokrészecske állapotok energiaszintjeinek végesméret-korrekcióját a végtelen térfogati szórásmátrix segítségével. Ezen formulát kiértékelték azon sokrészecske állapotokra, melyek ismert mértékelméleti operátorokhoz tartoznak és eredményeiket négy- és öt-hurok perturbáció számításban kiszámolt anomális dimenziókkal hasonlították össze. Az eredmény tökéletes egyezést mutatott, mely minden eddiginél jobban igazolta az AdS/CFT megfeleltetést. A témakörben további elért eredmény, hogy mivel a szuperhúr mozgásának van egy olyan tartománya, ahol spektrumát közelítőleg meg lehet adni az O(6) szigma modell segítségével, ezen megfeleltetést kihasználva sikerült nagy spínű és csavarású Wilson operátorok anomális dimenziójának aszimptotikus viselkedését leírniuk a szigma modellbeli két-hurok perturbáció számítás segítségével.

A csoport másik tagja más kutatókkal együttműködve általános módszert adott meg továbbá arra, hogy a nemintegrálható elméleteket integrálható modellek perturbációjaként leíró form faktor perturbáció számítást (FFPT) magasabb rendekben alkalmazni lehessen. Korábban csak az elsőrendű, vezető korrekciót lehetett kiszámítani, a véges méret korrekciók területén elért eredményeik alapján azonban képes volt egy teljes általánosságban, tetszőleges rendben működő eljárást konstruálni. Ennek hatékonyságát a kétfrekvenciás sine-Gordon modellben demonstrálta, és a másodrendű FFPT eredményeit összevetette a csonkolt konform állapottér módszer által adott numerikus eredményekkel.

A részecskefizika rendkívül sikeres Standard Modelljének egyetlen kísérletileg még felfedezetlen részecskéje a szimmetriasértésért felelős Higgs bozon. 2009-ben magyar részvétellel széleskörű nemzetközi együttműködésben indult az LHC (Large Hadron Collider, CERN, Genf), ennek egyik fő feladata a Higgs szektor kísérleti feltérképezése. Elméleti jóslatok csak azt támasztják alá, hogy az LHC felfedi a Standard Modell szimmetriasértő szektorának fizikáját, de a szimmetriasértő mechanizmust alternatív elmélet is leírhatja. Ezért különösen fontos a skalár szektort helyettesítő modelleket vizsgálni és azok kísérleti jóslatait összevetni az eddigi és a tervezett kísérletekkel. A csoport tagjai erősen kölcsönható fermionokra épülő dinamikai szimmetriasértő modellt javasoltak a Higgs szektor kiváltására. A modellben a Higgs részecskét és kölcsönhatásait két új fermionra és effektív négyfermion kölcsönhatásaikra cserélték ki. A modell újdonsága, hogy nem királis fermionok kondenzátumai sértik az elektrogyenge szimmetriát, ezáltal elkerülve a dinamikai szimmetriasértő modellek főbb problémáit. 2009-ben a csoport tagjai meghatározták a modellben az elektrogyenge precíziós mennyiségeket, majd összevetették azokat a kísérleti eredményekkel, eredményeik szerint ezek csak kevéssé szorítják meg az elmélet paramétereit. A számoláshoz egy új, általános módszert dolgoztak ki 4-dimenziós impulzustérbeli levágás használatára. Az új eljárás megőrzi az elmélet szimmetriáit, a véges mennyiségek megegyeznek az általánosan használt dimenziós regularizációban számoltakkal. Javaslatuk továbbra is a nagy erőkkel kutatott szimmetriasértés egy lehetséges elmélete. Az új részecskék nagy számban keletkezhetnek a majd teljes energián futó LHC-n.

Statisztikus fizikai kutatások

A csoport tagjai a Genfi Egyetem Fizika Tanszékének munkatársaival a kicsapódási mintázatok tervezésének leglényegesebb elemét a reakciófrontok kontrollját vizsgálták. Megmutatták, hogy külső elektromos terek és áramok segítségével elérhető a reakciófrontok szélességének vezérlése, azonban a szokásos terek és áramok nem elégségesek ahhoz, hogy a mintázatok mikron tartományba történő leskálázása során a módszer effektíven működjön.

A BME Fizikai és az ELTE Kémiai Intézet munkatársaival együttműködve mind kísérletileg, mind pedig elméletileg megvizsgálták a mintázatok tervezésének másik problémáját, a reakciófrontokban a mozgás irányára merőleges síkban megjelenő spontán mintázatok durvulási dinamikáját. A kísérletekben NaOH diffundált $AlCl_3$-mal átitatott gélbe, s mivel a $Al(OH)_3$ csapadék gyorsan feloldódott és így csak a front tartományában létezett, könnyen megfigyelhető és vizsgálható volt. A mintázatokról kiderült, hogy önhasonlóak és jellegzetes hosszúságskálájuk az idő 1/2-ik hatványával nő. Az eredményeket elméletileg is reprodukálták, s ez lehetőséget adott arra, hogy meghatározzák milyen körülmények között válik problémássá a frontok mozgásra merőleges instabilitása.

Frusztrált rendezetlen rendszerek (mint például az Ising spinüveg) fajlagos szabadenergiájának az átlagértéktől való eltérése - miközben a befagyott rendezetlenséget újra és újra preparáljuk, azaz mintát veszünk - különlegesen ritka esemény: valószínűsége a rendszer méretével exponenciálisan csökken. Ezen nagy skálájú szabadenergia-fluktuációk a replikamódszerrel tárgyalhatók, a térelméleti vizsgálat a perturbációszámítás első rendjében korrekciókat adott az átlagtérelmélet anomális viselkedéséhez. Különösen fontos eredmény adódott a véges dimenziós rács geometriájának a következményeként: a szabadenergia-fluktuációk vezető rendben Gauss-típusúvá váltak.

A diszlokációk kétdimenziós térelmélete keretében az ELTE más tanszékeinek kutatóival az általuk bevezetett variációs entalpia révén az anharmonikusság jelenlétében meghatározták a két-diszlokáció kölcsönhatás módosulását. A módszer alkalmas vakanciákkal való kölcsönhatás és az egymáshoz közeli, a rácsállandóval összemérhető távolságra levő diszlokációk közötti erők vizsgálatára.

A kvencselt kezdeti állapotból történő 2D kristályosodás molekuladinamikai vizsgálatával foglalkoztak SZFKI-s kollégákkal. A korábbi diszkrét diszlokációdinamikai tapasztalataikkal összhangban, de a hagyományosan használt modellekkel ellentétben a szemcsenövekedés un. nemideális, azaz nemdiffúzív időfüggést mutat.

Széles nemzetközi kollaborációban vizsgálták a független, azonos eloszlású változók extrém statisztikája és a renormálási csoport kapcsolatát, és feltárták a renormálási trajektóriák néhány tulajdonságát. A lyoni ENS-sel együttműködésben a differenciálegyenlet reprezentációban egzakt megoldásokat találtak.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A csoport tagjai együttműködnek egy sor hazai kutatóhellyel (az ELTE különböző Tanszékeivel, BME Fizikai Kémia Tsz, DE, MTA MFA, RMKI és SZFKI). Az ELTE-n folyó oktatásban is mindenki részt vesz szemeszterenként egy tantárgy oktatásával, vagy pedig heti 3-4 óra gyakorlattartással.

A csoport tagjai széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Ezek közül kiemelendőek azok, ahová a kutatók hosszabb tanulmányutakat tettek, illetve ahonnan kutatók érkeztek látogatóba: Berni és Genfi Egyetem, valamint a CERN Svájcban, az ICTP és SISSA Olaszországban, Grenoble-i Egyetem és Paris-Sud Egyetem Franciaországban, London King's College Angliában, Jagelló Egyetem Lengyelországban és a Ewha Egyetem Koreában.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Résztvevőként többnyire mindenki szerepel különböző OTKA pályázatokban Jelenleg a kutatócsoport két tagja témavezető részecskefizika illetve statisztikus fizika témakörű OTKA pályázatban.

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

1. Z. Bajnok, R. A. Janik, Four-loop perturbative Konishi from strings and finite size effects for multiparticle states, Nucl. Phys. B807: 625-650 (2009)
2. Z. Bajnok, R.A. Janik, T. Lukowski, Four loop twist two, BFKL, wrapping and strings, Nucl. Phys. B816: 376-398 (2009)
3. G. Cynolter, E. Lendvai, G. Pócsik: S and T Parameters in the Fermion Condensate Model. Mod.Phys.Lett.A24:2331-2344 (2009)
4. Gy. Fodor, P. Forgács, Z. Horváth, M. Mezei: Computation of the radiation amplitude of oscillons. Phys. Rev. D79: Art.No. 065002 (2009)
5. Gy. Fodor, P. Forgács, Z. Horváth, M. Mezei, Oscillons in dilaton-scalar theories. JHEP 08: Paper 106. (2009)
6. K. Martens, M. Droz, Z. Rácz: Width of reaction zones in A+B -> C type reaction-diffusion processes: Effects of an electric current, J. Chem. Phys. 130, 234506 (2009)
7. Volford, I. Lagzi, F. Molnár Jr., Z. Rácz: Coarsening of precipitation patterns in a moving reaction-diffusion front, Phys. Rev. E76, 055102(R) (2009)
8. G. Mussardo, G. Takács: Effective potentials and kink spectra in non-integrable perturbed conformal field theories, J. Phys. A: Math. Theor. 42, 304022 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:			7
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	2	levelező tag:	0	rendes tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							17
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							17
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			10
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			5
összesített impakt faktor[6]:	35,585			összes hivatkozás száma[7]:			238
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							210
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	1	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	11			poszterek száma[12]:			1
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0			Diplomamunkát(BSc):			0
Diplomamunkát(MSc):	2			PhD-t:			3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							436
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						35,9	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		3,2	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						3,2	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

ELTE FEHÉRJEMODELLEZŐ KUTATÓCSOPORT

Perczel András, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
Telefon:209-0555; Fax: 372-2592
e-mail: perczel@chem.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

NMR és optika spektroszkópiai és röntgendiffrakciós módszerekkel, valamint kvantumkémiai számításokkal vizsgálták a fehérjék szerkezetét, dinamikáját és kölcsönhatásait, valamint folytatták a biológiai makromolekulák építőköveinek szerkezetvizsgálatát. Folytatták kutatásaikat új, potenciálisan biológiailag aktív kismolekulák területén – elsősorban új típusú fémorganikus vegyületeket és heterociklusos származékokat szintetizáltak, a szerkezeteket komplex nagyműszeres módszerekkel derítették fel.

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

Biopolimerek építőelemeinek szerkezete és kölcsönhatásai

Két modell béta peptidet (Ac-β-HGly-NHMe and β-HAla-NHMe) vizsgáltak mátrix izolációs IR és elméleti módszerekkel. Vizsgálataik bizonyították, hogy egy-egy domináns konformerjük létezik. Az eredmények alapján feltételezhető, hogy az alfa peptidekhez képest nagyobb konformációs arzenálból kevesebb valósul meg a béta peptideknél, ami alapvetően befolyásolhatta elérhetőségüket a pre-biológiai evolúció számára.

A peptid modellek térszerkezet vizsgálatában fontos szerepet töltenek be az elméleti módszerek mellett a CD spektroszkópiai mérések. Ezen vegyületek spektrumainak kiértékeléséhez nyújt nagy segítséget kutatócsoportban fejlesztett CCA+, mely most már peptidek szerkezet-meghatározásához is használható.

NMR és QM módszerekkel vizsgálták polialkoholok kicserélhető hidroxil protonjainak konformácós tulajdonságait. A vizsgált monoszacharid esetén e két igen különböző módszerrel kapott rotamer populációk hasonlósága, valamint a mért és számított csatolási állandók hasonlósága arra utal, hogy e két módszer együttes alkalmazásával konformerek pontosabb atomi szintű jellemzése válik lehetővé.

Potenciálisan biológiailag aktív molekulák szintézise és vizsgálata

A dihidropirimidin származékok figyelemreméltó antibakteriális, antihipertenzív és kalciumcsatorna blokkoló hatással rendelkeznek. A kutatócsoportban számos új mono- és diszubsztituált ferrocéntartalmú dihidropirimidin származékot állítottak elő, formil- ill. 1,1'-diformil-ferrocént reagáltatva 1,3-dioxo-vegyületekkel és karbamiddal (Biginelli-reakció). A nitrogén- és kénatomot tartalmazó heterociklusok számos képviselője (tiazolok, tiadiazolok, tiazinon-származékok), ill. egyes metiltio-szubsztituált N-heterociklusok (pl. imidazol-3-on- és pirimidin-4-on származékok) többek között rákellenes ill. antituberkulotikus hatással rendelkeznek. A kutatócsoportban előállították e heterociklusok új, két ferrocenilcsoportot tartalmazó analógjait és a reakciókat optimalizálták.

Az 1,3,5-triaril-pirazolok körében sok biológiailag értékes tulajdonságot (pl. reumaellenes és rákellenes hatás, ill. szerinproteáz- és reverz transzkriptáz inhibitor hatás) közöltek az irodalomban. A kutatócsoport 2009-ben előállított számos új ferrocéntartalmú 1,3,5-triaril-

pirazolszármazékot. Vizsgálták a pirazolin/pirazol ciklo-dehidrogénezési reakció szubsztituens függését. A reakciók mechanizmusát DFT számításokkal támasztották alá, a szerkezeteket komplex nagyműszeres vizsgálatokkal (IR, 2D-NMR, több esetben röntgenkrisztallográfia) igazolták.

A Szegedi Tudományegyetemmel kooperációban egyrészt a sokrétű biológiai hatású 4-aril-1,3-tiazino[6,5-b]indol származékoknak, másrészt számos telített, a ciklohexán-gyűrűben, ill. a norbornán részben hidroxi-csoportot tartalmazó izoindolon- és pirimidinon-kondenzált policiklusos heterociklusnak a térszerkezetét meghatározták IR- és komplex NMR spektroszkópiás módszerekkel (DEPT, 2D-HMQC, 2D-HMBC, 2D-COSY, DIFFNOE).

A fehérjefunkció szerkezeti és dinamikai vonatkozásai

A dehidrinek növényi stresszfehérjék, feltételezhetően funkcionálisan rendezetlenek, tehát különleges kihívást jelent szerkezet-funkció összefüggéseik vizsgálata. Az ERD14 dehidrin fehérje spektrumait sikeresen felvettünk - az EU-NMR projekt keretében - nagy térerejű NMR készüléken (Frankfurtban) a fehérje teljes asszignációjának céljából. Enzimkinetikai és fehérjekrisztallográfiai módszerekkel vizsgálták a prolil-oligopeptidáz családba tartozó *Pyrococcus horikoshii* acilpeptid-hidrolázt. Bizonyították, hogy homohexamer felépítésű, így lehetővé válik a dimer, tetramer és hexamer enzimek szerveződését meghatározó kölcsönhatások mélyebb vizsgálata az enzimcsaládban.

Meghatározták a szerkezetét a veleszületett immunitás fontos eleme, a komplementrendszer egy újabb enzime, a MASP-1 katalitikus fragmentumának. A MASP-1 funkciója még nem teljesen tisztázott, lehetséges, hogy kapcsolatot teremt a komplement és a véralvadási kaszkádrendszerek között. Eredményeik rávilágítottak a MASP-1 rokon enzimeinél szélesebb szubsztrát szelektivitásának szerkezeti alapjaira, a trombinnal és tripszinnel mutatott rokon vonásokra.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

2009-ben is folytatódott a kutatócsoport együttműködése az MTA-SzBK Enzimológiai Intézet több kutatócsoportjával, az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoporttal, az MTA Kémiai Kutatóközpont munkatársaival és az SZTE Gyógyszerkémiai Intézetével. Külföldi kapcsolataik közül kiemelendő a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem Szerves Kémiai Tanszékével, valamint az Oxfordi Egyetem munkatársaival való együttműködés. Részben szintén külföldön történtek az NMR (Frankfurt) és röntgendiffrakciós kísérletek (DESY, Hamburg). A kutatócsoport tagja a COST CM0803 és az EAST-NMR FP7 projekteknek.

A kutatócsoport tagjai kötelező és speciális kollégiumok, valamint gyakorlatok tartásával részt vesznek az ELTE vegyész, biológia és kémia BSc és PhD képzésében. A kutatócsoporthoz köthető 2 diplomamunka védése, és 5 hallgató vett részt TDK konferencián. Vezetésük alatt további 3 diákörös hallgató, és 5 PhD hallgató dolgozott.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2009-ben a következő témakörökben voltak folyamatban OTKA pályázatok, amelyekben a kutatócsoport tagjai vezetők: fehérje feltekeredés (K72973), szerin oligopeptidázok (NK67800), ferrocénszármazékok és heterociklusok (K68887), immunrendszer fehérjéi (F67937). Egy folyamatban lévő OTKA iskolapályázatban résztvevők (NI68466). Külföldi

pályázati forrás: CPR-ICGEB kutatási pályázat fehérje feltekeredés és aggregáció témakörben.

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

1. T. Beke, Cs. Somlai, G. Magyarfalvi, A. Perczel, Gy. Tarczay: Chiral and Achiral Fundamental Conformational Building Units of beta-Peptides: Isolation Conformational Study on Ac-b-HGly-NHMe and Ac-b-HAla-NHMe. J. Phys. Chem. B, 113, 7918-7926 (2009).
2. I. Jákli, A. Perczel : The inherent flexibility of peptides and protein fragments quantitized by CD in conjunction with CCA+. J. Pept. Sci., 15, 738–752 (2009).
3. K. E. Kövér, A. Lipták, T. Beke, A. Perczel: OH-rotamer equilibrium of polyalcohols determined by combined NMR three-bond scalar coupling measurements and QM calculations. J. Comput. Chem., 30, 540-550 (2009).
4. A. Csámpai,. A. Györfi, Gy. Túrós, P. Sohár: Application of Biginelli reaction to the synthesis of ferrocenylpyrimidones and [3]-ferrocenophane-containing pyrimido[4,5-d]-pyrimidinediones. J. Organomet. Chem., 694, 3667-3673 (2009).
5. B. Fábián, A. Csámpai, T. Zs. Nagy, M. Czugler, P. Sohár: Synthesis, ring transformation, IR-, NMR- and DFT study of heterocycles with two ferrocenyl units. Study on ferrocenes, Part 22. J. Organomet. Chem., 694, 3432-3441 (2009).
6. V. Zsoldos-Mády, O. Ozohanics, A. Csámpai, V. Kudar, D. Frigyes, P. Sohár: Ferrocenyl pyrazolines: Preparation, structure, redox properties and DFT study on regioselective ring-closure. Study on ferrocenes, Part 23. J. Organomet. Chem., 694, 4185-4195 (2009).
7. P. Csomós, L. Fodor, G. Bernáth, A. Csámpai, P. Sohár: An expeditious synthesis for γ-carboline analogue 4-aryl-1,3-thiazino[6,5-b]indole derivatives via the trifluoromethanesulfonic acid-promoted isomerization of 3-amidomethylthioindole intermediates to 2-indolyl sulfides. Tetrahedron, 65, 1475-1480 (2009).
8. F. Miklós, P. Sohár, A. Csámpai, R. Sillanpää, G. Stájer: Preparation and Structures of Isoindolone- or Pyrimidone-Condensed Heterocycles Containing a Hydroxy Group on a Cyclohexane or Norbornane Moiety. Letters Org. Chem., 6, 252-257 (2009).
9. Z. Szeltner, A.L. Kiss, K. Domonkos, V. Harmat, G. Náray-Szabó, L. Polgár: Characterization of a novel acylaminoacyl peptidase with hexameric structure and endopeptidase activity. Biochim. Biophys. Acta, 1794, 1204-1210(2009).
10. J. Dobó, V. Harmat, L. Beinrohr, E. Sebestyén, P. Závodszky, P. Gál: MASP-1, a Promiscuous Complement Protease: Structure of Its Catalytic Region Reveals the Basis of Its Broad Specificit. J. Immunol., 183, 1207-1214 (2009).

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	5		Ebből kutató[2]:		4
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora: 0	levelező tag: 0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					12
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					11
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		11
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:		0
összesített impakt faktor[6]:	27,707		összes hivatkozás száma[7]:		171
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					115
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 0		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 0	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	6	poszterek száma[12]:			2
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát(BSc):			1
Diplomamunkát(MSc):	1	PhD-t:			0
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					673
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:				14,6	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:		34,5	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:				0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				31,1	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]				0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:				3,4	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:				0	MFt

ELTE GEOLÓGIAI, GEOFIZIKAI ÉS ŰRTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Haas János, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány sétány 1/c
Telefon: 381-2127, Fax: 381-2128
e-mail: haas@ludens.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatócsoport folytatta a Pannon-medence és a környező régiók geológiai felépítésének és szerkezetének kutatását: rétegtani, szedimentológiai és tektonikai kutatásokat végeztek. Folytatták a hazai geotermikus energia hasznosításával kapcsolatos vizsgálatokat. Elméleti modellszámításokat végeztek hévíztermelő és visszasajtoló kutak által keltett vízáramlás hőtranszportjának vizsgálatához. Alapkutatást végeztek a fölköpeny termikus konvekciójának numerikus modellezésével. Alfa- és gamma-spektrometriás méréseket, urán-soros radiometriai kormeghatározásokat végeztek, és fejlesztették a transzurán izotópok méréstechnikáját. Folytatták a műholdas regisztrátumokra és földi referencia adatsorokra építő eljárások kidolgozását, és alkalmazását a geokockázatot meghatározó, azzal összefüggő tényezők nyomon követésére.

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

A kutatócsoport vezetőjének koordinálásával, számos intézmény (Magyar Állami Földtani Intézet, MOL Nyrt., egyetemek) szakembereinek közreműködésével, több ezer mélyfúrás adatainak felhasználásával elkészült Magyarország új medencealjzat térképe, és a képződmények értékelését tartalmazó adatbázis. A térkép az aljzatot alkotó földtani képződmények és tektonikai elemek mellett, az aljzat mélységét is ábrázolja és a digitális földtani térmodell meghatározó jelentőségű elemét képezi. A nyomtatott változat 2010-ben jelenik meg. A térkép kiemelkedő jelentőségű a geotermikus energia-potenciál, továbbá a felszín alatti vízkészletek felmérése szempontjából, és szénhidrogén-kutatási jelentősége is számottevő. A kutatócsoport 3 tagja szerzői és koordináló feladatot végzett a Pannon-medence és azt körülölelő alpi–kárpáti–dinári hegységvonulatok terrénum térképeihez kapcsolódó monográfia, valamint a triász és a jura képződményeket átfogóan bemutató tanulmányok elkészítése érdekében. A monográfia nyomtatás alatt van Pozsonyban, a cikkek közreadását az Osztrák Földtani intézet vállalta.
OTKA támogatással folytatták az alapkutatási jellegű rétegtani, szedimentológiai, tektonikai kutatásokat a Bükk, az Aggteleki- és a Rudabányai-hegység, valamint a Dunántúli-közép területén. A Rudabányai-hegység triász és jura képződményeinek szedimentológiai, mikropaleontológiai, szerkezeti, metamorf kőzettani és fejlődéstörténeti átértékeléséről nemzetközi folyóiratokban jelentek meg cikkeik. Új kutatási projekt keretében vizsgálták a deformációs eseményekkel összefüggésben álló folyadékáramlásokat az Aggteleki–Szlovák Karszt területén. A diagenetikus ásványokon végzett speciális elemzések információt adhatnak a deformációk hőmérsékleti és nyomás viszonyairól, továbbá koráról, ami lehetővé teszi a takarók mozgásának rekonstrukcióját. Elkészítettek egy a Dunántúli-középhegység dolomit kőzetfajtáinak kutatását célzó OTKA pályázatot, amelyet azóta elfogadtak.
A Radiometriai Laboratóriumban folytatódtak az urán-soros kormeghatározások a MTA Izotópkutató Intézetének ICP-MS laboratóriumával való együttműködés keretében, az alfa-spektrometriai mérések transzuránok vizsgálatára környezetanalitikai és radiokémiai módszerfejlesztési, továbbá a gamma-spektroszkópiai mérések üledékföldtani céllal.

Meghatározták a Budai-hegység pleisztocén kori kiemelkedési ütemét, ezzel fontos adatot szolgáltatva a Dunántúli-középhegység kiemelkedés-történetéhez. Folytatták a paleoföldrengések barlangi képződményekre gyakorolt hatásának vizsgálatát. Az MTA-IKI-vel a transzurán elemek elválasztás-technikájának és méréstechnikájának fejlesztése érdekében közös módszertani kutatásokat végeztek. A mesterséges mintákon elért eredmények jól hasznosíthatóak természetes – környezetanalitikai vagy üledékföldtani célból vett – minták feldolgozásánál. Megszülettek a vulkáni kőzetek izokron módszerrel történő urán-soros korhatározásával kapcsolatos első eredmények.

Folytatták a geotermikus kutatásokat. Az elemzések szerint geotermikus energiahasznosításunkat egy nagyságrenddel növelni lehet, így aránya elérheti a 3-5%-t az ország energiafelhasználásának mérlegében. A hasznosítás ilyen mértékű növelése azonban technológiailag nem megoldott, mert a porózus közegbe történő visszasajtolás nem tekinthető rutin eljárásnak. Másrészt a generált vízáramlások hőtranszportja sem ismert. Elméleti modellszámításokat végeztek hévíztermelő és visszasajtoló kutak által keltett vízáramlás hőtranszportjának vizsgálatához. A számítások eredményeit a kutak helyének kijelölésénél a visszasajtolás mélységének meghatározásánál és a kitermelhető vízmennyiség megállapításánál lehet hasznosítani. A remélt gazdasági haszon több 100 milliárd forint továbbá a CO_2 kibocsátás csökken, nő a fűtési energiaellátás-biztonság, hazai munkahelyek jöhetnek létre. A geotermikus kutatást kiterjesztették az Erdélyi-medencére is. Ennek során a medence hőmérsékleti viszonyait, illetve a hőmérsékletet meghatározó földtani folyamatokat, és anyagi paramétereket tanulmányozták.
A földköpeny termikus konvekciójának numerikus modellezésével a konvekció struktúráját meghatározó anyagi jellemzőket, és az alsó-felső köpeny határon található ásványi fázisátmenetek hatását tanulmányozták. Ezektől a paraméterektől nagyban függ a konvekció által a felszín közelébe szállított hő mennyisége. A modellezés fontos adatokat szolgáltat a múltban végbement tektonikai folyamatok értelmezéséhez.
Részt vettek a geokockázati jelenségek globális monitorozását célzó orosz (IKI) Chibis mikro-műhold tudományos és technológiai előkészítésében. Egy munkatársuk meghívottként vett részt a francia (CNES) DEMETER műhold regisztrátumainak tudományos feldolgozásában. Részt vettek a globálisan telepített keskeny- és szélessávú (AWDANet) VLF földi űr-időjárási mérőhálózat továbbfejlesztésében. Ennek saját fejlesztésű jelfeldolgozó és elemző DSP egységei a technológiai élvonalat képviselik, széleskörű alkalmazásuk anyagi haszonnal és tudományos ranggal járó export. Megvalósult a plazmaszféra energikus részecskéinek kiszórását monitorozó automatikus eljárás első alkalmazása, valamint a regionális zivataraktivitás és a sugárzási öv dinamikája közötti kapcsolat igazolása tömeges űr-időjárási jelenség vizsgálatának részeként.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport munkatársai előadások és gyakorlatok tartásával, szakdolgozatok témavezetésével vettek részt az ELTE Földrajz és Földtudományi Intézetének oktatási tevékenységében és szerepet vállaltak a Földtudományi Doktori Iskola munkájában. Az Intézet szinte valamennyi tanszékével együttműködtek különböző kutatási feladatok megoldásában, különösen szoros volt a kutatási együttműködés az Általános és Alkalmazott Földtani és a Geofizikai és Űrtudományi Tanszékekkel.
A kutatás, az oktatás és a továbbképzés területén is aktív együttműködés folyt a MOL Nyrt-vel. Igen szoros volt a munkakapcsolat a Magyar Állami Földtani Intézettel, elsősorban

földtani térképszerkesztési feladatok tekintetében, az MTA Geokémiai Kutatóintézettel, izotópgeokémiai és metamorfózis vizsgálatok területén, a Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel elsősorban paleomágneses és obszervatóriumi méréseket illetően. A radiometriai labor rendszeres munkakapcsolatban állt az MTA Izotópkutató Intézet ICP-MS laboratóriumával. Konzorciális együttműködés keretében dolgoztak az MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézettel, elsősorban a hullámterjedési, ELF-VLF vizsgálatok és az űr-időjárás kutatás területén. Több éves szakmai együttműködést folytatnak a FÖMI KGO-val (Penc).
MTA kétoldalú együttműködés keretében szerb és szlovák akadémiai és egyetemi intézetekkel folytatták a paleozoos és mezozoos kőzetek összehasonlító vizsgálatát. TéT pályázat keretben osztrák, horvát, szlovák és lengyel partnerekkel működtek együtt. Az Erdélyi-medence geotermikus vizsgálatát a Bukaresti Egyetemmel és a Vrije Universiteit-tel közösen végezték. A hullámterjedés és ELF-VLF vizsgálatok terén szoros együttműködésben vannak a következő kutatóhelyekkel: CNES és CNRS (Franciaország); Univ. of Natal, Durban (Dél-Afrika); Izmiran, Moszkva (Oroszország); Laboratory of Electromagnetic Investigations, Lviv (Ukrajna); Banaras Hindu University, Varanasi (India); RBS College, Bichpuri, Agra (India); Regional Engineering College, Srinagar (India); Univ. of Otago, Dunedin (Új-Zéland); Stanford Univ. (USA); British Antarctic Survey,Cambridge (UK).

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az év folyamán új OTKA pályázatot nyert el a csoport vezetője (K 81296); melynek témája a Dunántúli-középhegységi felső-perm és triász dolomitok összehasonlító vizsgálata.

További fontosabb folyamatban lévő pályázatokkal elnyert kutatások: „Földköpeny-konvekció dinamikájának és felszíni megnyilvánulásainak numerikus modellezése” (OTKA K72665); „A Kárpát-Pannon térség utolsó vulkáni kitörései: a délkeleti Kárpátok kvarter magmatizmusa”. „A földkéreg feszültségviszonyainak meghatározása akusztikus fúrólyuk-fal vizsgálatok interpretációja alapján Magyarországi mélyfúrásokban”.

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

1. Varga Zs., Surányi G. (2009): Detection of previous neutron irradiation and reprocessing of uranium materials for nuclear forensic purposes. Applied Radiation and Isotopes Vol. 67, Issue 4, April 2009 p.: 516-522
2. Ferencz, Cs., et al., (3, Steinbach, P.) (2009) An unusual VLF signature structure recorded by the DEMETER satellite. Journal of Geophysical Research, doi: 10.1029/2009JA014636
3. Hips K, Haas J (2009) Facies and diagenetic evaluation of the Permian-Triassic boundary interval and basal Triassic carbonates: shallow and deep ramp sections, Hungary. Facies, 55, 421-442
4. Kövér S., Fodor L., Judik K., Németh T., Balogh K., Kovács S., 2009: Deformation history and nappe stacking in Rudabánya Hills (Inner Western Carpathians) unravelled by structural geological, metamorphic petrological and geochronological studies of Jurassic sediments – Geodinamica Acta, 22, 3-29

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:			7
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							13
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			10
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	2			idegen nyelven:			1
összesített impakt faktor[6]:	18,392			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							88
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	1	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	12			poszterek száma[12]:			9
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1			Diplomamunkát(BSc):			3
Diplomamunkát(MSc):	2			PhD-t:			1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							49
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						26,90	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		9,90	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						9,90	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

ELTE PEPTIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Hudecz Ferenc, a kémiai tudomány doktora
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/A., 1518 Budapest, Pf.32.
Telefon: 1 372 2828; Fax: 1 372 2620
e-mail: fhudecz@ludens.elte.hu; honlap: www.peptid.chem.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Biológiailag aktív peptidek és peptid konjugátumok tervezése és szintézise, szerkezet-hatás vizsgálatok, terápiás alkalmazás és diagnosztikumok kifejlesztésének céljából. Olyan nagy specifitású peptid-antigének illetve gyógyszerhatóanyagok kifejlesztése, amelyek hozzájárulhatnak olyan sokakat érintő betegségek korai diagnózisához és gyógyításához, mint például a rák, TBC, Alzheimer-kór, reumatoid arthritis, herpesz fertőzés.
A kutatási tevékenység három témára koncentrálódik:

- *Rákkemoterápiai kutatások*: A gyógyászatban alkalmazott daganatgátló szerek konjugátumainak szintézise célfelismerő/célbajuttató oligo- és polipeptidek felhasználásával, amelyek elősegítik a gyógyszermolekulák tumorsejt specifitását, ezáltal csökkentve azok toxikus mellékhatásait. A konjugátumok *in vitro* és *in vivo* tumorellenes hatásának vizsgálata és hatásmechanizmusuk feltérképezése.
- *TBC kutatások*: A *Mycobacterium tuberculosis* fertőzöttség korai kimutatása lineáris peptid epitópokra illetve ezek oligo- vagy polipeptid hordozóhoz kapcsolt konjugátumaira épülő teszt módszerrel, amelyek alkalmasak más fertőzések (pl. HIV) keresztreakcióinak kiszűrésére is. A TBC kezelésre bevált, illetve *in silico* módszerrel kiválasztott és hatékonynak bizonyult kismolekulák specifitásának növelése peptidkonjugátumaik előállításával.
- *Immunkémiai kutatások*: A fent felsorolt betegségekhez kapcsolódó fehérjékből származó és módosított mesterséges peptid alapú “szuperantigének” szintézise diagnosztikai és szintetikus oltóanyag (vakcina) kifejlesztése céljából. A célfehérjék: mucin (MUC1, MUC2) glikoproteinek (rák), Herpes simplex vírus D glikoprotein, hősokk fehérjék, filaggrin (reumatoid arthritis), béta-amiloid (Alzheimer-kór).

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

Új daunomicin-oligoarginin konjugátumcsaládot fejlesztettek ki. E vegyületekben a tumorellenes szer különböző kovalens kötéssel (oxim vagy hidrazon illetve a korábban előállitott négyszögsavdiamid) kapcsolódik 6 vagy 8 arginint tartalmazó oligopeptidhez. Meghatározták e konjugátumok *in vitro* stabilitását, fluoreszcens tulajdonságait, valamint citosztatikus hatását és a sejtfelvétel kinetikáját két sejtvonalon. Összefüggéseket állapítottak meg a konjugálásra alkalmazott kötés típusa, az oligoarginin rész hossza és a fenti kémiai illetve biológiai sajátságok között. Tanulmányozták a sejtféleség befolyásoló hatását is. Megállapították, hogy a négyszögsav diamid illetve oxim kötést tartalmazó vegyületek stabilak, míg a hidrazon kötésből folyamatosan szabadul fel a hatóanyag. In vitro toxicitási illetve sejtfelvételi adatok alapján megállapították, hogy a daunomicin-konjugátumok hatása/sejtbeli felvétele a kötés savérzékenységétől és jelentős mértékben a sejt típustól függ. (A kutatásban résztvevő összes kutatók száma/ ebből a kutatócsoport tagjai: 6/5.)

Előállítottak olyan új peptid-konjugátumokat, amelyekben *M. tuberculosis* ellenes szer, isoniazid (INH) kapcsolódik a baktérium 16-kDa fehérjén azonosított T-sejt epitóp peptidhez

vagy oligotuftsin-származékhoz. Kétféle – egy direkt és egy bifunkciós reagenst magában foglaló - konjugálási módszert dolgoztak ki. Megállapították, hogy a hidrazid kötést tartalmazó konjugátum stabilitása nagyobb, mint a hidrazon kötést tartalmazó vegyületé. Megállapították továbbá, hogy az INH konjugátumok - függően a peptid szerkezetétől - a szabad izoniaziddal azonos hatást mutatnak *M. tuberculosis* H37Rv tenyészeten (4/1).

Új *in silico* módszerrel kiválasztott potenciális antituberkulotikumok mycobactericid hatását vizsgálták, és egyes hatékonynak bizonyult szerves kismolekula konjugációját valósították meg a hatóanyag oldékonyságának növelése és sejtbejutásának fokozása érdekében. Izolált humán sejteken (perifériás vérből származó monomorfonukleáris sejtek) toxicitási kísérleteket végeztek az alacsony MIC értékkel rendelkező származékokkal (6/3).

Peptidek biotinnal történő módosítására előállítottak olyan új, etilén-glikol egysége(ke)t tartalmazó távolságtartót, valamint biotin származékokat, amelyek kiválóan alkalmasak hidrofób oligopeptidek jelzésére, a vízoldékonyság növelésére. A szilárd fázisú peptidszintézis körülményei között, az oligopeptid N-terminálisára beépíthető reagens család tagjai jelentős szerepet kaphatnak új, immunreakción alapuló kötődésvizsgálati technikák kialakításában (3/3).

Előállítottak olyan epitóp peptid – oligotuftsin biokonjugátumokat, amelyekben a herpes simplex virus D glikoproteinjéből származó epitóp, ^{9}LKMADPNRFRGKDL^{22} ciklusba zárt formája kapcsolódik a hordozóhoz. E konjugátumok, valamint a ciklopeptid dimerjei antigenitását egy fehérjespecifikus monoklonális ellenanyag felhasználásával ELISA módszerrel vizsgálták. Megállapították, hogy a ciklizáció csökkenti az ellenanyagkötődést, amit jelentős mértékben ellensúlyozni képes a dimerizáció, illetve a hordozóhoz való kovalens kapcsolás. A konjugálás helye, valamint a konstrukció topológiája jelentősen meghatározza a konjugátumban jelenlevő epitóp ellenanyagkötődését (9/4).

A kalpain intracelluláris aktiválását gátolni képes két kalpasztain peptid térszerkezetét vizsgálva megállapították, hogy a peptidek vízben rendezetlenek, de magas alkoholtartalmú oldószerben illetve Ca2+ ion jelenlétében helikális térszerkezetet (5/3).

Elágazó láncú polipeptidek illetve konjugátumok szintézisére használt polilizin polimerek jellemzésére új módszert dolgoztak ki. Ennek keretében azt vizsgálták, hogyan hat a mátrix illetve a minta előkészítés módja e polimerek MALD-TOF tömegspektrometriás jellemzésére. Megállapították, hogy e módszer kiválóan alkalmazható a polilizin minták jellemzésére a megfelelően megválasztott kísérleti paraméterek mellett (6/4).
Új módszert dolgoztak ki savra érzékeny kötést tartalmazó konjugátumok HPLC kromatográfiás tisztítására vonatkozóan (6/5).

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok: ELTE Szerves Kémiai Tanszék, Fizikai Kémiai Tanszék, Immunológiai Tanszék, Biokémiai Tanszék; Matematikai Tanszék; BME, Szerves Kémiai Tanszék; SE Biofizikai és Sugáregészségügyi Intézet, Immunológiai, Sejtbiológiai és Genetikai Intézet, I.sz. Gyermekgyógyászati Klinika, Központi Immunológiai Laboratórium; Pécsi Tudományegyetem Immunológiai és Biotechnológiai Intézet; Országos Onkológiai Intézet; MTA KK; MTA KOKI; MTA SZBK Biokémiai Intézet, Enzimológiai Intézet; ORFI; Richter G. Vegyészeti Gyár Rt.
Nemzetközi kapcsolatok: Department of Experimental and Health Sciences, Pompeu Fabra University, Barcelona; Cell Biology, Purpan Medical School, Toulouse III University, France,

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Konstanz University, Konstanz, Germany; Department of Medical Microbiology, University of Groningen, Groningen, The Netherlands; Department of Molecular Pathology, University of Palermo, Palermo; Institute of Food Science and Technology CNR, Avelino, Italy; Faculty of Health Sciences, University of Cape Town, South Africa; The Noguchi Institute, Tokyo, Japan.
Oktatás: PhD témavezetés (13 fő, ebből 5 fő védett), diploma-témavezetés (14 fő), tudományos diákköri témavezetés dolgozattal (5 fő). Fő- és speciális kollégiumok, gyakorlatvezetés, PhD előadássorozatok, szakdolgozat/PhD dolgozat bírálata, vizsgáztatás. Előadások tanár továbbképzés keretében. ERASMUS Oktatói és Hallgatói Mobilitás (Konstanz University).

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

NKTH (NKFP): Új projekt (NKTH-OTKA) indult, amely tumorellenes peptid konjugátumok előállításával és vizsgálatával foglalkozik (témavezető). Részvétel az ELTE eScience Regionális Egyetemi Tudásközpont programban (autoimmunbetegségek diagnosztikája, peptidkémiai kutatások), a Jedlik program keretében *M. tuberculosis* ellenes hatóanyagok kutatásában, valamint egy programban (szintetikus peptidek specifikus sejtadhéziós felületek, implantátumok bevonására) közreműködők. OTKA: Három programban (témavezető) folytatódott a kutatás (tumorellenes hatóanyagok célbajuttatása, *M. tuberculosis* ellenes szerek, autoimmun betegségek diagnosztikája és terápiája témakörökben). További két OTKA-programban (jelfeldolgozás a sejtben, neuropeptidek) folytatódott a kutatás (közreműködő). Új ETT projekt indult, amely tumorellenes hatóanyagok hatásmechanizmusának vizsgálatát tűzte ki célul (témavezető). Két TÉT programban folytatódik az együttműködés: a Magyar-Francia (témavezető) és a Magyar-Spanyol (témavezető) programokban.

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

1. Bartos Á, Hudecz F, Uray, K. A new water soluble 3,6,9-trioxaundecanedioic acid-based linker and biotinylating reagent. Tetrahedron Letters, 2009, 50: 2661-2663.
2. Horváti K, Mező G, Szabó N, Hudecz F, Bősze Sz. Peptide conjugates of therapeutically used antitubercular isoniazid – design, synthesis and antimycobacterial effect. J. Pept. Sci., 2009, 15: 385–391.
3. Jakab A, Schlosser G, Feijlbrief M, Welling-Wester S, Manea M, Vila-Perello M, Andreu D, Hudecz F, Mező G. Synthesis and antibody recognition of cyclic epitope peptides, together with their dimer and conjugated derivatives based on residues 9-22 of herpes simplex virus type 1 glycoprotein D. Bioconjugate Chemistry, 2009, 20: 683-692.
4. Miklán Zs, Orbán E, Csík G, Schlosser G, Magyar A, Hudecz F, Daunomycin–oligoarginine conjugates: synthesis, characterization, nd effect on human leukemia and human hepatoma cells new daunomycin–oligoarginine conjugates: synthesis, characterization, and effect on human leukemia and human hepatoma cells. Biopolymers, 2009, 92: 489-501.
5. Szabó I, Manea M, Orbán E, Csámpai A, Bősze Sz, Szabó R, Tejeda M, Gaál D, Kapuvári B, Przybylski M, Hudecz F, Mező G, Development of an oxime bond containing daunorubicin-gonadotropin-releasing hormone-III conjugate as a potential anticancer drug. Bioconjugate Chemistry, 2009, 20: 656-665.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:			6
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	1	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							19
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							19
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			15
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	3			idegen nyelven:			1
összesített impakt faktor[6]:	49,768			összes hivatkozás száma[7]:			297
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							222
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	11	poszterek száma[12]:					13
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							6
TDK munkát készítő hallgatók száma:	5	Diplomamunkát(BSc):					5
Diplomamunkát(MSc):	9	PhD-t:					11
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							0
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						33,10	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:				116,7	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						28,10	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						87,60	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						1	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0,5	MFt

ELTE STATISZTIKUS ÉS BIOLÓGIAI FIZIKA KUTATÓCSOPORT

Vicsek Tamás, az MTA r. tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1A
Telefon: 372 2795; Fax: 372 2757
e-mail: vicsek@hal.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

2009 évi feladatok egyfelől a korábban megkezdett kutatások eredményeinek fontos nemzetközi folyóiratokban való publikálása, és az esetenként hozzájuk társuló programcsomagok fejlesztése voltak. Egy további fontos feladat volt, hogy folytassák egy a korábbiaknál sokkal extenzívebb formában végzendő kutatásnak a megalapozását a kollektív mozgás témakörében. Az előzőleg elnyert pályázatok által lehetővé tett alkalmazások útján átmenetileg bővült létszámú kutatócsoport eredményes munkával a fenti célokat elérte.

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

Bár a hálózatok átfedő csoportosulásai jelentős érdeklődést váltottak ki az elmúlt pár évben, eddig nem sikerült a klaszterezés minőségét jellemző mennyiséget definiálni. Ezt a problémát oldották meg és az eredményekről készült kéziratot publikálásra benyújtották.

A kollektív mozgás alapmodelljét továbbfejlesztették, hogy annak új változata a madarak kollektív leszállásának főbb tulajdonságait is értelmezhetővé tegye.

Kifejlesztettek egy ultra könnyű GPS logger-t amelyet madarak hátára rögzítve követni tudták azok csoportos mozgásának statisztikus tulajdonságait (pl. irányváltoztatások korrelációját). Az eredmények szerint a postagalambok repülés közben igen komplex vezetői-szerep hierarchiát követnek.

Megmutatták (kísérleti úton elsőként), hogy zárt területen önhajtott egységek mozgása akkor is koordinálódik, ha a kölcsönhatásuk kizárólag az ütközéseikre korlátozódik.

A kutatócsoport a részecskefizikához kapcsolódóan két témakörben ért el eredményeket 2009-ben. Egyik a korábbi években a globális szimmetriájú térelméletek perturbatív tárgyalásának részleges felösszegezésében és azok renormalizálhatósága témakörében végzett sikeres kutatásaiknak a továbbfejlesztése volt. A másik új eredmény a mértékterekre Braaten és Pisarski által kezdeményezett mértékinvariáns HTL-felösszegzésnek (Hard Thermal Loop) az 1-hurok közelítésen túli alkalmazására vonatkozott.

A statisztikus térelméleti perturbatív sorok részleges felösszegzésével nyert nem-perturbatív ún. *nagy-N* sorfejtés vezető renden túli (NLO) renormalizálhatóságát bizonyították tetszőleges homogén szimmetriasértő háttér esetében az ún. *N-vektor* modellre. A Hubbard-Stratonovich transzformációt alkalmazva a bizonyítást a segédteret meghatározó nyeregponti változó tetszőleges értékére is sikerült megadni. A fenti bizonyítás aktuális fontosságát mutatja, hogy a közelmúltban (2004-08-ban) több olyan cikk jelent meg vezető folyóiratokban, amelyek

kétségbe vonták az NLO közelítés tetszőleges háttér melletti renormalizálhatóságát. (2 fő + 1 doktorandusz)

2009-ben a renormalizált 2PI-egyenletek numerikus megoldását nagy intenzítással fejlesztették, részeredményeikről 2 konferencia-előadásban is beszámoltak. A megoldásra 2008-ban kidolgozott elvi sémáról 1 konferencia-cikket publikáltak a Nuclear Physics A folyóiratban. (1 fő + 1 doktorandusz)

Két diplomamunkás bevonásával lényeges előrehaladást tettek a renormalizált kvark-mezon elmélet *nagy-N* közelítése NLO-szintű megoldásának fenomenológiai alkalmazásában. A megoldást véges hőmérsékleten, véges bariokémiai potenciál esetén, továbbá a kvark-bezárás hatását modellező Polyakov-hurok effektív szabadsági fok figyelembevételével vizsgálják. 2010-ben 2 fizikus diplomamunka készül az eredményekből. Várható nemzetközi folyóiratbeli publikáció benyújtása is. (2fő + 2 diplomamunkás)

A kutatócsoport 2009. áprilisában nagyon sikeres 3 napos műhely-szemináriumot szervezett a kvantumtérelméletek nem-perturbatív funkcionál-egyenletes megoldásának témakörében, "Resummation and Renormalisation" címmel. Továbbá aktív résztvevői a 2008-ban kezdett Budapest-Graz-Zágráb elméleti részecskefizikai szemináriumsorozatnak.

Társadalmi hasznosulás:

A hálózatkutatási eredmények társadalmi hasznosítása folytatódott. A csoport által kifejlesztett szoftvert továbbra is évente sok százan letöltik és használják szerte a világban. A hálózatokkal foglalkozó kutatócsoport tagok együttműködnek egy kifejezetten a hálózati módszerek alkalmazására frissen létrejött piaci tanácsadó céggel (Maven7), amely szervezetfejlesztési és egyéb feladatokat végez nagy cégeknél, az alkalmazottak kapcsolati hálójának analízise segítségével. A programcsomag új nemzetközi felhasználási lehetőségeire utal nagy gyógyszergyártó cégek (kutatólaboratóriumok, marketing) érdeklődése, valamint néhány speciális érdeklődő levél (pl. Nottinghami önkormányzat, US Army).

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel. Az alábbiakban csak azokat sorolju fel, amelyek keretében publikáció is született, ill. készülőben van.

- *Hazai együttműködések*:

Sejtbiológiai vonatkozású kutatások terén együttműködnek az MTA KOKI és az MTA RMKI csoportjával

- *Nemzetközi együttműködések*:

Barabási Albert-László csoportjával (Northeastern Univ., USA). Háromoldalú kutatási együttműködését folytattak a Graz-i Karl Franzens Egyetem és a zágrábi Rudjer Boskovic Intézet, valamint a Zágrábi Egyetem kutatóival. (Los Alamos National Laboratory)

A nemzetközi kapcsolatokhoz tartozik, hogy a csoport vezetője szerkesztő bizottsági tag a Fractals és a Physica A című folyóiratoknál.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Az elnyert pályázatok közül 2008-ban kiemelkedik a csoport vezetője által elnyert, és 2009 áprilisában indult FP7 ERC Advanced Investigators Grant (1,28 M Euro), amelyik a kollektív viselkedés számos aspektusának és törvényszerűségeinek kutatását az eddigieknél egy nagyságrenddel nagyobb forrással fogja támogatni.

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

1. G Fejős, A Patkós, Zs Szép: Renormalized effective actions for the O(N) model at next-to-leading order of the 1/N expansion. PHYS. REV. D, 80: Paper 025015. (2009)
2. Boross G, Orosz K, Farkas I J: Human microRNAs co-silence in well-separated groups and have different predicted essentialities *Bioinformatics* **25**, 1063 (2009)
3. P. Szabó, M. Nagy, T. Vicsek: Transitions in a self-propelled-particles model with coupling of accelerations. *Phys. Review*. E 79 (2009) 021908

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	8			Ebből kutató[2]:			8
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	1	levelező tag:	0	rendes tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							14
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							9
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			4
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			1
összesített impakt faktor[6]:	13,609			összes hivatkozás száma[7]:			423
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							0
Magyarul könyv[8]/atlasz:	2	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	2	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	16			poszterek száma[12]:			3
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			1
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							3
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2			Diplomamunkát(BSc):			2
Diplomamunkát(MSc):	0			PhD-t:			3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							14
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						30,2	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		96,7	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						14,8	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						10,9	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						1	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						70	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

ME ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT
Roósz András, az MTA levelező tagja
3515 Miskolc-Egyetemváros
Telefon: (46) 565-111/15-43, Fax: (46) 565-201
e-mail: femroosz@gold.uni-miskolc.hu; honlap: www.matsci.uni-miskolc.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása és fejlesztése
Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre (finanszírozó: ESA)
Nemesíthető rézötvözetek tulajdonságainak vizsgálata a hőkezelés függvényében

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

Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása és fejlesztése

Az elmúlt két év tapasztalata alapján arra a következtetésre jutottak, hogy a Cu-alapú tömbi amorf ötvözetek előállításához oxigéntartalmat minimálisra kell csökkenteni. A mesterötvözetek egy részét centrifugál öntéssel réz öntőformába öntötték. Az oxigéntartalom kizárása érdekében a centrifugál öntőgépet vákuumozhatóvá alakították át. A Cu-Zr-Ag rendszerben található m-fázis ($Cu_{70}Zr_{16}Ag_{14}$) rácsparaméterei, az atompozíciói nem ismertek. Az irodalomban található összetételű darabot legyártották, és hőkezelték. A röntgenes analízisek alapján az m-fázishoz tartozó három erőteljes diffrakciós csúcs alapján meghatározták a fázishoz tartozó síktávolságokat, s igazolták, hogy az m-fázis oldja saját komponenseit. A Cu-Zr-Ag-Al rendszerben elkészült mesterötvözetekből réz öntőformába ékeket öntöttek. Az Ag+Al tartalmat 16 at%-ig változtatták. A szerkezet vizsgálata pásztázó elektronmikroszkóppal és röntgenes analízissel történt. ACu-Zr-Ag rendszerű darabok alakíthatósága rendkívül kicsi, míg a Cu-Zr-Ag-Al daraboké jóval nagyobb.

2009-ben folytatódott a Cu-Hf-Ti és a Cu-Hf-Al ötvözetrendszerben új összetételű ötvözetek vizsgálata. Az új összetételekből (Cu_{60}-$Hf_{27.5}$-$Ti_{12.5;}$ Cu_{65}-Hf_{20}-$Ti_{15;}$ ill. Cu-Hf_{42}-$Al_{9;}$ Cu-$Hf_{42.5}$-$Al_{7.5}$) mester ötvözetek készültek nagy tisztaságú szín fémekből ívfényes olvasztással Ar védőgáz és Ti getter alkalmazása mellett. A mesterötvözet pogácsák a vákumrendszerrel ellátott centrifugál öntőberendezésben lettek leöntve ék alakú öntőformába. A korábban alkalmazott amorf karbon tégely szennyezését elkerülendő, az indukciós melegítésnél kvarctégelyt alkalmaztak. Az ék alakú próbák ismét ~ 1 mm vastagságig lettek amorf szerkezetűek. A további termodinamikai vizsgálatok még folynak.

A kutatócsoport 2009-ben folytatta a sikeres őrlési kísérleteket. A $Cu_{58}Zr_{42}$ kristályos mesterötvözetet aprították, majd golyós malomban őrölték, hogy amorf port állítsanak elő. Az amorf por előállításával céljuk az volt, hogy porkohászati úton tömbi amorf fémet hozzanak létre. A porok préselését és szinterelését a kutatócsoport a lengyel AGH University of Science and Technology, Krakkó intézettel közreműködésben végezte el. A préselést követően amorf szerkezetű, kompakt darabokat kaptak. A szinterelést 460-506 °C tartományban több különböző hőmérsékleten is elvégezték. Ezek mindegyike azonban túl magasnak bizonyult, a darabok kristályosak lettek. Az őrlési kísérletek másik iránya volt a két órán túli őrlés hatásának vizsgálata. 3,5 órás őrlést követően a por 100 százalékban amorf szerkezetű. 23 óra elteltével már megjelentek kristályos fázisnak megfelelő intenzitás csúcsok. A száraz őrlés mellett nedves őrlési kísérleteket is végeztek. Összehasonlítva az azonos őrlési időhöz tartozó

száraz és nedves őrlés eredményeit, megállapították, hogy az amorf hányad értéke jelentősen kisebb nedves őrlés esetén.
A Cu-Zr-Ni ötvözetcsaládban $Cu_{47}Zr_{43}Ni_{10}$ és $Cu_{50}Zr_{30}Ni_{10}$ mesterötvözetek lapokká való leöntése után lézersugaras felületkezelése történt folyamatos üzemmódú Nd:YAG lézer segítségével különféle paraméterekkel. A létrehozott rétegek szerkezetének a vizsgálata során röntgendiffrakciós módszert, pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatokat, mikrokeménység mérést alkalmaztak. Megállapították, hogy 2 kW és 120 mm/s kezelési idő alkalmazása esetén a felületi réteg részlegesen amorf volt.

Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre (finanszírozó ESA)
Állandó mintamozgatási sebesség mellett a kristályosítási front mozgási sebessége a minta hossza mentén növekszik. Kifejlesztettek egy olyan kristályosítási módszert (a mintamozgatási sebesség – idő függvény módosításával), amelynek segítségével a kristályosítási front mozgási sebessége a minta hossza mentén állandó értékre beállítható.
Az előző évben javasoltak egy olyan eljárást, melynél felmerült az a kérdés, hogy a tranziens jelenségek milyen mértékben zavarják a kísérletek kiértékelhetőségét. Ennek eldöntése érdekében vizsgálták a mágneses keverés indításánál és leállásánál a kristályosodott szövetszerkezetben bekövetkező tranziens jelenségeket. Megállapították, hogy B<20 mT mágneses indukcióval végzett kísérleteknél a tranziens hosszak nem befolyásolják az egy mintán belüli egymástól független kristályosításokat. Javaslatukat a külföldi partner elfogadta. A kutatási eredményekről nemzetközi konferencián számoltak be.

Nemesíthető rézötvözetek tulajdonságainak vizsgálata a hőkezelés függvényében
A Cég megbízása alapján Cu-6.24w%Ni-1.84w%Si-0.62w%Cr összetételű ötvözeten végeztek vizsgálatokat. A próbákat különböző hőmérsékleteken hőkezelt formában kapta a kutatócsoport, amelyeken keménység mérést, elektromos vezetőképességet, DSC (Differencial Scanning Calorimeter) mérést, mikroszkópos szövetvizsgálatokat, röntgenes fázisanalízist, pásztázó és átvilágításos elektronmikroszkópos vizsgálatokat végeztek. A vizsgálatok során saját hőkezelést is végeztek.
A mérési eredményekről a titoktartási szerződés miatt nem adhat információt a kutatócsoport.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Bay Zoltán Anyagtudományi és Technológia Intézet (BAY-ATI),
Bay Zoltán Nanotechnológia Kutatóintézet (BAY-NANO), Schmeltzmetal Kft.,
AGH University of Science and Technology, Krakkó
Prof. Dr. Y. Fautrelle- MADYLAM, Grenoble, Prof. Dr. L. Ratke- DLR, Cologne,
Dr. G. Zimmermann -ACCESS e.V., Aachen, Prof R.Scheller-Bergakademie, Freiberg

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Magyar Űrkutatási Iroda, Schmeltzmetal Kft, TU Bergakademie.

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

1. K. Tomolya, D. Janovszky, M. Sveda, N. Hegman, J. Solyom, A. Roosz: CuZrAl amorphous alloys prepared by castin and milling JOURNAL OF PHYSICS CONF. SER 144: 012032- p. (2009)
2. D. Janovszky, K. Tomolya. M. Sveda, J. Solyom, A. Roosz: New bulk glassy alloys in Cu-Zr-Ag ternary system prepared by casting and milling JOURNAL OF PHYSICS CONF. SER 144: 012033- p. (2009)
3. Rontó V, Nagy E, Svéda M, Roósz A, Tranta F:Structural and thermal properties of Cu-Hf-Ti bulk amorphous alloys, JOURNAL OF PHYSICS Conference Series 144: 012054 (2009)
4. Nagy E, Rontó V, Sólyom J, Roósz A: Investigation of new type Cu-Hf-Al bulk glassy alloys, JOURNAL OF PHYSICS Conference Series 144: 012035 (2009)
5. J.Kovács, A. Rónaföldi, A. Roósz: Unidirectional Solidification of Binary and Ternary Aluminum Alloys in a Rotating Magnetic Field, Proceedings of the 6th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials (EPM), Dresden, Germany, October 19-23, 2009., pp. 664-667., published by Forschungszentrum Dresden-Rossendorf, ISBN978-3-936104-65-3
6. Rónaföldi, J. Kovács, A. Roósz: Investigation of Transient Phenomena Generated by the on- and off Switching of a Rotating Magnetic Field in case of the Unidirectional Solidification of Aluminum Alloy, Proceedings of the 6th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials (EPM), Dresden, Germany, October 19-23, 2009., pp. 628-631., published by Forschungszentrum Dresden-Rossendorf, ISBN978-3-936104-65-3
7. András Roósz, Arnold Rónaföldi, Jenő Kovács, Zsolt Veres*:* Effect of a rotating magnetic field on the unidirectionally solidified structure of the eutectic Al7.5Ni alloy, Proceedings of the 6th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials (EPM*)*, Dresden, Germany, October 19-23, 2009., pp. 620-623., published by Forschungszentrum Dresden-Rossendorf, ISBN978-3-936104-65-3

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ME Anyagtudományi Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	9			Ebből kutató[2]:			7
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							10
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							10
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			2
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	0,178			összes hivatkozás száma[7]:			45
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							43
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	3			poszterek száma[12]:			2
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			2
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2			Diplomamunkát(BSc):			0
Diplomamunkát(MSc):	2			PhD-t:			0
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							308
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						26,2	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1			Teljes saját bevétel[18]:		7	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						3	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						4	MFt

ME MŰSZAKI FÖLDTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Lakatos István, az MTA levelező tagja
3515 Miskolc-Egyetemváros, Pf. 2.
Telefon: (46) 565-255, Fax: (46) 363-349
e-mail: lakatos@akki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A Műszaki Földtudományi Kutatócsoport elsődleges feladata olyan termelési és ehhez kapcsolódó geotechnikai eljárások elméleti megalapozása, amely lehetővé teszi a természeti erőforrásokkal történő nagy hatásfokú, gazdaságos és környezetbarát gazdálkodást, az importfüggőség csökkentését és az ellátottság nemzetgazdaság szintű javítását. Metodikai szempontból a tervezett kutatási projektek egységet képeznek a különböző tudományágak, így a geofizika, a bányászati tudományok, a kémiai tudományok, környezettudomány stb. hozzájárulása mellett. A kutatócsoport K+F tevékenységének súlypontját az alábbiak képezték:

– természeti erőforrások feltárását, támogatását célzó geofizikai kutatások;
– geotechnikai módszerek és integrált technológiák fejlesztése;
– konvencionális és nem konvencionális szénhidrogének hatékony kitermelését biztosító eljárások megalapozó kutatások.

A kutatás-fejlesztés súlypontját 2009-ben olyan új technológiák megalapozása képezte, amelyek lehetővé teszik a megkutatott földtani vagyon, elsősorban földgáz és kőolaj kitermelési hatékonyságának növelését, továbbá az erőműi füstgázból történő CO_2 leválasztását és geológiai formációkban történő elhelyezését.

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

A 2009. év alapkutatási tevékenységet a nem konvencionális gáztárolók (BCGA, Basin Concentrated Gas Accumulation) szerkezeti, felületkémiai és kapilláris tulajdonságainak feltárása képezte. A kutatásnak különös, nemzetgazdasági szempontból kiemelkedő jelentőséget adott az a tény, hogy a közelmúltban nagy szénhidrogénvagyont valószínűsítettek a dél-, illetve közép-magyarországi régióban. A laboratóriumi vizsgálatok mindenek előtt rámutattak arra, hogy a nagy mélységből (3000–6500 m) származó kőzetmagok átlagos pórusmérete, illetve pórusméret-eloszlása a nanométeres tartományba esik, és részben ennek következményeként a pórusos/repedezett rendszer áteresztőképessége a szokványos gáztárolóknál érvényestől két-három nagyságrenddel kisebb, lényegében a μD tartományba esik. Egyértelmű megállapítást nyert továbbá, hogy a kőzetek erősen víznedves felületi karakterrel rendelkeznek, a mért peremszögek közelítik az abszolút víznedves állapotot jelentő zérus értéket. Az előbbi adatok alapján számítható kritikus kapilláris nyomás nagyon széles tartományt fog át, azonban az átlagérték elérheti a több száz bart is. Kimutatásra került továbbá, hogy a pórusméret-eloszlás alapján számítható kapilláris nyomás spektruma alkalmas annak előre jelzésére, hogy a vízzel telített kőzetből milyen kritikus nyomás (nyomás-gradiens) mellett csapolható le a telítő fluidum.

A kapott eredmények alapján bizonyíthatóvá vált, hogy a natív kőzet feltehetően nagy (70–80%-os) víztelítettséggel rendelkezik, illetve a szokványos megcsapolási feltételek mellett ez a víztelítettség nem változik, ezért a tárolt gáz csak igen kis hozammal termelhető ki.

A tároló-rendszerben uralkodó, a szokványostól nagymértékben eltérő kapilláris erők okozta víztelítettség döntően befolyásolja a tárolt gáz mennyiségét, a rendelkezésre álló vagyont és a kitermelési hatékonyságot (a kitermelhető ipari készletet). Abban a különleges esetben, ha a tároló kialakulásának hosszú (több millió évet átfogó) ideje alatt nem érintkezett vízzel, a tároló megnyitása (fúrás, kútkiképzés, repesztés, savazás, egyéb kútserkentés és tisztítás) folyamán kerülni kell a vízbázisú fluidumok, oldatok, diszperz rendszerek használatát, mert a nagy kapilláris erők miatt a víz nem korrigálható rétegkárosodást okoz. A rendkívül tömött, kis áteresztő-képességű tárolók feltárása, termelésbe állítása és folyamatos termelése új elvi és gyakorlati megközelítést, paradigmát igényel, és a felmerülő műszaki problémák megoldása további, vertikálisan mély, horizontálisan széles alap- és alkalmazott kutatást tesz szükségessé.

A mélyfúrási geofizikai adatok feldolgozására kidolgozott intervallum inverziós eljárás lehetővé tette az inverz feladat túlhatározottsági fokának nagyságrendi növelését. Az inverziós változók számának növelése, a réteghatárok inverzión belül történő meghatározása, a petrofizikai paraméterek pontosabb meghatározása biztosította a bonyolultabb földtani szerkezetek vizsgálatát. Ezzel párhuzamosan a Fourier transzformációt inverziós feladatként értelmezve, a zajokkal szemben rezisztens viselkedést biztosító módszer kidolgozására került sor. Az eljárás alapja a komplex spektrum sorfejtéses diszkretizációja, amelynek együtthatói túlhatározott inverz feladat keretében lettek meghatározva. Az új módszer alkalmazhatóságát a Hermit függvényrendszerrel diszkretizált frekvenciaspektrum meghatározására szolgáló inverziós Fourier transzformáció két algoritmusán keresztül bizonyították. Az intervallum inverziós eljárás jelentősége abban áll, hogy a paraméterek a mérési adatrendszerből állíthatók elő, míg a jelenleg szokásos eljárás ezeket a laboratóriumi mérések alapján (általában egy kiterjedt zónára vonatkozóan) korlátozott érvényességgel adja meg.

Az erőműi füstgázokban jelenlévő CO_2 geológiai formációkba történő elhelyezésének kritikai értékelése számos vonatkozásban a médiákban közölt információkkal ellentétes következtetésekhez vezetett. Többek között megállapítást nyert, hogy a leválasztás hatékonysága a felhasznált tüzelőanyagtól és az erőmű technológiájától nagymértékben függ. Általában jellemző, hogy a befogás 10–15%-kal csökkenti a termikus hatásfokot, ami a szállítási és elhelyezési költségeket is figyelembe véve 14–28%-os kumulatív hatásfok csökkenést jelent. Az áramtermelés költségét tekintve előre jelezhető, hogy csak a leválasztás 40–90%-kal növelheti a termelői árat. Lignitre, illetve szénre alapozott áramtermelés esetén a jelenleg becsülhető 9–14 Ft/kWh önköltséget tehát a CO_2 leválasztás és elhelyezés 80–100%-kal növeli meg, ami társadalmilag elfogadhatatlan. A kiutat az állami/központi, esetleg nemzetközi (EU) támogatás jelentheti, amire azonban a közeljövőben nem lehet számítani.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Az Olajkémiai Kutatóintézettel, Orosz Tudományos Akadémia Szibériai Szekció, Tomszk, Oroszország „Intelligens kémiai rendszerekre alapozott kőolajtermelési módszerek alap és alkalmazott kutatása” című témában az MTA-RAS együttműködés keretében.

A Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar tanszékeivel a földtudomány és a bányászati tudományok területén valamennyi kutatott témakörben.

A MOL Nyrt. Upstream divízióval a kihozatali hatásfok növelését célzó elárasztási és rétegkezelési technológiák kidolgozása.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

„Metastabilis mikroemulziók alkalmazására épülő rétegkezelési eljárások elméleti megalapozása" című, 48715 számú OTKA téma 2009-ben fejeződött be, és elkészült a zárójelentés.

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

1. Lakatos I. (ed.): Recent Innovations in Oil and Gas Recovery, Progress in Oilfield Chemistry, Vol. 8., p. 300, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2009, ISBN 978 963 05 8719 8
2. Lakatos I., Lakatos-Szabó J., Bódi T., Vágó Á.: Restriction of Water Production in Gas Wells Using Water Sensitive Microemulsions, Proceedings of 15th European Symposium on Improved Oil Recovery, European Association Geoscientists and Engineering, CD, Paris, France, 27-29 April (2009), ISBN 978-90-73781-60-3
3. Lakatos I., Bódi T., Lakatos-Szabó J.: Water Induced Formation Damage in Unconventional Gas Reservoirs, Soc. Pet. Eng. (USA) Paper 121944 (2009), New Technologies for Conventional and Unconventional Reservoirs, Proceedings of SPE 8th European Formation Damage Conference, Scheveningen, The Netherlands, 27-29 May (2009), ISBN 978-1-55563-245-8
4. Lakatos I., Lakatos-Szabó J.: Role of Conventional and Unconventional Hydrocarbons in the 21st Century: Comparison of Resources, Reserves, Recovery Factors and Technologies, Soc. Pet. Eng. (USA) Papers 121775 (2009), SPE EUROPEC/EAGE Annual Conference and Exhibition, Amsterdam, The Netherlands, 8-11 June (2009), ISBN 978-90-73781-67-2
5. Kovács F: Az erőműi füstgázokból történő széndioxid leválasztás műszaki-gazdasági jellemzői, Magyar Energetika, 17(1): 26-35 (2009)
6. Dobroka M., Szabó N., Cardarelli, E., Vass P.: 2D inversion of Borehole Logging Data for Simultaneous Determination of Rockinterfaces and petrophysical Parameters, Acta Geodetica et Geophysica Hungarica 44(4): 459-479, ISSN 1217-8977

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	2			Ebből kutató[2]:			2
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							25
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							25
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			0
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	5			idegen nyelven:			1
összesített impakt faktor[6]:	0			összes hivatkozás száma[7]:			41
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							41
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet:	3			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	15	poszterek száma[12]:					0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	6	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							6
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát(BSc):					7
Diplomamunkát(MSc):	3	PhD-t:					4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							1100
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						12,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:				0	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

MTA–MTM PALEONTOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

Vörös Attila, az MTA levelező tagja
1083 Budapest, Ludovika tér 2.
1431 Budapest, Pf. 137;
Telefon: 210-1075, 338-3905; Fax: 338-2728
e-mail: voros@nhmus.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A 2003-ban indult kutatócsoport hosszú távú feladata alapkutatások végzése a bioszféra nagy változásainak elemzése céljából. A beszámolási év fő feladatai voltak:

- Középső-triász Ammonoidea fauna monografikus feldolgozásának megkezdése.
- -Radiolaria taxonok elterjedésének vizsgálata a triász/jura határintervallumban.
- Pliensbachi-toarci ammonitesz zónák időtartamának radiometrikus kalibrálása.
- Computer tomográf segítségével a meglévő Archosauria koponyák agyüregének összehasonlító vizsgálata, Microware szoftver segítségével fogkopás vizsgálatok.
- Paleogenetikai vizsgálatok elvégzése az erdélyi és magyar üledékszelvényekből kipreparált fosszilis *Picea abies* és *Carpinus betulus* polleneken.

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

Újonnan gyűjtött, diagnosztikus ammonoideák (Chieseiceras, Eoprotrachyceras) alapján kimutatták a ladin emelet bázisát (Curionii Zóna) a felsőörsi szelvényben.

Több balatonfelvidéki középső-triász szelvény (Felsőörs, Litér, Vászoly, Nemesvámos, Mencshely, Nosztori-völgy) ostracoda faunájának feldolgozását kezdték meg. Az év során 41 faj részletes taxonómiai leírása és ábrázolása (SEM felvételekkel) készült el.

Folytatták a páratlan gazdagságú és megtartású karni (késő triász) radiolária faunát szolgáltató törökországi lelőhely új fajainak taxonómiai leírását; 2 új genust, 27 új fajt és 10 új alfajt írtak le a törökországi Mersin Melange alsó tuval (karni) korú radiolária faunájából.

Kimutatták, hogy a mezozoós brachiopodák diverzitásának és díszítettségének változásai a tengeri ragadozók felvirágzásának függvényében értelmezhető. A rhynchonellidák a jura közepéig fokozták díszítettségük erősségét; ezután diverzitásuk csökkent. A terebratulidák (más védelmi mechanizmusok kifejlesztése mellett) egyre díszítettebbekké váltak ami máig tartó evolúciós sikerük oka lehet.

Befejezték a bakonyi pliensbachi brachiopoda faunát tárgyaló rendszertani monográfiát, mely 38 genusz és 95 faj (közülük 5 új genusz és 7 új faj) leírását tartalmazza, és megjelent 2009-ben, a Geologica Hungarica, Series Palaeontologica 58. köteteként, 300 oldal terjedelemben.

Folytatták az Alsórákos melletti lelőhelyről származó kora jura ammonitesz fauna biosztratigráfia feldolgozását, a kismonográfia kézirata 80%-ban kész.

Felismerték, hogy a Villányi-hegység késő-triász és kora-jura üledékciklusai (paraszekvenciák) kisebb félárok-rendszerekben rakódtak le, melyekben az üledék felhalmozódásának szakaszosságát ismétlődő transzpressziós-transztenziós tektonikai epizódok szabták meg.

A neotethysi ofiolit öv északi (Darnó-hegy) és déli (Pindos hegység) területein végzett radiolária vizsgálatok alapján pontosították a óceán felnyilási dátumát (anisusi) és először igazolták biosztratigráfiai koradatokkal a bazaltok korát.

A Bükk és a Rudabányai-hegység jura képződményeinek (Mónosbéli egység, Telekesvölgyi komplexum) korát pontosították a legújabb radiolária vizsgálati eredményekkel.

A Hárskút melletti alsó kréta szelvényben kimutatták a Weissert-eseményként értelmezhető pozitív szénizotóp-anomáliát és elvégezték az integrált rétegtani feldolgozást.
Az Iharkúton végzett gyűjtések eredményeként kb. 500 új késő-kréta gerinces lelet került elő. Ennek a munkának a legjelentősebb eredménye többek között egy új dinoszaurusz csoport (Ceratopsia) felfedezése, mely elsőként Iharkútról került elő Európában.
Tisztázták egyes korai Pterosauriak táplálkozással kapcsolatos anatómiai jegyeinek evolúcióját.
Mikropaleontológiai és izotópos mintagyűjtést végeztek erdélyi és magyarországi eocén/oligocén lelőhelyeken, illetve fúrások magmintáiból. Megkezdték a foraminiferák iszapolásos leválasztását és válogatását.
Befejeződött a dobai pannóniai korú lelőhely otolithjainak feldolgozása. A lelőhely fosszilis puhatestű-faunájával együttes értékelés eredményeiről dolgozat készült.
Elkészült a Magyar Természettudományi Múzeum Őslénytani és Földtani Tárának gyűjteményében fellelhető otolithok feldolgozása.
A lucfenyő refúgium szerepének és holocén populációgenetikájának vizsgálata során fosszilis és modern DNS minták analízisével kimutatták, (1) hogy a 11000 éves pollenek és tobozok olyan kloroplaszt szekvenciákat hordoznak, melyek egy része már nem fordul elő a mai populációban; (2) hogy a lucfenyőnek a hegységben több kisebb refúgiuma volt az utolsó eljegesedés maximumán (nunatak); a többszörös populációnövekedés és csökkenés a genetikai sodródás révén ritka allélek eltűnéséhez vezetett, a mai populáció nem közvetlen leszármazottja a refúgiumpopulációnak.
Vizsgálták a későglaciális és kora-holocén gyors felmelegedési hullámokra adott ökoszisztéma válaszreakciókat a Déli-Kárpátokban. A kvantitatív klímarekonstrukció segítségével kimutatták, hogy a regionális vegetációs válasz késleltetés nélküli: a grönlandi oxigén-izotóp által jelzett felmelegedések idejével egyidőben (14500 és 11550.cal BP) történt. A lokális tavi produkció és talajképződés 200-300 éves késleltetéssel reagált a felmelegedésre; lehetséges ok: a jégtakaró hűtő hatása. Az erdőhatár azonnal reagált a felmelegedésre (a lucfenyő már a későglaciálisban elérte az alpin zónát).

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet játszanak a hazai őslénytani tudományos közéletben, mint a Magyarhoni Földtani Társulat Őslénytani-Rétegtani Szakosztályának elnöke és vezetőségi tagja. A kutatócsoport vezetője az MTA Földtudományok Osztálya elnökhelyettese, a Magyarhoni Földtani Társulat társelnöke, hazai szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja, valamint a Nemzetközi Triász Rétegtani Albizottság szavazati jogú tagja. A kutatócsoport egy tagja az OTKA Földtudomány I. Zsűri elnöke, hazai és nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja, valamint a Nemzetközi Jura Rétegtani Albizottság elnöke.

A kutatócsoport tagjai speciális kollégium és doktori kurzus tartásával vállalnak részt az ELTE TTK, valamint a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem geológus képzésében.

A kutatómunka során aktív nemzetközi együttműködés folyik amerikai, angol, francia, svájci, német, romániai, kanadai és argentín kutatókkal.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

OTKA K72633: „ A mezozoós geológiai időskála egyes részeinek pontosabb kalibrálása és alkalmazása bioszféra-történeti kutatásokban”

OTKA F048341: „Magyarországi triász és jura radiolária közösségek taxonómiai és biosztratigráfiai vizsgálata, valamint alkalmazása globális paleo-oceanográfiai modellezésben” (lezárult)

OTKA PD73021: „A magyarországi késő-kréta Archosauria fauna vizsgálata”

OTKA PD73234: „A holocén klíma- és környezet nagyfelbontású, multi-proxi rekonstrukciója a Kárpáti-régióban: a vegetáció válaszreakciója a koraholocén felmelegedési hullámokra magashegységi és alföldi környezetben”

MERG-CT-2006-041088: Marie Curie Reintegration Grant.

NKTH TéT (2009-2010): „A magyarországi és dél-franciaországi késő-kréta kontinentális gerinces lelőhelyek összehasonlítása: következtetések a késő-kréta Mediterráneum szárazföldi paleobiogeográfiai helyzetét illetően”

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

1. Buczkó K., Magyari E. K., Bitušík P. & Wacnik A. (2009): Review of dated Late Quaternary palaeolimnological records in the Carpathian Region, east-central Europe. – *Hydrobiologia* 631:3-28.
2. Chapman, J. C., Magyari, E. K. & Gaydarska, B. (2009): Contrasting subsistence strategies in the Early Iron Age? – New results from the Alföld Plain, Hungary, and the Thracian Plain, Bulgaria. – *Oxford Journal of Archaeology* 28(2): 155-187.
3. Cornée, J.-J., Moissette, P., Saint Martin, J.-P., Kázmér, M., Tóth, E., Görög, Á., Dulai, A. & Müller, P. (2009): Marine carbonate systems in the Sarmatian (Middle Miocene) of the Central Paratethys: the Zsámbék Basin of Hungary. – *Sedimentology* 56(6): 1728-1750.
4. Götz, A., Ruckwied, K., Pálfy, J. and Haas, J. (2009): Palynological evidence of synchronous changes within the terrestrial and marine realm at the Triassic/Jurassic boundary (Csővár section, Hungary). – *Review of Palaeobotany and Palynology*, 156: (3-4): 401-409.
5. Kocsis, L., Ősi, A., Vennemann, T., Trueman, C. N. & Palmer, M. R. (2009): Geochemical study of vertebrate fossils from the Upper Cretaceous (Santonian) Csehbánya Formation (Hungary): Evidence for a freshwater habitat of mosasaurs. – *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology* 280: 532-542.
6. Kozur, H., Moix, P. & Ozsvárt, P. (2009): Additional new Spumellaria (Radiolaria) from the Spongotortilispinus moixi Zone of the Huğlu Unit in the Mersin Mélange (southeastern Turkey), with some remarks on the age of this fauna. – *Jahrbuch der Geologischen Bundesanstalt* 149(1): 25-59.
7. Kövér, S., Haas, J., Ozsvárt, P., Görög, Á., Götz, A. & Józsa, S. (2009): Lithofacies and age data of the Uppermost Triassic - Jurassic foreslope and basin sediments of Rudabánya Hills, NE Hungary. – *Geologica Carpathica* 60: 351-379.

8. Magyari, E. K., Buczkó, K., Jakab, G., Braun, M., Pál, Z., Karátson, D. (2009): Palaeolimnology of the last crater lake in the Eastern Carpathian Mountains - a multiproxy study of Holocene hydrological changes. – *Hydrobiologia* 631: 29-63.
9. Ősi, A. & Makádi, L. (2009): New remains of Hungarosaurus tormai (Ankylosauria, Dinosauria) from the Upper Cretaceous of Hungary: skeletal reconstruction and body mass estimation. – *Paläontologische Zeitschrift* 83:
10. Ősi, A. & Prondvai, E. (2009): Forgotten pterosaurs in Hungarian collections: first description of Rhamphorhynchus and Pterodactylus specimens. – *Neues Jahrbuch für Geologie und Paleontologie* 252(2): 167-180.
11. Ősi, A. & Weishampel, D. B. (2009): Jaw mechanism and dental function in the Late Cretaceous basal eusuchian Iharkutosuchus. – *Journal of Morphology* 270(8): 903–920.
12. Vörös, A. (2009): The Pliensbachian brachiopods of the Bakony Mountains (Hungary). – *Geologica Hungarica, Series Palaeontologica* 58: 300 pp.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-MTM Paleontológiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	5		Ebből kutató[2]:		5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora: 1	levelező tag:	0	rendes tag: 0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:					2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:					20
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:					19
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:		9
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1		idegen nyelven:		4
összesített impakt faktor[6]:	12,19		összes hivatkozás száma[7]:		104
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:					101
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 1		jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	1	könyvfejezet: 2		jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0		rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	14	poszterek száma[12]:			5
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:					0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:					5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0	Diplomamunkát(BSc):			1
Diplomamunkát(MSc):	0	PhD-t:			0
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:					50
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:					21,1 MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:			13,8 MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:					0 MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					13 MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0 MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0,8 MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]					0 MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0 MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0 MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0 MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:					0 MFt

PE LEVEGŐKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Gelencsér András, az MTA doktora
8200 Veszprém, Egyetem. u. 10.
Telefon: (88) 624-368, Fax: (88) 624-454
e-mail: gelencs@almos.uni-pannon.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A légköri szerves aeroszol képződésének vizsgálata, különös tekintettel a másodlagos aeroszolképződésre; a légköri aeroszol forrásainak azonosítására alkalmas szerves vegyületek vizsgálata; adatszolgáltatás nemzetközi adatbázisba a légköri aeroszol fizikai tulajdonságairól; a látótávolság és az aeroszol optikai tulajdonságai közötti kapcsolat vizsgálata mérésekkel és modellszámításokkal; Budapesten a téli szmogriadó időszakában és más magas légszennyezettségű időszakokban szabványos módszerekkel gyűjtött PM10 aeroszol forrásainak meghatározása; ^{14}C izotóp gyakoriságának meghatározása nemzetközi együttműködés keretében a fosszilis és modern (biomassza égetés) aeroszolbeli arányának meghatározás céljából.

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

2009-ben folytatódott a biogén eredetű illékony szerves vegyületek (terpének) oxidációjának és a másodlagos szerves aeroszol keletkezésének vizsgálata. A 2008-ban végrehajtott kamrakísérletek során gyűjtött minták folyadékkromatográfiás-tömegspektrometriás vizsgálatára került sor. Elektrospray ionizáció alkalmazásával, negatív üzemmódban számos ismert oxidációs termék (savak) ionját kimutatták. Ezen ionok mellett azonban az m/z 300-800 tartományban periodikus jeleket detektáltak. A tömegspektrum jellege, az ionok tartománya, továbbá az oxidációs termékek UV és fluoreszcenciás spektruma a légköri aeroszolból izolált humusszerű vegyületekére hasonlított. Ezek alapján valószínűsíthető, hogy a növényzet által kibocsátott terpének egy része a légkörben oxidálódva humusszerű vegyületekké alakul. A folyadékkromatográfiás elválasztást légköri nyomású kémiai ionizációval kombinálva, pozitív üzemmódban számos kevésbé poláris vegyületet (aldehidek, ketonok) detektáltak, amelyek tömegspektrumait is rögzítették. Ezen vegyületeket korábban a szakirodalomban nem említették. Bár az alkalmazott tömegspektrométer felbontása nem volt elegendően nagy ahhoz, hogy az oxidációs termékek összegképletét meghatározzák, a tömegspektrumok összehasonlítási alapként szolgálhatnak további vizsgálatokhoz.

A légköri aeroszol részecskék optikai tulajdonságait szennyező forrásoktól távoli, ún. háttér- és városi levegőben vizsgálták. Háttérlevegőben meghatározták az aeroszol részecskék törésmutatójának méret szerinti változását. Kimutatták, hogy az aeroszol törésmutatójának valós és képzetes része, amely a kémiai összetétel függvénye, a részecskenagysággal változik. Modellszámításokkal kimutatták, hogy a törésmutató méret szerinti eloszlásának figyelembe vétele rendre 4%-os növekedést, illetve 37%-os csökkenést okoz az aeroszol szórási és elnyelési együtthatójában. Városi környezetben tanulmányozták a látótávolságból számolt és a mért extinkciós együtthatók közötti kapcsolatot. Kimutatták, hogy e két paraméter között statisztikailag szignifikáns, lineáris összefüggés mutatható ki, amely lehetővé teheti az aeroszol részecskék extinkciós együtthatójának becslését a látótávolság adatok alapján. Megállapították, hogy a PM10 tömegkoncentráció és a fénygyengítési együtthatók között is

statisztikailag szignifikáns, lineáris kapcsolat áll fenn, valamint, hogy a PM10 koncentráció a részecskék kémiai összetétele alapján rekonstruálható. Ily módon az extinkciós együttható a kémiai összetétel ismeretében becsülhető.

A kutatások során mintavételi edényt terveztek a globálisan elterjedt mikroszkopikus gombafajok által emittált vegyületek mintavételezése céljából. Gázkromatográfia-tömegspektrometria módszerével megállapították a gombafajok által jellemzően emittált mono- és szeszkviterpének retenciós viselkedését, felvették az egyes komponensek analitikai mérőgörbéjét. Szilárd fázisú mikroextrakciós módszert dolgoztak ki a vizsgált komponensek veszteségmentes mintavételezéséhez.

Ezen kívül a kutatócsoport tagjai folytatták a légköri aeroszol forrásainak azonosítására alkalmas szerves vegyületek vizsgálatát. Ezeket a mennyiségi elemzéseket gázkromatográfhoz kapcsolt tömegspektrométer segítségével végezték, a vizsgálatokhoz különböző környezetben gyűjtött mintákat használtak.

Európai uniós kutatási projektben vállalt kötelezettségüknek megfelelően a K-pusztán kialakított monitoring rendszerrel folyamatos adatszolgáltatást végeztek a légköri aeroszol fizikai jellemzőiről (méreteloszlás), optikai tulajdonságairól (fényszórás, fényelnyelés) és széntartalmáról. Részt vettek az EMEP (European Monitoring and Evaluating Programme) által szervezett nemzetközi mintavételi kampányban és az ahhoz kapcsolódó elemzésekben.

A kutatási eredmények hozzájárulnak a légköri aeroszol részecskék közvetlen éghajlati hatásának meghatározásához. Részben pontosítják a modellszámítások eredményeit, másrészt a régóta, sok helyen mért meteorológiai (látótávolság) adatok felhasználhatóvá válnak az aeroszol éghajlati hatásának vizsgálatában. A kutatások finanszírozása gyakorlatilag teljes mértékben pályázati forrásokból történt, a kutatásokban a kutatócsoport tagjain kívül PhD hallgatók és témán foglalkoztatott további munkatársak is részt vettek.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Légkörtan, Levegőkémia és Környezeti megfigyelési rendszerek c. tárgyak oktatása a Pannon Egyetemen. Részvétel a „Kémiai és Környezettudományok Doktori Iskola” munkájában: TDK, PhD témavezetés. 2009-ben három hallgató szerzett PhD fokozatot.

Az Európai Uniós projektek keretein belül együttműködés alakult ki az alábbi intézetekkel: University of Helsinki; The French National Center for Scientific Research; Leibniz-Institute for Tropospheric Research; Institute of Atmospheric Sciences and Climate, Forschungszentrum Jülich GmbH; University of Copenhagen; University of Manchester; University of Aveiro; CNR-ISAC, Bologna. Továbbá, kétoldalú kormányközi kutatási szerződés keretében közös kutatást indítottak a zágrábi Ruder Boskovic Intézettel.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

Résztvevői az FP6 IP- 036833-2 „European Integrated project on Aerosol Cloud Climate and Air Quality interactions” pályázatnak, amelynek keretében aeroszolkémiai elemzések, valamint az FP6 RII3-026140 „European Super-sites for Atmospheric Aerosol Research”

pályázatnak, ahol az aeroszol mintavételi és mérési infrastruktúra fejlesztése, harmonizálása a feladatuk. Résztvevői „A környezeti levegő aeroszol-szennyezettségére vonatkozó új EU szabályozás betartását elősegítő műszerek és mérési eljárások fejlesztése" című AEROS_EU OM-00218/2007 Jedlik Ányos pályázatnak is.

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

1. Benkő, D., A. Molnár, K. Imre, Study on the size dependence of complex refractive index of atmospheric aerosol particles over Central Europe, *Időjárás*, 2009, 113, 157-175.
2. Fors, E. O., J. Rissler, A. Massling, B. Svenningsson, M. O. Andreae, U. Dusek et al., (9 A. Hoffer, G. Kiss), Hygroscopic properties of Amazonian biomass burning and European background HULIS and investigation of their effects on surface tension with two models linking H-TDMA to CCNC data *Atmos. Chem. Phys. Discuss*., 2009, 9, 26925-26967.
3. Gelencsér, A., B. May, D. Simpson, A. Sanchez-Ochoa, A. Kasper-Giebl, H. Puxbaum, et. al. (2) Major sources of PM2.5 organic aerosols in Europe: Predominance of biomass burning and secondary organic aerosols (SOA) *Geochim. Cosmochim. Acta*, 2009, 73, A425-A425
4. Lukács, H, A. Gelencsér, A. Hoffer, G. Kiss, K. Horváth, Z. Hartyáni, Quantitative assessment of organosulfates in size-segregated rural fine aerosol *Atmos. Chem. Phys*., 2009, 9, 231-238.
5. Yli-Juuti T, I. Riipinen, P.P. Aalto, T. Nieminen, W. Maenhaut, I.A. Janssens et al. (6 Hoffer A) Characteristics of new particle formation events and cluster ions at K-puszta, Hungary *Boreal Environ. Res*., 2009, 14, 683-698.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-PE Levegőkémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	4			Ebből kutató[2]:			3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	2	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							0
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							0
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			2
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			3
összesített impakt faktor[6]:	6,547			összes hivatkozás száma[7]:			446
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							387
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	3			poszterek száma[12]:			4
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							4
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1			Diplomamunkát(BSc):			0
Diplomamunkát(MSc):	1			PhD-t:			4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							135
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						22,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		22,6	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						9,7	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						12,9	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

PPKE-SE NEUROBIOLÓGIAI ÉS INFOBIONIKAI PLASZTICITÁS KUTATÓCSOPORT

Roska Tamás, az MTA rendes tagja
1083 Budapest, Práter u. 50/a.,
Telefon: 886 4703; Fax: 886 4724
e-mail: roska@sztaki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Hogyan kapunk el egy felénk repülő labdát? Hogyan vesszük észre az ismerősünket a vasútállomáson várakozó tömegben? A kutatócsoport munkájának célja ilyen egyszerűnek tűnő, mégis mesterséges rendszerekben eddig nem megvalósított feladatok hátterét képező idegrendszeri folyamatok jellemzése, kvantitatív modellezése és ezen modellek implementációja robotvezérlési algoritmusokban. Kiemelt hangsúlyt kap a környezethez alkalmazkodni képes, plasztikus érzékelő és motoros funkciók idegrendszeri mechanizmusainak kutatása és ezek kvantitatív, neuromorf modellezése. A neurobiológiai kutatások állatmodelleken, valamint a legújabb funkcionális agyi képalkotó módszerek segítségével embereken történnek. A kutatócsoport sajátos területe az infobionika és a neurobiológiai plaszticitás. A kutatások a következő témacsoportok köré szerveződnek:

1. Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: az EEv2 bipedál robot. A cél egy olyan rendszer elkészítetése, ahol az emberi mozgás vizuális visszacsatolás mellett segíti a gépi járás vizsgálatát. Robottalpra szerelt 3D tapintás szenzorokkal kiegészítve a kidolgozott kísérleti eszközzel modellezhető a látás-tapintás-mozgás interakciók. Az optimalizált modell által nyert járási és mozgási mintázatok illesztése a bipedhez és a roboton történő kísérletek elvégzése. Taktilis, vizuális szenzorok fúziójának kidolgozása a stabilabb járás érdekében. A kidolgozott algoritmusok (immunválasz alapú és neuróbiológusokkal közösen tervezett algoritmusok) implementációja és kísérleti mérései.

2. A hippokampusz funkcionális modellje. A kutatás célja a különböző érzékelő modalitásokból érkező információ integrációjában, a hosszú távú memóriában és a térbeli navigációban alapvető szerepet játszó agykérgi terület, a hippokampusz (ezen belül elsőként a CA1 régió) legfontosabb idegsejt-típusainak részletes biofizikai modellezése valamint a hippokampális hálózati dinamika modellezése.

3. Szenzoros kérgi funkciók szerveződése. A kutatás célja az érzékelés alapjául szolgáló strukturális jellegzetességek vizsgálata főemlősök agykérgében. Továbbá cél a nagyskálájú kérgi hálózatok működésének megértése. Hálózatelemző módszerekkel történik a vizsgálata 1, az egyes kapcsolatokon és 2, az egyes áreákban lejátszódó lehetséges direkt és indirekt kölcsönhatásokat az áreák között az ismert kérgi hálózatokban.

4. A figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása. A kutatások célja a hatékony információkinyerést biztosító, a specifikus ingerkörnyezethez és az aktuális feladathoz alkalmazkodni képes, adaptív látási folyamatok perceptuális és neurális mechanizmusainak jellemzése és modellezése, különös tekintettel a lényegtelen vizuális információ figyelmi kiszűrése. A kutatások kiterjednek a fiatal felnőtt diszlexiások figyelmi funkcióinak vizsgálatára.

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

1. Mozgásmintázatok dinamikus modellezése és implementációja robotokon: a EEv2 bipedál robot. Sikeresen került alkalmazásra a flexor-extensor elv a robotláb izületi holtjátékának csökkentésére. A holtjáték pozíciós hibát és nem kívánt dinamikus jelenségeket okoz elektromos meghajtások esetén. A probléma kiküszöbölésére kidolgozott megoldásukat az emberi flexor-extensor mechanizmus inspirálta. Az alapötlet egy olyan ellentétes irányban

meghajtott léptetőmotor pár alkalmazása, ami analóg a flexor és extensor izmokkal. A szabályozott rendszert valós körülmények között tesztelték és méréseik megegyeznek szimulációs eredményekkel. Megvalósított rendszerükben két léptető motort rögzítettek egymással szembe egy köztes alumínium elem segítségével. A motorok tetején található a vezérlő elektronika a teljesítmény résszel és a motor szenzor egységgel. A motorok mellett az áttételház végénél elhelyeztek egy másik egységet, ami a áttétel utáni pozíciót mérő szenzoros egység. A két különálló motor összehangolásához egy harmadik egységet is használnak, a lokális vezérlő egységet, ami a két motor fölött található az alumínium profilra rögzítve. Ennek a lokális egységnek a feladata a két motorvezérlő egység összehangolása. Újszerű bioinspirált módszerrel a PM léptető motorokat és általánosságban használt, nem löttyenés mentes áttételeket felhasználva állítható mértékű löttyenés csökkentést sikerült elérni.

2. A hippokampusz funkcionális modellje. A legújabb kísérleti adatok arra utalnak, hogy a CA1 régióban legalább három, egymástól frekvenciában és jórészt időben is elkülönülő, eltérő mechanizmusú és funkciójú 25 Hz fölötti frekvenciájú ritmikus aktivitás figyelhető meg. A CA1-es hálózati modellben ezeknek az oszcillációknak a keletkezési feltételeit, valamint egymással és a lassabb théta oszcillációval való kölcsönhatásait vizsgálták. Kimutattá+-k, hogy a modell CA1 régió képes átvenni mind a CA3 régió által közvetített lassú, mind az entorhinális kéreg által közvetített gyors gamma oszcillációt. Sikerült létrehozni a hálózatban éles hullámhoz tartozó magas frekvenciájú "ripple" oszcillációt is, melynek keletkezésében a modellben a gyorstüzelő periszomatikus gátlósejtek hálózata játszotta a kulcsszerepet

3. Szenzoros kérgi funkciók szerveződése. Az általuk bevezetett és az agykérgi hálózatra alkalmazott konvergencia mérték, a *konvergencia fok* (CD) más hálózattípusokra is alkalmazásra került. Az eredmények azt mutatják, hogy a CD biológiai szignál transzdukciós és komputer operációs rendszerek hálózatainak funkcionálisan releváns leírására is alkalmas mérőszám. Továbbá a vizsgálat tárgyát képezte a kérgi hálózat robusztussága a CD érték alapján megkülönböztetett „forward” és „backward” kérgi összeköttetések szelektív kiütése során. A hálózat szintű plaszticitás jeleként kimutatatásra került, hogy az élkonvergencia és –divergencia átrendeződik a kiütések során. Folytatódott a funkcionális kérgi reprezentációk kapcsolatainak feltérképezése. Megállapításra került, hogy az área 3b intrinsic kapcsolatai az ujjak közötti interakciót támogatják a tapintás során, míg az area 3b interáreális kapcsolataira az 1, 2 és 3a areákkal a tapintási ingerek topografikus szegregációja jellemző.

4. A látás és vizuális figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása. Sikerült azonosítani és jellemezni az irreleváns vizuális mozgásinformáció kiszűréséért felelős neurális hálózatot. Elsőként sikerült bizonyítékot szolgáltatni arra, hogy gyakorlással fokozható a lényegtelen vizuális ingerek kiszűrésének hatékonysága. Továbbá, a felnőttkori diszlexia behatóbb, komplex idegtudományi vizsgálatát célul tűző projekt részfeladataként kidolgozásra került egy új számítógépes tesztcsomag, amely – a mérések eddigi eredményei, azaz a különböző tesztekben nyújtott teljesítmény adatok alapján – alkalmas diszlexiás és nem diszlexiás fiatal felnőttek megbízható elkülönítésére. Az *eredmények lehetséges klinikai és mérnöki alkalmazási területei:*

– Alapját képezhetik új, a specifikus figyelmi funkciók zavarainak korai és megbízható detektálására valamint azok kezelésére alkalmas terápiás eljárások kidolgozásának;
– Algoritmikus implementációjuk hozzájárulhat zajos környezetben is hatékony, ingerkörnyezetekhez adaptálódni képes mesterséges látórendszerek tervezéséhez.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai kapcsolatok: A kutatócsoport a PPKE Információs Technológiai Karán és a Semmelweis Egyetemen működik és a lokális együttműködések mellett az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézetének több csoportjával is együttműködik. A kutatócsoport további együttműködő partnerei: MR Kutatóközpont, Szentágothai János TJ- Semmelweis Egyetem; MTA-KFKI Részecske és Magfizikai Kutatóintézet, Biofizika, Budapest; MTA

Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet, Budapest; BME Kognitív Tudományi Tanszék, Budapest

Vállalati kapcsolatok: Richter Gedeon Zrt., Philips Medical Magyarország; A Tateyama és NVIDIA nemzetközi cégek eszköztámogatással segítették a kísérleti munkát. Varinex Kft. 3D prototípusgyártással technológiai segítséget adott a robotikai kísérletekhez és fejlesztésekhez.

A csoport munkájához 6 PhD hallgató és 12 egyetemi hallgató kapcsolódik. A diákok sikeres munkáját jól mutatja, hogy a 2009 évi OTDK-n 6 diákunk vett részt.

Nemzetközi kapcsolatok: 1. *Téma:* European Research Network for Investigating Human Sensorimotor Function in Health and Disease (ERNI-HSF). 2007-11; *Steering Committee Member: Vidnyánszky Zoltán; 2. Téma:* A szomatoszenzoros kérgi funkciók szerveződése, Roe A.W. Vanderbilt Univ, USA

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

1. OTKA NN79366 (2010-2013) Funkcionális taktilis kérgi reprezentációk huzalozása: kombinált „optical imaging" valamint fény- és elektronmikroszkópos pályajelöléses vizsgálatok a főemlősök szomatoszenzoros kérgében.
2. OTKA-NKTH CNK (2010-2012) Koherens tulajdonságrendszerek a mesterséges és az emberi látásban.

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

1. Lazar, A., Vidnyánszky, Z. & Roska, T. (2009) Modeling stimulus-driven attentional selection in dynamic natural scenes. International Journal of Circuit Theory and Applications 37(1):3-30
2. Soós, G. B. Rák, A., Veres, J. and Cserey G, (2009) "GPU boosted CNN simulator library for graphical flow based programmability," EURASIP Journal on Advances in Signal Processing, Article ID 930619, 11 pages doi:10.1155/2009/930619
3. Gandhi, G. Cserey, Gy. Zbrozek, J. and Roska, T. (2009) "Anyone can build Chua's circuit: Hands-on-experience with chaos theory for high school students," International Journal of Bifurcation and Chaos, 2009.
4. Rák, A., Soós, G. B. and Cserey, Gy, (2009) „Stochastic bitstream based CNN and its implementation on FPGA," International Journal of Circuit Theory and Applications, vol. 37, no. 4, pp. 587-612.
5. Tar, A., Gandhi, G. and Cserey Gy, (2009) „Hardware implementation of CNN architecture based test bed for studying synchronization phenomenon in oscillatory and chaotic networks," Int. J. of Circuit Theory and Applications, vol. 37, no. 4, pp. 529-542.
6. Kóbor, I., Gál, V. & Vidnyánszky, Z. (2009) Attentional modulation of perceived pain intensity in capsaicin-induced secondary hyperalgesia. Exp. Brain Res. 195(3):467-72.
7. Sally, S.L., Vidnyánszky, Z. & Papathomas, T.V. (2009) Feature-based attentional modulation increases with stimulus separation in divided-attention tasks. Spatial Vision 22(6):529-553.
8. Bankó, E. M., Gál, V. & Vidnyánszky, Z. (2009) Flawless visual short-term memory for facial emotional expressions. Journal of Vision *9*(1):12, 1-13.
9. Gál, V., Kozák, L.R., Kóbor, I., Bankó, E. M., Serences, J.T. & Vidnyánszky, Z. (2009) Learning to filter out visual distractors. European J. of Neuroscience 29(8):1723-1731.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-PPKE Infobionikai és Neurobiológiai Plaszticitás Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	9			Ebből kutató[2]:			7
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	1	levelező tag:	0	rendes tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							15
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							15
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			9
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	30,121			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							0
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	1	poszterek száma[12]:					12
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	12	Diplomamunkát(BSc):					6
Diplomamunkát(MSc):	0	PhD-t:					6
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							198
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						36,10	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:				35	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						30	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						5	MFt

SZTE ANALÍZIS ÉS SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Totik Vilmos, az MTA rendes tagja
6725 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.
Telefon: (62) 544089; Fax: (62) 544548
e-mail: totik@math.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Kutatások végzése az alábbi területeken:

- Harmonikus és Fourier-analízis, potenciálelmélet. A véletlen mátrixok elméletében fontos szerepet játszó ún. univerzalitási hipotézis igazolása olyan rendszerekre, amelyekben a spektrum a számegyenes egy tetszőleges kompakt részhalmaza. D. Lubinsky egy tavalyi áttörő eredménye igazolja a hipotézist, de csak arra az esetre, amikor a spektrum egy intervallum. A polinomiális-inverz kép módszer segítségével várhatóan az általános eset is tárgyalható lesz. Az ortogonális polinomok elméletében alapvető szerepet játszó Christoffel-függvények aszimptotikájának megadása sima Jordan-görbéken illetve területmértékekre. Eddig ezt a kérdést csak nagyon speciális esetekben (a körön ill. a számegyenesen) sikerült megoldani, de most egy új módszert találtak, amely egyszerre vonatkozik ív és területmértékekre.
- Globális attraktorok lokalizálása. Funkcionál- differenciálegyenletek kvalitatív vizsgálata, lokális és globális dinamika, dichotómia eredmények. Influenza-pándémia modellje késleltetett hatással és gyógykezelési, megelőzési stratégiák kidolgozása. Eltűnő immunitás hatása a járványok dinamikájában., fertőzések perzisztenciája. Populációgenetikai modellek. Másodrendű differenciálegyenletek viselkedése.
- Összetartási eredmények szemistabilis eloszlások geometriai parciális vonzástartományából vett véletlen változók lineáris kombinációira. Aszimptotikus sorfejtések centralizált és normalizált változók összegére. Határeloszlás-tételek és a kupongyűjtő probléma. A Gnedenko-Kolmogorov-féle Poisson határeloszlás tétel finomítása. A Szentpétervári Probléma teljes feloldása valószínűségszámítási módszerekkel (Fourier-analízis nélkül).

Az elért eredmények közzététele rangos nemzetközi folyóiratokban és konferencia ill. szemináriumi előadásokon keresztül.

Az SZTE Bolyai Intézetében folyó oktatás segítése előadások és szemináriumok tartásán ill. tehetséggondozó szeminárium szervezésén, nemzetközi matematikaversenyeken keresztül.

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

A kutatócsoport az alábbi témákban ért el eredményeket (résztvevő kutatók száma / ebből a kutatócsoport tagja) [referencia]:

Valószínűségszámítás (4/3) [1-6]

Az [1] dolgozatban a szerzők szemistabilis eloszlások geometriai parciális vonzástartományából vett véletlen változók lineáris kombinációira igazolnak összetartási tételeket. A [2] cikk hasonló változók összegére bizonyít összetartó aszimptotikus sorfejtéseket.

A [3] dolgozat az ún. konstans módon átrendezett portfóliók bizonyos típusának hatékonyságát vizsgálja, számos esetben megadva az optimális befektetési stratégiát.

A [4] dolgozatban a szerzők az ún. kupongyűjtő várakozási idejére vonatkozó határeloszlás tételt finomítják. Egy tagú aszimptotikus sorfejtését adják a vonatkozó eloszlásfüggvényeknek.

Az [5] cikkben a szerző Gnedenko és Kolmogorov egy Poisson határeloszlás tételét finomítja. Az összetett Poisson eloszlásokkal való közelítés fontos eszköze a Mineka csatolási egyenlőtlenség, amely a $d_{TV}(W_n,W_n+1)$ teljes variációs távolságra ad felső becslést, ahol W_n n darab független egész értékű véletlen változó összege. A [6] dolgozat ezt az eredményt általánosítja.

[1] Kevei, P. and Csörgő, S.: Merging of linear combinations to semistable laws, Journal of Theoretical Probability, 22 (2009), 772–790.

[2] Kevei, P.: Merging asymptotic expansions for semistable random variables, Lithuanian Mathematical Journal, 49 (1) (2009), 40–54.

[3] Györfi, L. and Kevei, P.: St. Petersburg portfolio games, Proceedings of Algorithmic Learning Theory 2009, Lecture Notes in Artificial Intelligence 5809, 2009, pp. 83--96.

[4] Pósfai, A. and Csörgő, S.: Asymptotic approximations for coupon collectors, Studia Scientiarum Mathematicarum Hungarica, 46 (2009), 61--96.

[5] Pósfai, A.: Poisson approximation in a Poisson limit theorem inspired by coupon collecting, Journal of Applied Probability, 46 (2009), 585--592.

[6] Pósfai, A.: An extension of Mineka's coupling inequality, Electronic Communications in Probability, 14 (2009), 464--473.

Approximációelmélet (1/1) [7-8]

A [7] dolgozatban a szerző bebizonyítja, hogy tetszőleges véges sok intervallum uniójaként előálló E halmaz 1/n rendben közelíthető a [-1,1] polynomiális inverz képeivel.

A [8] dolgozat a véletlen mátrixok elméletében fontos szerepet játszó ún. univerzalitási hipotézis igazolására ad módszert olyan rendszerek esetén, amelyekben a spektrum a számegyenes egy tetszőleges kompakt részhalmaza.

[7] Totik, V.: Chebyshev constants and the inheritance problem, Journal of Approximation Theory, 160 (2009), 187--201.

[8] Totik, V: Universality and fine zero spacing on general sets, Arkiv för Math., 47(2009), 361-391.

Influenza pándémia modellezése (5/1) [9]

A [9] cikk az influenza járványok elleni küzdelem aktuális témájával foglalkozik. A szerzők a fertőzött betegek antivirális szerekkel történő lehetséges kezelési stratégiáit vizsgálják. Optimális stratégiát dolgoznak ki a profilaxis alkalmazására, amellyel a járvány visszaszorítható és a halálesetek száma minimalizálható.

[9] Moghadas, S.M., Bowman, C.S., Röst, G., Fisman, D.N. and Wu, J.: Post-exposure prophylaxis during pandemic outbreaks. BMC Medicine 7: Paper 73. (2009)

Differenciálegyenletek (5/2) [10-13]

A [10] dolgozatban a szerzők az $x'(t) = -\mu x(t) + f(x(t-T))$ késleltetett differenciálegyenletet vizsgálják, ahol f nem-monoton függvény. Meghatározzák a legszűkebb olyan intervallumot, amely tartalmazza a globális attraktort tetszőleges késleltetés esetén.

A [11] cikkben a szerzők egy új szelekció-mutáció-rekombináció modellt konstruálnak, amely leírja a különböző gaméták eloszlásának változását a populációban.

A [12] dolgozatban a szerző az $x''(t)+a^2(t)x(t)=0$ alakú másodrendű lineáris differenciálegyenletet vizsgálja, ahol a(t) bizonyos speciális függvény, amely konstans értéket vesz fel a pozitív félegyenest felosztó $[t_{k-1}, t_k)$, k = 1, 2,…, intervallumok mindegyikén. A [13] dolgozatban a szerző az előbbi egyenlet azon módosításával foglalkozik, amikor $t_0 := 0$ és $\{t_k\}$ olyan véletlentől függő sorozat, melyre $\{\tau_k := t_k - t_{k-1}\}$ független nemnegatív véletlen változók. A paraméterek bizonyos megválasztása esetén ez az egyenlet a véletlen hintázás modellje.

[10] Liz, E. and Röst, G.: On the Global Attractor of Delay Differential Equations with Unimodal Feedback, Discrete and Continuus Dynamical Systems, 24(4) (2009), 1215-1224.

[11] Hatvani, L., Toókos, F. and Tusnády, G.: A mutation-selection-recombination model in population genetics, Dynam. Systems Appl. 18 (2009), 335–362.

[12] Hatvani, L.: On the critical values of parametric resonance in Meissner's equationby the method of difference eqution, Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations, Spec. Ed. I, 2009, No. 1, 1–10

[13] Hatvani, L.: Stochastic parametric resonance in a linear oscillator at square-wave modulation, Problems of Analytical Mechanics and Stability, Fizmatlit, Moscow, 2009, 392–403 (in Russian).

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport tagjai előadásokat tartottak az alábbi konferenciákon és szemináriumokon:

- Differenciálegyenletek szeminárium (Pannon Egyetem, Veszprém)
- 8th Mississippi State: UAB Conference on Differential Equations, (Mississippi State University, Starkville, USA)
- Biomath Seminar (Rutgers Unversity, New Brunswick, USA)
- SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems (Snowbird, Utah, USA)
- MTA Tudományos Ülésszak, Differenciálegyenletek (MTA, Budapest)
- BERE 2009 (Izmir, Törökország)
- Nonlinear Methods in BVP (Eger)
- Equadiff 12 (Brno, Csehország)
- State-dependent delay equations workshop (Max Planck Institute, Dresden, Németo.)
- Progress in Stein's Method (Szingapúr)
- Orthogonal Polynomials and Special Functions (Leuven, Belgium)
- V-th International Conference on Functional Analysis and Approximation (Maratea, Olaszország)
- Tudományos konferencia Pintér Lajos 80. születésnapjára (Szeged)
- számos helyi szemináriumi és ismeretterjesztő előadás

Együttműködés kanadai , USA-beli, spanyol, svájci, japán, mexikói, kínai kutatókkal.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport külön nem pályázott más támogatásra. Futó OTKA pályázatokban részt vesznek kutatócsoporti tagok. Egy kutató részt vesz két nyertes TÉT-pályázatban a 2009-2010-es időszakban (magyar-spanyol, magyar-kínai).

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

Igen nagy irodalma van a valószínűségelméletben az egész értékű véletlen változók Poisson, illetve összetett Poisson változókkal való közelítésének. Az általános karakterisztikus függvényeket és csatolásokat alkalmazó módszerek mellett kifejezetten ilyen típusú approximációk hibarendjének meghatározására alkalmas az úgynevezett Stein-Chen módszer.
Ezen témakörhöz tartozó eredményeink közé tartozik a Kolmogorov és Gnedenko nevéhez fűződő Poisson határeloszlás-tétel pontosítása. Olyan független nemnegatív egész értékű infinitezimális véletlen változók szériasorozatát tekintették, melynek soronkénti összegei aszimptotikusan Poisson eloszlásúak, és az n-edik sorösszeget közelítettük olyan Poisson eloszlású véletlen változóval, melynek paramétere csak a sorösszegben szereplő változók eloszlásától függ. Korábbi hasonló eredményekkel ellentétben állításaik igazolásához nem kellett a fellépő véletlen változók momentumainak létezésére vonatkozó megszorító feltevéseket tenni.
Független egész értékű $X_1,X_2,\ldots,X_n$ véletlen változók W(n) összegének összetett Poisson eloszlásokkal történő approximációjára számos eredményt bizonyítottak, melyek elsősorban Barbour, Xia és Cekanavicius nevéhez fűződnek. Ezek olyan felső korlátokat adnak a közelítés hibájára, amelyek az összeadandó X változók első három momentumának és a $d_{TV}(W(n),W(n)+1)$ teljes variációs távolság ismeretében számolhatóak. Ezek közül általában az utóbbi kifejezés értékének meghatározása jelent problémát. Az ilyen típusú eredményt adó Mineka csatolási egyenlőtlenséget általánosították, melynek eredményeképpen jobb korlátot adtak a fenti kifejezésre abban az esetben, amikor VarW(n) jóval nagyobb, mint n.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	3			Ebből kutató[2]:			3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							13
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							13
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			9
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			4
összesített impakt faktor[6]:	0			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							0
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	1	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	10	poszterek száma[12]:					0
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					12
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							5
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát(BSc):					7
Diplomamunkát(MSc):	3	PhD-t:					0
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							24
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						11,70	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:				6	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						6	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

SZTE LÉZERFIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Bor Zsolt, az MTA rendes tagja
6720 Szeged, Dóm tér 9.
Telefon: (62) 544 4273; Fax: (62) 544 658
e-mail: bor@physx.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Nemzetközi szintű kutatómunka végzése az ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése és a lézerek spektroszkópiai és anyagtudományi alkalmazásai területén.

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

- *Lézerek anyagtudományi alkalmazásai*

A korábban megépített, lézeres szórási interferencia jelenségén alapuló áramlás-mérő elrendezésük gyakorlati alkalmazási lehetőségeit tanulmányozták. Kimutatták, hogy véráramlás kontrasztkép elemzéssel történő vizsgálata során a keletkező képet a mozgó vörösvértestek és a vizsgált terület statikus szórása is befolyásolja. A szövet modellezésére polisztirén mikrogömb szuszpenziót fedtek le jól szóró, ugyanakkor részben átlátszó réteggel. Többféle expozíciós idő felhasználásával készítettek képeket, és a korrelációs időt az elméleti kontrasztgörbe paraméterezésével határozták meg. Az eredmények távlati hasznosítása a gyógyításban, orvostudományi kutatásokban történhet.

Összehasonlító vizsgálatokat végeztek átlátszó anyagok lézeres indirekt mikromegmunkálási módszereivel kapcsolatban. Meghatározták a főbb maratási paramétereket a lézerindukált hátsóoldali nedves, száraz és plazmával elősegített ablációs maratási eljárások esetében. Az alkalmazott abszorbens anyag mindhárom módszernél ugyanaz volt, ón. Kimutatták, hogy kis (~100 nm) mélységek esetén a száraz, nagyobbaknál pedig a nedves maratási technika az előnyösebb. Az eredmények hasznosítására a mikrooptikai elemek gyártásában és a mikrofluidikai kutatásokban mutatkozik reális esély.

Plazmonikus struktúrákat állítottak elő egy többlépcsős eljárás során. Ezüst-arany bimetál filmmel vontak be üveg hordozót, majd ezen ún. „spin-coating" eljárással polikarbonát vékonyréteget alakítottak ki. Interferenciás litográfiai eljárással szubmikrométeres rácsot készítettek a polimer rétegben, melyre szilika kolloid gömböcskéket vittek fel. Kimutatták, hogy megfelelő kísérleti paraméterek esetén ezek is periodikus mintázatba rendeződnek. Az így kialakított felszínt KrF excimer lézerrel sugározták be, melynek eredményeképpen hullámhossz alatti lyukakat martak a bimetál filmbe. Az előállított fém-dielektrikum határfelületi struktúrán plazmonokat keltettek a Nd:YAG lézer második felharmonikusával.

Impulzus lézeres vékonyréteg építéssel különböző funkcionalitású vékonyrétegeket állítottak elő. Szilícium céltárgyat használva hidrogén környezetben vizsgálták a napelem ipar egyik fontos alapanyagának, a hidrogénezett amorf szilícium rétegnek az előállítását. Nitrogén környezetben a napelemeket védő antireflexiós rétegként használt szilícium nitridet állítottak elő. Argon környezetben nanoszerkezetű gyémántszerű és grafitszerű rétegeket készítettek. A rétegek vastagságát és optikai tulajdonságait ellipszometriával határozták meg. Ezen eredmények a napelem-technológiai iparban kerülnek felhasználásra a tervek szerint. A témán 9 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa.

Fotoakusztika

Továbbfejlesztették az eddigi fotoakusztikus rendszereiket és szélesítették alkalmazási körüket érzékenységük javításával, szelektivitásuk növelésével. A KFKI MFA-val való együttműködés során kifejlesztett optikai mikrofonok fejlesztése lezárult, jelenleg a mikrofon

tesztelése folyik. Várható, hogy ezen optikai mikrofonok alkalmazásával 1,5-2 nagyságrendes érzékenységnövekedés válik elérhetővé a fotoakusztikus rendszereikkel.

A talaj által kibocsátott illetve elnyelt ammónia fluxusának mikro-meteorológiai elvű mérésére műszert fejlesztettek, amely három talajfeletti magasságban méri az ammónia koncentrációt ppt felbontással. A rendszer egyedülálló lehetőséget kínál a bioszféra ammónia háztartásának vizsgálatára. A rendszert terepi körülmények között sikeresen tesztelték.

Egy új típusú fotoakusztikus berendezés kifejlesztését kezdték el, amely alkalmas a talajból kiáramló gázok (pl. CO_2, NO_2, H_2O, CH_4) mérésére. Egy új fotoakusztikus kamrát fejlesztettek, amely teljesen nyitott és így nagyon gyors méréseket tesz lehetővé.

Részt vettek egy négy hullámhosszon működő fotoakusztikus korommérő kifejlesztésében. A szimulációs és terepi mérések tapasztalatai alapján a készülék alkalmas a koromfélék megkülönböztetésére, ami mostanában a környezetvédelem egyik központi problémájává vált. A fotoakusztikai témákon 6 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa. A fotoakusztikus eredmények hasznosításában a részt vesz a HILASE Kft.

Ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése

A kutatócsoport korábban megvalósított egy nagy teljesítményű, 532 nm központi hullámhosszúságú impulzusok létrehozására alkalmas szélessávú frekvencia átalakítási sémát. 2009-ben sikerült a keltéskor még csörpölt, 50 pikoszekundumos összegfrekvencia impulzusok hosszát 150 femtoszekundum alá csökkenteni. Mivel a kapott impulzushossz még mindig kb. négyszerese a sávszélesség korlátolt értéknek, további kompresszálás lehetséges a spektrális fázis magasabb rendű tagjainak kompenzálásával a rácsos kompresszor optimalizálásával ill. csörpölt tükrök használatával. A bemutatott frekvencia átalakítási séma alkalmas nagy impulzus energiák és a fentinél jóval nagyobb spektrális sávszélesség elérésére, továbbá ultranagy időbeli kontraszttal rendelkező, nagy intenzitású impulzusok előállítására is. Az utóbbi kulcsfontosságú feltétele az Extreme Light Infrastructure elnevezésű európai szuperlézernek, amely megvalósításához jelenleg több ultranagy időbeli kontrasztot lehetővé tevő sémát is vizsgálnak több európai laboratóriumban.

A kutatócsoportnak a Szegedi Biológiai Központ kutatóival együttműködve sikerült pikoszekundumos optikai kapcsolást demonstrálnia bakteriorodopszin (bR) segítségével. A kapcsoló jövőbeli alkalmazásával Tbit/s-os teljesen optikai adatátviteli sebesség válhat lehetővé, amely nagyságrendekkel meghaladja a jelenlegi csúcsértéket. A témán 6 fő dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

Szenzortechnika

Nikkel-oxid (NiO) részecskékből álló nanokristályos rétegeket állítottak elő reaktív gáz leválasztással, s tanulmányozták a rétegek gázérzékelés szempontjából releváns jellemzőit, különös tekintettel a reduktív H_2S, illetve az oxidáló NO_2 gázokra. Elsőként demonstrálták, hogy NiO alapú érzékelővel mindkét fent említett gáz detektálható akár szobahőmérsékleten működtetett szenzorok segítségével is. Utóbbi eredmény különösen fontos annak fényében, hogy egyre növekszik a kis fogyasztású (teljesítmény-érzékeny) eszközöket igénylő gázérzékelési alkalmazások száma, melyek kizárólag alacsony működési hőmérséklet esetén érhetőek el a rezisztív elven működő gázérzékelők számára.

Folytatták a gázérzékelők kémiai szelektivitásának javítására irányuló munkájukat, mely az ellenállás fluktuáción alapuló gázdetektálás (EFG) módszerén, azaz a szenzor egyenáramú ellenállásának zajából származó információ kinyerésén és feldolgozásán alapul. Nem-funkcionalizált, többfalú szén nanocsöveket használva, érzékelő rétegként megmutatták, hogy az EFG módszer alkalmas kvalitatív és kvantitatív információk egyidejű kinyerésére. Igazolták, hogy olyan légszennyező gázok, mint pl. a CO, N_2O, NH_3 és H_2S, valamint ezek keveréke is megkülönböztethető amin-funkcionalizált egyfalú szén nanocső szenzorok jelének

EFG módszerrel történő kiértékelésével. A témán 6 fős nemzetközi kutató konzorcium dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

A kutatócsoport hazai partnerei közé tartozik a SE és a SZTE Szemészeti Klinikái, a SZTE-MTA Dermatológiai Kutatócsoportja, az Országos Meteorológiai Szolgálat, Pannon Egyetem Veszprém, Föld- és Környezettudományi Tanszék, az MTA SzBK, SZFKI, MFA, ATOMKI és az ELTE kutatóhelyei, a MOL NyRt. a Semilab ZRt és a Videoton Holding ZRt. A kutatók folyamatos kapcsolatban álltak a TU München Kémiai Intézetével, a Forschungszentrum Karlsruhe-val (Németország), a Laboratoire d'Optique Appliquée, Groupe Etude des Lasers Femtosecondes csoporttal (Palaiseau, Franciaország) az Uppsala University Angstrom Laboratóriumával (Svédország), a National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics, Lasers Department-jével (Bucharest-Magurele, Romania), a Texas A&M University villamosmérnöki tanszékével valamint a FORTH Lézer Laboratóriumával (Görögország).
A kutatócsoport tagjai a SZTE Optikai és Kvantumelektronikai Tanszéke oktatási feladatainak ellátásában éves szinten mintegy 122 óra megtartásával vállaltak részt. Továbbá 3 PhD hallgató, 14 diplomamunkát és szakdolgozatot író, valamint 6 tudományos diákköri munkát végző hallgató munkáját irányították.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A 2009-es év folyamán a kutatócsoport tagjai 8 db hazai (1 db OTKA, 1 db NKFP, 2db MOL, 1db Contitech Rubber Ind., 1db Semilab Zrt., 1db GE Hungary Zrt., 1 db G és G Növényvédelmi és Ker. Kft.) pályázatot nyertek el. Emellett több futó hazai (1db OTKA, 1 NKTH, 1 db MOL) és 2 db EU FP6 pályázat finanszírozta a kutatási költségeket.

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

1. Smausz T, Zölei D, Hopp B. "Real correlation time measurement in laser speckle contrast analysis using wide exposure time range images," Appl. Opt. 48, 1425-1429 (2009)
2. B. Hopp, T. Smausz, Cs. Vass, G. Szabó, R. Böhme, D. Hirsch, K. Zimmer: „Laser-induced backside dry and wet etching of transparent materials using solid and molten tin as absorbers", Applied Physics A-Materials Science & Processing 94 (4) 899-904 (2009)
3. T. Smausz, G. Megyeri, R. Kékesi, Cs. Vass, E. György, F. Sima, I. N. Mihailescu, B. Hopp: „Comparative study on Pulsed Laser Deposition and Matrix Assisted Pulsed Laser Evaporation of urease thin films", Thin Solid Films, 517 (2009) 4299–4302
4. Á Sipos, H. Tóháti, A. Szalai, A. Mathesz, M. Görbe a, T. Szabó, M. Szekeres, B. Hopp, M. Csete, I. Dékány, „Plasmonic structure generation by laser illumination of silica colloid spheres deposited onto prepatterned polymer-bimetal films", Applied Surface Science 255 (2009) 5138–5145
5. Pogány A, Mohácsi Á, Varga A, Bozóki Z, Galbács Z, Horváth L, Szabó G: „A compact ammonia detector with sub-ppb accuracy using near-infrared photoacoustic spectroscopy and preconcentration sampling." Environ. Sci. Technol. 2009, 43, 826–830
6. M. Szakáll, A. Varga, A. Pogány, Z. Bozóki, G. Szabó:" Novel resonance profiling and tracking method for photoacoustic measurements", Applied Physics B-Lasers and Optics, Volume: 94, Issue: 4, Pages: 691-698 (2009)
7. C. Luyo, R. Ionescu, L.F. Reyes, Z. Topalian, W. Estrada, E. Llobet, C.G. Granqvist and P. Heszler: *Gas sensing response of NiO nanoparticle films made by reactive gas deposition*, Sensors and Actuators B: Chemical 138 (1), pp. 14-20 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	8			Ebből kutató[2]:			6
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	1	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							1
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							29
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							29
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			10
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	1			idegen nyelven:			18
összesített impakt faktor[6]:	20,422			összes hivatkozás száma[7]:			131
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							114
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	3	poszterek száma[12]:					4
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							6
TDK munkát készítő hallgatók száma:	6	Diplomamunkát(BSc):					10
Diplomamunkát(MSc):	4	PhD-t:					3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							122
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						36	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:				85,5	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						32,20	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						4,3	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						49	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

SZTE MESTERSÉGES INTELLIGENCIA KUTATÓCSOPORT

Csirik János, az MTA doktora
6720 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.
Telefon: (62) 544-126, Fax: (62) 425-508
e-mail: csirik@inf.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A csoport kutatási témakörei alapvetően nem változtak az előző évekhez képest. A legnagyobb hangsúlyt továbbra is a nyelvtechnológiai kutatás-fejlesztés kapta, mely téren a kutatócsoport dolgozói jelentős szerepet vállaltak a befogadó intézmény, az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja által elnyert nagy volumenű pályázatok feladatainak megvalósításában. Erősödött az önszervező rendszerek terén végzett kutatási tevékenység, egy elnyert EU-s pályázatnak köszönhetően. Emellett folytatódtak a beszédfelismerés terén folyó kutatások, valamint a gépi tanulás elmélete és alkalmazásai témakörében korábban megkezdett kutatási tevékenységek és együttműködések.

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

Természetes nyelvi feldolgozás. Az intézet nyelvtechnológiai csoportja 2009 folyamán főként a tanszékcsoport által elnyert pályázatok feladataihoz kapcsolódó tevékenységet végzett. Hangsúlyozzuk, hogy a munkákban tanszékcsoporti és a projektekben alkalmazott kutatók is részt vettek, tehát az eredmények közösek, de a felsorolt kutatások mindegyikében volt kutatócsoporti részvétel. A projektek részeként elkészült egy szabadalmi igénypontokból álló, kézzel annotált angol nyelvű korpusz, illetve egy magyar néprajzi szövegeket tartalmazó morfológiailag annotált korpusz. Folyamatban van a Szeged Treebank átalakítása dependencia formátumra, aminek a magyar nyelvű dependeciaparser kifejlesztésében lesz kulcsszerepe. Az [origo] hírportál cikkeiben manuálisan annotálásra kerültek a földrajzi helyeket, szervezeteket, személyeket és egyéb tulajdonneveket jelölő frázisok. A korpuszépítés mellett végzett kutatások a trendelemzéshez szükséges információkinyerésre irányultak és a valós életbeli alkalmazáshoz elengedhetetlen problémákat oldanak meg. Ezen belül a címkézés, a webbányászat, a biológiai eseménykinyerés és a részben felügyelt tanulás témakörével foglalkozott mélyebben a csoport 2009-ben. A címkézés (tagging) célja a tartalom tömör leírása, jellemzése. Esetünkben blogbejegyzések és újsághírek automatikus címkézése volt a cél. Az elkészült algoritmusok az [origo] hírportál archívumán kerültek tesztelésre. A projekt sikeresen zárult, az archívum automatikus címkézése hamarosan élesben is elérhető lesz. A webbányászati technikák célja az Interneten elérhető adatok összegyűjtésével új összefüggések kinyerése kutatókkal, kutatási témákkal kapcsolatban. A kutatók weblapjait elemző rendszer első lépéseként egy olyan alrendszert konstruált meg a csoport, amely automatikusan képes azonosítani az egyes kutatókhoz tartozó oldalakat, a „tanulás pozitív és jelöletlen adatokból” paradigmáját követve. A biológiai eseménykinyerés célja fehérje-interakciók kigyűjtése publikációkból, ezen belül az entitásokat jelölő kifejezések és azok kapcsolatainak felderítése. A csoport által e célra javasolt megoldás lényege a szakértők bevonása egy iteratív gépi tanulási folyamatba (human-in-the-loop). A részben felügyelt tanulás terén javasolt módszerek célja a kézzel jelölt adatbázis szükséges méretének csökkentése a jelöletlen adatok kiaknázásával. A témán belül az ún. szekvenciajelölési problémára adott új megoldást a csoport, amely a legközelebbi

szomszédokat leíró gráfon megvalósított propagációs algoritmuson alapul. A projektek mind ipari partnerek részvételével futnak (Universitas Press, Glia Kft, MKIK, ALL, [origo]), így gazdasági hasznosulásuk bizonyosra vehető. Végezetül, 2009-ben a kutatócsoport munkatársainak szervezésében és részvételével ismét megrendezésre került a Magyar Számítógépes Nyelvészeti Konferencia, a hazai számítógépes nyelvészeti közösség fő fóruma.

Beszédfelismerés. Folytatódtak a korábbi években megkezdett, neuronhálós beszédfelismeréssel kapcsolatos kutatások: az elmúlt két évben kidolgozott ún. HMM/ANN tandem modellt jelentősen leegyszerűsítették és felgyorsították a csoport kutatói, és a korábbi eredmények helyességét újabb adatbázisokon is igazolták. A kifejlesztett technológia gyakorlati alkalmazásra érett, a gazdasági hasznosításhoz a csoport keresi az ipari partnereket.

Mintafelismerés és gépi tanulás. 2009-ben a csoport kutatói a zajos környezet modellezésére az ún. Statistical Query Learning modellben vizsgálták a hatékony tanulhatóság kritériumait. Ennek során sikerült megadniuk a tanuláshoz szükséges kérdések (query) számának egy új karakterizációját az ún. 'Strong DQ Dimension' segítségével. Ezen felül a Ruhr-Universität Bochum kutatóival együttműködve megmutatták, hogy a kétértékű függvények osztályainak PAC-tanulhatóságát karakterizáló VC-dimenzió általánosítása, a Pollard pszeudodimenzió felső becslést ad egy többértékű függvényekből álló osztály ún. „one-inclusion hypergraph density" értékére. Az ún. boosting algoritmusok továbbfejlesztésének problémakörében a csoport dolgozói egyszerű tanulóalgoritmusok szorzatának boostinggal történő javítására tettek javaslatot. Bevezettek továbbá egy újfajta tanulóalgoritmust nominális jellemzők esetére, és megmutatták, hogy az ilyen algoritmusok szorzatának boostingolása megoldja a maximális margóval történő mátrixfaktorizációs problémát, a hagyományos megoldásnál sokkal kisebb számítási költséggel. A csoport dolgozói új módszert javasoltak az AdaBoost algoritmus felgyorsítására az ún. „többkarú rabló" algoritmus felhasználásával.

Önszervező rendszerek. 2009-ben az önszervező rendszerek témakörében végzett kutatócsoporti tevékenységet alapvetően az EU FP7 keretprogramban elnyert „QLectives" projekt határozta meg, melyben egy 8 nemzetközi partnerből álló konzorcium tagjaként vesz részt az intézet. A projekt célja egyrészt annak megértése, hogy emberek közösségei milyen mechanizmusokkal érik el valamilyen produktum, pl. tudományos publikációk vagy zeneszámok minőségének megítélését és fenntartását, másrészt olyan számítógép- és szoftverrendszerek fejlesztése, amelyek ezeket a folyamatokat optimálisan támogatják. A kutatócsoport szerepe a projektben elosztott adatbányászattal és ajánlórendszerekkel kapcsolatos algoritmusok kidolgozása, kiértékelése és implementációja. Az első év során számos elosztott ajánló algoritmust fejlesztettek ki és implementáltak a csoport kutatói, amelyek ún. peer-to-peer környezetben memóriaalapú algoritmusokat valósítanak meg. Ezen kívül az „EconoPhysics forum" nevű 2.0 webhely fejlesztésében is részt vettek a csoport dolgozói. A projekt eredményeinek számos gyakorlati alkalmazása kínálkozik önszervező és elosztott rendszerekben.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Kutatási partnereink a különböző területeken: gépi tanulás elmélete: Ruhr-Universität Bochum, University of Illinois at Chicago, Université Paris, SZTAKI; önszervező rendszerek: University of Surrey, Technical University of Delft, Swiss Federal Institute of Technology, University of Fribourg, University of Warsaw, CNRS, Institut für Rundfunktechnik GmbH; természetes nyelvi feldolgozás: MTA Nyelvtudományi Intézet, MorphoLogic Kft, Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet, GLIA Kft, ELTE Biológia Fizika

Tanszék, Universitas Press, MKIK Gazdaság- és Vállalkozáselemző Kht, AITIA Zrt, ALL, BME TMIT, Kilgray Kft, [origo].

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport dolgozói 2009-ben is jelentős részt vállaltak a csoportot befogadó intézmény, az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja által vitt pályázatok feladatainak megoldásában. A TexTrend (OM-00006/2008) pályázat célja gazdasági és kormányzati döntéshozást támogató keretrendszer létrehozása. 2009-ben, a projekt második évében elkészültek a TexTrend keretrendszerbe illeszthető, angol nyelvre kidolgozott szövegfeltáró eszközök az UIMA rendszer alkalmazása révén. A MASZEKER kódnevű, 2009-ben indult pályázat (TECH_08_A2/2-2008-0092) célja egy modell alapú szemantikus keresőrendszer kifejlesztése elsődlegesen angol és magyar nyelvű szabadalmakra és néprajzi szövegekre. A projekt első évében a csoport tagjai a rendszerben alkalmazandó természetes nyelvi elemzőket választották ki és alakították át a részfeladatok sajátosságainak megfelelően. A BELAMI projekt (OMFB-737/05 II.) keretében 2009-ben az Ambient Assisted Living alkalmazásokban felmerülő szöveges adatbányászati problémákra fókuszálva a csoport elkészített egy tanulmányt, amely a két legfontosabb kapcsolódó szövegbányászati problémaként a hanganyagok szöveges átiratának szintaktikai és szemantikai elemzését és információk webes forrásokból történő automatikus összegyűjtését azonosította. A Nyelv- és Beszédtechnológiai Platform (NTP-07-NYBTPLAT) projektben a kutatócsoport aktív részvételével 2009-ben elkészült a magyarországi nyelv- és beszédtechnológia jelenlegi helyzetéről szóló áttekintő tanulmány és a jövőre vonatkozó stratégiai terv. Az életvitel-támogatási projekt (NTP OM-00192/2008) célja az idős betegek otthoni ápolásának támogatása adatbányászati és gépi tanulási módszerekkel. Az otthon monitorozott beteg adatainak feldolgozásához egy tanulmány és egy workflow szerkesztő készült el, amely segítségével az adatfeldolgozási folyamat lépései grafikusan összeállíthatók, futtathatók. Az EU FP7 keretprogramban futó QLectives projektben a kutatócsoport szerepe elosztott adatbányászattal és ajánló-rendszerekkel kapcsolatos algoritmusok kidolgozása, kiértékelése és implementációja. Az első év során a csoport kutatói ún. peer-to-peer környezetben működő algoritmusokat megvalósító elosztott ajánlóalgoritmusokat fejlesztettek ki.

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

1. Todd S. C., Tóth M. T., Busa-Fekete R.: A matlab program for cluster analysis using graph theory. Computers & Geosciences, 36(6):1205--1213, 2009.
2. Busa-Fekete R., Kégl B.: Accelerating AdaBoost using UCB. Journal of Machine Learning Research 7:111-122, 2009.
3. Jelasity M., Montresor A., Babaoglu O.: T-Man: Gossip-based fast overlay topology construction. Computer Networks 53(13):2321–2339, 2009.
4. Langlois M., Sloan R.H., Turán Gy.: Horn upper bounds and renaming. Journal of Satisfiability, Boolean Modeling and Computation 7:1-15, 2009.
5. Farkas R., Szarvas Gy., Hegedűs I., Almási A., Vincze V., Ormándi R., Busa-Fekete R.: Semi-automated construction of decision rules to predict morbidities from clinical texts. Journal of the American Medical Informatics Association 6(4):601-605, 2009.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:			6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							33
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							33
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			5
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			1
összesített impakt faktor[6]:	10,997			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							137
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	2	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	17			poszterek száma[12]:			10
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			0
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							7
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2			Diplomamunkát(BSc):			3
Diplomamunkát(MSc):	9			PhD-t:			7
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							32
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						27,40	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		0	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

MTA-SZTE SZTEREOKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Fülöp Ferenc, az MTA doktora.
6722 Szeged, Eötvös utca 6.
Telefon: (62) 545-562, Fax: (62) 545-705
e-mail: fulop@pharm.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

2009-ben az aszimmetrikus szintézisek közül enzimkatalitikus hidrolízisek, 1,3-dipoláris cikloaddíciók, Mannich reakciók, heterogén katalitikus hidrogénezések vizsgálatával foglalkoztak. A kutatások eredményeit 16 közleményben jelentették meg.

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

β-Aminosav enantiomerek szintézise során végzett szisztematikus kutatásuk szerint a Burkholderia cepacia igen kiváló enzimnek bizonyult a β-hetero-aril β-aminosav-észterek hidrolízisénél. Az ideális oldószer a terc-butil-metiléter, mely esetén 25 °C-on 200 feletti enantioszelektivitiásokat (E) tapasztaltak és nagy enantiomer tisztasággal izoláltak a megfelelő hidrolizált aminosav, ill. az el nem reagált aminosav észter enantiomereket.

Nitril-oxidok 1,3-dipoláris cikloaddíciójával új, enantimer tiszta, izoxazolinnal kondezált ciszpentacin sztereoizomereket állítottak elő régió- és diasztereoszelektív módon. A szelektivitást sztérikus és elektronikus tényezőkkel magyarázták.

Az amino-alkil-naftil származékok szintézise és alkalmazása témakörben egy új, környezetkímélő szintézist dolgoztak ki, melyben a háromkomponensű Manncih reakcióban ammóniaforrásként ammónium-karbamátot, ill. ammónium-hidrogén-karbonátot alkalmaztak. A reakció mikrohullámú körülmények között igen kiváló hozamokat eredményezett az egylombikos szintézisek során. A reakciót számos más esetre is kiterjesztették.

A prokirális telítetlen karbonsavak Pd-cinkonidin és a prokirális ketonok Pt-cinkonidin, Pt-cinkona alkaloidok királis katalizátorokon történő enantioszelektív hidrogénezését folytatva újabb eredményeket értek el.

Tanulmányozták a sebesség növekedés eredetét etil piruvát enantioszelektív hidrogénezésében cinkona alkaloidokkal módosított Pt katalizátorokon folyamatos rendszerben. Vizsgálták 2,2,2-trifluoroacetofenon enantioszelektív hidrogénezését ez idáig még nem tanulmányozott cinkona alkaloidokkal módosított Pt katalizátorokon. Az enantioszelektivitás irányának váratlan inverziója tapasztalható, amely mértéke elérte a 30%-os ee-t cinkonin metil éterrel vagy β-izocinkoninnal módosított katalizátorokon.

Cinkonidinnel módosított Pd katalizátoron először tanulmányozták heteroaromás szubsztituenseket tartalmazó 2,3-diarilpropénsavak hidrogénezését, amely során 73 % ee-t értek el. Tanulmányozták primer amin adalékok szerkezetének hatását (E)-2-metil-2-buténsav enantioszelektív hidrogénezésére cinkonidinnel módosított Pd/Al_2O_3 katalizátoron. Először írták le nanocső hordozós Pd katalizátor előállítását és alkalmazását prokirális α,β-telítetlen karbonsavak enantioszelektív hidrogénezésére cinkonidin módosító jelenlétében.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Hazai együttműködő intézmények:
- SZTE Gyógyszerkémiai Intézet,
- SZTE Orvosi Vegytani Intézet,
- SZTE Szerves Kémiai Tanszék,
- MTA-SZBK Biokémia Intézet,
- SZTE Neurológiai Klinika, ELTE Kémiai Intézet.

Külföldi együttműködő intézmények:
Univ Turku, Univ Ghent, Univ Jouensuu, Univ. Jyväskylä.

A kutatócsoport továbbra is szoros kapcsolatot ápol a potsdami egyetem kémiai intézetével, Erich Kleinpeter professzorral, akivel bilaterális együttműködés keretében 2010-2011 időszakra MÖB-DAAD közös kutatócsere pályázatot nyertek.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport kutatásait az Országos Tudományos Kutatási Alap (K72065, K75433) támogatta.

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

1. Szatmári I., Fülöp F: Microwave-assisted one-pot synthesis of (aminoalkyl)naphthols and (aminoalkyl)quinolinols by using ammonium carbamate or ammonium hydrogen carbonate as solid ammonia source. Synthesis, 775-778 (2009)
2. Kiss L,. Nonn M, Forró E.,. Sillanpää R, Fülöp F.: Synthesis of novel isoxazoline-fused cispentacin stereoisomers. Tetrahedron Lett. 50, 2605-2608 (2009)
3. Tasnádi G., Forró E., Fülöp F.: *Burkholderia cepacia* lipase is an excellent enzyme for the enantioselective hydrolysis of β-heteroaryl-β-amino esters. Tetrahedron: Asymmetry 20, 1771-1777 (2009)
4. Kleinpeter E., Szatmári I., Lázár L., Koch A., Heydenreich M., Fülöp F.: Visualization and quantification of anisotropic effects on the 1H NMR spectra of 1,3-oxazino[4,3-a]isoquinolines – indirect estimates of steric compression. Tetrahedron 65, 8021-8027 (2009)
5. Fülöp F., Szatmári I., Vámos E., Zádori D., Toldi J.,. Vécsei L: Syntheses, transformations and pharmaceutical applications of kynurenic acid derivatives. Curr. Med. Chem. 16, 4828-4842 (2009)
6. Hermán B., Szőllősi Gy., Felföldi K., Fülöp F., Bartók M.: Enantioselective hydrogenation of propenoic acids bearing heteroaromatic substituents over cinchonidine modified Pd/alumina. Catal. Commun. 10, 1107-1110 (2009)
7. Szőllősi Gy., Cserényi Sz., Balázsik K., Fülöp F., Bartók M.: New data in the enantioselective hydrogenation of ethyl pyruvate on Pt-cinchona chiral catalyst using continuous-flow fixed-bed reactor system: the origin of rate enhancement. J. Mol. Catal. A: Chem. 305, 155-160 (2009)

8. Kornél Szőri, Katalin Balázsik, Szabolcs Cserényi, György Szőllősi, Mihály Bartók, Inversion of enantioselectivity in the 2,2,2-trifluoroacetophenone hydrogenation over Pt-alumina catalyst modified by cinchona alkaloids. Appl. Catal. A: Gen. 362, 178-184 (2009)
9. György Szőllősi, Zsolt Németh, Klára Hernádi, Mihály Bartók, Preparation and Characterization of TiO_2 Coated Multi-walled Carbon Nanotube-supported Pd and its Catalytic Performance in the Asymmetric Hydrogenation of α,β-Unsaturated Carboxylic Acids. Catal. Lett. 132, 370-376 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:			5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0	levelező tag:	1	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							2
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							16
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			16
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	36,149			összes hivatkozás száma[7]:			900
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							570
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet:	0			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0	külföldön:[11]					0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	2	poszterek száma[12]:					4
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:					5
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							1
TDK munkát készítő hallgatók száma:	2	Diplomamunkát(BSc):					1
Diplomamunkát(MSc):	1	PhD-t:					1
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							60
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						25,5	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0	Teljes saját bevétel[18]:				13	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						13	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

SZTE SZUPRAMOLEKULÁRIS ÉS NANOSZERKEZETŰ ANYAGOK KUTATÓCSOPORT

Penke Botond, az MTA rendes tagja
6720 Szeged, Dóm tér 8.
Telefon: (62) 545-136, Fax: (62) 545-971
e-mail: penke@mdche.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

Szupramolekuláris fehérje aggregátumok szerkezete, neurotoxikus hatása; neuroprotekció

- A toxikus aggregátumok felszínét beborító peptidmimetikumok tervezése és szintézise; in vitro screenelése
- ACE-inhibitorok, Zn-kelátorok vizsgálata AD-modellen
- Új peptidmimetikumok tervezése, szintézise és tesztelése Huntington-kór modellen

Nanobiotechnológia

- Arany nanorészecskék valamint arany-ezüst ötvözetekből készített nanorészecskék előállítása peptidek és béta-amiloidok megkötése céljából. Felületi plazmon rezonancia (SPR) és kvarckristály mikromérleg (QCM) mérések. Aminosavak és peptidek szorpciójának vizsgálata nemesfémek felületén különös tekintettel a diszperziók kolloid stabilitására.
- Mikrokalorimetriás mérések a protein-arany és peptid-arany kötési állandók meghatározása céljából. A gyógyszerjelölt peptidek kötésére jellemző termodinamikai adatok meghatározása. A béta-amiloidok aggregációjának optikai jelzése arany nanorészecskék plazmonikus tulajdonságainak optikai mérésével.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények

A kutatócsoportnak sikerült standardizálni a β-amiloid (Aβ) peptid aggregációs folyamatát. Az ú.n. Aβ izopeptidből, amely egy depsipeptid kötést tartalmaz, O→N acilvándorlással (pH~7.0) szinte tetszőleges polimerizációs fokú Aβ-oligomer keverékek állíthatók elő. Meghatározták a különböző oligomerek neurotoxikus hatását (SH-SY5Y sejtvonal; in vitro mérések). Új vegyületcsoportot terveztek a kis polimerizációs fokú A oligomerek felszínén való kötődésre (4 fős kutatócsoport 12MFt).
Megvizsgálták két új Zn-kelátor (His-tartalmú tetrapeptidek) hatását az A aggregációra és egyben a neuroprotekcióra (in vitro kisérletek). Elkezdték a Perindopril® (ismert ACE-inhibitor, vérnyomáscsökkentő gyógyszer) neuroprotektív hatásának vizsgálatát az Alzheimer-kór egyik egérmodelljén (APPxPS1 törzs), a kísérlet 9 hónapig tart, befejezése 2010 júniusában esedékes (3 fős kutatócsoport; 6MFt).

Egy teljesen új vegyületcsoportot terveztek és szintetizáltak a toxikus poliglutamin peptidek (pl. huntingtin) hatásának kivédésére. Az LA101 anyag sejttenyészeten teljesen megakadályozza a neurotoxikus hatást, in vivo vizsgálata most folyik a Huntington-kór egérmodelljén (2 fős kutatócsoport; 6MFt).

Szférikus, 10 nm átmérőjű arany nanorészecskéket tartalmazó vizes közegű diszperziókat állítottak elő. Vizsgálták a Cys-A ciszteinnel módosított amiloid (1-40)) valamint az A molekula kötődését az arany nanorészecskék felületén. Az UV-Vis spektrumok alapján megállapították, hogy a plazmon rezonancia maximum értéke jellemző a Cys-A és A kölcsönhatásokra. Megállapították hogy az arany felületi funkcionalizálásához nem

feltétlenül szükséges a cisztein molekula tiol funkciós csoportjának reakciója. Ezüst valamint ezüst-arany ötvözet nanorészecskék kontrollált szintézisét dolgozták ki vizes közegben, valamint vizsgálták a keletkezett részecskék alakját, méretét, méreteloszlását. A nanorészecskék felületét módosították Cys, LPFFD-OH és Cys-$A\beta_{1-28}$ molekulák felületi kapcsolásával.

Lizozim fehérjéből ultravékony rétegeket építettek üveg hordozón, polielektrolitok (pl: polisztirol-szulfonát (PSS)) réteges kettőshidroxid (LDH), hektorit és arany szol felhasználásával. A rétegek épülését optikai módszerekkel és kvarc kristály mikromérleggel (QCM) követték, rétegvastagságukat meghatározták, morfológiájukat atomi erő mikroszkóppal (AFM) jellemezték.

QCM mérésekkel tanulmányozták a BSA adszorpcióját különböző funkciós csoportú (poláris negatív, ill. pozitív töltésű valamint apoláris) tiolokkal módosított arany felületen.

Biokompatibilis virág alakú arany nanorészecskéket állítottak elő Au(III) klorid-trihidrátból N-(2-hidroxietil)piperazin-N'-etánszulfonsav (HEPES) segítségével. A közismert HEPES puffer gyenge redukálószerként viselkedik, szabályozza a képződő részecskék morfológiáját, valamint stabilizálja is azokat. Titrációs mikrokaloriméterrel (ITC) meghatározták a részecskék kialakulásával járó képződési entalpiát. Az arany nanorészecskék felületét L-cisztein molekulákkal funkcionalizálták és meghatározták a kölcsönhatás kialakulását követő reakcióhőt.

Réteges szerkezetű szemikristályos titán-foszfátot szintetizáltak, melyet $Ti_2O_3(H_2PO_4)_2 \times 2\ H_2O$-ként (TiP) azonosítottak. Azt találták, hogy az amorf TiP morfológiája szabályozható és téglalap alakú krisztallitok képződtek. TiP mintákat vizes szuszpenziókban ciszteaminnal (CEA) reagáltatták és új TiP/CEA interkalációs komplexeket állítottak elő. Az interkalációs komlexek röntgendiffrakciója alapján a CEA monorétegesen épül be a TiP lamellák közé. Meghatározták az adszorbeált CEA mennyiségét és a differenciális adszorpciós entalpiát. A CEA-TiP interkalációs komplexeket biomolekulák immobilizációjában tanulmányozzák tovább, melyben a CEA, mint kötőréteg funkcionál.

Ón-dópolt indium-oxid (ITO) és antimón-dópolt ón-oxid (ATO) vékonyrétegeket állítottak elő üveg felületen. A rétegek felületi funkcionalizálása után elektromosan vezető, és optikai hullámvezető bioszenzorok készíthetők, melyeken - optikai fénymódus spektroszkópiával (OWLS) – különböző peptidek adszorpciója tanulmányozható.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok

- Zrínyi M, SOTE, BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék – Protein oldatok és gélek fizikai -kémiai tulajdonságainak vizsgálata
- H. Busse, Fraunhofer Institute (IFAM) Bremen, – Félvezető és szenzorkutatások
- R. Schoonheydt, Catholic University Leuven – Protein adszorpciós kutatások rétegszilikátokon
- Kellermayer M.; SOTE –Aβ fibrillumok szerkezete, stabilizálása
- Fülöp F, Martinek T.;SZTE-GYTK-NMR szerkezetvizsgálatok; kötésvizsgálatok
- P.G.M. Luiten, University of Groningen – Aβ aggregáció szimulációs számítások
- Datki Z, Szegedi V.; Bay Z. Intézet (Baygen) - In vitro és in vivo screenelés

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

2009-ban elnyert új pályázataik:

- Fraunhofer Institut (IFAM): Selektive Sensorend für die Detection toxischen industrieller Chemikalien „SenTIC". 1K845 90.000 €, 2009-2011.
- Firmenich SA: Nanostructured Compoiste Materials for the Controlled Delivery of Bioactive Ingredients including but not limited to Fragrances and Flavors. 50.000 €, 2009-2010
- NTP-NKTH/TECH-09-A1-Nanoster, Egészségre ártalmatlan sterilizáló rendszer kifejlesztése. 135.825.000 Ft, 2009-2012
- TÁMOP 4.2.2-2008-0001, Nemzetközi fotobiológiai interdiszciplináris kutatások környezeti tényezők és genomikai faktorok interakciójának vizsgálatára, új diagnosztikus és terápiás eljárások kidolgozására. 9.525.120 Ft, 2009-2011
- General Electric Hungary Kft (55-5/09) Fluoreszcens lámpák borítása fotokatalitikus réteggel és antibaktericid hatása. 1.875.000 Ft, 2009
- TÁMOP 4.2.2-2008-0001, Innovatív kutatói teamek: Neurodegeratív betegségek kutatása. 10MFt, 2009-2011

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

1. Kun R, Szekeres M, Dekany I, Isothermal titration calorimetric studies of the pH induced conformational changes of bovine serum albumin. JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY, 96(3): 1009-1017 (2009)
1. Majzik A, Patakfalvi R, Hornok V, Dekany I Growing and stability of gold nanoparticles and their functionalization by cysteine. GOLD BULLETIN, 42(2): 113-123 (2009)
2. Pal E, Hornok V, Oszko A, Dekany I, Hydrothermal synthesis of prism-like and flower-like ZnO and indium-doped ZnO structures. COLLOIDS AND SURFACES A-PHYSICOCHEMICAL AND ENGINEERING ASPECTS, 340(1-3): 1-9 (2009)
3. Sebok D, Szabo T, Dékány I, Optical properties of zinc peroxide and zinc oxide multilayer nanohybrid films. APPLIED SURFACE SCIENCE, 255(15): 6953-6962 (2009)
4. Szabadalom: Dékány Imre, Ábrahám Imre, Aradi Tamás, Hornok Viktória, Gingl Zoltán Átfolyásos mérőcella, ilyet tartalmazó töltéskompenzációs berendezés, valamint eljárás kolloid diszperz rendszerek heterokoagulációs tulajdonságainak vizsgálatára. Magyar szabadalom, P 0900422, bejelentés ideje: 2009 június 30.
5. Minkeviciene R, Rheims S, Dobszay MB, Zilberter M, Hartikainen J, Fulop L, Penke B, Zilberter Y, Harkany T, Pitkanen A, Tanila H: Amyloid beta-Induced Neuronal Hyperexcitability Triggers Progressive Epilepsy, JOURNAL OF NEUROSCIENCE 29(11): 3453-3462 (2009)
6. Juhasz G, Marki A, Vass G, Fulop L, Budai D, Penke B, Falkay G, Szegedi V: An Intraperitoneally Administered Pentapeptide Protects Against A beta(1-42) Induced Neuronal Excitation In Vivo, JOURNAL OF ALZHEIMERS DISEASE 16(1): 189-196 (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

Átlaglétszám[1]:	6		Ebből kutató[2]:			6
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora: 0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]						2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:						3
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:						20
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:						20
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0		idegen nyelven:			19
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0		idegen nyelven:			1
összesített impakt faktor[6]:	50,80		összes hivatkozás száma[7]:			546
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:						506
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0	könyvfejezet: 0			jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0	könyvfejezet: 1			jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 1	MTA doktora: 0	levelező tag: 0			rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	1	külföldön:[11]				0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	6	poszterek száma[12]:				13
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:						0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:				8
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:						8
TDK munkát készítő hallgatók száma:	1	Diplomamunkát(BSc):				5
Diplomamunkát(MSc):	6	PhD-t:				9
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:						120
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:					24,3	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	1	Teljes saját bevétel[18]:			97,6	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:					0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					14,6	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					8,8	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					2,4	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]					0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:					0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:					71,4	MFt

SZTE BIOSZERVETLEN KÉMIAI TÁRSULT KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Kiss Tamás, a kémiai tudomány doktora
6720 Szeged, Dóm tér 7. Postacím: 6701 Szeged, Pf. 440.
Telefon: (62) 544-337, Fax: (62) 420-505
e-mail: tkiss @chem.u-szeged.hu, honlap: www.staff.u-szeged.hu/inorg/indexh.html

I. A kutatócsoport fő feladatai a beszámolási évben

Biológiai fontosságú [VO(IV)- és Zn(II) és Cu(II)] komplexek oldategyensúlyi (pH-potenciometria) és szerkezeti (UV-Vis, multinukleáris NMR, EPR, CD spektrális) vizsgálata sajátságaik leírása, átalakulásaik, biospeciációjuk megismerése, illetve enzimaktivitásuk tesztelése céljából.

II. Az év folyamán elért kiemelkedő kutatási eredmények

Inzulinutánzó vanádium- és cinkkomplexek biospeciációja. Az inzulinutánzó VO(IV) komplexek biospeciációjára vonatkozó ismeretek feltárása után a vanadát(V) tartalmú komplexek sajátságait tisztázták és megállapították, hogy az oxidációs szám megváltozása alapjaiban nem hat a szérumbeli transzportsajátságokra; a V(V) elsődleges szállítója is a szérum-transzferrin. Az antidiabetikus hatású fémkomplexek szérumbeli szállításával kapcsolatos eddigi ismerteiket összegző közleményekben foglalták össze.

β-amyloid aggregation. Az AD előreheladását jelentő β-amiloid oligomerek képződését alkalmas kelátképzővel megakadályozandó a TPEN (N,N,N´,N´-tetrakisz(2-piridilmetil) etiléndiamine), ami egyébként a biológiában a sejtek szabad Zn(II) koncentrációjának mérésére szolgáló, azzal igen nagy stabilitású komplexet képező, reagens. Emiatt igen toxikus. A molekulát megfeleztük, illetve negyedeltük és kaptuk az ENDIP ((N,N'-bisz(piridine-2-il-metil)-etiléndiamine), illetve DMAP (N-metil-1-(piridin-2-il)-metilamin) molekulákat, így csökkentettük fémionkötő képességüket. Megállapítottuk, hogy a DMAP nem, de az ENDIP képes kivonni a fémionokat az amiloid komplexéből és így gátolja a fémion indukálta β-amiloid oligomerizációt. Ezen eredményeket floreszcenciás és fényszórás mérésekkel is alátámasztottuk.Mindkét módszer igazolta, hogy az ENDIP képes volt a fémionok indukálta β-amiloid aggregációt gátolni és az amiloid aggregátumok részbeni újraoldódását előidézni.

Metalloenzimek funkcionális illetve szerkezeti modellezése. Szerkezeti és funkcionális modellezés céljából vizsgálták számos fémtartalmú fehérje/enzim N-terminális (*Cu,Zn-SOD, Ni-SOD, humán endosztatin,*) valamint láncközi (*ZnT transzporterek, humán HRG (hisztidinben gazdag glikoprotein), mátrix metalloproteináz 13*) fémkötő szakaszának kölcsönhatását fémionokkal. Vizsgálataik hozzájárultak ezen fehérjék működésének mind részletesebb megértéséhez:

- néhány bakteriális Cu,Zn-SOD N-terminális részlete 'chaperon'-ként működhet a fehérje rézfelvétele során, valamint alternatív SOD centrumként működhet,
- a ZnT fehérjék $(HX)_n$ fémkötő szekvenciájának vizsgálata révén megállapították, hogy legalább 4 közeli His alegység szükséges nagy affinitású cinkkötő-hely kialakulásához,
- meghatározták a natív humán endosztatinnal azonos antiangiogén sajátsággal bíró N-terminális 25-mer peptid cinkkötő helyeit, rámutattak, hogy a nagyaffinitású rézkötő-helye szerepet játszhat a fehérje antiangiogén (s így rákellenes) hatásában,

- értelmezték a humán HRG His-gazdag régiójának kooperatív fémkötő sajátságát, és kimutatták a fiziológiás hatáshoz szükséges degradáció egy lehetséges fémkatalizált útját,

A vizsgált peptidek és más ligandumok fémkomplexei néhány esetben jelentős katalitikus sajátságot mutattak:

- az eredmények rávilágítottak a Ni-SOD és MMP13 enzimek aktív centrumának néhány funkcionális részletére
- megállapították, hogy a His-gazdag peptidek $\{2N^{-},2N_{im}\}$ koordinált komplexei kiemelkedő pirokatechin oxidáz sajátsággal bírnak
- His/Pro-gazdag peptidek alkalmazásával sikerült a peptidnitrogének deprotonálódását elkerülni, így $\{3/4N_{im}\}$ koordinált hidrolitikusan aktív katalitikus centrumokat nyertek
- His/Lys-gazdag peptidek segítségével jelentősen megnövelték a fémkomplexek DNS-hez való kötődését, s így azok hasítását hatékonyan elősegíteni képes vegyületeket állítottak elő
- előállítottak egy ciklikus triamin kétmagvú rézkomplexét, ami szelektíven és rendkívül hatékonyan segíti elő a foszforsavmonoészterek hidrolízisét
- egy három makrociklikust tartalmazó ligandum hárommagvú cinkkomplexe segítségével az RNS bázisszelektív (G-re szelektív) hidrolízisét érték el
- igazolták néhány szilárd hordozón rögzített fémkomplex hidrolitikus, SOD és pirokatechin oxidáz utánzó sajátságát, valamint szilárd hordozón rögzített ligandumok segítségével nehézfémionok és az arzén hatékony megkötését érték el

A molekuláris biológia eszköztárát is bevetették mesterséges nukleázok előállítása céljából:

- Előállították az Adenovírus 5 pVII fehérje néhány módosított származékát, melyekbe rövid, His-gazdag fémkötő szakaszokat építettek be a nukleáz funkció kialakítása céljából. Kimutatták, hogy az így nyert fehérjék megtartották specifikus DNS kötő képességüket.
- Előállítottak néhány rövidebb fémkötő szekvenciát (20-24 a.s.) tartalmazó GST fúziós fehérjét, de a GST fehérje gátolta a katalitikus hatást
- Előállították a ColE7 nukleáz HNH motívumának (kb. 5 kDa) ubikvitinnel (kb. 10 kDa) fuzionált változatát, majd lehasították róla az ubikvitin. Bár a HNH motívum cinkkötő sajátságát igazolták, nukleáz hatását nem tudták kimutatni.
- Végül előállították a ColE7 nukleáz domén 6 különböző mutáns változatát, s igazolták, hogy csak a teljes domén mutat nukleáz aktivitást, amit egyetlen aminosav allosztérikus kontrollja szabályoz. Ez lehetőséget teremt a továbbiakban egy biztonságos, biotechnológiai vagy terápiás célokra is használható mesterséges nukleáz megtervezéséhez.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Egy új COST Akció „Metal complexation in the diagnosis and cure of human diseases: importance and role of thermodynamic studies” szervezésével (11 ország 42 résztvevő) járó aktivitásunkat sajnos még nem koronázta teljes siker; 2009 májusában a projekt az utolsó fordulóban elbukott, most újra a végső megmérettetés előtt áll a feljavított projekt. Hazai és külföldi kutatócsoporttal, így például a DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékével, és az MTA Kémiai Kutatóközpontjával, a Thesszalonik-i Egyetem Kémia Tanszékével, a Lisszabon-i Műszaki Egyetem Kémia Tanszékével, a Suzuka Orvostudományi Egyetem Gyógyszerészettudományi Karával, a Hamburgi Egyetem Kémiai Tanszékével, a Henri Poincaré Egyetem (Nancy) Kémiai Tanszékével és a Padovai Egyetem Kémiai Tanszékeivel

együttműködéseink sikeresen folytatódtak. Új kapcsolatként jelentkezett egy kutatócsoporttal a bécsi Egyetemen kiépített kétoldalú egyezménnyel is megerősített együttműködés.

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok

Sikeresen befejeződött egy OTKA NI pályázatunk, és tovább folytatódott munkánk a korábban elnyert OTKA (2), és OECD (1) projektekben. Kétoldalú elsősorban mobilitási kapcsolataink vannak a Lisszaboni, a Padovai és a Bécsi Egyetemmel. Korábbi kutaócsoportunk egy tagja 2. évét tölti Marie-Curie post doc pályázattal a Frankfurti Egyetemen. A kutatócsoport anyagi támogatása megszünésével 2010-re rendeződni látszik a személyi állomány, három munkatársunk távozott más hazai kutatóhelyekre, 2 fő kerülhet nyugdíjazás révén egyetemi állásra. Igy a társult kutatócsoport ma már nem hivatalosan is csak az 1 fő „hivatalos" vezetőre és a korábbi 2 fő nem kutatócsoporti résztvevő kollegára csökkent (ebből 1 fő 2009-ben nyugdíjba ment) és a velük együtt dolgozó fiatalok munkájára épül.

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

1. Tamás Jakusch, Dominik Hollender, Éva Anna Enyedy, Cristina Sánchez González, Maria Montes-Bayón, Alfredo Sanz-medel, Joao Costa Pessoa, Isabel Tomaz, Tamás Kiss, Biospeciation of various antidiabetic VO(IV) compounds in serum, DALTON TRANSACTIONS, 2428-2437 2009
2. Hossein Esbak, Eva A. Enyedy, Tamás Kiss, Yutaka Yoshikawa, Hiromu Sakurai, Eugenio Garribba, Dieter Rehder, Aminoacid-derivatised picolinato-oxovanadium(IV) complexes: characterisation, speciation and ex vivo insulin-mimetic potential, J. INORG. BIOCHEM. 103. 590-600 2009
3. Anna K. Bytzek, Éva A. Enyedy, Tamás Kiss, Bernhard Keppler, Christian G. Hartinger, Biodistribution of anti-diabetic Zn(II) complexes in human serum and in vitro protein-binding studies by means of CZE-ICP-MS, ELECTROPHORESIS, 30, 4075-4082 2009
4. Jancsó, A. Kolozsi, B. Gyurcsik, N.V. Nagy, T. Gajda, Probing Cu2+ and Zn2+ binding affinity of histidine-rich glycoprotein, J.INORG. BIOCHEM., 103, 1634-1643, 2009.
5. Kolozsi, A. Jancsó, N.V. Nagy, T. Gajda, N-terminal fragmant of the antiangiogenic human endostatin binds copper(II) with very high affinity, J. INORG. BIOCHEM., 103, 940-947, 209.
6. Tamas Kiss, Tamás Jakusch, Dominik Hollender, Éva Anna Enyedy, László Horváth, Comparative studies on the biospeciation of antidiabetic V(IV) and Zn(II) complexes, J. INORG. BIOCHEM., 103, 527-535 2009.

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport (Társult tag)

Átlaglétszám[1]:	0			Ebből kutató[2]:			0
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							7
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							7
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			0
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	18,49			összes hivatkozás száma[7]:			350
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							291
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD: 2		MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	5			poszterek száma[12]:			6
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			3
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							2
TDK munkát készítő hallgatók száma:	3			Diplomamunkát(BSc):			3
Diplomamunkát(MSc):	2			PhD-t:			3
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							554
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						0	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		33	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						28	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						1,7	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						3,3	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt

SZTE REAKCIÓKINETIKAI KUTATÓCSOPORT (TÁRSULT TAG)

Kiss János, az MTA doktora
6720 Szeged, Dóm tér 7.
Telefon: (62) 544-803, Fax: (62) 420-678
e-mail: jkiss@chem.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatóegység két egymással szorosan összefüggő témakörben, nevezetesen a felületkémia és a heterogén katalízis területén végez kutatásokat. A tématerület kapcsolódik az MTA 2007-2011. évekre meghirdetett téma prioritásaihoz, nevezetesen a kémiai anyagvizsgálat területéhez.
A program elsődleges célja a szénhidrogének és CO_2 értékesebb vegyületekké történő átalakítása, alkánok, alkének és alkil-aromás vegyületek előállítása. Intenzív kutatásokat terveznek az alkoholok hasznosítására: elsősorban üzemanyagként, H_2 forrásként és tüzelőanyag cellában történő alkalmazásra. A reakció optimális feltételeinek megállapítása, a hatásos katalizátorok előállítása a katalizátorok spektroszkópiai jellemzése képezi a kutatás célkitűzését. Figyelmet fordítanak a katalizátorok felületén lejátszódó folyamatokra, valamint a reaktánsok és a katalizátorok kölcsönhatásának a vizsgálatára.
A katalitikus folyamatok megértése érdekében cél a szilárdtestek, beleértve fém-egykristályok, orientált felületű oxidok, karbidok, bimetallikus rendszerek, polikristályos rendszerek szerkezetének, topográfiájának megismerése, ezeken a felületeken végbemenő adszorciós folyamatok, az adszorbátumok stabilitásának, reakcióképességének tanulmányozása. Nanotechnológiai eljárásokkal kétdimenziós modellkatalizátorokat állítanak elő. Elektron-, ion- és fotoelektron spektroszkópiai módszerekkel, valamint STM-el vizsgálják a nanoklaszterek tulajdonságait.

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

Jelentős eredményeket értek el a metanol, etanol és a dimetil-éter katalitikus vizsgálatában. A szén hordozó felületén létrehozott Pt-fémek nanométer dimenzióban kitűnő katalizátoroknak bizonyultak a hidrogén előállításában. A metanolból történő hidrogén képződését elősegítette a különböző hordozóra felvitt arany katalizátor is. A káliummal promotált Au(111) felület nagymértékben előidézte a CO_2 aktivását és redukcióját.
Elektron- foton- és ion spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-el tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek (Au-Mo, Au-Rh és Rh-Mo) képződését és fizikai-kémiai sajátságait egykristály titándioxid felületen. A Mo adatom elősegítette az arany nanoklaszterek szétszakadását. A Rh viszont a nanoklaszter térfogatát növelte meg. Ennek eredményeképpen az arany vált dominánssá a felületen. A Rh-Mo bimetallikus réteg esetében ötvözet képződést figyeltek meg.
Mindezek az eredmények energetikai szempontból hasznosíthatók.

III. Hazai és nemzetközi kapcsolatok bemutatása

Téma címe: Fémkarbid alapú katalizátorok elméleti és kísérleti vizsgálata
Egyezmény neve: Magyar-argentin TÉT, ARG-1406

Eredmények: Spektroszkópiai eredmények és ezek elméleti kiértékelésének kialakítása. A metanol adszorpciójának és disszociációjának DFT vizsgálata $Mo_2C(100)$ felületen, valamint a kálium hatásának tanulmányozása.
Együttműködő partnerintézmény neve: Departmento de Física – Universidad Nacional del Sur, Buenos Aires, Argentína

IV. Fontosabb elnyert hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A pályázat megnevezése: OTKA
A pályázati téma megnevezése: *Szénhidrogének és alkoholok reakciójának katalitikus és felületkémiai vizsgálata*
A pályázati téma száma: NI 69327
A témafelelős neve: Solymosi Frigyes, résztvevő: Kiss János
A pályázat 2009. évi munkájának fontosabb eredményei: a projekt megvalósítása során elsősorban a hidrogén előállítására koncentráltak. A szén és oxid hordozóra felvitt platina fémeken azt találták, hogy alkoholokból hidrogén is képződik, melynek mértéke a hordozó minőségétől függ.Továbbá tanulmányozták Au(111) felületen a kálium adalékolásának hatását a CO_2 aktivására és disszociációjára. A folyamatok elemi lépéseit elektronspektroszkópiai módszerekkel is követték. XPS, LEIS és STM módszerekkel tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek képződését és fizikai-kémiai sajátságait TiO_2-on.
A tárgyévben a pályázat keretében 7 dolgozat született.
A pályázat megnevezése: Magyar-argentin TÉT
A pályázati téma megnevezése: *Karbid katalizátorok vizsgálata*
A pályázati téma száma: OMFB TÉT ARG-14/06
A témafelelős neve: Solymosi Frigyes
A pályázat 2009. évi munkájának fontosabb eredményei: a kutatócsoportban elért kísérleti eredmények alapján elméleti számításokkal (DFT) modellezték a Mo_2C szerkezetét. Az elméleti számítások alátámasztották a karbid szerkezetére kialakított képet. Megjelent dolgozatok: 2.

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

1. J.Kiss, R. Németh, Á. Koós, J. Raskó: Characterization of Au-Rh/TiO_2 bimetallic nanocatalists by CO and CH_3CN adsorption: XPS, TEM and FTIR measurements, Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 9, 3828 (2009)
2. J. Kiss, L. Óvári, L. Bugyi, A. Berkó: Characterization of Au-Rh and Au-Mo bimetallic nanoclusters on TiO_2(110): a comparative study, Reaction Kinetics and Catalysis Letters, 96, 391-396 (2009)
3. A.P. Farkas, F. Solymosi: Activation and reaction of CO_2 on K-promoted Au(111) surface, Journal of Physical Chemistry C, 113, 19930-19936 (2009)
4. P. Tolmacsov, A. Gazsi, F.Solymosi: Decomposition and reforming of methanol on Pt metals supported by carbon norit, Applied Catalysis A: General 362, 58-61, (2009)
5. L. Bugyi, L. Óvári, J. Kiss: Formation and characterization of Rh-Mo bimetallic layers on TiO_2(110) surface, Surface Science, 603, 2958-2963, (2009)

VI. A kutatóhely 2009. évi tudományos teljesítményének főbb mutatói

A kutatócsoport neve: MTA-SZTE Reakciókinetikai Kutatócsoport (Társult tag)

Átlaglétszám[1]:	0			Ebből kutató[2]:			0
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma:[3]							1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma:							0
Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[4]:							9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[5]:							9
Ebből impakt fakt. publ, térkép magyarul:	0			idegen nyelven:			9
nem impakt fakt. publikáció magyarul:	0			idegen nyelven:			0
összesített impakt faktor[6]:	16,357			összes hivatkozás száma[7]:			0
összes hivatkozás száma önidézetek nélkül:							367
Magyarul könyv[8]/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Idegen nyelven könyv/atlasz:	0			könyvfejezet:	0	jegyzet:	0
Tud. fokozat megszerzése[9]: PhD:	0	MTA doktora:	0	levelező tag:	0	rendes tag:	0
Nemzeti úton megadott oltalmak száma[10]:	0			külföldön:[11]			0
Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos szóbeli előadások száma[12]:	7			poszterek száma[12]:			1
Tanácsadói tevékenységek száma[13]:							0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0			Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:			4
Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[14]:							2
TDK munkát készítő hallgatók száma:	0			Diplomamunkát(BSc):			0
Diplomamunkát(MSc):	0			PhD-t:			4
Felsőfokú graduális és posztgraduális oktatott órák száma[15]:							16
Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[16]:						0	MFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[17]:	0			Teljes saját bevétel[18]:		12	MFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel[19]:						0	MFt
OTKA forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						9	MFt
NKFP pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb NKTH pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
ÚMFT pályázati forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:[20]						0	MFt
Egyéb hazai pályázati témákból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
EU forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Egyéb nemzetközi forrásból a tárgyévre vonatkozó bevétel:						0	MFt
Nem pályázati külső megrendelés keretében kapott bevétel:						0	MFt