A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA KUTATÓHELYEINEK 2011. ÉVI TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEI

I.

Matematika és természettudományok

Budapest
2012

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 munkatársai

Szarka László főosztályvezető

Hegedűs Éva
Herczeg György
Redler László
Sugár Éva

Idei Miklós

TARTALOMJEGYZÉK

Előszó 5
A táblázatokkal kapcsolatos megjegyzések 7

Matematikai és természettudományi kutatóintézetek

Atommagkutató Intézet 11
Földrajztudományi Kutatóintézet 26
Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet 37
Geokémiai Kutatóintézet 48
Izotópkutató Intézet 56
Kémiai Kutatóközpont 66
  Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet 68
  Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet 78
  Kémiai Kutatóközpont Nanokémiai és Katalízis Intézet 88
  Kémiai Kutatóközpont Szerkezeti Kémiai Intézet 98
KFKI Atomenergia Kutatóintézet 108
KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet 119
Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet 134
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet 145
Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet 160
Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet 172
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet 187

Matematikai és természettudományi támogatott kutatócsoportok

BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport 203
BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport 207
BME Fémtechnológiai Kutatócsoport 211
BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport 214
BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport 218
BME Irányítástechnikai Kutatócsoport 222
BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport 226
BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport 230
BME Szerves Kémiai Technológiai Kutatócsoport 234
BME Sztochasztika Kutatócsoport 238
BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport 241
DE Homogén Katalízis Kutatócsoport 245
DE Számelméleti Kutatócsoport 249
DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport 253
ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport 257
ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport 261
ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport 265
ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport 269
ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport 273
ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport 277
ME Anyagtudományi Kutatócsoport 281

ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport 285
MTM ELTE Paleontológiai Kutatócsoport 289
PE Levegőkémiai Kutatócsoport 293
PPKE Infobionikai és Neurobiológiai Plaszticitás Kutatócsoport 297
SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport 301
SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport 305
SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport 309
SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport 313
SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport 317

ELŐSZÓ

E kötet egyike a 2012. május 7-8-i közgyűlés *„Beszámoló a Magyar Tudományos Akadémia kutatóhelyeinek 2011. évi tevékenységéről”* c. előterjesztés mellékleteinek: a három kötet tudományterületek (matematika és természettudományok, élettudományok, humán és társadalomtudományok) szerint foglalja össze a kutatóintézeti és támogatott kutatócsoporti beszámolókat.

A Magyar Tudományos Akadémiáról szóló 1994. évi XL. törvény értelmében az MTA kutatóhelyei évente beszámolnak tevékenységükről. A 2011-ről (az intézethálózat-átalakulás évéről) szóló tudományos beszámolóhoz az adatszolgáltatás a 2011. évi intézethálózati szerkezetben történt.

40 költségvetési intézmény: 9 élettudományi kutatóintézet és az SZBK (intézetei szerint részletezve), 13 matematikai és természettudományi intézmény (12 kutatóintézet és a Kémiai Kutatóközpont, intézetek szerint részletezve) és 17 társadalomtudományi kutatóintézet, valamint 79 támogatott kutatócsoport (amelyek közül 37 a beszámolási év végével megszűnt, 42 pedig 2012. január 1-jei időponttal újjáalakult) nyújtott be 2011-ről éves beszámolót.

A kutatóintézet-hálózat pénzügyi és személyi feltételeit, tudományos és egyéb eredményeinek összefoglaló adatait a korábbi évekhez hasonlóan elemeztük. A tudományos teljesítményre vonatkozó adatok és tendenciák (így a hivatkozások és impaktfaktorok, de maguk a publikációk alakulása is) a kutatóintézet-hálózat átszervezése előtti állapotokra vonatkoznak. A pénzügyi és személyi feltételek alakulása már tükrözi a változó 2011-es feltételeket. 2011-ről összefoglalóan megállapítható, hogy „dinamikus” év volt.

E beszámolókötetek mérföldkövet jelentenek az akadémia eredményeinek bemutatásában. Az Akadémia ugyanis 2011-ben végrehajtotta a kutatóintézet-hálózat szerkezeti keretének megújítását, és 2012-től már új szervezeti formában – új kutatóközpontok és megújult intézetek keretei között – folyik a kutatómunka. A szerkezetükben megújult több száz fős kutatóközpontokban létrejött az a kritikus tömeg, amely a nemzetközi pályázati térben is versenyképes kutatócsoportok számára biztosítja az együttműködésekhez szükséges tudáskomponenseket, erősíti az intézményhálózat konzorciumalkotó-képességét és a pályázati eredményességet. A versenyképesség növelésére irányuló törekvések egyik legfontosabb eszköze, hogy a megújult intézményi struktúrában a kutatásfinanszírozási rendszer jelentős részben az iskolateremtő egyéni kiválóságokon keresztül valósul meg. A szakmai megújulás másik fontos eszköze, hogy a stratégiai fejlesztési irányok összehangolását követően az intézethálózatban olyan teljesítménykövetelmények érvényesíthetők, amelyek teljesítésének értékelését nemzetközi testületek végezhetik.

Kutatóintézeteink és támogatott kutatócsoportjaink 2011. évi beszámolóinak gyűjteményes kötete teljes képet ad az MTA kutatóhálózatának számos kiemelkedő eredményt is felmutató tevékenységéről.

Budapest, 2012. április

Németh Tamás
főtitkár

A TÁBLÁZATOKKAL KAPCSOLATOS MEGJEGYZÉSEK

A táblázatban szereplő adatok többségét az intézetek vagy a csoportok adták meg, az intézetek pénzügyi és létszámadatait pedig a Költségvetési és Pénzügyi Főosztály szolgáltatta a pénzügyi beszámolók alapján. Többéves pályázatoknál mindig az adott évre eső összeg került feltüntetésre forintban.

A beszámolók táblázataiban indexszel megjelölt számok jelentései:

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

[2] A kutatói besorolásban lévő közalkalmazottak 2011. 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] Akadémiai fiatal kutatói álláshelyen és egyéb álláshelyen levő 35 év alattiak együtt.

[5] A publikációk közé soroltuk mindazon tudományos és tudományos ismeretterjesztő publikációkat, amelyeket a kutatóhely statisztikai állományi létszámába besorolt munkatársai jelentettek meg a beszámolási évben, és a publikáción szerepel a kutatóhely neve. Az egyes publikációtípusok meghatározásánál az MTMT definícióit vettük alapul.

[6] Tudományos publikációk alatt értjük azokat az új tudományos eredményeket vagy meglévő eredményeket tudományos igénnyel feldolgozó írásműveket, amelyek ellenőrzött formában hozzáférhetővé váltak a tudományos közösség számára az adott tudományterület írott és íratlan normáinak megfelelő színvonalon és kivitelben tartós adathordozón (pl. nyomtatott forma, nem magánjelleggel létrehozott weblap).

[7] Új kutatási eredményeket vagy kísérleteket leíró tudományos dolgozat, amely a) eredeti elméleti vagy empirikus kutatási eredményről számol be, az adott tudományterület elfogadott módszereit használja, a tudományos közösségnek szól; b) a vizsgált tudományterület eredményeinek összefoglalását, szintézisét nyújtja és új kutatási területeket, irányokat jelöl ki; c) a szakirodalomban való eligazodást, tartalomfeltárást szolgálja; d) ide számítjuk a térképeket is.

[8] Általában 48 oldal terjedelmet meghaladó, szöveget, illusztrációt tartalmazó, önálló kiadványként megjelentetett tudományos mű. Idetartoznak a monográfiák, egy-egy témát összefoglaló jelleggel bemutató kötetek. Dokumentumhordozó tekintetében lehet nyomtatott papíralapú (ekkor ISBN-számmal rendelkezik) vagy elektronikus formátumú, amely nem magánjelleggel létrehozott honlapon, internetes elérhetőséggel rendelkezik. A meg nem jelentetett, csak a doktori eljárás által előírt példányszámban készült disszertáció nem tartozik ide.

[9] Könyvrész, könyvfejezet (tanulmánykötetben megjelent tanulmány): egységes tematikájú könyv vagy tanulmánykötet részeként megjelenő, szerzővel, címmel, meghatározható terjedelemmel rendelkező, illetve önálló, kisebb egységként leírható (rész, fejezet) publikációs forma.

[10] A folyóiratok 2010. évi, 2011-ben közzétett impaktfaktorait használtuk.

[11] A kutatóhely állományában lévő kutatók 2011-ben kapott hivatkozásainak száma az MTMT számára leadott listák alapján. A bibliográfiai adatként szereplő művek száma itt nem szerepel.

[12] A tárgyévben kiállított oklevelek alapján.

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

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

[15] Azokat az előadásokat és posztereket is ideszámítottuk, amelyek konferencia-kiadványban nem jelentek meg, de dokumentálhatók.

[16] Itt csak a kormányszintű vagy ezzel ekvivalens országos és nemzetközi, nem megbízási díjért végzett szakpolitikai tanácsadó tevékenység, bizottsági részvétel számít.

[17] 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 témavezetését a beszámoló III., illetve IV. pontjában találjuk. Az adatok a 2010/2011-es tanév második és a 2011/2012-es tanév első szemeszterére vonatkoznak.

[18] A 2011. 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.

[19] 2011-ben az MTA-keretből a kutatóhely rendelkezésére álló fiatal kutatói álláshelyek száma.

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZETEK

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

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

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Kvantumfizika

Kvantumkorrelációkat vizsgálva valódi többrészű összefonódottságot detektálni képes egyenlőtlenségeket találtak bármely mérésszám mellett. A módszer eszközfüggetlen, és a 3-kubites Greenberger-Horne-Zeilinger állapotra optimális abban az értelemben, hogy ha a mérések száma végtelenhez tart, akkor a zajtolerancia 2/3-os küszöbértéke semmilyen 3-résztvevős egyenlőtlenséggel sem javítható.

Megmutatták, hogy a nemlokalitás nemadditív erőforrás, amely aktiválható. Konkrétan olyan részecskepárokat vizsgáltak, amelyeken végzett mérések közötti korrelációk klasszikusak (nem sértik a Clauser-Horne-Shimony-Holt-féle Bell-egyenlőtlenségeket). Ugyanakkor két ilyen részecskepárt véve a tenzorszorzat-állapot már az egyenlőtlenség sérüléséhez vezethet. A módszerek könnyen általánosíthatók kettőnél több részecskés nemlokalitás aktiválására is.

Az atommagok fázisátmeneteinek tanulmányozása kapcsán megvizsgálták az atommagok fürtösödését leíró félmikroszkopikus algebrai klasztermodellt. Értelmezték a modell egy fenomenologikus határesetét, amelyben a nukleonokra vonatkozó Pauli-elvet figyelmen kívül hagyták. Mindkét esetben azonosítottak első- és másodrendű fázisátmeneteket is. Példákként a ^{16}O+alfa és ^{20}Ne+alfa rendszereket tekintetve megállapították, hogy a Pauli-elvet figyelmen kívül hagyó modellből kapott energiaspektrum jelentősen különbözik a megfigyelttől.

A nemrelativisztikus kvantummechanika legáltalánosabb egzaktul megoldható potenciálfeladatát a hatparaméteres Natanzon-féle potenciálosztály képviseli. Megoldásokat eddig csak speciális esetekben vezettek le, pl. az ún. alakinvariáns potenciálokra. A hiányosságok pótlására a Natanzon-féle osztály egy olyan négyparaméteres halmazát tekintették, amely megoldásait a Jacobi-polinomok adják, és amelyek speciális esetként tartalmazzák mind a hat ennek megfelelő alakinvariáns potenciált. Kimutatták, hogy e hat potenciál páronként egymásba transzformálható a paramétertér három diszjunkt halmazán.

Az atommagok olyan potenciáljainál vizsgálták a szórásmátrix komplex energiájú pólusainak trajektóriáit, amelyek egy véges értektől kezdve azonosan nullák. Ilyenek a levágott Woods-Saxon (WS) potenciál és a Salamon-Vertse (SV) potenciál, amely simán megy át a nullába. Kimutatták, hogy WS esetén a rezonanciatrajektóriák erősen függnek a levágási távolságtól.

A ^{6,8}He magok töltéssugarainak értelmezése kapcsán a magok külső neutronjainak korrelációját vizsgálták a komplex energiájú konfigurációs kölcsönhatás módszerével. A ^{8}He töltéssugarának csökkenése a ^{6}He-hoz képest három tényező összjátékának eredménye: di-neutron korreláció, spin-pálya kölcsönhatás és a magtörzs megnövekedése. Megmutatták, hogy a ^{6}He 2_1^+ rezonanciaállapotában a di-neutron szögkoreláció más jellegű, mint az alapállapotbeli.

Héjmodell-számolással megadták a ^{56}Ni atommag kísérletből ismert szuperdeformált állapotának leírását. Ugyanaz a modell jóslatot adott a hiperdeformált állapot, sőt még megnyúltabb alakok létére is. A szerzők szisztematikusan megvizsgálták a talált alakizomérek lehetséges bináris fürtösödését (klaszterizációját) is. Eredményeik útmutatást adnak arra nézve, hogy milyen magreakciókban lehet keresni ezeket az egzotikus állapotokat.

A Hartree-Fock-Bogoljubov-egyenletekhez tartozó, nem-kötött kvázirészecskék spektrumát a határfeltételek explicit megadása nélküli módszerekkel tanulmányozták. A stabilizációs módszert az igen keskeny rezonanciáktól eltekintve mindenhol alkalmazhatónak találták.

Részecskefizika

A CERN nagy hadronütköztetője, az LHC, 2011 folyamán végig messze az eredetileg tervezett hatékonyság fölött működött. A kísérleti berendezések működtetésében az Atomki kutatóinak fontos szerep jutott. A CMS-kísérlet detektorának a debreceni csoport által épített és üzemeltetett része, a barrel-müon-detektor helyzet-meghatározó rendszere az LHC üzemelése alatt végig hibátlanul működött. Atomki-kutatók dolgozták ki a CMS észlelőrendszer biztonsági felügyeletének forgatókönyvét, és domináns szerepük van a detektor ellenőrzőrendszerének üzemeltetésében. Tevékeny részt vállaltak a CMS szíve, a részecskepályák meghatározásában kulcsszerepet játszó pixel-detektor üzemeltetésében és kalibrációjában is. A vizsgálatok egyik fő eredménye, hogy a Higgs-részecske lehetséges tömegét a két nagy LHC-kísérlet, a CMS és az ATLAS, 115 és 130 GeV közé szorította.

A részecskefizika-fenomenológia területén folytatták a második QCD sugárzási korrekciók elméletének kidolgozását. A négyfajta duplán feloldatlan levonási tagból kettőt sikerült integrálniuk a feloldatlan partonok fázistere felett. Eljárást adtak e bonyolult integráloknak elegendően pontos, gyors numerikus számítására.

Két szabadon elérhető számítógépes program ötvözésével olyan parton-szintű eseményeket generáltak, amelyek partonzápor Monte Carlo programok segítségével egészen a hadron szintig fejleszthetők. Ezzel a módszerrel pontos becslést adtak proton-proton ütközésekben $t\bar{t}$ + X végállapotok hatáskeresztmetszeteire, ahol X egy nagyenergiájú részecskét jelent a Standard Modelben (Higgs-részecske, Z-részecske, hadronikus jet), illetve a Minimálisan Szuperszimmetrikus SM-ben (pszeudoskalár Higgs-részecske).

A bozonizáció és a renormálási csoport kapcsolatát vizsgálva sikerült a kétdimenziós alacsonyenergiás kvantumszíndinamika viselkedését meghatározni. A bozonizációt felhasználva egy új módszert dolgoztak ki a renormálási csoport sémafüggésének optimalizálására.

Magfizikai alapkutatás

Az atommag szerkezetének megértésében fontos szerepet játszó mágikus számok a protonok és neutronok arányának jelentős változása esetén eltolódnak. Könnyű (N,Z<20) magokban ennek a proton-neutron monopol kölcsönhatás az oka. Ez az egyrészecske-energiákat neutronszám-függővé teszi. Kutatóik a ^{39,41}Si magok szerkezetét a GANIL nehézion-

laboratóriumban vizsgálva kimutatták, hogy nehezebb magokban, ahol a mágikus számok nem oszcillátor-héjzáródáshoz kapcsolódnak, a valenciaprotonok és -neutronok számával arányosan erősödő kvadrupólkorreláció relatíve nagy héjközöknél is deformálni tudja az atommagot.

A Nukleáris Kémia Kézikönyvének 2. kiadása 2011-ben jelent meg, jelentősen kibővítve és átszerkesztve, 6 kötetben, számos Atomki-beli cikkel. A főként magfizikát tartalmazó I. kötetet az Atomki kutatója szerkesztette.

Az ^{232}U atommag hasadási valószínűségét a ^{231}Pa(^{3}He,df) reakcióban 11 keV energia-felbontással vizsgálták. 4,8 MeV gerjesztési energia körül hiperdeformált, 5 MeV gerjesztési energia körül pedig szuperdeformált magalakra jellemző rotációs sávokat találtak.

A PPAC detektorokból készült 4π térszögű OBELISK detektorrendszert alkalmassá tették töltöttrészecske-indukált hasadás vizsgálatára.

Feldolgozták a hasadási termékek bomlásánál keletkező reaktorhő jelentős járulékát adó néhány magas olvadáspontú izotóp bétabomlásának korábban általuk mért kísérleti adatait.

A Debrecenben épített LENA (Low Energy Neutron detector Array) prototípusát Los Alamosban tesztelték és a GEANT szimulációs számításokkal hasonlították össze az eredményeiket. A szimuláció eredménye jól egyezett a kísérleti válaszfüggvénnyel. A LENA detektor inverz kinematikájú (p,n) reakcióban keletkező, kisenergiás neutronok detektálására készült. Az első sikeres kísérleteket Darmstadtban, a GSI-ben az R3B és EXL együttműködésekben az elmúlt év végén végezték vele.

A Sc izotópok spin-izospin dipólus gerjesztéseit (^{3}He,t) töltéscserélő reakcióban az osakai RCNP-ben 420 MeV-es bombázó energiánál vizsgálták nagy energiafelbontással. Mindegyik állapotra megmérték a szögeloszlást, ezek alapján kiválogatták a dipólusgerjesztéseket, és elsőként határozták meg a relatív spin dipólus erősségek eloszlását. A ^{40}Sc esetén az alacsonyan fekvő spin-dipólus erősségeloszlás különös, periodikus jelleget mutat, amely egy ħω = 1,8 MeV paraméterrel rendelkező puha csillapított többfononos vibrációs sávra emlékeztet, ami esetleg a nukleonpárok vibrációjával értelmezhető.

A ^{92}Pd atommag gerjesztett állapotait vizsgálták a ^{58}Ni(^{36}Ar,2*n*) fúzió-párolgás típusú magreakcióban. Az N=Z magokban különösen erős korreláció várható az azonos kvantumszámokkal jellemzett állapotokban lévő protonok és neutronok között. A kísérleti eredmények héjmodell-számításokkal történt összevetése alátámasztja, hogy ezen atommagban az izoskalár proton-neutron párkölcsönhatás megjelenik, és fontos szerepet játszik a gerjesztett állapotok tulajdonságainak kialakításában.

A királis-jelölt ^{134}Pr atommag közepes- és nagyspinű gerjesztett állapotait vizsgálták a ^{116}Cd(^{23}Na,5*n*) magreakcióban. Meghatározták az állapotok jellemzőit, és számos új forgási sávot azonosítottak. Kimutatták, hogy ezek egyike királis párja lehet a korábban azonosított királisjelölt sávok valamelyikének. Ez felveti a ^{134}Pr mag királis jellegének újragondolását.

A ^{155}Gd közepes- és nagyspinű állapotait gerjesztették ^{154}Sm(α,3n) reakcióban. Kimutatták, hogy az [505]1/2 kvázineutron egyrészecske-állapot csatolódik a ^{154}Gd gamma-vibrációs sávjához, de nem csatolódik a korábban beta-vibrációsnak tekintett sávhoz. Ez az eredmény alátámasztja, hogy a ^{154}Gd első gerjesztett 0^{+} állapotára épülő sáv nem béta-vibrációs sáv, hanem egy második kvázirészecske-vákuum állapotra épülő sáv.

A ^{79}Kr nagyspinű állapotait vizsgálták ^{70}Zn(^{13}C, 4n) reakció felhasználásával, a $\pi g_{9/2}^{2} \otimes \nu g_{9/2}^{-1}$ konfigurációnak megfelelő királis forgási sávpár kimutatása céljából. Azonosították egy oldalsáv néhány állapotát, amelyek jó jelöltek a keresett királis partnersávra.

Bebizonyították, hogy a karakterisztikus röntgensugárzás detektálásán alapuló aktivációs módszer alkalmas a nehéz magok tartományában asztrofizikai jelentőségű α-indukált reakciók hatáskeresztmetszetének mérésére. A módszer hatékonyságát a $^{169}Tm(\alpha,\gamma)^{173}Lu$ reakció vizsgálatával demonstrálták és megmutatták, hogy az elméleti számítások jelentősen túlbecsülik a mért hatáskeresztmetszetet.

A ^{110}Cd és ^{116}Cd magokon végzett nagy pontosságú rugalmas szórási mérésekkel kimutatták, hogy a globális optikai potenciálok nem képesek reprodukálni a szórási hatáskeresztmetszeteket, illetve azok proton- és neutronszámtól való függését.

A $^{14}N(p,\gamma)^{15}O$ reakció kísérleti vizsgálatával új, pontosabb értéket határoztak meg a reakció extrapolált S-faktorára, mely a hidrogénégés CNO ciklusa szempontjából nagy jelentőségű.

A $^{15}N(p,\gamma)^{16}O$ reakció hatáskeresztmetszetét minden eddiginél alacsonyabb energián mérve jóval kisebb értéken pontosították a reakció hidrogénégési folyamatokra jellemző sebességét.

Az asztrofizikai szempontból fontos $^{2}H(d,p)^{3}H$ és $^{2}H(d,n)^{3}He$ reakciók hatáskeresztmetszetét határozták meg az ún. Trójai Faló indirekt mérési technika alkalmazásával 1,5 MeV és 2 keV energiatartományban.

Japán kutatókkal együttműködésben a ^{27}P rezonanciaállapotainak vizsgálatával a $^{26}Si(p,\gamma)^{27}P$ reakció nóvákban történő lejátszódási valószínűségét határozták meg.

Befejezték az A=129 tömegszámhoz tartozó összes ismert nuklid szerkezetére vonatkozó új kísérleti adatok kritikai kiértékelését. Összegyűjtötték és kritikailag kiértékelték az A=128 tömegszámhoz tartozó összes ismert nuklid szerkezetére vonatkozó új kísérleti adatokat, megtörtént a publikálás előkészítése.

Magfizikai alkalmazások

Protonnyalábos mikromegmunkálással konvex mikrolencsemátrixot készítettek, miután meghatározták az ionnyaláb hatására végbemenő kompaktálódást, kémiai és törésmutató-változást a poli(dimetilsziloxán) polimer (PDMS) anyagban.

A kulturális örökség megőrzése érdekében folyó CHARISMA EU FP7-es projekt keretében 7 méréssorozatot végeztek 2011-ben, összesen 10 külföldi kutatót fogadtak Belgiumból, Bulgáriából, Görögországból, Németországból és Romániából. Vizsgáltak őskori betétes és antik kerámiákat, piramisokból származó mintákat, bizánci aranyozott üvegmozaikokat, kárpát-medencei leleteket, középkori dísztárgyakat és textilekben alkalmazott fémszálakat.

A pásztázó nukleáris mikroszonda berendezés két Si(Li) detektoros PIXE (C-Ca/Ca-U) mérőrendszerét HP(Ge) és NaI(Tl) gamma-detektorokkal, valamint egy korszerűsített, pA-érzékenységű „beam chopper”-rel egészítették ki. A PIGE technika alkalmazásával a fluor detektálási határértékét ~0,01%-ra csökkentették.

Dél-afrikai együttműködésben $^{166}Ho/^{166}Dy$, valamint $^{90}Sr/^{90}Y$ generátorokkal végzett kísérletekkel bizonyították, hogy a béta-sugárzó izotópok is mutathatnak a magvisszalökődésre hasonlító jelenséget, ha bomlásukat Auger-kaszkád kíséri. Becslési módszert adtak a kémiai kötés energiájára más béta-bomló izotópok esetén is. Ennek nagy jelentősége lehet az in vivo radioizotópos terápiában, és forradalmasíthatja a lantanidák radioizotópjainak elválasztását.

Újszerű izotópos módszerrel tanulmányozták a különböző vas és króm felületi helyek szerepét a metanol katalitikus átalakulásában cérium-oxid hordozón. A ^{12}C- és a ^{11}C-jelzett metanol egymást követő alkalmazása lehetővé teszi a katalitikusan aktív felületek, ezen belül a gyenge és erős kémiai kötések meghatározását. Az alkalmazott gázkromatográfiás analízis során a hagyományos detektorok mellé egy radioaktivitást mérő detektort is beiktattak.

Alkalmazási célokra, magadat mérésekkel töltöttrészecske-reakciók aktivációs hatáskeresztmetszetét és hozamát vizsgálták. Deuteron-besugárzással végeztek méréseket Mg, Nd, Yb, Cr, Tb, Dy, Si, Eu, Pb, Sb, Tb, C, Sc, Gd-céltárgyakon a belgiumi Cyclone90 ciklotronnál.

A saját fejlesztésű epitermikus neutronanalizátor (ETNA) alkalmazhatóságát vizsgálva átfogó tanulmányt készítettek azokról a módszereikről, melyekben neutronokkal történő expozíciót használnak a vizsgált térfogatban levő robbanóanyagok és kábítószerek kimutatására.

Gyorsneutronokkal polikristályos CVD gyémánt alapú eszközöket sugároztak be a RadiCal EU FP7 projekt számára. A külföldi partnerekkel együttműködve tanulmányozták a neutronok okozta sugárkárosodási hatásokat. A téma keretében nagy sugárzástűrésű on line dozimétermátrixok fejlesztése folyik elsősorban sugárterápiás célokra.

Az ausztriai AC^2T intézettel együttműködésben új módszereket dolgoztak ki kopás, korrózió és erózió radioaktív izotópokkal történő vizsgálatára, és ezt a gyakorlatban is alkalmazták.

A NAÜ FENDL 3 projektje részére adatbázist készítettek proton- és deuteronindukált reakcióknak a fontosabb szerkezeti anyagokra vonatkozó aktivációs hatáskeresztmetszetére nagy intenzitású gyorsítók és céltárgyrendszerek tervezéséhez és sugárvédelméhez.

Vizsgálták a ^{201}Tl, ^{123}I, ^{167}Tm, ^{99}Mo(^{99m}Tc), ^{113}Sn/^{113}mIn, ^{177g}Lu ,^{76,77}Br, ^{88,89}Zr orvosi izotópok előállítási körülményeit, különös tekintettel a keletkező szennyező radioizotópokra.

A PHARMATOM projekt keretében a radiokémiai labor felújítása befejeződött (Két forrófülke, ^{18}F, és ^{11}C izotópokkal jelzett radiofarmakonok előállítására szolgáló készülékek). A kémiai szintézisek folynak, a célvegyületek előállításának optimalizálása folyamatban van.

Atomfizikai alapkutatás

Nagyenergiájú csupasz ionok H és He atomokon történő szóródását vizsgálták Born- és torzított hullámú közelítésben. A vizsgálatok a szögeloszlásban megfigyelhető ún. kritikus szögek értelmezésére irányultak. Számításaik egyelektron-gerjesztések esetén egyetlen kritikus szóródási szög jelenlétét mutatják. Ez ellentmondásban van a közelmúltban végzett egyszeres elektronbefogási kísérlet eredményével. Ott a fenti kritikus szögön kívül további szögeknél is megfigyeltek csúcsokat. A többszörös szórási elméletek szerint több kritikus szöget csak két vagy több elektron gerjesztődésével járó folyamatok eredményezhetnek.

H^0 + He ütközésre végeztek méréseket az Atomki 1,5 MV-os Van de Graaff gyorsítóján. A motivációt G. Laricchia és csoportjának mérései adták. A londoni csoport pozitroniumnak (Ps) atomokon és molekulákon történő szóródását vizsgálta, és azt a meglepő eredményt kapta, hogy a Ps-hatáskeresztmetszetek nagy hasonlóságot mutatnak az ugyanolyan sebességű elektronok szóródási hatáskeresztmetszeteivel. A két lövedék (H^0 és Ps) összehasonlítása azért érdekes, mert mindkettő semleges, különbség csak a tömegükben van.

A töltés-kicserélődési reakciót tanulmányozták elméletileg keV-es energiájú C^{2+} - HCl ütközésekben. Kimutatták, hogy a töltés-kicserélődést a bemeneti és a legmagasabb energiájú kimeneti csatorna közötti erős nem-adiabatikus radiális csatolás vezérli, és a hatáskeresztmetszet 3 keV ütközési energiánál maximumot mutat. Ez a viselkedés teljesen eltér a hidrogén-fluorid céltárgyas ütközés esetében kapott, ’két-elkerült-kereszteződéses’ folyamattól, ahol a töltés-kicserélődési hatáskeresztmetszet az ütközési energiával fokozatosan nő. Az eltérés a töltéskicserélődés erősen rendszerspecifikus jellegére utal, azaz hasonló elektronkonfigurációjú céltárgyak esetében is különböző mechanizmus várható.

Négyatomos Renner-Teller-típusú molekulák (pl. acetilén kation) energiaszintjeinek degenerációit vizsgálták, a molekulát a lineáris konfigurációjából kismértékben elhajlítva. A

degenerált állapotokra kidolgozott másodrendű perturbációs elmélet segítségével kimutatták, hogy ilyenkor a Renner-Teller-típusú degeneráció két, kónikus jellegű degenerációvá hasad fel, melyek relatív térbeli helyzetére reciprok összefüggés teljesül.

Modellezték a néhány keV energiájú OH^+ + Ar és OH^+ + CH_3COCH_3 ütközésekben észlelt H^- anionok keltésének mechanizmusát. Megmutatták, hogy a H^- ionok keltése akkor valószínű, ha mindkét ütköző partneren található többelektronos atomi centrum.

Víz és metán molekulák szétesését vizsgálták közepes (65 keV/u) energiájú N^+ ionbombázással a VdG-5 újonnan kiépített nyalábcsatornáján. Az ütközésekben a többszörös ionizációt követő fragmentációs csatornák bizonyultak dominánsnak.

Az elektron-ciklotronrezonanciás (ECR) ionforráson plazmadiagnosztikai méréseket végeztek. A nagyfelbontású látható fény és röntgen fotók egymással és számítógépes szimulációkkal való összevetéséből értékes információkat kaptak a plazma elektron-komponenséről és az ionok csapdázásáról.

Vasplazmát állítottak elő az ECR ionforrásban, miután kicserélték a NdFeB radiális mágnes csapdát és megnövelték az axiális mágneses teret. Az így nyert nagytöltésű vasionokat az előre elkészített fullerén (C_{60}) rétegekbe implantálták. A vasatomok jelenlétét a várt és kiszámított mélységben az Atomki SNMS berendezésével igazolták. Ez volt az első lépés a végső cél, egy új fullerénanyag, a szénketrecbe zárt vasatomok előállítása irányában.

Atom- és molekulafizikai kísérletekben a molekuláris és negatív ionok egyre jelentősebb szerepet játszanak. Az ECR ionforrással H^-, O^-, OH^-, O_2^-, C^-, C_{60}^- negatív ionnyalábot (μA intenzitással) és H_2^+, H_3^+, OH^+, H_2^+, H_3^+, O_2^+ pozitív molekulaion-nyalábokat (mA intenzitással) állítottak elő. Az ATOMKI-ECRIS újra bebizonyította, hogy különböző követelményeket (plazmafizikai kutatások, alacsonyenergiás atomfizikai mérések, alkalmazások) is ki tud elégíteni egy ilyen többcélú berendezés.

A Kr 4*p* fotoelektronjainak szögeloszlását mérték olyan fotonenergia-tartományban, ahol a 3*d* elektronok rezonáns gerjesztése is lejátszódik. Az elektronspektrumokból meghatározták a bal-jobb aszimmetriaparaméterek gerjesztő fotonenergiától való függését. Azt tapasztalták, hogy az aszimmetriaparaméterek érzékenyek a direkt ionizációs és a 3*d* rezonáns gerjesztési csatornák közötti kölcsönhatásra. Fontos megfigyelés, hogy a $3d_{5/2} \rightarrow 5p$ rezonanciánál az aszimmetriaparaméter – a 4*p* fotoelektronok mindkét spin-pálya komponensére – pozitívból negatívvá válik, majd újra pozitív lesz 250 meV-es fotonenergia-tartományon belül.

Az Atomki ECR ionforrásánál 3 keV-os Ar^{7+} ionok áthaladását vizsgálták polikarbonát fóliában (PC) sűrűn elhelyezkedő nanokapillárisokon, a hollandiai KVI Zernike LEIF laboratóriumban pedig Ne^{7+} ionok terelődését polietilén-teraftalát (PET) fóliában kialakított, ugyancsak nagy sűrűségű kapilláris mintákban. Az ionterelődés a sűrű mintáknál is mindig szabályosan kialakult, ám egy idő után a kapillárisok részlegesen, vagy teljesen elzáródtak. Az elzáródási hajlam a kapilláris hosszával növekedett, de a lövedék energiájával csökkent. Elemzésük szerint az elzáródást a kapillárisok nagy sűrűsége esetén a minták elektromos túltöltődése okozza, ám a különböző anyagoknál a mechanizmus nem teljesen azonos. Míg PET mintáknál az átjutott semleges atomok többnyire a kapillárisok bejáratánál keletkeznek, PC minták esetén döntő többségük a kapillárisok kijárata környékéről származik.

Atomfizikai és szilárdtestfizikai alkalmazások, felületkutatás

Ar^+-ionbombázással módosított, hőkezelt Pd-Au ötvözetek elektronspektroszkópiai módszerekkel történő tanulmányozásával a komponensek felületi koncentrációjának változását vizsgálták. Ezek a rendszerek a tüzelőanyag-cellákban történő alkalmazásuk miatt fontosak.

Az urán és transzurán vegyületek VVER típusú nyomottvizes reaktor rozsdamentes acél szerkezeti anyagain történő akkumulációját tanulmányozták laboratóriumi modellkísérletekben, egy országos projekt keretében. A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a transzurán vegyületek monorétegnél kisebb mennyiségben vannak jelen a felületen, míg a főként UO_2-ként azonosítható uránvegyület mennyisége a felületen nagyobb, mint egy monoréteg.

Fém hordozóra felvitt grafénrétegek és a fém-grafén határrétegek kémiai szerkezetét határozták meg XPS módszerrel a Koreai–Magyar Közös Nanotudományi Laboratórium keretében budapesti és koreai kutatókkal végzett közös kutatások során.

Új anyagtudományi és felületfizikai laboratóriumot alakítottak ki az Atomkiban. A laboratóriumban helyet kapott az MTA Kémiai Kutatóközpontja által átadott laterális feloldással és monokromátorral rendelkező ESCASCOPE elektronspektrométer is.

Szinkrotronsugárzással keltett Fe 1s és Ni 1s fotoelektron-spektrumokat vetettek összse modellszámításokkal. Eredményeik megerősítik az elektronszórás-korrekcióra alkalmazott eljárásuk és az 1s vonalak aszimmetriájának leírására használt modellük érvényét.

Pd szubsztrát felületére felvitt Ni nanoréteg példáján megmutatták, hogy a szinkrotronsugárzásos, un. szögfeloldású keményröntgen fotoelektron-spektroszkópiai módszer alkalmazható nagyenergiájú fotoelektronok fémekre vonatkozó gyengítési hosszának meghatározására.

Kiterjedt Monte Carlo számításokkal vizsgálták a többszörös elektronszórás hatását szilártestekről visszaszóródott elektronok spektrumaira. A számításokat gyémánt- és HOP-mintákra és relativisztikus elektronenergiákra végezték el.

Elsőként vizsgálták az ionterelés hőmérsékletfüggését a terelési jelenség mechanizmusának, a kapilláris belső felületén kialakuló töltésfolt felépülésének és dinamikájának alaposabb megértéséhez. Ez az ionterelés optimalizálása az alkalmazások szempontjából is fontos. Ehhez új hűthető-fűthető mintatartót terveztek. A mérések a Bécsi Műszaki Egyetemen történtek.

A 300-1000 eV energiatartományban megvizsgálták az elektronok egyedi, makroszkópikus méretű üvegkapillárison történő átvitelét. A kísérletek az elektronterelés energia- és időfüggése szempontjából is számos új megfigyeléshez vezettek.

Elektrokémiai leválasztással előállított lágymágneses vékonyfilmek mélységi elemösszetételét, szerkezetét vizsgálták egy erre kifejlesztett mélységprofil-analízis módszerrel. Ezzel a hordozó-közeli tartomány nm-es mélységi feloldással elemezhető, és a néhány 100 nm vastagságú NiCd, NiSn, FeCoNi, CoNi és CoNiCu ötvözetekből készített vékonyfilmek előállításakor lejátszódó elektrokémiai folyamatok tanulmányozhatók. Megállapították, hogy a kiválási folyamatban fellépő összetétel-változás az első 150 nm-es zónára szűkül a preferenciális leválási folyamat és az elektrolit katódközeli kiürülési folyama által megszabott módon.

Kémiai gázleválasztási technikával előállított félvezető Ga, As és Ge filmekben a leválasztás alatti diffúziós folyamatokat vizsgálták. Kidolgoztak egy eljárást, amivel az előállítás során fellépő nemkívánatos atomi keveredéseket gátolni lehet. Kémiai gázleválasztási technikával előállított ZnO rétegek – melyek optikailag áteresztő és elektromosan is jól vezető tulajdonságokkal rendelkeznek – termikus stabilitását vizsgálták vékonyfilm-napelemekben történő felhasználás céljából. Az eredmények a magyarországi napelemgyártásban hasznosulhatnak.

Elektrokémiai rétegleválasztásos technikával előállított Co/Pb ferromágneses/szupravezető rétegszerkezetek elektronvezetési mechanizmusát vizsgálták alacsony hőmérsékleteken a

hőmérséklet és az elemösszetétel függvényében. Kísérletileg igazolták, hogy a szakirodalom állításával ellentétben CoPb ötvözetet elő lehet állítani elektrokémiai módszerrel.

Elméleti számolásokkal vizsgálták és analizálták az időben változó mágneses térbe helyezett szuperparamágneses tulajdonságú nanorészecskék energiaveszteségi folyamatait.

Nanoporokat állítottak elő nagy energiájú mechanikai őrléssel szuperionos kristályokból kompozitok és kerámiák készítése, majd azok fizikai tulajdonságainak kutatása céljából (a DE KFI és az Ungvári Egyetemmel együttműködésben). A porok kristályszerkezetét és szemcseméret-eloszlását XRD módszerrel tanulmányozták.

Kis teljesítményigényű, kis zajú előerősítőt készítettek szilícium lavina-fotodióda (APD) kiolvasású CsI(Tl) töltöttrészecske-detektorokhoz vákuumban történő üzemeltetés céljára.

Szilícium lavina-fotodióda (APD) kiolvasású CsI(Tl) detektor és digitális részecskediszkrimináció együttes alkalmazásával sikerült a proton/alfa szeparáció küszöbenergiáit a korábban fotodióda-kiolvasással és analóg diszkrimináció segítségével elért ≈ 2,1MeV / 4,5 MeV értékről ≈1,2 MeV / 3,2 MeV értékre csökkenteni.

Meghatározták a monolit, nem szegmentált, szcintillátorra alapozott helyzetérzékeny detektorral elérhető 3-dimenziós térbeli feloldóképességet korlátozó tényezőket és meghatározták a feloldás leírására szolgáló formulákat.

A plazmon keltését és bomlását is figyelembe vevő modelljük segítségével megvizsgálták az elektronok energiaveszteségi folyamatait InSb-ben. Az elektronspektroszkópiai (REELS) mérésekből arra a következtetésre jutottak, hogy az energiaátadásban meghatározó plazmonszélesség túl nagy volta alapján InSb detektorokkal nem várható jó feloldás, még a keskeny tiltott sávszélessége ellenére sem.

Elkészítettek egy 18x18 elemű, egyenként 10 mm^2 érzékeny felületű szilícium fotoelektronsokszorozóból felépített helyzetérzékeny fotodetektor-mátrixot egy 49x49 mm^2 összfelületű, 35x35 elemű LYSO szcintillátortűkből felépített mátrix segítségével kialakítandó MRI kompatibilis kisállat-PET detektoregység létrehozása céljából.

Környezetfizika

A K-Ar kronológiai kutatás terén összefoglaló tanulmányt készítettek a San Salvadorban végzett vulkanológiai és geokronológiai vizsgálatok eredményeiről. Az antarktiszi projektben magyar–lengyel együttműködésben a King George Islandot tanulmányozták. Mélységi és kiömlési magmás kőzetek kronológiája kapcsán méréseket végeztek a Cseh Masszívumban és a Dunántúlon. Agyagásványok kormeghatározásával kisfokú metamorfitok átalakulási idejét vizsgálták. A földművelés hatását vizsgálták hazai talajokon.

A Hertelendi Ede Környezetanalitikai Laboratóriumban megtörtént az EnvironMICADAS gyorsítós C-14 tömegspektrométer (AMS) telepítése és átfogó tesztje. Lezajlott az AMS C-14 méréséhez szükséges minta-előkészítő módszerek kidolgozása, a szükséges rendszerek építése, beüzemelése és átfogó tesztje: szilárd szerves és szervetlen mintákra, külön a régészeti mérésekhez a csontok kollagénjére, valamint vízkorméréshez vízben oldott szervetlen szénre. Egyszerre nyolc párhuzamos zártcsöves grafitizációs reakciócella együttes kezelésére alkalmas egyedi gázkezelőrendszert építettek ki, és átfogó tesztet végeztek a MICADAS típusú gyorsítós tömegspektrométerrel. Egyéves légköri aeroszol C-14 mérési sorozatot végeztek Debrecen belvárosában gyűjtött havi átlagmintákból, párhuzamosan az ugyanitt végzett légköri CO_2 radiokarbon mérésével.

Új, az eddig ismerteknél jobb és jobban standardizálható módszert vezettek be a cseppkövek folyadékzárványaiban lévő nemesgázok méréstechnikájához. A tyúktojás fehérjéjében lévő víz stabilizotóp-összetételének mérése céljából új módszert fejlesztettek ki, összefüggést kerestek a fehérje és az itatóvíz izotóp-összetétele között. Forrásvizek oldott gáztartalmát mintázták passzív, diffúziós technikával, $^{3}H/^{3}He$-kormeghatározást végeztek vizeken.

Gázföldtani és gázáramlástani modellszámításokat végeztek a mofettagázoknak a felszín közeli talajrétegekben való transzportjának leírására, és azt összevetették a mátraderecskei száraz szén-dioxid fürdőnél létesített kutatófúrásnál végzett gázhozam-méréseik eredményeivel. Kimutatták a felszíni hőmérséklet és a légnyomás változásainak a gázhozamra való hatását.

A fukusimai reaktorbalesetet követően Magyarország légterében mérték a ^{131}I, ^{134}Cs és ^{137}Cs aktivitáskoncentrációját, dózisjárulék-számításokat végeztek. Fejlesztették a ^{79}Se (nehezen mérhető izotóp) aktivitáskoncentrációja meghatározásának módszerét kis- és közepesen aktív folyékonyhulladék-mintákban az Atomki ciklotronlaboratóriumában termelt ^{75}Se nyomjelző segítségével. A kimutathatósági határt a korábbi kb. 10000 Bq/l-ről 100 Bq/l alá szorították le. Kiértékelték a Bátaapáti NRHT környezetmonitoring részeként végzett terepi (InSitu) gamma-spektrometriás felméréseket. Új folyadékszcintillációs méréstechnikát dolgoztak ki lúgban oldott karbonátok ^{14}C mérésére, mely atomerőművek és nukleáris hulladékkezelő létesítmények légnemű ^{14}C-kibocsátásának mérését nagyban egyszerűsítheti. A Paksi Atomerőműhöz közeli fák évgyűrűiben megvizsgálták a ^{14}C-kibocsátást a 2000–2009 időintervallumban.

A 1993–2011 közötti időszakra megállapították a kelet-magyarországi régióra jellemző légköri aeroszol összetételének és forrásainak hosszú távú tendenciáit és szezonális változásait. Órás feloldású mintavételi technika, nukleáris analitika, valamint egyedi szemcseanalízis és statisztikai módszerek alkalmazásával meghatározták az epizódszerűen megjelenő koncentrációnövekedések eredetét. Egy téli és egy nyári kampányt folytattak a szállópor-szennyezettség felmérésére debreceni oktatási intézményekben. Elemezték a tantermekben a légköri aeroszol koncentrációját, összetételét és méreteloszlását. A forgalmas utak mellett fekvő iskolákban és óvodákban minden esetben magasabbnak találták a szálló por koncentrációját a WHO által javasolt egészségügyi határértékeknél. Meghatározták az Atomki különböző munkahelyein a légköri aeroszol koncentrációját, összetételét, forrásait, szezonális változásait, valamint megfigyelték az ablakcsere hatását.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az Atomki hagyományos ismeretterjesztő programjának, a márciusi Fizikusnapoknak 2011-ben a fő gondolata az atommag felfedezésének 100. évfordulója volt. A diákok és más érdeklődők előadásokban ismerkedhettek meg Rutherford felfedezésével és annak a fizikában betöltött szerepével. A legendás kísérletet a részecskéket megszemélyesítő diákok az udvaron is eljátszották. A rendezvénynek olyan programpontja is volt, amikor egy adott időpontra gyülekeztek az érdeklődők, és szervezett vezetés mellett megtekinthették az intézet néhány érdekes laboratóriumát. A program részét képező rendhagyó fizikaórákon való részvételt is tekintetbe véve a Fizikusnapokat 2011-ben is nagy érdeklődés kísérte, a résztvevők száma kb. 1900 fő volt.

A szervezett események mellett kényszerű ismeretterjesztésre is sort kellett keríteni; a fukusimai tragikus balesetet kísérő érdeklődésre az intézet képviselői, kutatói tájékoztatással tudtak szolgálni mind a médiának, mind a lakosságnak.

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

Ismeretterjesztő előadásokkal szerepeltek az Atomki kutatói az MTA májusi közgyűléséhez kapcsolódó rendezvényen. Témaként szerepelt Rutherford aktualitása, a korszerű magfizikai detektorrendszerek, a magfizika európai perspektívái, de a jubiláló magfizikai témák mellett ezúttal is szerephez jutottak a mindig érdeklődéssel kísért környezetfizika témái; radiokarbonos kormeghatározás, ionmikroszkópia.

Júniusban a fizikai kutatás frontvonalával ismerkedhettek meg a debreceniek egy CERN-ről szóló kiállításon. A lebonyolításban alapvető szerepet töltöttek be az Atomki kutatói. A nyitva tartás hét napján állandó ügyelettel, valamint csoportoknak tartott tárlatvezetéssel segítették elő, hogy az összesen több mint 500 főnyi látogatónak élményszerű legyen a kiállítás.

Az MNT ifjúsági szakcsoportja, a Fiatalok a Nukleáris Energetikáért csoport működése keretében az Atomki fiatal kutatói is részt vettek a debreceni nyári CAMPUS fesztiválon a nukleáris energetikával kapcsolatos ismeretterjesztésben.

2011 nyarán a Debreceni Egyetem és az Atommagkutató Intézet közös rendezésében valósult meg az Élő Fizika Nyári Tábor. A kutatók érdeklődő középiskolás diákokat fogadtak, a fiatalok az egyhetes program alatt részt vettek egy rövid kutatási, mérési feladat kidolgozásában.

Szeptemberben a Kutatók Éjszakája jelentett lehetőséget a tudománnyal való találkozásra. A BME-vel közösen szervezett eseményen a szupravezetés jelenségkörével és alkalmazásának lehetőségeivel ismerkedtek meg az Atomkiba látogatók. Az előadásra zsúfolásig megtöltötték a termet, majd látványos kísérleteket figyelhettek meg.

Novemberben a Magyar Tudomány Ünnepe keretében az ismeretterjesztés a megújuló energiák hasznosítása, a környezetfizika, az innovatív gyógyszerfejlesztések és a másodfajú szupravezetők témakörében zajlott. Az Élő Fizika programban decemberben egy magfizikai témájú előadással is részt vett az intézet.

A népszerűsítő tevékenységnek része az ismeretterjesztő cikkek írása is. 2011-ben a Természet Világa és a Fizikai Szemle hasábjain nyolc cikk jelent meg az Atomki kutatóinak tollából. A Debreceni Városközpont és a helyi hírlapok is szolgáltak információval az Atomkiról. Szerepeltek a kutatók az OTKA és az MTA honlapján, a Légkörkép c. magazinműsorban, a Duna Televízióban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A hazai intézményekkel folyó együttműködések a korábban kötött megállapodásoknak és a kialakult gyakorlatnak megfelelően folytak 2011-ben is. Első helyen lehetne említeni a Debreceni Egyetem sok tanszékét és az RMKI-t. A további partnerek felsorolása hosszú listát képezne. Fontos eleme volt az intézet működésének a Paksi Atomerőmű (Paks), a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Közhasznú Nonprofit Kft. Radioaktív Hulladékkezelő és Feldolgozó Telephelye (Püspökszilágy) és a Nemzeti Radiokatívhulladék-tároló Telephelye (Bátaapáti) környezeti monitoring rendszerének üzemeltetésében, kibocsátás-ellenőrzésében, technológiai rendszerei üzemi paramétereinek diagnosztizálásában, valamint a hulladékminősítési eljárásokban való részvétel.

Az intézet 2011-ben megtartotta korábban is betöltött szerepét a felsőoktatásban, a Debreceni Egyetemmel fenntartott hagyományos kapcsolatait. Az Atomki kutatói a beszámolási időszakban meghirdetett 42 kurzus keretében 745 tantervi óra megtartásával járultak hozzá a

Debreceni Egyetemen (DE) folyó oktatáshoz. A gyakorlati órák száma a DE-n 2011-ben 226 volt 37 kurzus keretében. Az oktatásban összesen 42 kutató vett részt. A pregraduális képzésben elsősorban fizikus, fizika tanári, informatikus, programtervező matematikus, környezettan, környezettudományi, valamint környezetgazdálkodási agrármérnök szakos hallgatókat oktattak (előadások, speciális laboratóriumi gyakorlatok, diplomamunkák). Az oktatásban fontos terület a doktori képzés. A Fizikai Doktori Iskola 20 törzstagja közül 7 az Atomki kutatója. A beszámolási időszak folyamán 20 PhD-, 7 diplomamunkás, 7 szakdolgozó és 14 TDK-hallgató dolgozott az intézetben, a témavezetésre fordított órák száma összesen 2620 volt. Az intézetben folytatódott a kutató hallgatói ösztöndíjas program, amelynek keretében egyetemisták rész vállalnak a kutatómunkában. A tavaszi félévben 7 ösztöndíjas volt, az ősziben 8.

A *nemzetközi kapcsolatok* természetesen ezúttal is fontosak voltak a kutatásban. A korábbi együttműködések folytatásaként mintegy 60 téma sorolható fel, de új elemekkel is gazdagodott a közös munka.

Az Atomki kutatói hosszú ideje eredményesen működnek együtt különböző francia intézetek kutatóival, akikkel közösen végeznek kísérleteket Caenben a Francia Nemzeti Nehéz Ion Gyorsítónál (GANIL). Ebből az együttműködésből számos kiemelkedő eredmény született, köztük a 2011-es év egyik legjelentősebb eredménye, ami a Nature-ben került publikálásra. A GANIL új gyorsítóközpontjának az építését előkészítő konzorciumnak és FP7-es projektnek az Atomki részese volt. A projekt új fázisába lépett, mivel 2011 novemberében megtörtént az új gyorsító alapkőletétele. Az Európai Bizottság lehetővé tette, hogy az európai stratégiai infrastruktúrát képviselő gyorsítókomplexum megépítéséhez a strukturális alapok felhasználásával csatlakozhassunk. Az Atomki nemzetközi tanácsadó testülete messzemenően támogatja a csatlakozási szándékot, ami új lendületet adhat a magfizikai alapkutatásoknak.

A nukleáris asztrofizika területén négy kutató több, néhány hetes mérésen vett rész a Laboratori Nazionali de Gran Sasso és az INFN LNS Nuclear Physics Laboratory Catania intézményben Olaszországban. Ez a program a törökországi Kocaeli University munkatársaival való együttműködést is jelenti.

A komplex skálázás és a Gamow-héjmodell kapcsolatának a kérdését vizsgálta az Atomki egyik kutatója a Tennessee Egyetemen eltöltött három hónapos tanulmányúton.

Korábbi müncheni együttműködőkkel együtt új kutatási programot indítottak a Duke Egyetem nagyintenzitású gamma-forrása mellett tervezett mérésekhez, ahol a hasadás előtti erősen deformált állapotokra épülő dipólus óriásrezonancia felhasadását fogják vizsgálni.

2011-ben zajlott az Isotoptech − MTA ATOMKI − ETH háromoldalú svájci–magyar kutatás/fejlesztési megállapodás (összérték: 1,0 MEUR) „Development of an EnvironMICADAS ^{14}C AMS system for Hungary” programjának megvalósítása. Az Atomki egyik kutatója 2011-ben előbb magyar OTKA, majd svájci Sciex mobilitás ösztöndíjjal 9 hónapot töltött a svájci ETH Zürich intézet kutatólaboratóriumában, ahol részt vett a műszer és a módszerek fejlesztésében.

Az Atomki két kutatója 3 hetet töltött Japánban, a Toyo Egyetemen belül működő Bio-Nano Electronics Research Centerben a japán fél meghívására ECR ionforrások orvosi alkalmazásait vizsgálva.

Egyéves munkavállalás keretében ion-ion és foton-ion ütközéseket tanulmányozott az intézet egyik kutatója a Justus-Liebig Egyetemen Giessenben.

Egy kutató az EFDA GOT program keretében több hónapot töltött Karlsruhében, ahol trícium kalorimetriával foglalkozott. A téma művelését tovább is folytatja.

Külföldi kutatók is érkeztek hosszabb időszakra Debrecenben. Nukleáris asztrofizikai kutatómunkájának egy évét töltötte le egy bukaresti kutató kétéves OTKA-pályázata keretében. PhD-munkáján Erasmus-ösztöndíjjal két külföldi kutató dolgozik az intézetben, egyikük Törökországból érkezett, a másik Portugáliából.

A külföldi kutatók debreceni tevékenységében megkülönböztetett szerepe van a CHARISMA programnak. A kulturális örökség megőrzését Európa-szerte fontos feladatnak tartják, a program által biztosított lehetőségek és az Atomkiban erre kialakított gyorsítós infrastruktúra harmóniában van a feladat fontosságával. Belgiumból, Bulgáriából, Görögországból, Németországból és Romániából 2011-ben összesen 10 külföldi kutatót fogadtak, a vizsgálatok a teljes évi gyorsítóidő 17 %-át tették ki.

A nemzetközi kutatómunka terén új egyezmények is születtek 2011-ben. Csatlakozott az Atomki az EXOGAM2 nevű nemzetközi programhoz, amely a franciaországi Caenben folyó magfizikai kutatás fejlesztését segíti elő. Együttműködési szerződést kötött az intézet a németországi Physikalisch-Technische Bundesanstalt Braunschweig und Berlin intézménnyel atomfizikai kutatások végzésére. Kutatás és oktatás területén történő együttműködésre kötött szerződést az intézet a Nagyváradi Egyetemmel. Együttműködési megállapodást írt alá az Atomki a Huazsong Egyetemmel (Kína) a számítógépes támogatással végzendő májsebészeti kutatások megkezdésére. Csatlakozott az intézet a Debreceni Egyetem, a DEOEC, a Debrecen Város Önkormányzata és a Proton Therapy Provider nevű prágai cég együttműködéséhez, amelynek célja a Protonterápiás Centrum projekt megvalósítása Debrecenben.

Magyarország EU-elnökségéhez kapcsolódóan a Week of Innovative Regions in Europe 2011 (WIRE2011) konferencia Debrecenben tartotta ülését 2011. június 7-9-én az Atomki aktív közreműködésével. A konferencia résztvevői az Atomkiba is látogatást tettek. Az European Strategy Forum on Research Infrastructures (ESFRI) 37. találkozóját az Atomkiban rendezték 2011. június 6-án. A FLAME közép-európai innovációs projekt téningje pedig 2011. július 11–14 között zajlott le az intézetben. A Workshop on Dynamics and Control of Atomic and Molecular Processes Induced by Intense Ultrashort Pulses nevű tudományos műhelyre szintén Debrecenben került sor 2011. szeptember 28–30-án. Az Atomki Külső Tanácsadó Testülete 2011. október 5–6-án tartotta ülését az intézetben. A nemzetközi összejövetelek méltó környezetben, a 2011-ben felújított előadóteremben és a tanácsteremben zajlottak le.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

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

Az intézetnek 91 pályázata volt 2011-ben, ezek közül 37-nél a teljes összeg 10 millió Ft fölött volt, 22-nél pedig 20 millió Ft fölött. Az alábbiakban felsoroljuk ezt a 22 pályázatot, és megadjuk, hogy a pályázatból mekkora összeg az Atomkié, valamint hogy 2011-re ebből mennyi jutott.

NFÜ: Komplex épületenergetikai fejlesztés, 342208 E Ft − 223208 E Ft
NFÜ: PRIZMATECH Klaszter, 36143 E Ft – 6971 E Ft
Radioaktív Hull. K. Kft.: Püspöksz. RHT terül. vett minták vizsg., 108788 E Ft – 27073 E Ft
NKTH: Előrehaladott képalkotási rendszer, 106550 E Ft − 68454 E Ft
NKTH: Az összetevők kémiai állapotának megh., 71250 E Ft − 71250 E Ft
NKTH: Debreceni LHC Grid központ, 64084 E Ft – 64084 E Ft
NKTH: Újgenerációs, környezetbarát vékonyréteg-napelemek, 40000 E Ft
NKFP: Multi-modalitású képalkotó-rendszer, 82112 E Ft – 20740 E Ft
Paksi Atomerőmű Zrt.: Nehezen mérhető izotópok meghatározása, 47620 E Ft − 11270 E Ft

NKTH – OTKA: Új fizika keresése a CERN-ben, 29359 E Ft – 11784 E Ft
NKTH – OTKA: A Napban lejátszódó 3He + 4He reakciók vizsg., 24000 E Ft − 12000 E Ft
OTKA: A nehéz elemek nukleoszintézise, 21998 E Ft – 8117 E Ft
OTKA: Alapvető kölcsönhatások és egzotikus magállapotok, 23157 E Ft – 3231 E Ft
EU: Asztrofizikai p-folyamat, 750000 EUR – 214731 EUR
EU: EURATOM Fúziós Tréning, 149227 EUR – 14623 EUR
EU: CHARISMA-program, 197000 EUR – 35040 EUR
EU: A jövő laboratóriuma az anyagtudományban, 105723 EUR − 11556 EUR
EU: Kollektív gerjesztések atomi ionizációban, 100000 EUR – 35900 EUR
EU: Felületi kopásvizsgálat, 83350 EUR
EU: E+E- detektor fejlesztése, 79500 EUR − 38425 EUR
EU: Trícium oktatási program, 65000 EUR – 24000 EUR
EU: Mesterséges gyémánt alapú detektorok fejlesztése, 34242 EUR – 24202 EUR

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bene E, Vértesi T, Englman R: Reciprocity in the degeneracies in some tetra-atomic molecular ions. Journal of Chemical Physics 135:(8) Paper 084101 (2011)

2. Bosi M, Attolini G, Ferrari C, Frigeri C, Calicchio M, Rossi F, et al. (9), Vad K, Csik A: Effect of temperature on the mutual diffusion of Ge/GaAs and GaAs/Ge. Journal of Crystal Growth 318:(1) 367-371 (2011)

3. Caciolli A, Mazzocchi Ch, Capogrosso V, Bemmerer D, Broggini C, Corvisiero P, et al. (30), Elekes Z, Fülöp Zs, Gyürky Gy, Somorjai E: Revision of the 15N(p, gamma)16O reaction rate and oxygen abundance in H-burning zones. Astronomy & Astrophysics 533: A66. (2011)

4. Cederwall B, Moradi FG, Back T, Johnson A, Blomqvist J, Clement E, et al. (57), Nyako BM, Algora A, Dombradi Z, Gal J, Kalinka G, Molnar J, Sohler D, Timar J: Evidence for a spin-aligned neutron-proton paired phase from the level structure of Pd-92. Nature 469: (7328) 68-71 (2011)

5. Dassanayake B S, Bereczky R J, Das S, Ayyad A, Tőkési K, Tanis J A: Time evolution of electron transmission through a single glass macrocapillary: Charge build-up, sudden discharge, and recovery. Physical Review A 83:(1) 2707-7 (2011)

6. Hori M, Sótér A, Barna D, Dax A, Hayano R, Friedreich S, et al. (12), Horváth D: Two-photon laser spectroscopy of antiprotonic helium and the antiproton-to-electron mass ratio. Nature 475:(7357) 484-488 (2011)

7. Huszank R, Szikra D, Simon A, Szilasi SZ, Nagy IP: He-4(+) Ion Beam Irradiation Induced Modification of Poly(dimethylsiloxane). Characterization by Infrared Spectroscopy and Ion Beam Analytical Techniques. Langmuir 27:(7) 3842-3848 (2011)

8. Kardos A, Papadopoulos CG, Trócsányi Z: Top quark pair production in association with a jet at NLO accuracy with parton showering. Physics Letters B 705:(1-2) 76-81 (2011)

9. Kern Z, Fórizs I, Pavuza R, Molnár M, Nagy B: Isotope hydrological studies of the perennial ice deposit of Saarhalle, Mammuthöhle, Dachstein Mts, Austria. The Cryosphere 5: 291-298 (2011)

10. Kiss G G, Szücs T, Rauscher T, Kertész Zs, Fülöp Zs, Gyürky Gy, et al. (10), Farkas J, Elekes Z, Somorjai E: Determining reaction cross sections via characteristic X-ray detection: α-induced reactions on 169Tm for the astrophysical γ –process. Physics Letters B 695:(5) 419-423 (2011)

11. Krasznahorkay A: Tunneling through triple-humped fission barriers. In: Vértes A, Nagy S, Klencsár Z, Lovas R, Rösch F (szerk.). Handbook of Nuclear Chemistry: 2nd edition. Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 2011. 281-318 3. (ISBN: 978-1-4419-0719-6)

12. Navascués M, Vértesi T: Activation of Nonlocal Quantum Resources. Physical Review Letters 106: 060403 (2011)

13. Nándori I: Bosonization and functional renormalization group approach in the framework of QED2. Physical Review D Particles And Fields 84:(6) 9 Paper 065024. (2011)

14. Rácz A, Salamon P, Vertse T: Trajectories of S-matrix pole in a new finite-range potential. Physical Review C Nuclear Physics 84:(3) Paper 037602 (2011)

15. Racz R, Biri S, Pálinkás J:. ECR plasma photographs as a plasma diagnostic. Plasma Sources Science & Technology 20:(2) Paper 025002 (2011)

16. Sohler D, Grevy S, Dombrádi Z, Sorlin O, Gaudefroy L, Bastin B, et al. (40), Elekes Z, Kuti I: Spectroscopy of 39,41Si and the border of the N=28 island of inversion. Physics Letters B 703:(4) 417-421 (2011)

17. Stolterfoht N, Hellhammer R, Sulik B, Juhász Z, Bayer V, Trautmann C, et al. (8): Evidence of blocking effects on 3-keV Ne7+ ions guided through nanocapillaries in polycarbonate. Physical Review A 83:(1) 10, Paper 012901. (2011)

18. Szilasi SZ, Budai J, Pápa Z, Huszánk R, Tóth Z, Rajta I:Refractive index depth profile and its relaxation in polydimethylsiloxane (PDMS) due to proton irradiation. Materials Chemistry And Physics 131: 370-374 (2011)

19. Tárkányi F, Ditrói F, Hermanne A, Takács S, Király B, Yamazaki H, et al. (9): Activation cross-sections of deuteron induced nuclear reactions on gold up to 40 MeV. Nuclear Instruments & Methods In Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 269:(12) 1389-1400 (2011)

20. Valastyán I, Kerek A, Imrek J, Hegyesi Gy, Kalinka G, Molnár J, et al. (7): LSO based dual slice helical CT and PET demonstrators. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 633:(Suppl1) 300-302 (2011)

21. Vodila G, Palcsu L, Futo I, Szanto Z: A 9-year record of stable isotope ratios of precipitation in Eastern Hungary: Implications on isotope hydrology and regional palaeoclimatology. Journal of Hydrology 400:(1-2) 144-153 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Atommagkutató Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	190			Ebből kutató[2]:	105
PhD, kandidátus:	64	MTA doktora:	14	Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					33

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				415
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				376
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	4	idegen nyelven:	7
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	322
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	237
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	2	idegen nyelven:	7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	810,38	Összes független hivatkozás száma:	1820
Összes hivatkozás száma[11]:	1820		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	5	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			88
		poszterek száma:	57
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	7	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	31		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			32
Témavezetések száma: TDK munka:	14	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:	20

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	741 283	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 12 — Teljes saját bevétel:	589 885	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	14	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	23 728	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	7	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	267 790	E Ft
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	6	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	15 798	E Ft
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	14	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	10 955	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	10	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	38 653	E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	253 779	E Ft

FÖLDRAJZTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET
1112 Budapest, Budaörsi út 45.; 1554 Budapest, Pf.: 130.
telefon: 1-3092628; fax:1-3092628
e-mail: kocsisk@mtafki.hu; honlap: www.mtafki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet 2011-ben is a Földtudományi Kutatóintézetek Társulásának tagjaként végezte tudományos tevékenységét. A kutatóhely hosszú távú, kiemelt alapkutatási feladata az ország természeti környezetében rövid és hosszútávon várható változások kutatása, továbbá a társadalmi-gazdasági térszerkezet átalakulási folyamatainak vizsgálata. Ezek egyaránt kapcsolódtak nemzetközi pályázatok során elnyert kutatási projektekhez (EU-LIFE SOWAP, SNF), a hazai kutatóhelyek, továbbá különböző akadémiai és kormányzati szervezetek által meghirdetett projektekhez (OTKA, NKA stb.). A hon- és nemzetismeret terén kiemelt feladat volt a széleskörű hazai tudományos együttműködésben készülő, a Magyarország Nemzeti Atlasza előfutárának számító *„Magyarország térképekben”* című tematikus atlaszmű kiadása, mely átfogó képet ad hazánk természeti-társadalmi környezetének jelenlegi helyzetéről és múltbeli alakulásáról. Az FKI – más hazai földtudományi kutatóhelyekkel karöltve – évtizedek óta foglalkozik a hazai árvizek, felszínmozgásos folyamatok (földcsuszamlások, bánya- és folyópartomlások, talajpusztulás) geomorfológiai és hidrogeográfiai, okainak feltárásaival, valamint az ember építette műtárgyak esetében bekövetkező katasztrófák természetföldrajzi és antropogén eredetének vizsgálatával. E kutatások eredményeinek összefoglalásaként 2011 egyik kiemelt feladata volt a „*Katasztrófák tanulságai”* című könyv megjelentetése, mely lehetőséget teremt arra, hogy a tudományos kutatások eredményei felhasználhatóvá váljanak a társadalmat és a gazdaságot sok esetben súlyosan fenyegető veszélyek elhárítására. Az intézet 2011-ben a korábbinál aktívabb szerepet vállalt nemzetközi tudományszervezőként kelet-európai ösztöndíjasok fogadásával és nemzetközi konferenciaszervezéssel.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Komplex, regionális földrajzi kutatások

Az év kiemelkedő kutatási eredményeit az intézet által kiadott, széles hazai tudományos együttműködés keretében megvalósult „*Magyarország térképekben”* című atlaszmű vezeti fel. A 200 térképpel, ábrával illusztrált könyv olyan természeti, gazdasági és társadalmi kérdésekkel foglalkozik, amelyek egyaránt fontosak a tudomány képviselői, az oktatás és a civil szféra számára.

Az intézet több évtizedes kutatási eredményeinek összefoglalásaként jelent meg a „*Katasztrófák tanulságai”* című kötet, mely lehetőséget teremt arra, hogy a tudományos kutatások eredményei felhasználhatóvá váljanak a társadalmat és a gazdaságot sok esetben súlyosan fenyegető veszélyek elhárítására. A kiadvány nem csak az elmúlt években bekövetkezett természetes és mesterséges katasztrófákat dolgozza fel, hanem felhívja a figyelmet a jövőbeli veszélyforrásokra is. Legnagyobb tudományos értéke abban rejlik, hogy stratégiai megoldásokat, forgatókönyveket, térképekkel illusztrált terveket mutat be a katasztrófahelyzetek megelőzésére.

Természetföldrajzi kutatások

„Az árkos erózió szerepe Magyarország jelenkori felszínfejlődésében” című OTKA-szerződés keretében a korábbi időszakban végzett országos felmérés digitalizált vízmosás adatbázisának térinformatikai módszerrel történő elemzése zajlott. Az elemzés első eredményeként elkészült az országos vízmosás-sűrűség térkép raszteres formában, 0,25 km^2-es területi bontásban. Az eredmények rávilágítanak arra a tényre, hogy az ország 4,2%-a tartozik a komolyan veszélyeztetett kategóriába. Miután összevetették a leginkább veszélyeztetett területeket a vízmosások kialakulását befolyásoló tényezők közül a felszínborítással és a lejtéssel, megállapították, hogy a vízmosások által leginkább felszabdalt területeket jelenleg erdő borítja. Nem szabad azonban megfeledkezni arról, hogy a szántóföldek területén időszakos vízmosások találhatók, amelyeket az adatbázis kiépítéséhez használt 1:10 000-es méretarányú térképek nem feltétlenül ábrázolnak. Megállapították továbbá, hogy a vízmosások nem feltétlenül a legmeredekebb részeken alakulnak ki. Hegységeink központi régiói a meredek lejtők ellenére vízmosásokban relatíve szegények, mivel folyamatosan erdő borította őket. A hegységek pereme ezzel szemben – ahol időszakos erdőirtások történtek – vízmosásokban gazdag. A középtájakat vizsgálva megállapítható, hogy a legtöbb vízmosás a Cserhát-vidék, a Mátra-vidék, a Börzsöny és az Észak-magyarországi medencék, a Dunántúlon a Baranyai- és a Tolnai-dombság, a Zalai-dombság és az Alpokalja területén található. Az említett középtájak kistájai között a legtöbb vízmosás a Felső-tarnai dombság, Medves-vidék, Karancs, Nyugati-Mátra és Mátralába kistájon található.

„Szemcseösszetétel-vizsgálat előkészítésének módszertani kérdései” című vizsgálatban Magyarországon mind a meszes, mind a nagy szervesanyag-tartalmú talajminták vizsgálatához az egyszerű, Na-pirofoszfátos előkészítést használják széles körben. Ez összhangban van a magyar szabvánnyal (MSZ-08 0205-78), azonban a tapasztalatok szerint problémás a nagy szervesanyag-tartalmú talajminták e módszerrel történő feltárása. Az elvégzett vizsgálatban 17 talajmintán 6 féle előkészítés hatását vizsgálva a varianciaanalízis eredménye szerint a hidrogén peroxidos kezelésekkel szignifikánsan jobb eredmény érhető el. Kimutatták, hogy az ultrahangos kezelésnek kiemelkedő jelentősége van a szemcsék diszpergálásában.

„Táji mintázatok hatása vizes élőhelyek makro és mikroelem háztartására” című kutatásban idén kiemelkedő kutatási eredményt értek el. A valódi mérsékelt övben pedogén hematit (másfélszeres vas-oxid), sziderit (vas-karbonát) és rodokrozit (magán-karbonát) létrejöttéről igen kevés közlemény tudósít. A Kárpát-medencében ilyen ásványok talajban történő recens keletkezéséről nincs ismert forrás. A kutatásban olyan környezettípust (típusokat) sikerült azonosítani, amelyekben jelen környezeti feltételek mellett is lejátszódik ezen ásványok keletkezése. A kutatási eredmények a jövőben a toxikus fémszennyezők stabilizációs kármentesítésében és a nitrát-szennyezés volatilizációs csökkentésében lehetnek hasznosíthatók.

„A légköri por szerepe a paleoklímában és az üledékképződésben” című kutatás a magyar természeti földrajz 1972 óta nemzetközi szintű eredményeket produkáló hagyományos tudományos témaköre. A nagy területeket fedő hullóporos eredetű üledékek nagyszerűen archiválták a természeti környezetben végbement változásokat több millió évre visszamenően is, és globális, regionális, valamint lokális léptékű hatótényezők elkülönítését tették lehetővé. A pliocén és pleisztocén éghajlat- és környezetváltozások rekonstrukciós folyamataiban a vörösagyag–lösz–paleotalaj sorozatok vizsgálatai kétségkívül döntő jelentőségűek. Ezen kutatás keretében 2011-ben egy algoritmus került kidolgozásra, melyben a mintánként külön-külön történő egyesítés helyett a függvényillesztés automatikusan történik. A módszert alkalmazva a Kárpát-medence területéről a legfontosabb típusfeltárások és számos további

rétegsorból begyűjtött több száz minta alapján meghatározásra kerültek a különböző korú üledékek jellemző mérőszámai. Megállapításra került, hogy a vörösagyag minták szemcseloszlási jellemzői az üledékpopulációkra történő felbontás és újabb szempontú értékelés alapján jól beleillenek a hullóporos rendszer jellemzői közé, de jelentősen eltérnek más üleddékképződési (lakusztriális, fluviális) környezethez köthető képződmények granulometriai profiljától. A múltbéli porviszonyok rekonstruálásában korábban nem alkalmazott mérőszám, a légköri porkoncentráció meghatározásának lehetőségét az egyre pontosabb sztratigráfiai és koradatok, valamint a szemcseeloszlási görbék újabb szempontú elemzési módszere tették lehetővé. Az átlagos, háttérporból adódó porkoncentráció értékeket felhasználva egy további érdekes, korábbiakban nem számított környezeti viszonyszám meghatározásának a lehetősége is felmerül. A recens porviharos események során megfigyelt és megbecsült látási viszonyok empirikus összefüggéseit felhasználva megbecsülhetjük az adott múltbéli porkoncentrációhoz tartozó látótávolságot is.

„A Duna-völgy bal parti, Szob-Verőce közötti szakaszának geomorfológiai vizsgálata” című kutatás célja a hagyományos teraszkutatás keretei között lezajlott korábbi vizsgálatok eredményeinek kiegészítése, azok folytatása volt. A Duna-völgy felszínfejlődésével foglalkozó kutatók korábban a teraszkutatás keretében a Dunakanyarban leginkább a folyó közvetlen környezetét vizsgálták. Kutatásaik csak kis mértékben terjedtek ki a Dunába torkolló patakok völgyformálódására, a patakvölgyekben kialakuló patakteraszokra, illetve a területen előforduló idős kavicstakarók maradványaira. 2011-ben megállapításra került, hogy a Nógrád környékén, a Szokolyai-medence magasabb részein és a Kóspallagi-medence felett megjelenő kavicsfoltok egymással párhuzamosíthatók, tehát eredetileg egyazon üledékösszlet részei voltak. A napjainkban különböző magasságban található, kavicsokkal borított részek tehát a patakok bevágódása előtti, egységes kiindulási felszínként rögzíthetők.
„A Dráva-völgyben (Berzence környékén) végzett geomorfológiai, környezettörténeti kutatások” keretében az MTA Régészeti Intézetével közösen, interdiszciplináris kutatás eredményeként pontosabb képet alkottak a Berzence környéki Dráva-völgy középkori környezeti viszonyairól és az ármentesítés óta bekövetkezett környezeti, vízföldrajzi változásokról. E szempontból értelmezték a régészeti, történeti adatokat is. A természeti környezet jelentős átalakulását mutatták ki, vizsgálták a környezethasználat változását, különös tekintettel foglalkoztak a középkori halastavakkal és a gyepvasérc feldolgozással. Az elvégzett kutatások a nemzeti kulturális örökség megismeréséhez, feldolgozásához, méltó megőrzéséhez és új tudományos eredményekhez vezettek. Az intézetek között erősödő kapcsolatok további kutatási együttműködések alapja is lehetnek.

A *„Felszíni és felszín alatti domborzat és a klorid tartalmú vizek lehetséges kapcsolata a földrengésekkel Budapesten és környezetében”* című téma keretében a domborzat és a földrengések közötti kapcsolatot egy más, teljesen új aspektusból vizsgálták. A munka során értelmezték, rekonstruálták és geomorfológiai térképeken ábrázolták a különböző korú, felszíni és felszín alatti domborzatot, térképen megszerkesztették a tektonikai vonalakat és ábrázolták az aljzat süllyedő vagy emelkedő mozgásához kapcsolódó magas klorid-tartalmú vizek adatait is. Ha a vizek klorid tartalmának 30–50 mg/l-nél magasabb értéke összefüggésbe hozható az aljzat emelkedésével, ill. süllyedésével, vagy a szerkezeti vonalakkal, akkor a földrengések valószínűsége ezeken a területeken sokkal nagyobb, mint az alacsonyabb klorid tartalmú vizekkel jellemezhető térségekben. A témát, a Geofizikai és Geodéziai Kutatóintézet munkatársaival együttműködve dolgozták ki, amely közös kutatás 20 éve tart. Állampolgárok védelmét, mindennapi életüket fenyegető természeti veszélyforrások kiszámíthatóbbá tételét célozza. A közösen létrehozott tanulmány a földrengés veszély meghatározásáról szól

Magyarország teljes területére átlagos, valamint Budapest és térségére konkrét talajadottságok alapján.

Az intézet munkatársai által kutatott témák egy része az antropomorf felszín- és tájalakító tényezőket, építményeket, beruházásokat vizsgálja, azok állapotáról, esetleges rizikótényezőiről tájékoztat és az esetleges kockázati tényezőket mérséklő megoldási javaslatokat készít és juttat el megfelelő szervekhez. Ezen munka keretében az *alacsonyárvízi vésztározás lehetőségeire* fogalmaztak meg ajánlásokat a Tisza vízgyűjtőjén, ahol mára halaszthatatlanná vált a várható katasztrófák elkerülése érdekében új stratégia kidolgozása. Szintén a Tisza vízgyűjtőjén a *cianid- és nehézfém-szennyezés,* illetve a zagytározók jelentette kockázatra hívták fel a figyelmet e terület vízrajzi kapcsolatait és összefüggéseit vizsgálva, továbbá utalva az eddig nem ismert, vagy elhanyagolt következmények lehetőségeire. A *Duna Gönyű-Mohács közötti magasparti szakaszainak* tömegmozgásokkal is érintett részeit térképeken mutatták be olyan formában, hogy az a tudományos ismeretterjesztés igényeinek is megfeleljen. A téma aktualitását indokolja, hogy a magaspart domborzati adottságai hatással vannak a közlekedési útvonalakra és létesítményekre, továbbá alapvetően meghatározzák a települések (Ercsi, Százhalombatta, Dunaföldvár, Dunakömlőd stb.) terjeszkedési–beépítési lehetőségeit a főbb közlekedési utak irányát.

A Magyarországi vörösiszap-tározók mint potenciális környezeti veszélyforrások. A kérdéssel foglalkozó kutatás egy aktuális, széles társadalmi és tudományos érdeklődésre számot tartó témát dolgozott fel, amely az állami szervek munkáját is segítette. A témában korábban megjelent tanulmányokra szakmai fórumokon, a sajtóban is számosan hivatkoztak.

Társadalomföldrajzi kutatások

Az *„Egészségturizmus és életminőség Magyarországon: az egészségorientált mobilitás társadalmi, gazdasági és környezeti problematikájának földrajztudományi szintézise”* című OTKA kutatás igazolta, hogy az utazás egyike az életminőség-növelő tényezőknek, mivel általa kerülünk közelebb a szeretett rokonainkhoz, ismerőseinkhez vagy jutunk el az egészségmegőrzést biztosító turisztikai desztinációkba (mindkét motiváció alapjaiban befolyásolja a jóllétet). Mivel a turizmus igazoltan hozzájárul a társadalom mentális és a fizikai egészségének megőrzéséhez, ezért az utazás életminőségre gyakorolt hatásaival kapcsolatos ismereteknek a kormányzat egészségügyi, turisztikai és oktatási politikájába történő beépítése a lakosság közérzetének javulása érdekében megkerülhetetlen. A projekt részeredményei már eddig is hasznosításra kerültek (pl. Nemzeti turizmusfejlesztési stratégia megvalósítása, Új Széchenyi terv egészségipari programjának megfogalmazása), azonban a felhalmozódott tudás települési, térségi szintű felhasználására (pl. fürdővárosok TDM szervezeteinek munkájában, egészségturisztikai létesítmények tervezésénél) ezt követően kerülhet sor. Az életminőséget alakító tényezők minél alaposabb megismerése össztársadalmi érdek. Mivel a magyar társadalom közérzetére vonatkozó kutatási eredmények meglehetősen kedvezőtlen képet festenek, ezért a döntéshozóknak feltétlenül ismernie kell az azt érdemben befolyásolni képes mechanizmusokat. Ezek közül a turizmus különösen fontos szerepet tölthetne be. A kutatási eredményeket közreadó kiadványok önmagukban a nemzeti kulturális örökség részét képezik, különösen a tipográfiai, grafikai és az esztétikai szempontból sem figyelmen kívül hagyható térképészeti megoldások révén.

„A Kárpát-Pannon térség országainak etnikai földrajza és térképezése” című OTKA-kutatás során jelentős előrelépés történt a térképi háttér, és a térképi objektumok megjelenítésében. Ennek köszönhetően a korábbiaknál látványosabb, és információgazdagabb térképek elkészítésére nyílt mód. Térképészeti és társadalomföldrajzi szempontokat egyaránt

figyelembe véve kidolgozásra került a főtérképen megjelenő névrajz anyaga, illetve megjelenítési módja; megtörtént az ütköző karakterek (latin és cirill) nagyobb részének kezelése és feldolgozása az egységes települési névrajz létrehozásához. Ugyanígy kidolgozásra került mind a fő-, mind a melléktérképeken a térképi objektumok megjelenítése (pl. színek, vonaltípusok, jelkulcs). 2011-ben a 34 ezer települést magába foglaló etnikai adatbázis is jelentősen gyarapodott. A Kárpát-medencén belüli települések esetében teljessé vált az adatbázis mind a nyolc vizsgált évre (1495, 1784, 1880, 1910, 1930, 1960, 1990, 2000). Ez nemcsak az új évekre vonatkozó adatok feldolgozását jelenti (1960; Erdély esetében 1784, 1880, 1930, 1960), hanem a már meglevő állományok adatainak szűrését, a hibák kijavítását, illetve a térképi keret változása miatt új területek bevonását (Horvátország esetében). Az adatok összegyűjtésén, minősítésén, az adatbázisba való beépítésén kívül számottevő eredménynek számít a vizsgált terület közigazgatásának feldolgozása és (mintegy háttér-információként) térképi megjelenítése. 2011 folyamán megtörtént a térképek és adatbázisok összekapcsolása: napjainkig a főtérképen kívül ez három melléktérkép (1960, 1990, 2000) esetében valósult meg.

2011-ben a *nemzetközi vándorlás* vizsgálata keretében az újabb adatok alapján kerültek áttekintésre az országhatárt átlépő migráció Magyarországot érintő aspektusai. A vizsgálatból kitűnt, hogy az utóbbi évek fejleményei alapján egyre kevésbé felel meg a valóságnak az a sztereotípia, hogy Magyarország csak a szomszédos országok számára jelent vonzó migrációs célpontot, mivel az innen érkezők aránya a bevándorlók között csökken. Ezzel párhuzamosan átalakulóban van a Magyarországon élő külföldiek térszerkezete is: a budapesti városrégió meghatározó súlya ugyan nem változott, de az utóbbi évtizedben új „sűrűsödési térségként" jelentkezett a Balaton térsége és Északnyugat-Dunántúl. Teljesen új fejlemény továbbá az országhatárt átlépő szuburbanizáció, melyre a legjobb példa a pozsonyiak Rajkára és a nagyváradiak Ártándra és Biharkeresztesre költözése. A kutatás felhívja a figyelmet arra, hogy az elkövetkező évtizedekben a Magyarországot érintő nemzetközi vándorlás peremfeltételeiben és folyamataiban jelentős változások várhatók, melyek közül a legfontosabb a szomszédos országokból érkező bevándorlás (el) apadása, az ország folytatódó demográfiai hanyatlása és Afrikának Európára nehezedő migrációs nyomása.

A 2010 óta zajló *TRANSMIG (Integrating (trans)national migrants in transition states*) című projekt a délszláv háborúk után megindult migrációs folyamatokat vizsgálja kvalitatív társadalomtudományi módszerekkel. Az MTA FKI az MTA RKK kutatócsoportjával együttműködésben végzett terepi munka eddigi két fő eredménye a következő: az 1990-es évek óta Magyarországra érkező vajdasági közép- és felsőoktatásba bekapcsolódó diákok számára a határon átívelő oktatási célú migráció sok esetben az első lépcsőfokot jelenti a Magyarországra való áttelepedésről való döntésben. A másik kiemelésre méltó eredmény a zene, a nosztalgia és az identitás közti összefüggésekre koncentráló elemzés. Ennek során arra a jelenségre hívták fel a figyelmet, hogy a Vajdaságból Magyarországra érkezett, etnikailag magyar migránsok egy része a Budapesten megrendezésre kerülő ún. jugó bulik rendszeres résztvevője. Ezen kétnyelvű (magyar és szerb) rendezvények alkalmat adnak arra, hogy a migránsok egyrészt megidézzék azt a kort és multikulturális környezetet, amiben felnőttek, másrészt identitásuk vajdasági, szerbekkel és más délszláv népekkel való együttélés során formálódott oldalát is megéljék. A jugó buli és az itt tapasztalható jugónosztalgia eltér a nemzetközi szakirodalomban leírtaktól, mert mindenfajta politikai céltól vagy jelentéstől független.

A *gazdaság és településföldrajzi* kutatások közül a *kreatív gazdaság tereivel* kapcsolatban a következő eredmény emelendő ki: a magyarországi kreatív szektor területi jellegzetességeit és munkaerőpiaci sajátosságait vizsgálva a közepes és nagyvárosok példáján látható, hogy a

kelet-nyugat lejtőnél nagyobb szerepet kap a városhierarchiában betöltött szerep, a helyi hagyományok és kultúra. A jelenség időbeli változását tekintetbe véve pedig megállapításra került, hogy a budapesti városrégió szerepe nem hogy gyengült volna, hanem erősödött. A kutatás eredményei kiemelkedő relevanciával bírnak a jelenlegi társadalmi-gazdasági viszonyok között, hiszen Magyarország számára az elkövetkező évek egyik nagy kihívása éppen az, hogy miként tudja gazdaságát dinamizálni, hogyan lesz képes a tudásigényes (kreatív) ágazatokat – más országoknál jobban – magához vonzani.

A „*Spatial structural impacts of industrial investments and their transport connections"* című OTKA kutatás megállapította, hogy ipari parkok útjainak minősége sokszor nem megfelelő, gyakran zsúfoltak, elkerülő utak hiányában az adott település környezetére is kedvezőtlenül hatnak. Még nagyobb probléma, hogy autópálya hiányában az ipari parkok szállítási költségei és a szállítás ideje is megnőtt. Negatívum, hogy ma sem szempont az autópálya útvonal tervezésénél az ipari parkok elhelyezkedése. A gazdaságpolitika, a tudatos regionális gazdaságfejlesztés számára rendkívül fontos, hogy pontos információk legyenek a potenciális és a már létező ipari telephelyek közlekedési, szállítási és logisztikai lehetőségeiről.

A jelenlegi gazdasági válság magyar *iparra gyakorolt hatását* elemző kutatás megmutatta, hogy a válság térben és időben differenciáltan érintette az ipart és egyes ágazatait, a legsúlyosabb következmények, kihatások a feldolgozóipar néhány szegmensében figyelhetők meg (pl. az autóiparban, elektronikai iparban), főleg azokban, amelyek a globális gazdaságba leginkább integrálódtak. A válság góca az Észak-Dunántúl volt a magyar iparban, amit rövid ideig, de számottevően érintett a válság. Más térségek kisebb mértékben szenvedtek a válságtól, de sokkal tartósabban kell a negatív következményekkel számolniuk. A válság a magyar ipar területi szerkezetét nem „rendezte át" alapjaiban, azonban az új ipari térstruktúra nagyfokú sebezhetőségét jelezte. A kutatás jelentősége vitathatatlan napjainkban, jelen gazdasági körülmények között mindenképp nagyfokú érdeklődésre tarthat számot a válság területi konzekvenciáit, mélyebb térbeli összefüggéseit feltáró-elemző kutatás.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet osztályainak kutatómunkái több – a hazai társadalmat is foglalkoztató – kérdést érintettek, amelyekkel kapcsolatban a tudományos közösségen kívül az ország szélesebb nyilvánosságát is tájékoztatták a helyi és országos média segítésével az intézet munkatársai. A következőkben csupán a legnagyobb sajtóérdeklődést kiváltó projektek, kiadványok, rendezvények társadalmi kommunikációjáról ejtünk szót.

A „*Magyarország térképekben"* c. atlaszmű sajtótájékoztatójára a Magyar Tudományos Akadémia székházában került sor, a kötetet óriási médiaérdeklődés kísérte: minden jelentősebb sajtóorgánum, úgymint nyomtatott napi- és hetilapok (Magyar Nemzet, Népszabadság, HVG), internetes hírportálok (Index, Origo, Hírstart, Kultúra.hu), televízió (RTL klub) rádió (Gazdasági Rádió) beszámolt megjelenéséről és hosszabb-rövidebb tudósításban méltatta.

A Természetföldrajzi Osztályon zajló, a talajkímélő művelés előnyeit vizsgáló kutatás (SOWAP 2011) eredményeit a megbízóval közösen több szakmai bemutató keretében ismertették a terepen. Ezeken a bemutatókon gazdák, kormányzati és nem kormányzati szervezetek képviselői, valamint a média (televízió, újságírók) is jelen voltak. A környezetkímélő mezőgazdaságnak a klímaváltozás mérséklésében való szerepéről a Duna TV készített riportot a kutatás vezetőjével.

A Geomorfológiai Osztály munkájának egyik kiemelt feladata a stratégiai jellegű geomorfológiai kutatások végzése és mindezeknek a lakossági fórumokon és médiában történő közzététele. A kutatások összegzése a 2011. decemberében megjelent „*Katasztrófák tanulságai"* című kiadványban látott napvilágot, amely közérthető formában tájékoztat az ország lakosságát közvetlenül érintő rizikótényezőkről. A könyv egyik fejezete kapcsán, az MTV 1 „Ma Reggel" című műsorában az ár- és belvizek kérdéséről, valamint annak megoldási lehetőségeiről zajlott beszélgetés a kutatás vezetőjével. Az ATV-n került adásba a szaharai porviharokról, és ezek eseteges hatásáról a Kárpát-medencére vonatkozóan készített riport az intézet kutatójával. További előadás szólt a természettudományok és a régészet együttműködésének eredményeiről.

Az „*Egészségturizmus és életminőség Magyarországon: az egészségorientált mobilitás társadalmi, gazdasági és környezeti problematikájának földrajztudományi szintézise"* című OTKA-kutatás eredményei a Hazai Turizmus című, az ATV és az ECHO TV csatorna adásaiban folyamatosan menő műsorokban szakértői interjúk keretében adták közre.

„Magyarország kistájainak katasztere" című könyv sajtóbemutatója 2010. szeptember 15-én volt a Magyar Tudományos Akadémián, de a kötet iránti sajtóérdeklődés 2011-ben is kitartott, amit a Magyar Nemzetben és a Somogyi Hírlapban közölt interjúk is jeleznek.

A kreativitás és a városfejlesztés kapcsolatáról illetve a zöldterületek és a budapesti városfejlődés helyzetéről az MTV körzeti híradójában szakértőként vett részt egy kolléga. Ugyanő saját weboldalt hozott létre varosrehabilitacio.net címen, amely bemutatja a legfontosabb nemzetközi és hazai kutatásai eredményeit, illetve az összes lényeges publikációja hozzáférhető. Jelenleg a Google browser az 1. helyen, azaz a leglátogatottabb magyar weboldalként adja ki „városrehabilitáció" témakörben.

A nemzetközi migráció témakörében illetve a volt posztszovjet országok aktuális helyzetével foglalkozó kutatások kapcsán több kollégával készült rádióinterjú (Klub95 rádió, Klubrádió).

Az intézet kutatói aktív szerepet vállaltak 2011. évi Magyar Tudomány Ünnepe (MTÜ) rendezvénysorozatban („Összhang. Tudomány a gazdaságban és a társadalomban") Magyarországon és Erdélyben tartott előadásokkal, intézmények vagy civil szervezetek által rendezett alkalmakon, összejöveteleken, konferenciákon egyaránt. Az MTÜ 2011. évi országos megnyitó előadását az intézet igazgatója tartotta.

A munkatársak rendszeres résztvevői és szervezői is egyben az idén 140 éves Magyar Földrajzi Társaság különböző szakosztályai által szervezett tudományos ismeretterjesztő előadásoknak. Ezek célcsoportját elsősorban a hazai földrajz-földtudományi képzésben résztvevő egyetemisták és középiskolai földrajztanárok képezik. 2011-ben 4 ilyen előadást tartottak az intézet kutatói, továbbá szervezői voltak az MFT-vel és az ELTE TTK Földtudományi Központjával egy Cholnoky Jenő emlékére rendezett koszorúzásnak és emlékülésnek.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Az intézet a jövőben tovább kívánja fokozni nemzetközi kapcsolatait, részben új kapcsolatok nyitásával, részben a már meglévők gazdagabb tartalommal való megtöltésével. Ennek keretében konzorciumi tagként részt vett több EU FP7-es projekt előkészítésében (iCOPE, SOMIX, AgriSCAPE), melyek alkalmasak a meglévő kapcsolatok mellett új intézményi kötelékek kialakítására is. Az intézet széleskörű nemzetközi kapcsolatai egy része oktatási kapcsolat (egy főmunkatársuk a révkomáromi Selye János Egyetemen, egy pedig a kolozsvári Babeş-Bolyai Egyetemen lát el felsőoktatási feladatokat), de ugyanígy nagy jelentőségűek a különféle társasági, szerkesztőbizottsági tagságok is. Munkatársaik közül négyen vesznek

részt hosszabb ideje bizottsági tagként nemzetközi tudományos szervezetek munkájában, 5 fő nemzetközi földrajzi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja. Egy tudományos tanácsadó az ESSC (European Society for Soil Conservation) alelnöke. Az intézet kutatóinak 16 tanulmánya jelent meg külföldi szakfolyóiratokban, ebből 9 impakt faktoros folyóiratban.
A külföldi tudományos rendezvények közül az intézet kutatói a következőkön szerepeltek előadással, poszterekkel, korreferátumokkal, illetve konzulensként: Association of American Geographers, Annual Meeting, Seattle; EUGEO 2011, 3rd congress of the association of European geographical societies, London; XI. BRIT (Border Regionsin Transition), Genf/Svájc– Grenoble/Franciaország; ICCG (International Conference on Critical Geography), Frankfurt; Euroclay 2011, Ankara; Hydroeco, Bécs; ESSC, Thessaloniki)

2011-ben az intézet nemzetközi kapcsolatai különösen szorosak voltak a Román, az Ukrán, a Horvát, valamint a Szlovák Tudományos Akadémiák földrajzi intézeteivel, a kijevi Sevcsenkó Egyetemmel, a hannoveri Akademie für Raumordnung und Landesplanunggal, a lipcsei Leibniz Institut für Landerkunde-val továbbá az ungvári, a nagyváradi, a zágrábi, az újvidéki, 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. 2011-ben külön hangsúlyt fordítottak az intézet korábban meglévő, a rendszerváltást követően azonban elhanyagolt keleti kapcsolatainak felélesztésére. Ennek egyik elemeként a Nemzetközi Visegrádi Alap ösztöndíjának köszönhetően összesen hét junior kutató érkezett az intézetbe hosszabb-rövidebb kutatómunkát végezni Belaruszból, Ukrajnából és Oroszországból; az intézet egy fiatal kutatója pedig Örményországban kutatott. Az intézet és a Belarusz Tudományos Akadémia Környezeti Menedzsment intézete közötti akadémiai cserekeretet felhasználva két kutató utazott Minszkbe ahol jelentős előrehaladást értek el a közös kutatás terén.

2011 kiemelkedő nemzetközi kapcsolatépítő eseménye volt a *Regional Socio-Economic Processes in Central and Eastern Europe – 20 Years in Transition and 2 Years in Global Economic Crisis (ReSepCEE)* című konferencia, mely a Nemzetközi Visegrádi Alap támogatásával valósult meg az intézet szervezésében. A nemzetközi konferencia célja volt, hogy a rendszerváltás után húsz évvel a volt szocialista országok földrajzos műhelyeit közelebb hozza egymáshoz. A 2011. április 4-5-én megrendezésre került konferencián 10 országból (Ausztria, Németország, Lengyelország, Csehország, Szlovákia, Ukrajna, Belarusz, Oroszország, Románia, Magyarország) csaknem 50 kutató vett részt. A konferencia kiváló fórumot teremtett a különböző műhelyek és projektek bemutatkozására, tapasztalatcserére és intézményi kapcsolatok kialakítására. Az elhangzott előadások bővített, szerkesztett anyagából egy angol nyelvű kötet is napvilágot látott *Geography in Visegrad and Neighbour Countries* címmel.

Az intézet munkatársai közül 13 fő lát el oktatói feladatokat hazai felsőoktatási intézményekben (ME, PTE TTK, SZTE, BGF, ELTE, Kodolányi János Főiskola, Selye János Egyetem, Nyugat-Magyarországi Egyetem, EKTF, BME), közülük heten doktori iskolában is oktatnak, egy fő pedig doktori iskolát vezet.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az év folyamán a SOWAP 2011 projektet nyerték el, amelynek célja, annak megállapítása, hogy az általános talajforgatásos talajműveléshez képest az ún. talajkímélő talajművelés hazai alkalmazása milyen technológiai, agronómiai és gazdasági igényekkel és következményekkel jár, különös tekintettel e művelési beavatkozások közvetlen természeti-környezeti hatásaira.

Egy sikeres OTKA konzorciális főpályázata volt az intézetnek (K100180), melynek címe *Táji mintázatok hatása vizes élőhelyek vasháztartására*. Időtartama négy év, a támogatás összege meghaladja a 27 millió Forintot, amelyből 14 millió forintot egy diffúz reflektancia mérésre alkalmas UV-NIR fotométer beszerzésére fordíthatnak.

A Nemzetközi Visegrádi Alap pályázatán 5000 Eurót nyert az intézet a *Regional Socio-Economic Processes in Central and Eastern Europe – 20 Years in Transition and 2 Years in Global Economi cCrisis (ReSepCEE)* című konferencia megrendezésére.

NKA Ismeretterjesztés és Környezetkultúra Szakmai Kollégiumának könyvkiadást támogató pályázatán a *Katasztrófák tanulságai* című kötethez 600 ezer forint támogatást nyert az intézet, míg a Hungarian Geographical Bulletin kiadásához 500 ezer forinttal járult hozzá ugyanezen kollégium.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bhattacharyya R, Fullen M A, Booth C A, Kertész Á, Tóth A, Szalai Z, Jakab G, Kozma K, Jankauskas B, Jankauskiene G, Bühmann C, Paterson G, Mulibana E, Nell J P, Van der Merwe G M E, Guerra A J T, Sathler R, Bezerra J F R, Peres S M, Yi Z, Yongmei L, Li T, Panomtarachichigul M, Peukrai S, Thu D C, Cuong T H, Toan T T: Effectiveness of biological geotextiles for soil and waterconservation in different agro-environments. Land Degradation & Development 22:(5) 495-504 (2011)
2. Bontje M, Musterd S, Kovács Z, Murie. A: PathwaysToward European Creative-Knowledge City-Regions. Urban Geography 32:(1) 80-104 (2011)
3. Erőss Á, Karácsonyi D (szerk.): Geography in Visegrad and neighbour countries.:regional socio-economic processes in Central and Eastern Europe - 20 years in transition and 2 years in global economic crisis.Budapest: Geographical Research Institute of HAS, 2011. 169 p.
4. Erőss Á, Filep B, Kocsis K, Tátrai P: Onlinkages and barriers: The dynamics of neighbourhood along the stateborders of Hungary since EU enlargement. In: Armbruster H, Meinhof U H (szerk.) Negotiating multicultural Europe: borders, networks, neighbourhoods. Basingstoke: Palgrave MacMillan, 2011. pp. 69-93. (Palgravepolitics of identity and citizenship series)
5. Kertész Á, Szalai Z, Jakab G, Tóth A, Szabó Sz, Madarász B, Jankauskas B, Guerra A, Bezerra J F R, Panomtaranichagul M, ChauThu D, Yi Z: Biological geotextiles as a tool for soil moistureconservation. Land Degradation & Development 22:(5) 472-479 (2011)
6. Kertész Á: Desertificationin Hungary - processes, research and policy making. In: Vermang J, Gabriels D, Cornelis W, De Boever M (szerk.) Landdegradation processes and assessment: winderosion, interrillerosion, gullyerosion, landcover features. Ghent, Belgium, 2010.06.16-2010.06.17.Ghent: Ghent University, pp. 162-168.
7. Kocsis K, Schweitzer F (szerk.): Magyarország térképekben. Budapest: MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, 2011. 248 p.
8. Kocsis K: A magyar népesség története. A Kárpát-medencei etnikai térszerkezet történeti alakulása. In: Paládi-Kovács Attila, Flórián Mária (szerk.) 1. Táj, nép, történelem. Budapest: Akadémiai Kiadó, 2011. 293-426 (Magyar néprajz nyolc kötetben; I.)

9. Kocsis K, Váradi MM: Borders and neighbourhoods in the Carpatho-Pannonian area. In: Wastl-Walter D (szerk.). The Ashgate Research Companion to border studies Farnham: Ashgate, 2011. 585-605.
10. Michalkó G, Rátz T: Egészségturizmus és életminőség Magyarországon. Fejezetek az egészség, az utazás és a jól(l)ét magyarországi összefüggéseiről. Budapest: MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, 2011. 179 p.
11. Schweitzer F (szerk.): Katasztrófák tanulságai.: stratégiai jellegű természetföldrajzi kutatások. Budapest: MTA Földrajztudományi Kutatóintézet, 2011. 195 p. (Elmélet-módszer-gyakorlat; 67.)
12. Varga Gy: Similarities among the Plio–Pleistocene terrestrial aeolian dustdeposits in the World and in Hungary. Quaternary International 234:(1-2) 98-108 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Földrajztudományi Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	43			Ebből kutató[2]:	24
PhD, kandidátus:	8	MTA doktora:	6	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					7

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				140
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				126
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	19	idegen nyelven:	15
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	15
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Könyv[8]	magyarul:	1	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	36	idegen nyelven:	7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	13,478	Összes független hivatkozás száma:	456
Összes hivatkozás száma[11]:	456		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			33
		poszterek száma:	7
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	12		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			13
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	23
Diplomamunka (MSc):	9	PhD:	23

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		146 584	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	4	Teljes saját bevétel: 69 024	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		6234	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		1100	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		5014	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		14 034	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		12 087	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		36 789	EFt

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet fő feladatai: a geodézia, a geofizika és a szeizmológia területéhez tartozó alapkutatások végzése, terepi és laboratóriumi megfigyelések adatainak tudományos feldolgozása, értelmezése és közzététele. Az alapkutatási tevékenység része a szakterület elméleti és gyakorlati (matematikai, fizikai) módszereinek, vizsgálati eszközeinek (műszerek) fejlesztése, létrehozása. Az alapfeladatok körébe tartozik továbbá az országos szeizmológiai hálózat és szolgáltatás működtetése, a szilárd Föld és a Föld körüli térség (geodinamika, geomágneses tér, aeronómia) folyamatos obszervatóriumi megfigyelése és a nemzetközi hálózatokban az együttműködésekkel járó adatszolgáltatási feladatok ellátása, időszakos megfigyelőrendszerek működtetése. Az intézet, alapkutatási tevékenységével összefüggésben, részt vállalt természeti kockázatok felmérésében, megelőzésében és az európai kritikus infrastruktúra kutatásában is.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Geodéziai Főosztály

Geomatematikai kutatások

A környezetünkben vizsgált jelenségeket túlnyomó részt nemlineáris matematikai modellek írják le, amelyeket általában csak linearizálva, iterációval lehet megoldani. A számítógéppel támogatott algebrai rendszerek alkalmazásával a geodéziai feladatok megoldásában is új eredmények születtek, így több nemlineáris geodéziai alapfeladatra sikerült egzakt, zárt formában megoldást adni.

A totális legkisebb négyzetek módszere elvének következetes alkalmazásával megadták a lineáris regresszió részletes statisztikai elemzését. A felhasznált matematikai eszközök összhangban vannak a hagyományos legkisebb négyzetek módszerével.

Általánosították a fotogrammetria egyik alapfeladatát, a külső tájékozás paramétereinek meghatározását, tetszőleges számú pontra, az eddig ismert korlátos számú ponttal szemben. Az új megoldás alapja a pontok képkoordinátái és a hozzájuk tartozó tárgy- vagy terepkoordináták között megalkotott matematikai modell. Modelljükben a fő eltérés az új és a hagyományos módszer között a méretarány-tényezők kezelésében van. Míg a régi módszer indirekt kezeli a méretarányokat, az új módszer minden ponthoz explicite meghatároz egyedi méretarány-tényezőket.

Megmutatták, hogy a külső tájékozásra újonnan kidolgozott eljárás a hagyományos megoldási módszerrel szemben hatékonyabb algoritmusra épül, a régi módszer nehézségeit kiküszöböli.

Igazolták, hogy külső tájékozási feladat megoldására az általuk kidolgozott eljárás előnyösebb a régi módszernél: nem igényel sem Taylor-sorfejtést, sem közelítő értékeket, sem iterációt.

Geodinamikai kutatások

Az extenzométeres adatok légnyomás korrekciójára egy teljesen új, neurális hálózaton alapuló módszert dolgoztak ki, amely a korábbi módszerekkel ellentétben a lokális mellett a regionális légnyomás változások hatását is figyelembe veszi.

Számszerű összefüggést találtak az extenzométerrel mért strain adatok és a radonkoncentráció hosszúperiódusú értékei között. Kimutatták, hogy a Sopronbánfalvi Geodinamikai Obszervatóriumban mért éves radonkoncentráció maximális értéke a kőzetben felhalmozódó feszültséggel arányosan csökken.

Kimutatták, hogy a radonkoncentráció és az extenzométerrel mért strain adatok hosszúperiódusú változása közötti összefüggés felhasználható az extenzométer műszerdriftjének ellenőrzésére is.

Összefüggést mutattak ki a kismértékű vertikális partfalmozgások és a növényi életfolyamatok, valamint a talajvízszint és a Duna vízszintjének ingadozása között.

A dunaszekcsői partcsuszamlás mérési adatainak elemzése alapján előre jelezték egy új törésvonal kialakulását, ami az év során meg is jelent a felszínen. A Duna vízében megfigyelt „füstölés" jelensége alátámasztja egyik korábbi hipotézisüket, miszerint a mozgásfolyamatot a rétegek átázása és kimosódása eredményezi, ami a viszkózus elasztikus visszapattanási modellel írható le.

Egy elemi, harmonikus deformációs modell alkalmazásával kimutatták, hogy a gravimetriai mérésekben megmutatkozó inerciális gyorsulásból származó zaj mértéke szoros korrelációban van a szeizmogramok spektrális tulajdonságaival mind alacsony, mind magas mikroszeizmikus aktivitás esetén.

Továbbfejlesztették az interneten szolgáltatott óceáni időjárási térképek és a gravimetriai árapály idősorok együttes statisztikai elemzésének módszertanát. Ennek segítségével bemutatták, hogy az Észak-Atlanti térség hidroszférájának az időjárással összefüggő dinamikai folyamatai (hullámzás) akár 5000 km-es távolságból is jól érzékelhetők, így még a Kárpát-Pannon térségben sincsenek elhanyagolható hatással a szélső pontosságú ($\sigma \leq \pm 5\mu$Gal) gravimetriai mérésekre.

Meghatározták az EGM2008 geopotenciális modell pontosságát a rendelkezésre álló magyarországi nehézségi erőtér adatok alapján. Elkészítettek egy kombinált, EGM2008 geopotenciális modellen és SRTM3 magassági adatokon alapuló GPS/szintezési adatok, függővonal-elhajlások és nehézségi rendellenességek felhasználásával készült kvázigeoid megoldást.

Megvizsgálták az SRTM3 felszínmodell pontosságát Magyarország területén a vízszintes és a magassági alappontok adatbázisának felhasználásával. Továbbá kimutatták egy teszterületen, hogy az SRTM3 modell és a topográfiai térképek digitalizált szintvonalaiból előállított domborzatmodell eltérése mekkora változásokat eredményez a potenciál egyes deriváltjaiban.

Műszertechnikai kutatások

Új módszert dolgoztak ki fúrólyuk extenzométerek hőmérséklet kompenzálására, amelynek segítségével a dunaföldvári magasparton alkalmazott vertikális fúrólyuk extenzométer esetében 1μm-nél jobb pontosságot lehet elérni.

Geofizikai Főosztály

A Geofizikai Főosztály fő feladatai a *légköri elektromos jelenségek vizsgálata, felszínközeli elektromágneses módszerek fejlesztése, elektromágneses mélyszerkezet-kutatás, leképezési tulajdonságok vizsgálata, geomágnesség és a Föld plazmakörnyezetének (ionoszféra, magnetoszféra) kutatása*. A kutatások fontos bázisát jelentik az *MTA Széchenyi István Geofizikai Obszervatórium* adatai, illetve azok az adatok, melyek az obszervatórium széleskörű nemzetközi együttműködései révén válnak elérhetővé. A társadalmi igényeknek és pályázati lehetőségeknek megfelelően a tevékenység *környezettudományi alkalmazásokkal és a globális változások, az űridőjárás és -klíma hatásainak interdiszciplináris kutatásával* egészült ki.

Szilárd Föld kutatása

Felszínközeli geoelektromos kutatások. Egyenáramú ERT elrendezésekkel különböző modellek és zajszintek esetén numerikus modellezést végeztek. Kimutatták, hogy a hagyományos elrendezések közül általában a béta típusú elrendezések jobbak, különösen a dipól-dipól elrendezés, tehát a priori ismeretek hiányában ezt célszerű használni a hagyományos elrendezések közül, míg a priori ismeretek birtokában a kapott táblázat segítségével célszerű dönteni az alkalmazandó elrendezésről. Gyakorlatilag minden vizsgált modell és zajszint esetén a Stummer optimalizált elrendezés jobbnak bizonyult minden hagyományos elrendezésnél.

Magnetotellurika. Az „Investigation of the lithospheric structure around the margin of East European Craton by the magnetovariation soundings (2009-2012)" projekt keretében, a tavalyi hosszúperiódusú mágneses méréshez kapcsolódóan, 2011. június és október között Füzér közelében végeztek hosszúperiódusú méréseket.

A 2010-ben az ELTE TTK FFI Kőzettan-Geokémiai Tanszék együttműködésével a Csomád-hegység (Erdély) környezetében mért magnetotellurikus szondázások feldolgozását 2011 évben végezték el, ennek fő célja a jólvezető anomáliák kimutatása volt. A két (1D és 2D) hibrid modell alapján egy konduktív (20 Ohmm) kis mélységű (2-10 km) anomáliát sikerült meghatározni, amelynek a laterális kiterjedése a nagyobb mélységek felé ÉÉK-DDNY irányítottsággal 15-30 km között teljesedik ki. A polarizációs felbontásban végrehajtott feldolgozás során ez az anomália a transzverzális elektromos (TE) mód esetében egy masszív, déli irányban kiterjedt jólvezetőt indikál, míg a transzverzális mágneses (TM) mód esetében csak a kis mélységű jólvezető anomália jelenik meg. Összehasonlítva más vulkáni területen mért hasonló adatokkal, a kis mélységű konduktív zónát a módosult és agyagosodott vulkáni kőzetek vagy ideiglenes víztározó kőzetblokk indikálhatja. A nagymélységű, laterálisan kiterjedt jólvezető anomália valószínűleg a megolvadt, vagy ki nem ürült vulkáni magmakamrát jellemzi.

A szeizmikusan is aktív területen intenzív geotermális anomáliák találhatók, 20 km mélységben akár 800 C° hőmérsékletű források is előfordulnak. A szeizmikus adatokkal összhangban a magnetotellurikus eredmények arról árulkodnak, hogy a Vrancea zóna mentén a kontinentális litoszféra szubdukció határzónájában az asztenoszféra mélysége kisebb mélyégre, kb. 70 és 80 km közé tehető.

Aeronómia

A „*Schumann-rezonancia*, mint globális változások jelzőrendszere" témakörben a globális villámlás pozíciójának változását modellszámításokkal (Schumann-rezonancia frekvencia távolságfüggése) is alátámasztották. Az elvégzett munkáról az IUGG2011 Tudományos

Közgyűlésén, Melbourne-ben szóbeli előadáson, valamint az ICAE2011 konferencián, Rio de Janeiróban poszteren számoltak be. Ez utóbbi eredmény megjelent a konferencia kiadványában, négy oldalas terjedelemben. Schumann-rezonancia frekvenciamérések alapján megállapították, hogy a globális felmelegedés hatására, amely 1993-óta intenzívebb az északi féltekén, mint a déli féltekén, a globális zivatartevékenység súlypontja (hipotetikus centruma) ~6°-7°-nyi földrajzi szélességgel északabbra került az utolsó naptevékenységi ciklusnak megfelelő időtartam során.

A *légköri elektrooptikai jelenségek* kutatása keretében részt vettek a Réunion sziget mellett észlelt öt óriás nyaláb (gigantic jet) tulajdonságait vizsgáló kutatómunkában, amelynek eredményeit még a tárgyévben publikálták. A cikk a video felvételek alapján részletesen elemzi a ritka felsőlégköri emissziótípus időbeli alakulását, miközben a jelenségeket kiváltó vihar meteorológiai paraméterei között az óriás nyalábok keletkezésére utaló jellemző állapotokat tárgyalja. Az öt óriás nyaláb ELF elektromágneses sugárzást is produkált, amelyet a Széchenyi István Geofizikai Obszervatórium Schumann-rezonancia mérőrendszere észlelt. Jelentős eredmény a nyalábok negatív polaritásának meghatározása, valamint az észlelési idő alapján annak igazolása, hogy a sugárzás forrásai maguk a felsőlégköri kisülések voltak. Az észlelt jelekből levezették a felsőlégköri kisülések töltésmomentum változásait is. A kapott értékek (2000-8000 Ckm) a vörös lidérceket produkáló felhő-föld villámokéhoz (500-1500 Ckm) viszonyítva magasabbak, de az óriás nyalábokénál korábban tapasztaltaknak megfelelőek voltak.

Geomágnesség

Napszél – geomágneses tér kölcsönhatása. Az ún. seedpopulation ionok létezését elméleti megfontolások alapján biztosra veszik, de eddig még nem sikerült ezt az ioncsoportot megfigyelni. Francia kutatókkal (LPC2E CNRS, Orleans) együttműködve, műholdas adatok felhasználásával döntő bizonyítékokat találtak a seedpopulation ionoknak nemcsak a létezésére, hanem tisztázták a keletkezésük folyamatát is. Ez olyan jelentőségű eredmény, amely érdeklődésre tarthat számot csillagász és asztrofizikus körökben is. A diffúz ionok viselkedésének fizikája két oldalról közelíthető meg: egyrészt ismeretes az a tény, hogy a diffúz ionok szóródása (pitch angle scattering) mágneses hullámokkal való kölcsönhatás nyomán történik. A szóródás következménye az ionok „visszafordítása” a földi fejhullám felé, ami további gyorsítási ciklusban való részvételt tesz lehetővé, ezáltal folyamatosan növelve a folyamatban részt vevő ionok energiáját. Másrészről viszont a hullámokat maguk a diffúz ionok keltik, amint útjuk során kölcsönhatásba lépnek a napszél plazmájával. A két jelenség együtt egy komplex, visszacsatolt fizikai mechanizmust képez, amelyben az ionok és a hullámok kölcsönösen befolyásolják egymás viselkedését. A kutatások során sikerült bizonyítékot szerezni egy olyan jelenségre, amelynek során (szokatlanul stabil interplanetáris mágneses tér megléte esetén) a diffúz ionok szóródását egy újabb tényező is befolyásolja. Az eredményt nemzetközi konferenciákon (2011 ClusterWorkshop, 2011 AGU Meeting) ismertették.

A geomágneses tér forrásai, geomágneses indukció. Tanulmányozták a geomágneses tér és az indukált elektromos tér kapcsolatát leíró felszíni elektromágneses (EM) impedanciatenzor széles spektrális tartományban kimutatható, hosszú távú, periodikus változásait. A vizsgálathoz a Széchenyi István Geofizikai Obszervatórium közel 50 éves geomágneses és tellurikus regisztrátumát használták fel. Elsősorban az impedanciatenzor 2-120 perces periódustartományának 1 napos és éves modulációs tulajdonságait vizsgálták. A magnetoszférikus Pc5 pulzáció-források egy kézenfekvő ionoszférikus forrás-modelljét alakították ki, amelyre vonatkozólag levezették az elméleti felszíni elektromos és mágneses terek formuláit. A terek ismeretében meghatározták az elméleti felszíni EM impedancia

egyenleteit. Egyszerűsített rétegmodellt feltételezve levezették az elektromágneses tér változásait a forrás kiterjedésének, jellemző karakterisztikus hullámhosszának, valamint a megfigyelési pont relatív helyzetének függvényében. A feltételezett rétegmodell mellett, meghatározták a felszíni impedanciatenzor változásait a forrás kiterjedésének, jellemző karakterisztikus hullámhosszának, valamint a megfigyelési pont relatív helyzetének függvényében. A felszínen érzékelhető természetes EM forráskonfigurációk mellett, meghatározták a klasszikus MT feldolgozás alkalmazásával kapott impedancia modulus és fázis görbék, valamint látszólagos fajlagos ellenállás torzulásának mértékét.

Szeizmológiai Főosztály

Obszervatóriumi eredmények

A szeizmológiai adatközpontban az állomáshálózat felügyeletét, az adatátvitelt, illetve az adatok elsődleges feldolgozását végző szoftver újabb verzióját telepítették. A Csókakőn működő szeizmológiai állomás korszerűsítésével a mérési adatok elérése immáron online üzemmódban történik. Létavértesen új szeizmológiai állomás telepítése kezdődött meg. Sikerült megoldani a mobil internet kapcsolat közel valós idejű adatátvitelhez történő felhasználását is.

A 2011. január 29-én Oroszlány térségében keletkezett M4.5-es földrengés, valamint a 2011. március 11-én kipattant japán rengés utórengései rendkívüli mértékben megnövelték a feldolgozandó adatmennyiséget. 2011-ben mintegy 10 300 hazai kimérési adat keletkezett, melyhez hozzáadódott a külföldről kapott több mint 224 400 fázisadat. Ezek együtt mintegy 25 000 látszólagos és valódi eseményt alkotnak, amelyből 2423-ban szerepelt magyar állomás adata is. Mikroszeizmikus adataikat megküldték a nemzetközi adatközpontoknak és az együttműködő nemzeti szeizmológiai szolgálatoknak. Megszerkesztették és megjelentették a 2010. évi földrengés-bulletint.

2011-ben Magyarország területén hét olyan földrengés keletkezett, amelyek intenzitásbecslést tettek lehetővé. Ezen rengések között a január 29-én Oroszlány térségében kipattant rengés volt a legjelentősebb, melynél nagyobb méretű esemény 1985 óta nem keletkezett hazánk területén.

Szerkezetkutatás

A Szeizmológiai Főosztályon 2011-ben új kutatások kezdődtek, melyeknek célja a Kárpát-medence S-hullám sebességeloszlásának meghatározása. Az alkalmazott felületi hullám tomográfia módszerének bemenő adatait diszperziós görbék képezik, melyek szeizmikus zajból állíthatók elő (zajtomográfia módszere). Az eljárás előnye, hogy a mindenkor jelenlevő szeizmikus zajt használja, így közepes szeizmicitású területeken, például hazánkban is jól alkalmazható, hiszen földrengések regisztrátumaira nincs szükség. Ezzel egyidejűleg a sugárlefedettséget és így az elérhető maximális felbontást sem a földrengések kipattanási helye, hanem az állomások elhelyezkedése és száma határozza meg. A zajtomográfia megbízhatósága annál nagyobb, minél hosszabb időtartamú zajregisztrátumok kerülnek felhasználásra. Jellemzően legalább egy hónapnyi, de bizonyos esetekben akár egy egész évnyi szeizmogramra is szükség lehet a Green-függvények és a diszperziós görbék megbízható becsléséhez.

Földrengés-kockázat

Vizsgálták a földrengések hatására létrejövő talajfolyósodás után bekövetkező felszíni süllyedés mértékének meghatározási módszereit. Vízzel telített, laza szemcsés talajokban földrengések során megnő a pórusvíznyomás, melynek következtében a talaj teherbírása

lecsökken, szélsőséges esetekben pedig talajfolyósodás alakul ki. A túlnyomás a rengés után a víz elszivárgása miatt megszűnik, maga után vonva az üledékek kompaktálódását és a felszín süllyedését, ami a sekélyen alapozott szerkezetek károsodását idézheti elő. A pórusnyomás-növekedés, a talajfolyósodás és a felszíni süllyedés a szeizmikus gerjesztéstől és a talaj jellemzőitől egyaránt függ. Meghatározásuk a földrengések véletlenszerű tulajdonságai, a talajmodell és a számítási módszerek egyszerűsítései miatt sok bizonytalanságot hordoz magában. Vizsgálataik során áttekintették a talajfolyósodás és a felszíni süllyedés számítására kidolgozott módszereket. Rámutattak a bizonytalanságokhoz leginkább hozzájáruló paraméterekre. Kidolgoztak egy valószínűségi eljárást, amely a laza rétegsor módosító hatását, a talajfolyósodást és a felszíni süllyedést egy komplex folyamat keretében, egyidejűleg határozza meg. A bizonytalanságokat logikai fa metodikával veszik figyelembe, egyidejűleg törekedve azok minimalizálására.

Elméleti kutatások

Klasszikus, az első beérkezések polaritását hasznosító eljárással kilenc földrengés fészekmechanizmusát sikerült kiszámítani. Teljes hullámforma inverziós eljárással olyan alacsony magnitúdójú, kisszámú állomás által regisztrált rengések fészekmechanizmusait is meghatározták, amelyek esetén a klasszikus módszerek nem vezettek eredményre. 2011-ben folytatódott a hazai földrengések spektrális elemzése is. A spektrum alakjának helyes értelmezéséhez figyelembe veszik a hullámterjedés során bekövetkező felszínközeli csillapodást (κ) és a sugárút többi részére jellemző jósági tényező (Q) hatását is. Az egyes állomásokra beérkező hullámok amplitúdó spektrumát először κ-val korrigálják, majd az így kapott korrigált adatokra legjobban illeszkedő elméleti görbét egy, a teljes modellteret feltérképező módszerrel keresik meg. Megállapították, hogy az alacsony frekvenciák amplitúdószintje és a sarokfrekvencia általában jól meghatározhatók, míg a jósági tényező becslésére nagyobb bizonytalanság jellemző. Az eddigiek során 50 magyarországi földrengés fészekparamétereit becsülték meg, melyek lokális magnitúdója 0.8 és 4.5 közé esik. A kapott eredmények alapján lineáris összefüggést állítottak fel a lokális magnitúdó és a momentum magnitúdó között.

Geodinamika

Az 1900-2011 közötti időszak $M_W \geq 7.0$ földrengéseinek 1729 eseményt tartalmazó katalógusa alapján vizsgálták a felszabaduló földrengés energia mélység szerinti és területi eloszlását. Megállapították, hogy az energia döntő részben a ~30 km-es mélységből származik és csak kisebb mértékben az 550-670 km közötti mélységtartományból, ahol a szubdukálódó lemez a C átmeneti réteg alsó határán áthatol. A földrengés energiájának területi eloszlását szimmetrikusnak találták. Nemzetközi összefogással vizsgálták a naphosszúság (LOD) változás és a Föld magjának fejlődése közti kapcsolatot. A Phanerozoikumban a LOD növekedésére a magfejlődésnek nem volt számottevő hatása, de az azt megelőző időszakban a mag feltételezhető növekedésének hatása jelentős mértékű lehetett. Különböző magfejlődési szcenáriókat modellezve arra a következtetésre jutottak, hogy a paleo-LOD értékek fokozatos magfejlődést valószínűsítenek, ellentétben a ma széles körben elterjedt nézettel, miszerint a mag kialakulása a földfejlődés legkorábbi szakaszában, viszonylag rövid idő alatt ment végbe.

Szeizmicitás

A 2011. január 29-én kipattant oroszlányi M4.5-es földrengés után az Eötvös Loránd Geofizikai Intézettel összefogva két ideiglenes állomást telepítettek az epicentrális területre (Bokod és Vértessomló). Az utórengések idejére ezeknek és a környéken található egyéb permanens állomásoknak a segítségével nagyon jó lefedettséget sikerült biztosítani és a magyarországi földrengés kutatás történetében először sikerült igen közeli és rendkívül kicsi

méretű utórengéseket is detektálni. 2011 végéig több mint 350 utórengést sikerült azonosítani. A *Double-Difference Hypocenter Location* módszer segítségével megkezdődött az utórengések pontosabb hipocentrum meghatározása is, mely várhatóan fontos adatokat szolgáltat a neotektonikai vizsgálatokhoz.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Geodézia

Extenzométeres és gravitációs kutatásaik hozzájárulnak a geo-környezetet jellemző ok-okozati összefüggések jobb megértéséhez és rávilágítanak arra, hogy a Kárpát-medencétől nagy távolságokban zajló, látszólag irreleváns, bennünket közvetlenül nem érintő és egyébként normális, vagyis átlagos mértékűnek számító természeti folyamatoknak is mérhető hatásuk van, amelyeket a különböző emberi tevékenységek során a katasztrófák megelőzése céljából is figyelembe kell venni.

Pontos geoidmodell ismerete nélkül nem lehetséges GNSS mérésekből a mindennapokban és a mérnöki gyakorlatban használt tengerszint feletti magasságokat meghatározni. A korszerű EGM2008 geopotenciális modell vizsgálata és gravitációs adatokkal történő kombinálása egy újabb előrelépést jelent a nagypontosságú geoidmeghatározás szempontjából.

A földcsuszamlási folyamatokat kiváltó okok kutatási eredményei jelentős mértékben járulnak hozzá a földcsuszamlások előrejelzéséhez és ezáltal az okozott károk csökkentéséhez. A dunaszekcsői magasparton végzett megfigyeléseik során folyamatosan tájékoztatták a helyi önkormányzatot és a Katasztrófavédelmi Főigazgatóságot, elősegítve ezzel a megelőző védelmi munkálatokat.

Geofizika

Geofizikai mélyszerkezetkutatás: Az elektromágneses mélyszerkezetkutatás a Kárpát-Pannon régió geotermikus, szeizmikus és geodinamikai viszonyainak jobb megismerését segíti elő.

Felszínközeli geofizikai módszerek: A geoelektromos kutatási módszerek fejlesztése lehetővé teszi a repedezett töréses szerkezetek, felszín alatti vízmozgások, így a lehetséges szennyeződések mozgásának tanulmányozását, partfalak omlásának előrejelzését.

Légköri elektromos jelenségek: A Schumann-rezonancia kutatása összefügg a globális felmelegedés okozta változásoknak a globális légköri elektromos jelenségekre gyakorolt hatásával, így nem csupán a hazai társadalmat, hanem az egész emberiséget is érintő problémák megválaszolásához járulhat hozzá.

Magnetoszféra, ionoszféra: Rádióhullámok terjedésére, műholdas technológiákra gyakorolt ionoszférikus, magnetoszférikus hatások pontosabb megismerése.

Geomágnesség: A napszél és a geomágneses tér közötti energiacsatolás, valamint a különböző légköri tartományok közötti energiacsatolási folyamatok megértése.

MTA Széchenyi István Geofizikai Obszervatórium: Az európai kritikus infrastruktúra Nap-Föld fizikai folyamatokkal, pl. geomágneses viharokkal összefüggő veszélyeztetettségének vizsgálata (EURISGIC FP7 projekt).

Szeizmológia

A napi 24-órás szeizmológiai ügyeleti rendszer működtetése során az intézet munkatársai számos esetben adtak információkat a lakosság, a kormányzati szervek, az írott és elektronikus sajtó számára. A hazai földrengésekről a lakosság a Szeizmológiai Főosztály weblapján keresztül is tájékozódhatott. Ügyvédi irodáknak, bíróságoknak, cégeknek számos alkalommal készítettek szeizmológiai szakvéleményt.

A 2011-ben kipattant M4.5-es oroszlányi és M9.2-es japán földrengések hatására a földrengés-megfigyelés fokozottan foglalkoztatta a hazai társadalmat. A szeizmológusok ezt a felfokozott érdeklődést az írott és elektronikus sajtónak adott interjúk és nyilatkozatok, ismeretterjesztő cikkek publikálása, valamint diákoknak és pedagógusoknak tartott előadások formájában elégítették ki. Továbbképzési kurzust tartottak Szabadkán (Szerbia) az Észak-Bácskai Pedagógusok Egyesülete Természettudományi Szakcsoportjának. Felkérésre tájékoztatták az MTA X. Osztályát a hazai szeizmológiai kutatás aktuális helyzetéről.

2011-ben együttműködési megállapodás jött létre a GGKI és az Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság (OKF) között. Ezen megállapodás szerint a Szeizmológiai Főosztály nemcsak földrengés adatokat szolgáltat az OKF számára, hanem továbbképzési kurzusokat is tart az OKF főügyeleti dolgozóinak és a polgári védelmi felügyelőknek.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Stuttgarti Egyetem Fotogrammetriai Intézete: fotogrammetriai- és térinformatikai kutatások;
Jénai F. Schiller Egyetem, Alkalmazott Geofizikai Intézet : műszerfejlesztés;
Pozsonyi Geofizikai Intézet, Ukrán Nemzeti Tudományos Akadémia Geofizikai Intézet, Moszkvai Földfizikai Intézet, Stuttgarti Egyetem, Feketeerdő Obszervatórium: extenzométeres mérések;
Aristotle Egyetem, Thessaloniki, Görögország, TU Wien,TU Darmstadt, TU Braunschweig: földcsuszamlások, méréstechnika;
Dán Nemzeti Űrkutatási Intézet, Koppenhága, Finn Geodéziai Intézet: gravimetriai kutatások;
Nemzeti Csillagászati és Geofizikai Kutatóintézet, Helwan, Cairo: GPS mérések;
Max Plank Naprendszer-Kutatóintézet, Katlen-Lindau: Nap-Föld fizika;
Környezettudományi és Űrkutatási Fizikai - Kémiai Laboratóriumok (LPC2E CNRS), Orleans: magnetoszféra-kutatás;
Föld és Bolygók Környezete Kutatóközpontja, Franciaország: geomágnesség;
Lengyel Tudományos Akadémia Geofizikai Intézete, Varsó: mélyszerkezet-kutatás;
Lengyel Tudományos Akadémia Űrkutatási Intézet: ionoszonda fejlesztése;
Geomágneses Indexek Nemzetközi Szolgálata: mágneses tranziens események.

Külföldről érkezett vendégkutatók:
Kutatási együttműködés keretében 15 fő vendégkutató 4 hónapot töltött az intézetben.

Intézeti kutatók hosszabb idejű külföldi szakmai munkája:
Poszdoktori ösztöndíjas: 1fő;
Kutatási együttműködés keretében 8 fő intézeti kutató összesen 15 hónapot töltött külföldön.

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (eseti):
Habilitációs Bizottság, PhD-védés 5 (2 elnök); OTDK – zsűritag, bíráló.

A hazai felsőoktatásban végzett tevékenység (rendszeres):
ELTE TTK: 3 elméleti kurzus, 2 gyakorlati kurzus;
NyME KTK: 2 elméleti, 2 gyakorlati kurzus (német nyelven);
NyME KTK: 4 elméleti, 2 gyakorlati kurzus;
NyME FMK: 5 elméleti, 3 gyakorlati kurzus;
NyME EMK: 4 elméleti, 2 gyakorlati kurzus;
BME Szélessávú Hírközlési és Villamosságtani Tanszék: 2 elméleti kurzus.

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

Doktori iskolában törzstag:
NyME EMK Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola:2 fő;
NyME FMK Cziráki József Faanyagtudomány és Technológiák Doktori Iskola: 1 fő.
NyME KTK Széchenyi István Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola: 1 fő;

Doktori iskolában oktatás:
NYME Kitaibel Pál Környezettudományi Doktori Iskola: Geodinamikai folyamatok modellezése, A tudományos kutatás módszertana, Naptevékenység és időjárás, Geomágnesség, Űridőjárás és klíma.
NyME Cziráki József Faanyagtudomány és Technológiák Doktori Iskola: Méréselmélet, Digitális képfeldolgozás.
NYME KTK Széchenyi István Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola: Statisztikai elemzések elmélete.

Témavezetés (TDK-dolgozat):
BME űrkutatás: 2 fő;
NYME környezettudomány: 8 fő.

Témavezetés (MA-, MSc-diploma):
NYME, informatikus: 1 fő;
NYME, környezetkutató: 2 fő.

Témavezetés (PhD-disszertáció):
ELTE Földtudományi Doktori Iskola: 1 fő;
NYME (EMK, KTK, FMK): 8 fő.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA K 101603: „*A gravitációs árapály javítás területfüggésének vizsgálata a Pannon medencében a nagy pontosságú terepi gravimetriai mérések követelményei szerint*", 2012–2016.
OTKA K 81295: „Mérési módszerek kifejlesztése nagyon kicsi felszíni tömegmozgások kimutatására", 2011–2014.
NIIFP: „*Számítóközpont fejlesztése*", 2011.
TÁMOP 4.2-1: „Biotikus és abiotikus környezetek vizsgálata és kutatásmódszertana", IV. Alprogram; *„A földtani környezet komplex biztonsági értékelése és a károk elhárításának stratégiája"*, 2011–2012.
EU FP7, Grant agreementNo: 260330, "European Risk from Geomagnetically Induced Currents", Status: Participant (WP leader), 2011–2014.

Szerződéses vállalati kapcsolatok
Dunaszekcső Önkormányzata: Integrált geodéziai megfigyelő-hálózat telepítése és időszakonkénti mérése;
*Paksi Atomerőmű:*A nemzeti szeizmológiai hálózat fejlesztése;
Paksi AE: PAE geodinamikai hálózat ellenőrző mérése és adatfeldolgozása AS6 kapcsolattal;
OMV Onshore Exploration GmbH: EM (transient and MT soundings) and gravity research.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bányai L: The relationship between the Hungarian local and global geodetic reference frames estimated together with local geoidundulations. ActaGeod. Geoph. Hung. 46(1): 50-70. (2011)

2. Győri E, Tóth L, Gráczer Z, Katona T: Liquefaction and post-liquefaction settlement assessment – a probabilistic approach. Acta Geod. Geoph. Hung. 46(3): 347-369 (2011), doi: 10.1556/AGeod.46.2011.3.6

3. Masters A, Schwartz S J, Henley E M, Thomsen M F, Zieger B, Coates A J et al.(4): Electronheating at Saturn's bowshock. Journal of Geophysical Research 116: A10107 (2011), doi: 10.1029/2011JA016941

4. Papp G, Szűcs E: Effect of the difference between surface and terrain models on gravity field related quantities. Acta Geod. Geoph. Hung. 46(4): 441-456 (2011), doi: 10.1556/AGeod.46.2011.4.6.

5. Szalai S, Szarka L: Expanding the possibilities of two-dimensional multielectrode systems, with consideration to earlier geoelectric arrays. Journal of Applied Geophysics75(1): 1-8 (2011), doi: 10.1016/j.jappgeo.2011.06.020

6. Szalai S, Novák A, Szarka L: Which geoelectric array sees the deepest in a noisy environment? Depth of detectability values of multielectrode systems for various 2D models. Physics and Chemistry of theEarth 36: 1398–1404 (2011)

7. Telesca L, Lovallo M, Kiszely M, Tóth L: Discriminating Quarry Blasts from Earthquakes in Vértes Hills (Hungary) by Using the Fisher–Shannon Method. Acta Geophysica59(5): 858-871 (2011), doi: 10.2478/s11600-011-0018-0

8. Varga P: Geodetic strainobservations and return period of strongest earthquakes of a given seismic source zone. Pure and Applied Geophysics168(1-2): 289-296 (2011)

9. Závoti J, Fritsch D: A first attempt at a new algebraic solution of the exterior orientation of photogrammetry.Acta Geod. Geoph. Hung. 46(3): 317-325 (2011)

10. Zieger B, RetinòA, Nakamura R, Baumjohann W, Vaivads A, Khotyaintsev Y: Jetfront-driven mirror modes and shock lets in the near-Earthflow-braking region. Geophysical Research Letters (38): L22103, (2011), doi: 10.1029/2011GL049746

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	60			Ebből kutató[2]:	34
PhD, kandidátus:	15	MTA doktora:	4	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					8

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				146
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				128
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	15	idegen nyelven:	9
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	16
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	24
Könyv[8]	magyarul:	1	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	2	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	35,94	Összes független hivatkozás száma:	316
Összes hivatkozás száma[11]:	551		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	2	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			38
		poszterek száma:	49
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	8	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	32		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			10
Témavezetések száma: TDK munka:	10	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	10

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	225 929	E Ft
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 3 — Teljes saját bevétel:	58 229	E Ft
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	16 472	E Ft
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	E Ft
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		4
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	8064	E Ft
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:		3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2366	E Ft
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		E Ft
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	47 799	E Ft

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet 2011-ben is folytatta a litoszféra anyagának, folyamatainak jobb megismerését célzó azon alapkutatásokat, amelyek az intézetben nagy hagyományokkal rendelkeznek és 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 környezetgeokémia 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. Folytatták az egyes hazai ásványi nyersanyagaink képződését, migrációját és felhalmozódását eredményező, illetve befolyásoló geokémiai folyamatok kutatását is. Mind a geokémia belső fejlődése, mind pedig a természetes környezet állapotának megismerése, megőrzése és 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 geokémiai körforgalmát, a talajok, valamint a felszíni és felszín alatti vízbázisok, hévizek sajátságait, továbbá az épített környezet és kulturális örökségünk egyes tárgyi emlékeit ért antropogén hatásokat vizsgálták.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

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

Metamorf kőzettani-geokémiai kutatások. A diagenezis és a kis hőmérsékletű metamorfózis növekvő hőmérséklettel jellemzett folyamatai általában nem egyensúlyi jellegű, metastabilis rétegszilikát ásvány-együtteseket hoznak létre az agyagos kiindulási kőzetekben. Ezeket a „reakciófejlődésnek” nevezett átalakulásokat az utóbbi fél évszázadban igen intenzíven kutatták. Ezzel szemben, nagyrészt módszertani okok miatt, lényegesen kisebb figyelmet fordítottak a metamorfózis maximuma után, csökkenő hőmérsékleti viszonyok között, gyakran kis hőmérsékletű fluidumok által közvetített retrográd rétegszilikát-átalakulásokra. Ez utóbbi kutatási területen értek el jelentős eredményeket az ÉK-magyarországi Szendrői-hegység alpi epizónás regionális metamorfózist szenvedett paleozoós agyagpala sorozatának komplex kőzettani-geokémiai vizsgálatával. A kutatás során kimutatták, hogy az első, progresszív metamorf eseményt csökkenő hőmérséklettel jellemzett retrográd hidrotermális események egész sora követte. Az ilyen és ehhez hasonló jelenségek, földtani összletek feltehetően sokkal gyakoribbak a világon, mint ahogyan azt eddig vélték.

Magmás kőzettani-geokémiai kutatások. Folytatták egyes nyugat-ausztráliai (Speewah Dome) karbonatitok (karbonátos erek) és fluoritok genetikájának tanulmányozását a bennük található zárványok, valamit a befogadó ásványok (karbonátok) mikrotermometriai és izotópos

vizsgálatával. Az új eredmények azt sugallják, hogy a fluidum, amelyből nagy valószínűséggel a karbonátos erek képződtek, köpeny- és kéreg-eredetű fluidumok keveredésével és nyitott rendszerben történő kigázosodással jött létre. Kimutatták, hogy a fluoritokat létrehozó fluidum közös eredetű lehetett a karbonátokat létrehozóval, azonban a fluoritot létrehozó fluidum zárt rendszerben fejlődött tovább.

Szintén folytatták a dunántúli alkáli bazaltos vulkánok által felszínre hozott peridotitxenolitok vizsgálatát. A korábbi vizsgálatokból jól ismert, hogy a peridotitxenolitok két egymással élesen szembenálló csoportot képeznek. A gyakoribb protogranuláris, porfíroklasztos és ekvigranuláris szövetű xenolitok geokémiai jellegei arra engednek következtetni, hogy ezek idős, konszolidált litoszféra köpenyből származnak. Ezzel szemben, a világszerte ritka, de a Pannon-medencében viszonylag gyakori poikilites xenolitok számos anomális geokémiai bélyege komplex fejlődésről árulkodik. Új főelem, nyomelem és radiogén izotóparány mérések alapján kimutatták, hogy ezek a különleges geokémiai viszonyok porózus olvadékvándorlási rendszerben, ún. kromatografikus frakcionáció, valamint olvadék-kőzet reakciók során jöhettek létre. Az olvadék-köpeny kölcsönhatás legvalószínűbb helyszíne a szilárd litoszféra köpeny és a felfelé nyomuló asztenoszféra határán lehetett. A poikilitesxenolitok kőzettani és geokémiai bizonyítékként szolgálhatnak a felemelkedő asztenoszférából származó magmás olvadékok és fluidumok, valamint a szilárd litoszféra köpeny kőzeteinek kölcsönhatására. Ez a kölcsönhatás a litoszféra termális eróziójának fontos eleme, így jelentős mértékben járulhatott hozzá a Pannon-medence alatti litoszféra kivékonyodásához.

A metamorf és magmás kőzettani-geokémiai kutatások alapkutatás jellegűek, közvetlen gyakorlati jelentőségük nincs. Egyes képződmények vizsgálata azonban (fluorit) közvetve kapcsolódnak a nyersanyagkutatáshoz.

A hazai ásványi nyersanyagok kutatása. Új, a kőolajfrakciók (SARA) H-izotóp típusgörbéinek vizsgálatán alapuló módszert vezettek be a kőolajok jellemzésére. A frakciók H és C izotóp típusgörbéi alapján megállapították, hogy együttes alkalmazásuk esetén nem csak genetikai rokonság (szerves fácies) és származás (pl. egy adott medencén belül vagy kívül) megállapítására, hanem érettség, és bizonyos esetekben relatív rezervoár hőmérséklet és mélység megállapítására is alkalmasak. Jelenleg az eredmények kőolajipari alkalmazásának fejlesztése folyamatban van.

A hazai nyersanyagok genetikájának vizsgálata a készletbecsléshez és a kitermeléshez nyújt fontos alapadatokat.

A földtani környezet geokémiai állapotának és változásainak vizsgálata

Radioaktívhulladék-elhelyezés kutatása. A hazai nagy aktivitású radioaktívhulladék-elhelyezés kutatásához kapcsolódva minden eddiginél részletesebben és komplexebben vizsgálták a Bodai Aleurolit Formáció (a nukleáris hulladékot potenciálisan befogadó képződmény a Ny-Mecsekben) ásványos összetételét és agyagásványait. A vizsgálatok fényt derítettek arra, hogy a képződményben uralkodóan előforduló illit agyagásvány rendkívül kicsi, 7-10 nanométer vékony lemezekből áll. Eddig az sem volt ismert, hogy ez az illit szerkezetét és kémiai összetételét tekintve kétféle. Az eredmények alapvető fontosságúak a BAF szigetelőképességének, szorpciós kapacitásának kutatásában, a hozzá kapcsolódó jelenségek magyarázatában, azaz a lerakó földtani környezet által szolgáltatott hosszú távú biztonságának megítélésében.

Talajgeokémiai kutatások. Az intézet lényeges alapkutatási – ugyanakkor gyakorlati jelentőségű – témája a toxikus és esszenciális nyomelemek agyagásványokon és talajban történő megkötődésének, mozgásának vizsgálata. Laboratóriumi kísérletekben bizonyították, hogy váltakozó nedvesítés és szárítás hatására – mely az időjárás szélsőségesebbé válásával egyre gyakoribb – a kálium-montmorilloniton csökken a megkötődött ólom mennyisége, vagyis jelentősen romlik az adszorpciós képessége.

Vizsgálták továbbá a nyomelemek vasborsókban tapasztalható dúsulási jellegzetességeit is. Semleges-lúgos kémhatású ártéri talajokban azt találták, hogy a Co és Mn jellemezhető a legnagyobb dúsulással a talajbeli koncentrációjukhoz képest. Ezeknél kevésbé dúsul a Cd, Ba, Ni, V, Zn, Cu, Pb és Fe. Más elemek, mint az Al, Mg, Si, Ti, K, Cr (szilikátos fázisokhoz kötődő elemek), valamint a Ca, Sr (karbonátos fázisokhoz kötődő elemek) nem mutattak jelentős dúsulást, viszont hasonlóan viselkedtek a különféle kioldások során. A vizsgált szelvény semleges-lúgos körülményei között a pH felülírja a víz hatását, amit a vasborsók nyomelem-felhalmozó képességére gyakorolnak. A szorpciónak, együttes kicsapódásnak és a vasoxidok rendszeres újrakristályosodásának köszönhetően a legtöbb kationos elem a vasoxidokban dúsul a vizsgált körülmények között a Mn-oxidokkal szemben.

Kolontár környékén vizsgálták a talaj és altalaj ásványos összetételét, agyagásványos karakterét. Megállapították, hogy uralkodó agyagásvány a jól duzzadó, jó szigetelő és szennyeződés-megkötő tulajdonságú szmektit. Ennek köszönhetően a képződmény alkalmas lehetett volna a kiömlött vörösiszap ideiglenes tárolására.

Egy hazai talajsorozaton vizsgálták a szemcseösszetétel meghatározásakor alkalmazott FAO szabvány (ISO/DIS 11277/1995.) szerinti aggregátum roncsoló, elemi részecskéket eredményező eljárás eredeti ásványos/agyagásványos összetételt módosító hatását. A karbonátok, a vas-(oxi)hidroxidok és a szerves anyagok eltávolításával a duzzadó agyagásványok mennyiségének csökkenését, illit típusúvá átalakulását tapasztalták. A kioldások hatására a talajok duzzadó agyagásványainak beidellit jellege megszűnt. Az agyagfrakciókban az agyaglemezek felületén a vas oldódását követően a titán dúsulását, rutil tűk kialakulását észlelték.

A talajok geokémiai vizsgálatával kapcsolatban egy eddig ismeretlen jelenséget találtak a lipidek (szerves oldószerekben oldható szerves anyagok) extrakciója során. Alapvető minőségi különbséget észleltek a meleg (forrásban lévő) és a hideg (szobahőmérsékletű) extrakció során kapott extraktumok n-alkánok páros-páratlan összetételében, az alifás vegyületek relatív telítetlenségében/telítettségében. A tapasztalt különbségek nagy eltéréseket okoznak az alapvető szerves geokémiai paraméterekben és befolyásolják a lipid frakciók H és C stabilizotópos összetételét is. Emiatt a különböző módszerekkel kinyert szerves anyagok irodalomban található vizsgálati eredményei nem összehasonlíthatóak. A megfigyelt eltérések oka tisztázásra szorul.

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

Levegőben szállított porok vizsgálata. A közlekedési eredetű szennyezés mértékét és eloszlását vizsgálták Budapest egyik nagy forgalmú útja mentén álló épület két oldalán, különböző magasságokban gyűjtött ülepedő porminták mágneses, ásványtani és geokémiai módszerekkel történő elemzésével. Jelentős évszakos függést tapasztaltak az antropogén eredetű szennyezők megoszlásában, mennyiségük nyáron, 9 méteres magasságban volt a legnagyobb. Ebben az évszakban volt kimutatható a legnagyobb változékonyság is a portömeg, a mágneses szuszceptibilitás és a porok ólomkoncentrációja tekintetében. A különböző évszakokban tapasztalt portömeg-eloszlások nem minden esetben voltak összeegyeztethetők az ismert általános levegőáramlási modellekkel. A legfontosabb nehézfémtartalmú fázisok a magnetit (Pb, Zn) és az agyagásványok (elsősorban Zn).

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

Paleoklímatológiai kutatások. Az intézetben folyó kutatások egyik fontos területe a geokémiai vizsgálatok paleoklimatológiai alkalmazása. Az év során elkészült az első olyan geokémiai/paleoklimatológiai szintézis, amely régészeti feltárásokból származó kagyló és csontleletek stabilizotóp-adatait, cseppkövek stabilizotópos és nyomelem-geokémiai eredményeit, valamint tavi üledékek diatómatartalmának oxigénizotópos adatsorát foglalja egységes képbe. Újszerű megközelítésként cseppkövekbe zárt fluidumzárványok hidrogénizotóp- és kalcitok oxigénizotóp-összetételeiből származó deutériumtöbblet-számítások történtek, amelyek alapján a kb. 2000-9000 évvel ezelőtti időszakra jellemző csapadékszármazási viszonyok változására derült fény. A csapadék atlanti, mediterrán vagy kontinentális területről történő szállítása az Észak-Atlanti oszcillációval, az Atlantikumból benyomuló légtömeg hatásának változásával függ össze.

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

Egy horvátországi barlangi jégfuraton végzett jégkémiai vizsgálataik eredményei egyértelműen arra utaltak, hogy a jégben található nyomelemek több forrásból származnak. A légköri ülepedés, a talajvíz beszivárgás és a mészkő oldódása a három legfontosabb forrása az oldott ionoknak. A karsztos környezetnek köszönhetően a Ca az uralkodó ion a barlangi jégben. Az eredmények alapján megfogalmazták, hogy jégbarlangi környezetben csak azok a kémiai elemek őrizhetnek megbízható légköri ülepedési történetet, amelyek szelvény menti fluktuációi nem korrelálnak a Ca változásaival. A Vukušić-jégbarlang esetében eredményeink azt sugallják, hogy a Cr, Cu, Pb és Zn lehetnek ilyen elemek.

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

Vízgeokémiai kutatások. Romániában az ásványvizek döntő többségét a Székelyföldön palackozzák. Ezen belül is a Csíki-medence különösen gazdag forrás- és ásványvizekben,

ugyanakkor vízföldtani megkutatottsága nem arányos jelentőségével. Források és kutak izotóp-hidrológiai vizsgálatával elsőként határozták meg a Csíki-medence lokális csapadékvíz vonalát, valamint a medence területére jellemző izotóp-hidrológiai magassági hatást, ami $\delta^{18}O/100m$ = -0,15‰-nek adódott. Ez utóbbi gyakorlatilag azonos a Nyugati-Kárpátokban mért értékekkel, jelentősége a források és kutak beszivárgási területének azonosításában van.
A Duna és a Szentendrei-szigeten található Tahi I. kútsor egyik csáposkútjának oxigénizotópos összetételének segítségével sikerült modellezni az adott csáposkút szivárgási idejét és diszperzióját, immár több különböző időszakban, a vízállás függvényében. Kis vízállás esetén (~200 mm) a szivárgási idő 2-3 hét, a háttérvíz a termelt vízmennyiség több mint felét teszi ki. Magas vízállás esetén (~700 mm) a szivárgási idő néhány nap (akár 6-8 nap), a termelőkútban elsősorban Duna-víz van jelen. A megfigyelő kutak stabilizotópos összetételében az évszakos változás nem jelentős. A Dunához közelebb eső termelő kutak stabilizotópos összetétele nagyobb szórást mutat, ami nagyobb háttérvíz részarányt bizonyít.

Fenti vizsgálatok segítségével a Fővárosi Vízművek Zrt.-vel együttműködve intézetünk szerepet vállal a felszín alatti egyik legjelentősebb vízbázisunk működésének pontosabb megismerésében, így közel 2 millió ember napi ivóvízszükségletének biztonságosabbá tételében.

A kulturális örökség tárgyi emlékeinek vizsgálata. A sárospataki vár területén feltárt 17. századi ágyú- és harangöntő műhely több habán edénytöredékeinek vizsgálata megerősítette, hogy az opak fehér máz nagy mennyiségű ón-oxidot tartalmaz (16-20 tömeg% SnO_2). Ez a mennyiség a reneszánsz majolikák ónmázára jellemző 4-10 tömeg% SnO_2-höz képest nagyobb, és jelzi, hogy a habánok a minél fehérebb máz előállításához az ónt tudatosan adagolták.

Az ún. szászkézdi (kobaltkék, kék alapon fehér díszítésű) kerámiák készítési technikai kérdéseinek pontosítására anyagvizsgálatot végeztek a Néprajzi Múzeum Kerámiagyűjteményében található tárgyak mázán. Kimutatták, hogy a tárgyak vöröses kerámia-alaptestét borító világos színű engóbra a mázat két rétegben vitték fel: először kék, kobaltdús mázat, majd átlátszó, ólomban gazdag mázat. A korábbi feltételezésekkel ellentétben egyértelműen bebizonyították, hogy a kék réteg máz, nem engób. Továbbá egyértelműen cáfolták fehér vagy kékre színezett ónmáz használatát. Az eredmények hozzájárulnak részben a szászkézdi kerámiák jövőbeli szakszerű restaurálásának kivitelezéséhez (megfelelő anyaghasználat), másrészt a díszítések előállítására alkalmazott technika sgraffito vagy batik (viaszos) jellegének eldöntéséhez, mivel a jövőbeli kísérleti darabokat a vizsgálat eredményére alapozva lehet elkészíteni.

A grafitos kerámiák proveniencia vizsgálata során az ásványos összetétel (jarosit) és a nyomelem-karakter meghatározásának segítségével feltárták egy mosonszentmiklósi 8-9. sz.-i lelőhely grafitjának eredetét, amely a kelta grafitos kerámiáktól eltérő, ausztriai eredetű.
További jelentős eredmények születtek a bronz és ezüst leletek összetételének, korróziós kérgének (patina) finomszerkezet-vizsgálata, továbbá a szemcseközi korrózió mértékének és nyomelem-eloszlásának meghatározása alapján a hamisítványok kiszűrése terén.

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.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A Geokémiai Kutatóintézet négy munkatársa részt vett a Magyarhoni Földtani Társulat és a Miskolci Egyetem által 2011. november 6-án megrendezett „Földtudományos Forgatag" elnevezésű rendezvényén. Az eseményen több száz laikus látogató vett részt. Az intézet saját standdal fogadta őket, ahol az intézet dolgozói ásvány- és kőzetbemutató, geokémiai showműsor, interaktív fejtörők segítségével ismertették a nagyközönséggel a geokémiai kutatás módszereit és eredményeit.

Az intézet négy kutatója vett részt vendégként a Kossuth Rádió tudományos ismeretterjesztő műsoraiban, ahol egyrészt a stabilizotóp-geokémiai kutatásokról, másrészt a mikrobák aranyérc-képződésben betöltött szerepéről beszéltek.

A Mindentudás Egyeteme 2.0 sorozat vízzel foglalkozó részének riportfilmjében (Víz-választón – Magyarország felszíni és felszín alatti vizei ME 2.0, 2011.05.17.) a budapesti hévizekkel kapcsolatos kutatás folyamatát, valamint az eredmények egy részét ismertették a nézőkkel.

Az intézet egy munkatársa ismeretterjesztő cikket írt a Természet Világa folyóirat, a Kémia Éve alkalmából megjelentetett különszámába, „Mérgező és éltető elemek a vízben" címmel. A cikkben a természetes vizekben található esszenciális és toxikus elemekről esett szó, főként hazai vonatkozásban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

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

A 2011-es évben a „European Society for Isotope Research (ESIR)" keretein belül, az intézet bonyolította le a kétévente megrendezésre kerülő „Isotope Workshop" című tudományos konferenciát. A konferencián 20 országból (zömmel európai országok, továbbá USA, Izrael) 98 résztvevő vett részt.

Az MTA Környezetgeokémiai Albizottságával közösen megrendezték a Környezetgeokémiai ankétsorozat keretében „A króm környezetgeokémiája" és „A környezetgeokémia eredményei az ezredfordulón" című, 1-1 napos ankétokat.

Az intézet egy fiatal kutatója 18 hónapos SCIEX ösztöndíjjal a Berni Egyetemen tartózkodik, hazai mentora az intézet igazgatója. Az ösztöndíjhoz kapcsolódóan tudományos együttműködés jött létre a két intézmény kutatói között a geokémia paleoklimatológiai alkalmazásának témájában.

Az intézet egy kutatója zsűritag volt a 30. Jubileumi Országos Tudományos Diákköri Konferencia Fizika, Földtudományok és Matematika szekciójában.

Az intézet 8 kutatója vett részt a felsőoktatásban, összesen 18 kurzus keretében az alábbi egyetemeken: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szegedi Tudományegyetem, Pécsi Tudományegyetem, Pannon Egyetem, Magyar Képzőművészeti Egyetem.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Ugyan a pályázat támogatását 2010-ben már bejelentették, egy OTKA-NKTH közös finanszírozású (OTKA 80661, Lézerspektroszkópia alkalmazása geológiai minták hidrogénizotóp-összetételének meghatározásában) projekt anyagi támogatása 2011 novemberében kezdődött. A projekt teljes összege 42.893.000 Ft, a 2011-re eső támogatási összeg 23.768.000 Ft. A projekt egy újszerű technika továbbfejlesztését és alkalmazását tűzi ki célul, az első célkitűzés egy lézerspektrométer beszerzése és üzembe helyezése.

A tárgyévben indult a „Nyílt láncú reguláris izoprenoidalkánok képződése, stabilitása és alkalmazása fácies- és érettségjelzőként" című OTKA (K 84086)-pályázat, összesen 23.840.000 Ft támogatással. A projekt célja a szerves anyagok (pl. kőolaj) felhalmozódása egyik fontos mutatójának, a prisztán/fitán hányados érettség függőségének jobb megértése és alkalmazási lehetőségeinek biztosabbá tétele, fenntartások megfogalmazásával.

Két másik OTKA támogatásának kihirdetése 2011-ben megtörtént. Az NK 101664 jelű, „Hazai szárazföldi karbonátképződmények komplex geokémiai, paleoklimatológiai és tektonikai vizsgálata" című projekt teljes összege 43.468.000 Ft. A projekt eddig nem vizsgált barlangi tetarátaképződmények képződési folyamatainak és paleoklimatológiai alkalmazhatóságának elemzését tűzi ki célul. A K 100181 jelű, „Táji mintázatok hatása vizes élőhelyek vasháztartására" című projekt teljes összege 10.139.000 Ft. A kutatási projekt célja a vasásványok átalakulásának, a vas-oxid-agyagásvány asszociációknak, valamint a vas-oxidok szerepének vizsgálata vízhatású talajokban.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Casillas R, Demeny A, Nagy G, Ahijado A, Fernandez C: Metacarbonatites in the Basal Complex of Fuerteventura (Canary Islands). The role of fluid/rock interactions during contact metamorphism and anatexis. Lithos 125: 503-520 (2011)

2. Fekete J, Sajgó Cs, Demény A: Hydrogenisotopetype-curves of very hot crudeoils. Rapid Communicationson Mass Spectrometry 25: 191–198 (2011)

3. Kern Z, Fórizs I, Pavuza R, Molnár M, Nagy B: Isotopehydrological studies of the perennial icedeposit of Saarhalle, Mammuthöhle, Dachstein Mts, Austria. The Cryosphere 5: 291-298 (2011)

4. Németh T, Jiménez-Millán J, Sipos P, Abad I, Jiménez-Espinosa R, Szalai Z: Effect of pedogenic clayminerals on the sorption of copper in a Luvisol B horizon. Geoderma 160: 509-516 (2011)

5. Schöll-Barna G, Demény A, Serlegi G, Fábián Sz, Sümegi P, Fórizs I, Bajnóczi B: Climatic variability in the Late Copper Age: stableisotope fluctuation of prehistoric Unio pictorum (Unionidae) shells from Lake Balaton (Hungary). Journal of Paleolimnology 47: 87-100 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Geokémiai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	28			Ebből kutató[2]:	16
PhD, kandidátus:	8	MTA doktora:	2	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					6

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				53
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				52
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	12	idegen nyelven:	15
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	13
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	13
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	27,825	Összes független hivatkozás száma:	309
Összes hivatkozás száma[11]:	486		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			22
		poszterek száma:	33
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	12		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			8
Témavezetések száma: TDK munka:	8	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	9	PhD:	5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	105 258	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 3 — Teljes saját bevétel:	66 256	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	6	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	8978	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	24 848	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	10 128	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2070	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	29 210	EFt

IZOTÓPKUTATÓ INTÉZET
1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.; 1525 Budapest, Pf.: 77.
telefon: 1-392 2531; fax: 1-392 2533
e-mail: wojn@iki.kfki.hu; honlap: www.iki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézeti szakmai tevékenységének előzetes céljai négy fő irányban csoportosultak.

A nukleáris vizsgálati módszerekkel kapcsolatban *az alkalmazás terén* célul tűzték ki a

- nukleáris állandók és adatok meghatározását a transzmutációs reaktorok és IV generációs atomerőművek működési paramétereinek tervezéséhez,
- a kulturális örökséggel és műtárgyakkal kapcsolatos eddigi eredményes vizsgálatok folytatását,
- a hidegneutronos kutatási infrastruktura biztosítását az EU FP7 NMI3 projektben,
- a MANREAD (Minor Actinide Neutron Reaction Data, NAÜ CRP) méréseinek folytatását.

A módszerek továbbfejlesztése terén

hazai projektek keretében a hidegneutron-nyalábban végzett munkákkal kapcsolatban

- az adatgyűjtés és digitális jelfeldolgozás módszereinek javítását a PGAA mérés-technikában,
- neutronoptikai es radiográfiai mérőrendszer anyagvizsgálati célokra történő kialakítását.

A nukleáris anyagok és radioizotópokkal kapcsolatos vizsgálatok terén

- a nukleáris biztosítéki célú vizsgálómódszerek fejlesztése (lézer indukált plazma spektroszkópia alkalmazása, egyes különálló részecske analitikai módszerek adaptálása),
- hosszú felezési idejű radioizotópok elemzési módszereinek fejlesztése biológiai mintákban történő meghatározáshoz,
- hideg neutronos koincidencia mérési módszer alkalmazása urán nagyérzékenységű kimutatására,
- új atomerőművi telephely kiválasztásához szükséges környezeti alapszint felmérésének előkészítése,
- a nukleáris anyagok és technológiák lehetséges eltérítésének elemzése,
- redox folyamatok vizsgálata a nukleáris hulladékok perspektivikus hazai tárolókőzeteiben.

Sugárhatáskémiai és dozimetriai vizsgálatok terén

- gyógyszeripari szennyvizek nagyenergiájú sugárzásos kezelése során a vízben oldott szennyezők azonosítása, mennyiségeik meghatározása kis koncentrációkban is. A köztitermékek megfigyelése a lebomlás folyamatában impulzusradiolízissel, a végtermékek mérése HPLC-MS berendezéssel,
- a retrospektív dozimetriai mérési módszer megkezdett fejlesztésének folytatása,
- új típusú, nagyérzékenységű termolumineszcens anyagok előállítása és TL tulajdonságaik ill. LET függésük összehasonlító vizsgálata kevert (gamma és neutron) sugárterekben.

Katalitikus vizsgálatok terén

Az arany katalízis terén többkomponensű, arany alapú összetett aktív centrumú katalizátorokban vizsgálják az összetétel és szerkezet hatását különböző reakciókban. Au-CuO-CeO_2-M_xO_y (M-Ti, Mn, Zr) katalizátorrendszereket tanulmányoznak a PROX folyamatban, SiO_2, TiO_2, CeO_2, MnO_x, CoO_x hordozós kétfémes AgAu katalizátorokat CO oxidációban, glükóz szelektív oxidációjában és NO_x redukcióban.

A metán száraz reformálásának vizsgálatában *nemzetközi konzorcium* keretében folytatják a kolloidkémiai és hagyományos módszerekkel előállított egyfémes Ni és kétfémes AuNi katalizátorok vizsgálatát különféle vegyes oxidhordozókon. Elvégzik a katalizátorok szerkezetvizsgálatát, kinetikai és stabilitási vizsgálatokat folytatnak, megkezdik a dezaktiválást okozó szénképződés mechanizmusának feltárását $^{13}CO_2$ alkalmazásával.

A környezetvédelmi katalízis terén

- A szennyvizek oxidációs kezelésében a nagy energiájú sugárzással iniciált reakciók vizsgálatát folytatják a szükséges sugárdózis és az optimális reakcióparaméterek megállapítására. Modellvegyületek felhasználásával tanulmányozzák a katalitikus és sugárzásos technikák együttes alkalmazásakor lejátszódó reakciókat.
- Folytatják a hidrodeszulfurálás folyamatának vizsgálatát kén-35 radioizotóppal jelzett tiofén tiofén-tetrahidrotiofén ill. tiofén-butadién elegyek konverziójának mérésével, szén-14 izotóp bevonásával. Vizsgálják a HDS reakció mechanizmusát további, ipari célra használt ill. használni tervezett katalizátorokkal.
- A dinitrogénoxid bontását, valamint a metán-dinitrogénoxid elegy teljes átalakulását optimálják az Ir/H-ZSM-5 és Ir/Ga/H-ZSM-5 katalizátorokon in beam Mössbauer spektroszkópiai vizsgálatokkal kibővítve.
- *Zöldkémiai* folyamatokkal kapcsolatban vizsgálják az aszimmetrikus hidrogénezésekben királis ciklohexanon származékok kinetikus reszolválását prolin adalékkal, illetve királis dimetilciklohexénon aszimmetrikus redukcióját (jórészt saját fejlesztésben).
- *A szénhidrogén reakciók* tanulmányozásában az eddigi kétfémes (PtIr, PtRh) katalizátorokon végzett vizsgálatokat kiterjesztik harmadik fémet (pl. Sn-t vagy Ge-t) tartalmazó katalizátorokra is. Külföldi kooperációban CeO_2 hordozós Pt katalizátor tesztelését kezdik meg modellszénhidrogének reakcióiban.

Az intézet munkájának számottevő része irányul a közvetlen kutatások végzése mellett szakmai-tudományos támogató tevékenységre is (elsősorban az Országos Atomenergia Hivatal műszaki háttérintézményeként) a nukleáris biztosítéki tevékenység, ill. a sugárbiztonság, a radioaktív anyagok szállítása, nyilvántartása, és ismeretlen eredetű radioaktív anyagok azonosítása terén.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A nukleáris analitikai módszerek továbbfejlesztése terén

- GEANT4 Monte Carlo szimulációs kódon alapuló módszert fejlesztettek ki a HPGe detektorok hatásfokának és válaszfüggvényének meghatározásához. Ezzel a hatásfokra az 50 keV-10 MeV-es tartományban néhány százalék pontosságot sikerült elérni.
- Pontosították számos dúsított ritkaföldfém és W minta segítségével az egyes izotópok (n, γ) spektrumát a kaliforniai Lawrence Berkeley Laboratóriummal együttműködve.

– Módszert dolgoztak ki dúsított minták összetételének és szennyezői elemösszetételének meghatározására:
  - a NIPS berendezéshez új mintakamrát, mintatartót, hálózatos adatgyűjtő modult szereztek be,
  - Monte Carlo módszert dolgoztak ki a PGAI módszerrel megmért tárgyak belső elemi összetételének elméleti leírására. Az ANCIENT CHARM projektben kidolgozott mérési módszert két könyvfejezetben ismertették.
– Megtervezték, elkészíttették és telepítették a NORMA elnevezésű neutronradiográf és –tomográf berendezést.
– Módszert dolgoztak ki ötvözetek bórtartalmának mérésére és a bór eloszlásának vizsgálatára. A térfogati bórtartalom PGAA-val, az eloszlás pedig részecske nyomdetektorokkal volt mérhető a $^{10}B(n,\alpha\gamma)$ reakció segítségével.
– Demonstrálták, hogy Monte Carlo szimulációval kiegészítve az EGAF (Evaluated Gamma-ray Activation File) alkalmas az atommagok nívósémájának kiegészítésére és a befogási hatáskeresztmetszetek meghatározására.
– Tovább javították a ^{235}U kimutathatóságának érzékenységét hidegneutron nyalábban: a kimutathatósági határt 1 mikrogram alá csökkentették.

A nukleáris analitikai módszerek alkalmazása terén

Archeometriai alkalmazásokban
– Kárpát-medencei pattintott- és csiszolt kőeszközök eredet meghatározását végezték PGAA módszerrel a Magyar Nemzeti Múzeummal, valamint külföldi felhasználókkal együttműködésben paleolit és neolit régészeti leleteken.
– Vizsgálták az észak-magyarországi késő-neolit, ú.n. Bükki kultúrából származó régészeti kerámiákat, ill. különböző (Zselic, Bükk, Vinca) kultúrákhoz tartozó kerámia edényeket hasonlítottak össze. Megállapították, hogy a kémiai összetétel alapján történő osztályozás nem egyezik a tipológiai csoportosítással.

Kémiai, anyagtudományi vizsgálatokban
– *In situ* PGAA segítségével
  − Klór megoszlását vizsgálták a RuO_2-dal katalizált Deacon-reakcióban a reakciópartnerek között. A vizsgálatok a mechanizmus jobb megértését, zárt, környezetbarát ipari anyagciklus kialakítását segíthetik elő.
  − Frissen készült, ill. több évig tárolt minták hidrogéntartalmát határozták meg Pd és Ti alapú anyagokban. A mérések alapján következtetni lehet az anyagok hosszú távú hidrogéntárolási képességére.
– *In situ* Mössbauer spektroszkópiával kettősen módosított (Fe,Ti)-MCM-41, ill. újtípusú (KIL-2) mezopórusos ferriszilikátokat tanulmányoztak. Vizsgálták a vasionok koordinációs környezetét, megállapították, hogy a vas reverzibilis redox $Fe^{2+} \leftrightarrow Fe^{3+}$ átalakulása mindkét szerkezetben könnyebben végbemegy, mint mikropórusos rendszerekben hasonló körülmények között.

Nukleáris anyagok vizsgálata terén

– Új módszert dolgoztak ki az ^{235}U és ^{238}U neutronbefogási hatáskeresztmetszetének mérésére, amely a besugárzás során keletkező ^{236}U és ^{239}Pu atomok tömegspektrométeres számlálásán alapszik.
– Urán-tartalmú egyedi részecskék izotóp-összetételének meghatározásához fejlesztett lézerablációs ICP-MS analitikai eljárást adaptálták dörzsminták elemzéséhez. A módszer

alkalmas mikrométer nagyságú részecske dúsításának pontos meghatározására, ily módon nukleáris biztosítéki és nukleáris törvényszéki analitikai célú elemzésekre is.

- *Biológiai mintákban* hosszú felezési idejű aktinidák (elsősorban urán) mennyiségének együttes, gyors meghatározásához fejlesztettek kémiai elválasztási módszert. A minták aktinida-tartalma ICP-MS módszerrel elemezhető. A módszer alkalmas arra, hogy nukleáris baleseteket, vagy terrorcselekményeket követően a sérültektől vett biológiai minták (vér, vizelet) mérésével 1-2 nap alatt becsülhető legyen az elnyelt dózis, valamint a belső szennyeződés.
- Atomerőművi újtípusú profilírozott friss fűtőelemkazetták külső és belső pálcáinak dúsítását verifikálták HPGe és CdZnTe gamma spektrometriával. A most már rutin vizsgálattá fejlesztett eljárással a beérkező friss kazetták ~ 10%-át ellenőrzik.
- Atomerőművi üzemanyagkazetták kiégését gamma-spektrometriával határozták meg, oldalanként és különböző magassági pozíciókban. A mérési eredmények kiértékelésére szoftvert fejlesztettek. Kimutatták a kazetták kiégésének irányfüggését a kiégésszámításokkal korrelációban. A $^{134}Cs/^{137}Cs$ aktivitásarányok jól jellemzik a kazetták kiégését, a mérési pontosság %-os nagyságrendű. A mérési adatok alapján a kiégésszámítás hibahatára csökkenthető, ezzel a kazetták kiégési szintje esetenként növelhető, aminek jelentős pozitív gazdasági kihatásai lehetnek.
- Tanulmány kertében elemezték nukleáris anyagok és technológiák eltérítésének lehetőségeit. Bemutatták az irányított gráf modell alkalmazhatóságát a NAÜ tagországok nukleáris infrastruktúrájának elemzésében.
- Nagyaktivitású radioaktív hulladékok végleges elhelyezésével kapcsolatban azt vizsgálták, hogy a hosszú felezési idejű komponens (UO_2^{2+} ionok) vándorlását befolyásolják-e a az agyagos kőzet ásványaiban lejátszódó ($Fe^{2+} \rightarrow Fe^{3+}$) redox folyamatok. A Bodai Aleurolit formációból származó mintákon azt találták, hogy az uranil ionok vegyértékváltozás nélkül kemiszorbeálódnak az ásványszemcséken.

A sugárhatáskémia – dozimetria terén

- Gyógyszermolekulák, fájdalomcsillapítók és antibiotikumok ionizáló sugárzással indukált lebontását tanulmányozták híg vizes oldatban. Megállapították, hogy az aromás gyűrű minden esetben ciklohexadienil típusú gyök keletkezése közben bomlik. Oxigén jelenlétében ebből peroxi típusú termékek keletkeznek. A hidroxilgyök reakciójának tanulmányozásakor arra a következtetésre jutottak, hogy az reagál az aromás gyűrűvel, OH-származékokat eredményezve. Ketoprofen lebontásakor azt tapasztalták, hogy a víz radiolízise során keletkező hidroxilgyök és hidratált elektron köztitermékek közül a hidroxigyök sokkal hatékonyabban bontja le a gyógyszermolekulát. Paracetamol lebontásakor megállapították, hogy a lebontás hatékonysága 2-3-szoros abban az esetben, ha oxigén jelenlétében végzik a besugárzást. A lebontás során, kis dózisoknál, az oldat toxicitásának növekedését tapasztalták. Ezt a lebontás során keletkezett, a paracetamolnál toxikusabb vegyületek (acetamid, hidrokinon) keletkezésével magyarázták.
- Nagyenergiájú sugárzással iniciált polimerizációval nagy (5000%) duzzadó képességű hidrogélt állítottak elő N-vinil-pirrolidon (NVP) monomerből. Hidrogélből és CEPA (2-Cl-etil-foszforsav) sóból pasztillát készítve olyan összetételű gázadagoló rendszert dolgoztak ki, mely képes az etiléngáz koncentrációt több, mint 72 órán keresztül állandó értéken tartani a gyümölcsérlelő eszközben. Az eredményeket szabályozott etilén adagolást megvalósító gyümölcsérlelő eszköz kialakításához használják fel, melyeket az együttműködő partnerek állítanak elő.
- Retrospektív dozimetriai eljárások fejlesztése során többféle felületszerelt elektronikai elem (SMD ellenállás) összehasonlító vizsgálatával megmutatták, hogy azonos típus

(gyártó) esetén az ellenállás érték (a felpárologtatott fém vékonyréteg) csak csekély mértékben befolyásolja az elemek termolumineszcens (TL) tulajdonságait, továbbá megállapították, hogy a jel csökkenése szobahőmérsékleten típustól függően a besugárzást követő 24-36 órában anomálisan gyors. A tapasztalati görbére alapozva megkezdték a dózis rekonstrukciós eljárás kidolgozását. Megkezdték az SDM ellenállások vizsgálatát optikailag stimulált lumineszcencia (OSL) módszerrel is. Az első eredmények azt mutatják, hogy az OSL eljárással a 0,1-50 Gy dózistartományban egyértelmű a dózis-OSL jel kapcsolat.

– Elvégezték a közelmúltban kifejlesztett különféle szennyezőkkel *aktivált* lítium-tetraborát *dozimáter anyagok* részletes, az alkalmazhatóságra is vonatkozó vizsgálatát. Megállapították, hogy gyakorlati felhasználás szempontjából legalkalmasabb a rézzel aktivált anyag.

Katalízis terén

A metán száraz reformálása, $CH_4+CO_2=2CO+2H_2$ (pl. biogáz, vagy a hazai nagy CO_2 tartalmú metán kutak hasznosítására) témakörében

ERAChemistry program keretében (ír és francia partnerekkel) folytatták az újszerű AuNi katalizátorok vizsgálatát. Különféle Au/Ni aránnyal $MgAl_2O_4$-hordozós Ni és AuNi minták készültek a) impregnálás+karbamidos lecsapatás módszerével és b) újszerű szol-módszerrel. Megállapították, hogy a fémtartalom növelésével a minták diszperzitása, és így aktivitása is csökken (impregnálásos módszernél) és, hogy az azonos fémtartalmú egyfémes Ni katalizátorok az előállítási módtól függetlenül hasonló végső mérettel és aktivitással rendelkeznek. Az impregnált, 10% Ni-t tartalmazó mintában lévő nagy, 30-100 nm-es Ni és AuNi részecskéken szénburok alakul ki a metán száraz reformálása során, míg a kisebbeken szén nanocsövek nőnek, a 6-8 nm alattiakon azonban ez a kétféle szénlerakódás nem észlelhető. Az impregnált minták hatékonyan regenerálhatóak, a kétfémes szolosak viszont nagyobb Au-tartalomnál már nem.

CH_4+N_2O *reakció (Az erős melegház-hatással bíró és ózonpajzs-roncsoló dinitrogén-oxid ártalmatlanításához, biogázok tisztításában a metán száraz reformálással történő hasznosításukhoz)* tanulmányozása keretében az extra aktivitású többfunkciós átmeneti vagy nemesfém/Ga/H-ZSM-5 katalizátorok vizsgálatakor megállapították, hogy kalcinált mintákban egyértelműen szinergikus hatása van a H-ZSM-5 mátrixban létrehozott Ga és M (Fe, Co, Ni, Mo, Ir, Ag, Au) együttes jelenlétével létrehozott bifunkciós aktív centrumoknak, ami a galliumnak az M fém redukálhatóságát elősegítő hatásában keresendő. Hidrogénes redukció hatására, a keletkező Ga^+ instabil és mozgékony ionok elhagyják az átmeneti fémek környezetét, a savasság csökkenése miatt romlik a sav-centrumok stabilizáló hatása, a bifunkciós aktív centrumok szétesnek és a szinergikus hatás megszűnik.

A PROX (Hidrogén tüzelőanyagcellák tüzelőanyagából az elektródkatalizátor méreg CO szelektív oxidációja) folyamatban vizsgálták arany és rézoxid kölcsönhatását SiO_2, CeO_2 és 23%CeO_2/ZrO_2 hordozós katalizátorokon. Az aranyat kétféle Au szol adszorpciójával rögzítették, a rézoxidot $Cu(NO_3)_2$ prekurzorból kalcinálással alakították ki a hordozóként alkalmazott oxidokon. Megállapították, hogy a katalizátor legaktívabb komponensei a CeO_2-vel érintkező, kölcsönhatásban levő CuO_x vagy nanodiszperz arany részecskék voltak. A CuO_x és Au között nem volt szinergikus kölcsönhatás. Az elérhető maximális CO konverzió a különböző hordozókon a SiO_2<CeO_2/ZrO_2<CeO_2 sorrendben változott. SiO_2 hordozón mind oxidált, mind redukált katalizátoron a 2% Au aktívabb és szelektívebb volt, mint a 4% CuO, a kétfémes 2%Au4%CuO/SiO_2 aktivitása és szelektivitása az egyfémeseké közé esett. A CeO_2 ill. 23%CeO_2/ZrO_2 hordozón 4% ill. 12,5% CuO nagyobb CO konverziót eredményezett

nagyobb szelektivitás mellett, mint a 2 ill. 1% Au. A 4%CuO/CeO_2 katalizátor maximális CO konverziója elérte a 100%-ot, az Au/CeO_2-é a 90%-ot.

Pt és Sn sók oldatából hidrazinos redukcióval PtSn ötvözetet állítottak elő. A termék kb. 70% Pt-t és 30% Sn-t tartalmazott. Ez a PtSn katalizátor aktívabb volt PROX reakcióban, mint a Pt.

Környezetvédelmi katalízis keretében a szennyvíz oxidáció folyamatában

– Kísérlettervezés módszerével 3 különböző modell-szennyvízzel és egy valós gyógyszergyári szennyvízzel vizsgálták a paraméterhatást. A vezető paraméter reakcióidő mellett a hőmérséklet, az oxigén parciális nyomás és a keverés intenzitás hatása lényegesen kisebb a reakció előrehaladására. A meghatározott egyenletek fontos eszközei a méretnövelésnek.
– A nagy energiájú sugárzással segített oxidációt vizsgálták gamma és elektron besugárzással egyaránt. A modell vegyület fenol oxidációja már szobahőmérsékleten lejátszódott. A laboratóriumi oxidáló autoklávot átalakították, hogy a besugárzás mellett egyidejűleg emelt hőmérsékleten is lehessen dolgozni. Két modell szennyvíz katalitikus oxidációjában elvégezték a különböző bevonatú Ti háló monolit katalizátorok összehasonlítását. Leghatékonyabb a Ru és Ir oxid bevonatú katalizátor volt, amennyiben a két fémoxid egyenletes eloszlású a felületen.

CO oxidáció, hidrodeszulfurálás

CeO_2, CuO „aktív” oxidokkal szelektíven promoveált SiO_2-hordozós Au-tartalmú katalizátorok készültek arany szolok alkalmazásán alapuló szintézismódszerrel: 6 nm-es arany részecskék felületén 1-3 nm-es aktív oxid szigetek jöttek létre. A CeO_2-dal és CuO-dal részlegesen borított Au részecskék szinterelődési hajlama jelentősen csökkent, és kiváló CO oxidációs aktivitást mutattak a referencia mintákhoz képest, azaz, amikor az arany a tömbi aktív oxidon van diszpergálva. A SiO_2 hordozón stabilizált kiterjedt aktív oxid - Au határfelület szinergetikus tulajdonságait az arannyal érintkező vékony oxid szigetek feltehetőleg megnövekedett oxigén-aktiválási képességével magyarázzák. A tömbi jellegű aktív oxidok, melyek az aranytól távol helyezkednek el, lényegében nem befolyásolják a katalitikus aktivitást.

SiO_2/Si(100) felületen kialakított FeO_x/Ag vagy Au, és FeO_x/AuAg inverz modellrendszereken folytatták a CO oxidációja aktivitás-szerkezet összefüggéseinek vizsgálatát. Molekula sugár epitaxiával (MBE) választottak le egyfémes arany és ezüst és különböző összetételű kétfémes AuAg, és arra különböző vastagságú Fe rétegeket az MTA SZFKI-val együttműködésben. A CO oxidációban mutatott katalitikus aktivitás lineárisan függött az Ag/Au aránytól, az ezüstben gazdagabb minták aktívabbnak bizonyultak az ezüstben szegényebbeknél, amelyből megállapítható, hogy nincs szinergikus hatás az arany és ezüst részecskék között CO oxidáció során.

Kéntelenítés mechanizmusának vizsgálata során bizonyították, hogy a tiofén HDS folyamata során jelentős a reciklizáció folyamata, ami a kéntelenítés hatásfokát csökkenti. A reciklizáció pontosabb megértése céljából butadién + H_2S és butadién + S_{kat} reakciókat tanulmányozva megállapították, hogy a butadién képes a felületen irreverzibilisen kötött kénatommal tiofént képezni. Bizonyították, hogy a H_2S inhibitor hatását a HDS folyamatra nem a katalizátor aktív centrumainak gátlásával éri el, hanem a kéntelenítéssel ellentétes reciklizáció, tehát a tiofénné visszaalakulás irányába tolja el az egyensúlyt.

Aszimmetrikus hidrogénezések

2-Me és 3-Me ciklohexanon kinetikus reszolválását vizsgálták prolin adalékkal és Pd katalizátorral, reduktív alkilezéssel. Az orto származéknál nagyobb, a meta származéknál kisebb enantioszelektivitást értek el, mindkét vegyületnél jóval kisebbek voltak az enantioszelektivitások, mint az izoforonnál, amit a sztérikus hatásokkal magyaráztak. A prokirális és egyben királis 3,5 dimetil-ciklohex-2-énon hidrogénezését is vizsgálták. Ennél a vegyületnél egyértelmű a C=C kötés hidrogénezésének sztereokémiája, kizárólag a mezo vegyület képződik. Ettől a folyamat királis módosítókkal és adalékokkal sem téríthető el.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az MTA Izotópkutató Intézetben folyó munkát, annak eredményeit igyekeztek minél szélesebb körben az érdeklődők számára is hozzáférhetővé tenni. Ennek egyik módja az *intézeti honlap*. Ezen a kutatási témák szakmai bemutatásán kívül rövid hírekben is beszámoltak a nemcsak az intézeti kutatók számára fontos hírekről, eseményekről, intézeti rendezvényekről. Igy pl. május 5-én a *Nukleáris Újságíró Akadémia* szemináriumsorozatára került sor az intézetben. December 5-én a *víz-, ill. szennyvízkezeléssel* foglalkozó intézeti rendezvényre is sor került. Ugyancsak a vízminőség témában a *Mindentudás Egyeteme* keretében a „Víz-választón Magyarország felszíni és felszín alatti vizei” (http://mindentudas.hu/riportfilm/item/2810-madlne-magazinmusor.html) műsorban egy interjú keretében népszerűsítették eljárásukat.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A hazai kapcsolatok között első helyen említendő, hogy az Izotópkutató Intézet egyike az Országos Atomenergia Hivatal műszaki-tudományos háttérintézményeinek. Ilyen minőségében is hozzájárul újabb nukleáris-radioizotópos tematikájú műszaki-tudományos fejlesztések megalapozásához, valamint a nukleáris biztosítéki tevékenység szakmai hátterének biztosításához. Az intézet e tevékenységének keretében számos kutatási-szakértői tanulmányt is készített 2011-ben.

Nemzetközi rendezvények

Az intézet munkatársai szervezték a „12th Tihany Symposium on Radiation Chemistry” konferenciát Zalakaroson, aug. 27 – szept. 1. között (ld: http://www.tihany.kfki.hu).). A rendezvényen mintegy 140 résztvevő volt, 30 országból. Több mint 50 előadás hangzott el, a bemutatott poszterek száma pedig meghaladta a hatvanat.

Nemzetközi kapcsolatok

Az intézet számos két-, ill többoldalú kutatási projektben részt vevő, ill. partner.

A legtöbb résztvevő az EU FP-7-es és COST projektekben van, ezek biztosítanak kereteket a szélesebb körű együttműködésekhez (FP-7 : NMI3 – Neutron, Muon Integrated Infrasrtucture Initiative, MANREAD – Minor Actinide Neutron Reaction Data, CHARISMA – Cultural Heritage Advanced Research Infrastructure, RECOSY – Redox Controlled Systems, ill. COST : Interfacial functionalisation of (bi-)metallic nanoparticles to prepare highly active catalysts).

Számos további hivatalos, és informális nemzetközi együttműködés is segíti az intézetben folyó munkát: a 2011-es publikációk 60%-a készült nemzetközi együttműködés keretében.

Nemzetközi mérési infrastruktúra szolgáltatás
Az intézet Nukleáris Kutatások Osztálya a BNC hidegneutron nyalábja PGAA mérési infrastuktúrájának szolgáltatója is. Az itt végzett mérési kapacitás jelentős hányadát nemzetközi pályázati projektekkel kötik le. 2011-ben 10 vendégkutató nyerte el a mérőhely használatának lehetőségét.

Kutatói mobilitás
Különböző programok keretében számos (~25) vendégkutató látogatta meg intézetüket. Többségük kb. egy hetet töltött az intézetben, kisebb részük szemináriumot is tartott.
A látogatások viszonzásaként az intézet munkatársai is hasonló mértékben kerestek fel külföldi partnerintézeteket.

Részvétel az oktatásban
Megállapodás született az Óbudai Egyetem és az IKI együttműködéséről, melynek keretében az IKI vállalta, hogy kutatói témavezetőként működnek közre az egyetem diplomázó, ill. PhD hallgatói képzésében. Meglévő egyéb együttműködéseikben az intézet munkatársai 2011-ben

- rendszeres egyetemi előadásokat tartottak (BME, Vegyészmérnöki Kar)
- PhD-képzés témavezetését (és a munkavégzés kísérleti feltételeit) biztosították hat hallgatónak
- szakdolgozatok témavezetését látták el, (11 hallgató számára)
- laborgyakorlatokat vezettek (BME, ELTE – hat kurzus)

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ) CRP (Coordinated Research Project) támogatását nyerték el (Research Contract No. 16485). A projekt címe: "Radiation Treatment of Wastewater Containing Pharmaceutical Compounds". A CRP-ben 21 ország sugárzásos szennyvízkezeléssel foglalkozó kutatói (országonként egy) vesznek részt. A NAÜ a kutatók együttműködését, az információk cseréjét segíti, koordinálja. A projekt keretében gyógyszermaradványok sugárzásos lebontásával kapcsolatos kutatásokat végeznek.

NNF2 85631 sz. OTKA (Környezetvédelmileg ártalmas anyagok csökkentése arany és ezüst katalizátorral): A projekt nagyfelületű MnOx és CoOx hordozós Au-Ag kétfémes katalizátorokon a két fém egymásra hatásának, és a hordozó hatásának vizsgálatára irányul a CO oxidációban és NO_x (NO vagy N_2O) CO-dal történő redukciójában, mely folyamatoknak kiemelkedő szerepe van a kipufogó gázok összetételének kontrollálásában és az üvegház hatású gázok eltávolításában.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Wojnárovits L: Radiation Chemistry, in: Handbook of Nuclear Chemistry, Eds: Vértes A, Nagy S, Klencsár Z, Lovas RG, Rösch F. Springer, 1267-1331 (2011)

2. Révay Z, Lindstrom RM, Mackey EA, Belgya T: Neutron-induced prompt gamma activation analysis (PGAA), in: Handbook of Nuclear Chemistry, Eds: Vértes A, Nagy S, Klencsár Z, Lovas RG, Rösch F. Springer, 1619-1672 (2011)

3. Horváth A, Beck A, Stefler G, Benkó T, Sáfrán G, Varga Z, Gubicza J, Guczi L: Silica-supported Au nanoparticles decorated by CeO_2: Formation, morphology, and CO oxidation activity, J. Phys. Chem. C. 115: 20388-20398 (2011)

4. Paál Z, Wootsch A, Teschner D, Lázár K, Sajó IE, Győrffy N, Weinberg G. Knop-Gericke A, Schlögl R: Structural properties of an unsupported model Pt-Sn catalyst and its catalytic properties in cyclohexane transformation. Applied Catalysis A: General, 391: 377-385 (2011)

5. Homlok R, Takács E, Wojnárovits L: Elimination of diclofenac from wastewater using irradiation technology, Chemosphere 85: 603-608 (2011)

6. Cámara AL, Kubaczka A, Schay Z, Koppány Zs, Martinez-Arias A: Influence of calcination temperature and atmosphere preparation parameters on CO-PROX activity of catalysts based on CeO_2/CuO inverse configurations. Journal of Power Sources, 196: 4364-4369 (2011)

7. Horváth A, Stefler G, Kiennemann A, Pietraszek A, Guczi L: Methane dry reforming with CO_2 on CeZr-oxide supported N i, NiRh and NiCo catalysts prepared by sol-gel technique: relationship between activity and coke formation. Catalysis Today, 169: 102-111 (2011)

8. Beck A, Magesh G, Kuppan B, Schay Z, Geszti O, Benkó T, Viswanath RP, Selwam P, Viswanathan B, Guczi L: Specific role of polymorphs of supporting titania in catalytic CO oxidation on gold. Catalysis Today, 164: 325-331 (2011)

9. Győrffy N, Tungler A: Effect of basic and acidic additives on the (S)-proline and Pd mediated kinetic resolution of 3,5,5-trimethyl cyclohexanone and asymmetric hydrogenation of isophorone. Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, 336: 72-77 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Izotópkutató Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	83			Ebből kutató[2]:	56
PhD, kandidátus:	22	MTA doktora:	8	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					15

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				91
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				37
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	35
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	32
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	51,88	Összes független hivatkozás száma:	1329
Összes hivatkozás száma[11]:	1843		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			37
		poszterek száma:	24
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	37		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			9
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		293 484	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	5	Teljes saját bevétel: 564 763	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		14 821	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		96 546	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		10 344	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			6
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		59 691	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		398 182	EFt

KÉMIAI KUTATÓKÖZPONT

1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf.: 17.
telefon: 1-438 1130; fax: 1-438 1147
e-mail: szepvol@chemres.hu; honlap: http://www.chemres.hu/aki

A Kémiai Kutatóközpont (KK) szervezeti egységeit alkotó intézetek – Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Biomolekuláris Kémiai Intézet, Nanokémiai és Katalízis Intézet, Szerkezeti Kémiai Intézet – külön-külön számoltak be a 2011. évi tudományos tevékenységükről. Az egyes intézetek beszámolói a következő oldalakon olvashatók.

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Kémiai Kutatóközpont

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	357			Ebből kutató[2]:	200
PhD, kandidátus:	89	MTA doktora:	30	Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					86

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				233
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				222
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	13	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	183
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	1	idegen nyelven:	174
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	498,048	Összes független hivatkozás száma:	4135
Összes hivatkozás száma[11]:	4933		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	8	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 1	külföldi oltalmak száma[14]: 1

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			126
		poszterek száma:	83
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	34	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	25		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			62
Témavezetések száma: TDK munka:	22	Diplomamunka (BSc):	16
Diplomamunka (MSc):	31	PhD:	63

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		1 366 041	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	22	Teljes saját bevétel: 1 187 171	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		2027	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			46
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		164 439	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		28 665	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			15
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		776 232	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			10
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		32 597	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		98 855	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		248 795	EFt

Kémiai Kutatóközpont
ANYAG- ÉS KÖRNYEZETKÉMIAI INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf.: 17.
telefon: 1-438 1130; fax: 1-438 1147
e-mail: szepvol@chemres.hu; honlap: http://www.chemres.hu/aki

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet fő feladatának tekintette 2011-ben magas színvonalú kémiai és interdiszciplináris kutatások folytatását az anyagtudomány és anyagtechnológia, valamint a környezeti kémia területein. Tevékenységük alapvető jellemzője, hogy a tudományos kérdésekre komplex módon, többféle elméleti, kísérleti és anyagvizsgálati módszer együttes alkalmazásával keresik a válaszokat.

Témáik kiválasztásakor kiemelt figyelmet fordítottak a tudományos újszerűségre, a kutatási feladatok gyakorlati vonatkozásaira és a társadalom aktuális igényeire. Kutatási témáikban az anyagtudományi és a környezetkémiai szempontok együtt jelennek meg.

A szerkezeti anyagok kémiai és szerkezeti jellemzőinek meghatározása, a kialakulásukhoz vezető folyamatok tanulmányozása mellett speciális funkcionális anyagok előállítására lehetőség szerint olyan eljárásokat dolgoznak ki, amelyekkel a környezetet legkevésbé terhelik. A szerkezeti anyagok létrehozásakor természetes eredetű illetve biológiailag lebomló komponens beépítésére törekszenek.

A potenciális vagy valós környezeti károk felszámolására olyan kémiai eljárásokat fejlesztenek ki, amelyek nem fejeződnek be a kárenyhítésnél, hanem kiterjednek arra is, hogy a hulladékokat hasznos alapanyagokká lehessen átalakítani.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Nanorétegek előállítása és vizsgálata

Amorf hidrogénezett szénréteget alakítottak ki polietilén-tereftalát (PET) műszaki polimer felületén hélium plazma-alapú ionimplantációval. Összefüggéseket tártak fel a kezelési paraméterek és a felületi kémiai összetétel és szerkezet között, amelyek lehetőséget nyújtanak a felületi C-tartalom és a kémiai szerkezet célirányos kialakítására. Szerkezet-tulajdonság és összetétel-tulajdonság összefüggéseket tártak fel, amelyek olyan területeken lehetnek fontosak, mint például a műér, a mesterséges szívbillentyű és sztent implantátumok kialakítása.

Nanocsövek felületén lévő rétegek vastagságának meghatározására új modellt fejlesztettek ki, amely figyelembe veszi az egymáson véletlenszerűen elhelyezkedő nanocső-sorokból származó XPS intenzitásokat. A modell módosított felületű nanocsövek és a rájuk leválasztott rétegek esetén alkalmazható. Használhatóságát rádiófrekvenciás és egyenfeszültséggel gyorsított nitrogénplazmában kezelt, többfalú szén nanocsövek külső rétegeinek módosítása példáján igazolták.

Funkcionális szemcsés anyagok előállítása, formálása és elemzése

Fehérje típusú anyagokat tartalmazó kompozit gyógyszerformák kifejlesztése területén különböző biokompatibilis és biodegradábilis polimerek (kitozán, politejsav-glikolsav) felhasználásával és mágneses nanorészecskék előállításával több nanoszerkezetű kompozit hordozórendszer kifejlesztése folyik. A publikálható alapkutatási eredmények mellett ezekből olyan szabályozott- és célzott hatóanyag leadást biztosító új gyógyszerformátumok hozhatók létre, amelyek alkalmazása a betegek számára komfortosabb és kisebb terhelést jelentő gyógyszeradagolást tesznek lehetővé. A kutatócsoport által vizsgált mikrokapszulázási módszerek a különböző összetett emulziós – evaporációs és diffúziós fázis átalakítási technikák.

A Maribori Egyetem Textil Tanszékével együttműködésben polimer nanorészecskékbe kapszulázott fotokróm festékek fáradással szembeni ellenállását megfelelő adalékanyaggal megnövelték. A keletkező nanorészecskéket textilanyagok bevonásához használt keverékben diszpergálták, és tartós bevonatként printing módszerrel rögzítették.

A hagyományos szilárd részecsketechnológiai eljárások közül természetes eredetű hidrokolloidok élelmiszeripari alkalmazhatóságát javító technológiai módosításokat dolgoztak ki (BUSZESZ Élemiszeripari Zrt).

Nanoszemcsés TiB_2 kerámiapor szintézis termikus RF plazmában

Nanoszemcsés TiB_2 kerámiapor szintézisét tanulmányozták termikus plazmában. Vizsgálták az eljárás hatékonyságát, valamint a kapott termék szemcseméretét és morfológiáját a beadott különböző prekurzorok függvényében. Eljárást dolgoztak ki a TiB_2 szennyezőinek eltávolítására. A reakciók kinetikájának felderítéséhez optikai spektroszkópiát vettek igénybe. A mérések során sikerült felvenni és beazonosítani a TiO (titan-monoxid) spektrumát, melynek különös elméleti jelentősége van a plazmadiagnosztikai eljárások terén. Az eredmények megalapozhatják a plazma hőmérsékletének a korábbiaknál megbízhatóbb meghatározását.

Nanoszerkezetű amfifil polimer kotérhálók

Folytatták vizsgálataikat úgynevezett intelligens, hőmérséklet-érzékeny, vagyis alsó kritikus oldhatósági hőmérséklettel (LCST) rendelkező AKTH-kal. Megállapították, hogy vizes közegben a poli(N,N-dietil-akril-amid) és a poliizobutilén (PIB), illetve a polidimetilsziloxán alapú kotérhálóknak a testhőmérséklethez közeli hőmérséklet-tartományban a hőmérséklet emelkedésével csökken az átlátszósága (LCST) és közel lineárisan a duzzadási foka. Differenciális pásztázó kalorimetriával meghatározták a poli(N-izopropilakrilamid)-ot és PIB-et tartalmazó AKTH-k LCST-je és összetétele közötti összefüggést.

Fémsók megkötésére alkalmas poli(N-vinil-imidazol) alapú amfifil kotérhálókat állítottak elő, és tanulmányozták a szerkezetükből adódó tulajdonságaikat. A kotérhálókat nanoreaktorként alkalmazva ezüst és réz nanorészecskéket állítottak elő, amelyek antibakteriális hatását vizsgálták. Felderítették a polimetakrilsav és PIB alapú AKTH-k rövid- és hosszúidejű (pár órás és pár hónapos) reverzibilis duzzadási tulajdonságait a duzzasztó közeg pH-jának változtatásával.

Előállítottak olyan PIB és poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát) (PPEGMA) összetevőkből álló amfifil kotérhálókat, amelyekben változik a PIB:PPEGMA arány. Kísérletet tettek ilyen térhálókban fém nanorészecskék előállítására, és ezek esetleges katalitikus tulajdonságainak a vizsgálatára. Vizsgálták lineáris PIB és hiperelágazásos PPEGMA komponensekből álló

kotérhálók duzzadási viselkedését, és felhasználásukkal teljesen újszerű, polialmasavat és polianilint tartalmazó interpenetráló térhálókat alakítottak ki.

Új típusú polimerek kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációval

Olyan speciális szerkezetű kopolimerek gazdaságos és környezetileg előnyös szintézisét valósították meg, amelyek bizonyos tulajdonságaikban felülmúlják számos eddig használt polimer fizikai és kémiai jellemzőit. A műanyagipar által használt monomerek (sztirol és (met)akrilátok) kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációjával lineáris, csillag és hiperelágazásos polimereket állítottak elő környezetileg előnyös oldószerben (benzotrifluoridban). Többféle katalizátorrendszert is kipróbáltak, aminek során a katalizátor-koncentráció csökkentése fontos szempont volt.

Az így előállított multifunkciós makromolekulák funkcionalitását a felhasználási területeknek megfelelően változtatták. A hidroxil-telekelikus polisztirol illetve hidroxil csoportokat tartalmazó csillag/hiperelágazásos poliakrilátok jól alkalmazhatók poliuretán szintézisénél. Az általuk előállított, vinil-csoportokat tartalmazó (fotopolimerizációba vihető) elágazott szerkezetű polimerek, pedig mint fogtömő anyagok jöhetnek számításban. Ezen újszerű anyagok iránt nagy az érdeklődés nemzetközi partnerek részéről.

Poliizobutilén és poli(poli(etilén-glikol)-metakrilát) (PPEGMA) szegmensekből felépülő blokk-kopolimerek bifunkciós etilénglikol-dimetakriláttal történő összekapcsolásával jó mechanikai tulajdonságú csillag polimert és amfifil kotérhálókat állítottak elő.

Az előállított makromolekulákat minden esetben modern analitikai módszerekkel, mint pl. lézer fényszóródás detektorral felszerelt gélpermeációs kromatográfiával és NMR spektroszkópiával vizsgálták

Funkciós polimerek kationos polimerizációval

A polimerizációs reakciók környezetterhelésének csökkentése céljából a sztirol karbokationos polimerizációjának katalizátoraként alkalmazott $TiCl_4$ koncentrációjának hatását vizsgálták a polimerizáció kimenetelére. A katalizátor koncentrációjának folyamatos csökkentésével azt tapasztalták, hogy a reakciósebesség szisztematikusan csökken, csakúgy, mint az iniciátorhatékonyság. Valamint a kisebb $TiCl_4$ koncentrációk alkalmazásával előtérbe került egy, a láncvégi csoportot érintő mellékreakció, az indanil szerkezetet eredményező intramolekuláris gyűrűzáródás is, amit ^{1}H-NMR mérésekkel igazoltak. További ígéretes eredménynek tekinthető a sztirol oldószermentes karbokationos tömb polimerizációjának megvalósítása, valamint a reakció levegő jelenlétében történő kivitelezése, amely az inert atmoszféra nélkülözését teszi lehetővé. Vizsgálták továbbá az izobutilén és p-metilsztirol karbokationos kopolimerizációjának lehetőségét, amely új lehetőségeket nyithat speciális funkciós polimerek előállítására.

Polimerek környezetileg előnyös lebontása és átalakítása

Folytatták a poli(vinil-klorid) (PVC) degradatív átalakításával kapcsolatos ígéretes kutatásaikat. Oldatban végzett szisztematikus kísérletekkel tanulmányozták a PVC láncon bekövetkező kémiai átalakulásokat a térhálósodás és más nemkívánatos reakciók elkerülését biztosító körülmények között. Tanulmányozták a PVC egyik legnagyobb mennyiségben használt adalékának, a dioktil-ftalátnak (DOP) a degradációra gyakorolt hatását. Bebizonyították, hogy az általuk alkalmazott termooxidatív körülmények között a DOP hatékonyan elősegíti a kívánatos degradációs folyamatokat. Vizsgálták a DOP hatását különböző koncentrációkban DOP-t tartalmazó oldószerelegyekben is. Arra a meglepő

eredményre jutottak, hogy a dioktil-ftalát és az 1,2,4-triklórbenzol bizonyos arányú keverékei szinergesztikus hatással vannak a PVC oxidatív bomlási folyamataira.

Poliolefinek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek feltárása és tulajdonságainak módosítása

Tovább folytatódott az együttműködés a TVK-val, amelynek eredményei a gyakorlatban is hasznosulnak. A kutatók bebizonyították, hogy szoros kapcsolat áll fenn a feldolgozott polietilén reológiai jellemzői és a késztermék tulajdonságai között, amelyek nagymértékben függenek az alkalmazott stabilizátor rendszertől. Irányelveket fogalmaztak meg a stabilizátor rendszer optimalizálására. Ígéretes eredményeket értek el természetes vegyületek stabilizátorként való alkalmazására.

A Borealis multinacionális céggel folytatott együttműködésben összefüggést állapítottak meg polipropilén polimerek molekuláris szerkezete, a gócképzők kémiai szerkezete és a termék tulajdonságai között. Megállapították, hogy bizonyos kopolimerek ütésállósága többszörösére növelhető megfelelő típusú és mennyiségű gócképző adagolásával. Az eredmények alapján szabadalmi bejelentés született. Poliolefineket nano- és természetes erősítőanyagokkal módosítottak a tulajdonságok javítása érdekében.

Természetes és szintetikus polimerek és társított rendszereik

A természetes erősítőanyagot, töltőanyagot tartalmazó PP/fa és PLA/fa kompozitok deformációs és tönkremeneteli mechanizmusának vizsgálata során megállapították, hogy a tulajdonságokat az erősítőanyag szemcsemérete és alaki tényezője mellett a mátrix jellemzői és a határfelületi kölcsönhatások is jelentősen befolyásolják. A termék tönkremenetele bekövetkezhet a szálak kereszt- és hosszirányú törése, a szemcsék elválása vagy kihúzódása következtében. Különböző megközelítéseket dolgoztak ki, illetve alkalmaztak a határfelületi kölcsönhatások becslésére, és bebizonyították, hogy azok széles határok között változnak. PP és PA6/montmorillonit kompozitokban is vizsgálták a határfelületi kölcsönhatások szerepét, és elsőként közöltek kvantitatív adatokat a kompozitokban kialakuló határréteg jellemzőire vonatkozóan. A rétegszilikát nanokompozitok kutatásában szerzett tapasztalataikat több könyvfejezetben foglalták össze.

Egyre jobban előtérbe kerül a biológiailag lebontható polimerek és társított rendszereik kutatása is. Sikeresen állítottak elő termoplasztikus keményítő nanokompozit filmeket, amelyek szilárdsága többszörösére nőtt az erősítés hatására, és természetes szállal erősített keményítőből hatékony táprudat készítettek. Jelentős eredményeket értek el a gyógyászatban alkalmazott poliuretán elasztomerek szerkezetének felderítésében, és funkcionális csomagolóanyagok előállításában is. A kutatások egy jelentős része hazai vagy nemzetközi együttműködéshez, illetve pályázathoz kapcsolódik.

Biomassza anyagok hasznosítását valamint műanyagok újrahasznosítását megalapozó kutatások

Fa és lágyszárú biomassza valamint csatornaiszap minták termikus lebontását vizsgálták inert és oxidatív atmoszférában. Főkomponens elemzéssel összefüggést mutattak ki a minták termogravimetriás paraméterei és a kalorimetriás adatok között, valamint új ismereteket nyertek a csatornaiszap és az akácfa keverékének oxidatív hőbomlásáról. A minták égését a kinetikai rezsim tartományában az eddig rendelkezésre állóknál megbízhatóbb reakciókinetikai modellel írták le.

Megállapították, hogy a nátrium ionos Y és β zeolitok általában alkalmasak a klór- és brómtartalmú polimerek pirolízisolajában a halogéntartalom csökkentésére, de aktivitásuk jelentősen eltérő a különböző típusú szerves halogénvegyületek esetében. A benzolgyűrű

alifás szubsztituenseiből és fenolos hidroxilcsoport szomszédos pozícióiról a klór- és brómatomok könnyen és teljesen eltávolíthatóak nátrium zeoliton, de aromás gyűrűhöz kapcsolt halogénatom általában csak részben cserélődik hidrogénatomra.

Légkörkémiai kutatások

Részletesen vizsgálták a 2,3-pentándion (2,3PD) légkörkémiai kinetikáját és fotokémiáját direkt és relatív kinetikai mérésekkel, valamint impulzus-lézer fotolízis alkalmazásával. Elsőként a szakirodalomban megadták az OH-gyökkel végbemenő reakció sebességi együtthatóját. A tapasztalt nagy reaktivitást a 2,3PD molekula β-helyzetben lévő H-atomjának könnyű lehasíthatóságával magyarázták. Megállapították, hogy a molekula jelentős mértékben elnyel és fotolizálódik a látható hullámhossz-tartományban is, ami miatt a légköri élettartama mindössze néhány óra.

A tárgyévben megjelent közleményükben megmutatták, hogy a dimetil-adenin típusú nukleinsav-származékok aprotikus oldószerekben mutatott kettős lumineszcenciás viselkedését a reverzibilis kétállapotú rendszerekre jellemző kinetikával lehet leírni. A legfontosabb energiavesztő folyamat a belső konverzió, de a spinváltó reakció szerepe is számottevő. Legújabb kutatásaik arra irányulnak, hogy leírják, hogyan módosítja e molekulák gerjesztett állapotú viselkedését az, ha közeg protikus.

Környezeti elektrokémia

A már szobahőmérsékleten is folyékony szerves sókra, az ún. ionos folyadékokra nagy jövőt ígérnek a modern, környezetbarát elektrokémiai technológiák terén. Ezek kidolgozásához alapadatok hiányoznak, melyek meghatározására alap-elektrokémiai méréseket végeztek: Voltammetriás és elektrokémiai impedanciamérésekkel jellemezték az Au(100) egykristály elektródot egy új guanidinium-ion-alapú ionos folyadékban, az N,N-dibutil-N',N'-dietil-N'',N''-dimetilguanidinium-bisz(trifluorometilsulfonil)imid elektrolitban. Hőmérsékletfüggő impedanciamérésekkel a kettősréteg átrendeződésére jellemző kinetikai adatokat kaptak. Hasonlóképpen az előző évi, butil-metil-imidazólium-hexafluorofoszfátban végzett mérések következtetéseihez, most is megállapították, hogy a ténylegesen mérhető effektusok és az ilyen rendszerek határréteg-dinamikáját értelmező kurrens elméletek következményei távol esnek egymástól.

Az elektrokémiában alapvető fontosságú a fém-folyadék határfelületek jellemzése, az ottani erőhatások jellemzése. Evégett egy vezetőszondás pásztázó atomierő mikroszkóp összeállítást akként módosítottak, hogy azzal periodikus fém-fém nanokontaktusok kialakulása és széthúzása közben párhuzamosan legyen mérhető a fellépő erőhatás és a kontaktus elektromos vezetése. A berendezéssel folyadékfázisban vizsgálták az arany-arany kontaktusok kialakulásánál, megszűnésénél, ill. a különböző vezetési kvantumállapotok közti átmeneteknél fellépő erőhatást.

Poliklórozott aromások roncsolása hőhasznosítással

A „*Folyamatos üzemű technológia kifejlesztése poliklórozott aromások dehalogénezése"* című NKTH projekt keretében laboratóriumi és nagylaboratóriumi léptékben a reakciósebesség és a roncsolási hatásfok szempontjából optimalizálták a bruttó reakciót, amely a klóratomok mészkővel történő lehasításából és fixálásából, a klórmentes köztitermékek hőhasznosítással egybekötött oxidálásából, valamint a reakcióban képződő folyadékfázisú $CaCl_2$ gravitációs elkülönítéséből áll. Kidolgozták a prototípus üzem technológiai tervét. A konzorciumi tagokkal együttműködésben megtervezték, és elkészítették a prototípus kiviteli terveit. Ez a tevékenység magában foglalta a szerkezeti anyagok

kiválasztását és azok hőállóságának és korrózióállóságának ellenőrzését a reakció körülményei között; a teljes rendszer fluid-mechanikai jellemzőinek meghatározását elméleti számítások és nagylaboratóriumi modellkísérletek útján; valamint a reakcióhők meghatározását termodinamikai számításokkal különböző típusú és klórtartalmú anyagok betáplálása esetére. A teljesen automatizált, a bruttó reakció exoterm hőjétől függően 100-200 t/év névleges kapacitású prototípus elkészült. 2011 folyamán eredményes kísérletek során a prototípus tüzetes bevizsgálása és optimalizálása megtörtént.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A társadalom széles rétegeihez elsősorban a televíziós és rádióműsorokon keresztül juttatták el a tudomány híreit. A Mindentudás Egyeteme c. műsorhoz kapcsolódóan három kerekasztal beszélgetésen vettek részt, a Delta c. műsorban új eredményeikkel szerepeltek, a Kémia Éve kapcsán pedig rádióriportban beszéltek a 114-es és a 116-os rendszámú elemek IUPAC általi hivatalos elismeréséről.

Az érdeklődőknek szól az elmúlt évben magyar nyelven megjelent 8 cikk és egy könyvfejezet valamint egy német nyelvű cikk. Ezek a tudományos ismeretterjesztő anyagok olyan, nagy érdeklődésre számot tartó témákkal foglalkoznak, mint a vörösiszap képződése, tulajdonságai, tárolása, hasznosíthatósága, a megújuló energiaforrások, a tudomány és áltudomány kérdései.

Különösen fontosnak tartják, hogy a kémiát és általában a természettudományokat népszerűsítsék a középiskolások körében, ezért sokféle rendezvényen igyekeztek megszólítani ezt a korosztályt: Előadásokat tartottak a Lángész Zárófesztiválon Budapesten, a Tudománynapon Jászberényben és Veszprémben, a Kutatók Éjszakáján Budapesten valamint a Fáy András Tudománynépszerűsítő Középiskolás Programon. Részt vettek a Magyar Kémikusok Egyesülete által a Kémia Éve 2011 rendezvénysorozat keretében középiskolások részére szervezett „Felszínelők” című vetélkedő lebonyolításában. Posztert mutattak be „A Magyar Tudomány Ünnepe” alkalmából rendezett „A mi világunk kémiája” szimpóziumon. Intézeti nyílt nap keretében fogadták a budapesti II. Rákóczi Ferenc Gimnázium és Berzsenyi Dániel Gimnázium tanulóit, akik a laboratóriumokban bemutatott kísérleteken keresztül ismerkedhettek az intézetben folyó kutatásokkal. A Waldorf iskola tanulói az intézeti rendkívüli kémiaórájukon analitikai kémiai kísérleteket végezhettek.

A kémia iránt nagy érdeklődést mutató középiskolások tehetséggondozásával már több éve foglalkoznak, és a tárgyévben immáron a harmadik „AKI kíváncsi kémikus” kutatótáborukat rendezték meg. A kutatótáborban 15 modern témában folyó kutatásba 25 diák kapcsolódhatott be, és a laboratóriumi munka mellett megtapasztalták a kutatói munka olyan tevékenységeit is, mint az előadás készítése és megtartása és a cikkírás. A kutatótáborról és eredményeiről szól további 3 ismeretterjesztő cikk és két rádióriport.

A pályaválasztás előtt álló fiataloknak pedig a BME-n és az ELTE-n tartottak demonstrációval egybekötött előadást.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet három fő tevékenységi körben kapcsolódik magyarországi intézményekhez, ezek a közös kutatások végzése, részvétel a felsőoktatásban és fejlesztési munkák ipari megbízásból.

A közös kutatások jelentős számú publikációban megmutatkozó eredményessége elsősorban abból adódik, hogy a különböző iskolákhoz tartozó kutatók ismereteikkel hasznosan

kiegészítik egymást, és a rendelkezésre álló többféle módszerrel a megoldandó problémákat komplexen, esetenként multidiszciplinárisan tudják megközelíteni.

Több éve tart és évenként megújul a kapcsolat a Pannon Egyetemmel funkcionális nanorészecskék témában, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel (BME) műanyagok szerkezet – tulajdonság összefüggéseinek vizsgálatában, és egy éve az Eötvös Loránd Tudományegyetemmel légkörkémiai és fotokémiai kutatásokban. Az intézet Alkalmazott Polimer Fizikai Kémiai Osztálya a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékkel közös szervezeti egység, a Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Karának Műszaki Kémiai Intézetével közös professzori laboratórium működik, az ELTE TTK Kémiai Intézetével pedig a 2010-ben megkötött szerződés alapján a tárgyévben kezdte meg munkáját a Környezeti Kémiai-fizikai Laboratórium. Nem formális együttműködésben a Semmelweis Egyetemmel sokkomponensű biológiai rendszerekben végeztek analitikai vizsgálatokat. A BME Gépészmérnöki Kar, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékével biomassza anyagok égési tulajdonságait határozták meg. OTKA projekt keretében a cellulóz alapú bioetanol gyártás hatékonyabbá tételén dolgoznak a BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék kutatóival.

Az intézet munkatársai magas óraszámban oktattak egyetemeken. Graduális és posztgraduális előadásokat tartottak, szemináriumokat és laborgyakorlatokat vezettek a BME Vegyész- és Biomérnöki Karán, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán, a Pannon Egyetemen és a Miskolci Egyetemen. Az ELTE, a BME hallgatóinak TDK-, BSc-, MSc- és PhD-munkáit irányították, a Semmelweis Egyetemen PhD-hallgatók konzulensei voltak.

Az egyetemek mellett ugyancsak fontosak a kapcsolatok az MTA kutatóhálózatán belüli intézetekkel, különösen a korábbi Kémiai Kutatóközpont intézeteivel.

Az intézet kutatói nagy számban vesznek részt az MTA bizottságainak és munkabizottságainak és más tudományos testületek, folyóiratok szerkesztőbizottságainak munkájában.

Tizenkét magyarországi kis- és középvállalat megbízásából az intézet kutatási és fejlesztési feladatokat, méréseket végzett, többen közülük igénybe vették az intézet akkreditált laboratóriumának szolgáltatásait. Hét nagyvállalattal – amelyek közül kettő külföldi, kettő pedig multinacionális – áll kapcsolatban az intézet. A tőlük kapott feladatok jellemzően nagyobb volumenűek és gyakran tudományos igényűek. Az eredmények az anyagi bevétel mellett esetenként közös publikációkban is mérhető. Vannak olyan vállalatok, melyek az intézet több osztályával és különböző feladatok elvégzésére is szerződött.

Nemzetközi kapcsolatok

Az előző években megkötött és 2011-re is áthúzódó kétoldalú egyezmények keretében végzett munkán felül, és a több éve folyó nem formális együttműködéseiken túl az alábbi projekteket indították 2011-ben.

Funkcionális nanorészecskék előállítása és modellezése rádiófrekvenciás termikus plazmában témájú 3 éves Magyar–Olasz TÉT-együttműködésre vonatkozó szerződést írtak alá az év utolsó napjaiban. A partnerintézmény a Bolognai Egyetem Mérnöki Karának Gépészmérnöki tanszéke.

MTA kétoldalú egyezmény keretében talajminták lézeres szemcseméret analízise területén vizsgálatok kezdődtek a Lengyel Tudományos Akadémia Agrofizikai Intézetével közösen. Kutatásaikat kiterjesztik felszíni üledékek elemzésére is.

A Kínai Új Energia Vállalattal biobutanol üzemanyag extraktív fermentációval történő előállításán dolgoznak. Az előállítás kétfázisú immobilizált rendszerben, speciális új szétválasztási és frakcionálási technikával történik.

Újszerű multifunkcionális, elágazásos polimerek szintézise területén kialakult egy munkakapcsolat az indiai Roorkee székhelyű Indiai Technológiai Intézet Kémia Tanszékével.

Az új és régi együttműködések velejárója az intézet kutatóinak külföldre és a külföldiek hazánkba utazása.

Az intézet kutatói új és kevéssé ismert komplex permanganátsók előállításával és jellemzésével foglalkoznak, és ezzel kapcsolatban látogatást tettek az indiai Jodhpur Egyetemen és a Cirill és Metód Egyetemen Skopjeben (Macedónia). Ugyanezzel a témával kapcsolatban látogatott az intézethez a romániai Petru Poni Intézet munkatársa.

Egy fiatal munkatárs atomátadásos gyökös polimerizációs kutatásokat folytatott a Bázeli Egyetemen Svájcban. Blokk-kopolimerek szintézisével foglalkozott az intézetben az Indiai Technológiai Intézet kutatója.

Biomassza anyagok hőbomlásának kinetikája vizsgálatához kapcsolódó számítógépes kiértékeléseket tanított az intézet kutatója a Trondheimi Egyetemen (Norvégia). A Hawaii Egyetem (USA) professzora a biomassza hasznosítás kutatása témával rendszeresen visszatérő vendége az intézetnek.

Európai Uniós COST program keretében égési folyamatokat leíró kinetikai modelleket tanulmányozott egy fiatal kutatónő a Karlsruhei Egyetemen (Németország).

Hosszú évek óta eredményes munkát folytat az intézet kutatója az Ulmi Egyetemen (Németország), ahol fémek elektrokémiai tulajdonságait vizsgálja ionos folyadékokban.

A Berni Egyetemen (Svájc) molekuláris vezetés mérésével foglalkoznak, ahol az intézet munkatársa nagyérzékenységű műszereket fejleszt. Hasonló érdeklődés – elektronátlépés vizsgálata a molekuláris elektronika új anyagaiban – hozott az intézetbe két kutatónőt a prágai Heyrovsky Intézetből (Csehország).

Erasmus program keretében PhD-hallgató érkezett a Vilnius Egyetemről (Litvánia). Szilikátok plazmatermikus előállítása és jellemzése témában végzett kísérleti munkát az intézetben.

Az intézet több kutatója tagja nemzetközi tudományos szervezeteknek és külföldi folyóiratok szerkesztőbizottságainak.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A tárgyévben elnyert OTKA-pályázat keretében természetes és mesterséges polimer hulladékok együttes pirolízisével foglalkoznak. Több mint 40 halogén tartalmú komponenst azonosítottak a PVC-t és brómozott égésgátlót is tartalmazó polimerkeverék pirolízisekor keletkező olaj komponensei között. A teljes szerződésállomány 6 M Ft, ebből 2011 évre 1.117 ezer Ft jutott.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tóth A, Veres M, Kereszturi K, Mohai M, Bertóti I, Szépvölgyi J: Structure-property and composition-property relationships for poly(ethylene terephthalate) surfaces modified by helium plasma-based ion implantation. Applied Surface Science 257: 10815-10820 (2011)

2. Feczkó T, Tóth J, Dósa Gy, Gyenis J: Optimisation of protein encapsulation in PLGA nanoparticles. Chemical Engineering and Processing 50: 757-765 (2011)
3. Károly Z, Mohai I, Klébert Sz, Keszler A, Sajó IE, Szépvölgyi J: Synthesis of SiC powder by RF plasma technique. Powder Technology 214: 300-305 (2011)
4. Fodor Cs, Kali G, Iván B: Poly(N-vinilimidazole)-l-poly(tetrahydrofuran) amphiphilic conetworks and gels: Synthesis, characterization, thermal and swelling behavior. Macromolecules 44: 4496-4502 (2011)
5. Csiszár E, Fekete E: Microstructure and surface properties of fibrous and ground cellulosic substrates. Langmuir 27: 8444-8450 (2011)
6. Kovács J, Pataki P, Orbán-Mester A, Nagy G, Staniek P, Földes E, et. al. (1): Melt stabilisation of Phillips type polyethylene, Part III: Correlation of film strength with the rheological characteristics of the polymer. Polymer Degradation and Stability 96: 1771-1779 (2011)
7. Várhegyi G, Bobály B, Jakab E, Chen H: Thermogravimetric study of biomass pyrolysis kinetics. A distributed activation energy model with prediction tests. Energy and Fuels 25: 24-32 (2011)
8. Demeter A: Hydrogen bond basicity in the excited state: Concept and applications. In: Ke-Li H, Guang-Jiu Z (szerk). Hydrogen bonding and transfer in the excited state, Chapter 3. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 2011. 39-78.
9. Bakos I, Szabó S, Pajkossy T: Deposition of platinum monolayers on gold. Journal of Solid State Electrochemistry 15: 2453–2459 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:	1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				87
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				77
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	10	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	50
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	1	idegen nyelven:	46
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	107,497	Összes független hivatkozás száma:	1407
Összes hivatkozás száma[11]:	1652		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	3	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			57
		poszterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	16	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	52		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			20
Témavezetések száma: TDK munka:	13	Diplomamunka (BSc):	10
Diplomamunka (MSc):	16	PhD:	23

Kémiai Kutatóközpont
BIOMOLEKULÁRIS KÉMIAI INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf.: 17.
telefon: 1-438 1110; fax: 1-438 1145
e-mail: hajos.gyorgy@ttk.mta.hu; honlap: http://www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet kutatási tevékenysége döntően a biomolekuláris kémia két fontos területére irányul: új vegyületek szintézisére és reakciókészségük feltárására, valamint a biológiailag hatásos molekulák kötődésének, transzportjának és lebomlásának tanulmányozására.

A szintetikus munkák elsősorban heterociklusos származékok, alkaloidok, peptidmimetikumok és szénhidrátok előállítását célozzák, a biokémiai kutatások kötődésvizsgálatokra, neurokémiai témákra, transzportfolyamatok tanulmányozására és metabolizmus-vizsgálatokra összpontosulnak. Ezek mellett organokatalitikus eljárásokkal is foglalkoznak.

Gyógyszerkötődési vizsgálatokat is végeznek, a metabolizmus folyamatainak vizsgálatával foglalkoznak, valamint potenciális gyógyszerjelölt molekulák és célfehérjék azonosításán és tervezésén dolgoznak. Komoly erőfeszítéseket tesznek továbbá neurodegeneratív megbetegedések (például az epilepszia és az ischémia) mögött fennálló mechanizmusok jobb megértése érdekében.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Heterociklusos vegyületek szintézise és vizsgálata

A fenotiazinnal szubsztituált diének körét új funkcionalizált származékokkal (pl. aminokkal, savamidokkal, szulfoxidokkal) egészítették ki új szintetikus eljárásokkal. E munka részeként általános eljárást dolgoztak ki 2-amino és 2-amidofenotiazinek szintézisére.

A magyar-portugál együttműködés keretében 40 db új származék multidrog-rezisztenciát gátló hatását tesztelték baktériumokon. A közös munka és a kutatási eredmények alapján meghatározták a jövőbeli lead vegyület szerkezeti feltételeit.

A kéntartalmú piridin-származékok körében egy új átrendeződést mutattak ki, amely szokatlan módon egy metil-csoport részvételével zajlik le. A folyamatot kvantumkémiai számítással értelmezték.

Az izokinolin-gyűrű új funkcionalizálásával kiterjesztették a fluoreszcens tulajdonságú származékok körét, ezekre a vegyületekre jól járható szintézist dolgoztak ki.

Külföldi (argentin) kooperációban a speciális „flash vákuum pirolízis” módszerrel új indazolszármazékok keletkezését mutatták ki.

Neurokémiai kutatások

Azonosították egy új típusú, korábban leírt, glutaminsav felvétellel közvetlenül kiváltható gliális γ-amino-vajsav (GABA) kibocsátási folyamat forrását és *in vitro* epilepszia modellben felderítették hatását a neuronális aktivitásra. A NANOSEN9 projekt támogatásával egyedi

ioncsatornák aktivitásának mérésére alkalmas nanoszenzort fejlesztettek ki és vizsgálati protokollt dolgoztak ki nanorészecskék funkcionális neurotoxicitásának meghatározására. Meghatároztak egy, a neuronális aktivitástól független, energia-metabolitok által aktivált gliális Ca^{2+} szignált a nucleus accumbens-ben, az agy jutalmazásért felelős régiójában.

Molekuláris farmakológiai kutatások

Kimutatták, hogy az α_1-savas glikoprotein (AGP) szérumfehérjén specifikusan kötődő fluoreszcenciás jelzőanyagok kötődésmódja jelentősen megváltozik egy endogén szteroid jelenlétében.

A Quinacrine sztereoszelektív kötődését detektálták immobilizált calmodulinon.

Igazolták az indukált CD (cirkuláris dikroizmus) sávok mérésével az α-kimotripszin eddig ismert gátlószereitől merőben eltérő növényi alkaloidok (berberin, szangvinarin, keleritrin, ellipticin) kötődését, amelyek az enzim lehetséges gátlószereinek tekinthetők. Ugyancsak CD spektroszkópiás módszer alkalmazásával kimutatták, hogy a bilirubin specifikusan kötődik több, az emberi szervezetben előforduló enzimhez. A bilirubin és az enzimek kofaktorai (NADH, AMP) között kimutatott kötődési kölcsönhatások képezhetik részben az epepigment élettani és kóros körülmények között kifejtett biológiai hatásainak szerkezeti alapját.

A Cyclolab Kft.-vel együttműködésben vizsgálták a danzil-aminosavak sztereoszelektív elválasztását újonnan szintetizált ciklodextrin származékok alkalmazásával, kapilláris elektroforézis technikával.

Elválasztástechnikai módszereket dolgoztak ki a nanoszenzor komponensek vizsgálatára, jellemezték a szenzor fluoreszcenciás sajátosságait.

Vizsgálták a farmakológiai allosztéria szerkezete, termodinamikája, evolúciója és tervezése összefüggéseit. Kimutatták GABA-A receptorokra neuroszteroidok alegység-szelektív potenciáló hatását.

A metabolizmus folyamatainak vizsgálata

Kidolgozták a műtéti mintákból történő májsejt izolálás technikáját. Egyre kevesebb a kísérleti munkára alkalmas, nem transzplantált kadáver donorból származó májszövet. Ez terápiás szempontból jó, mert a szervek többnyire beültetésre kerülnek, a kutatást és gyógyszerfejlesztést azonban megnehezíti. Igazolták, hogy a műtéti mintákból jó életképességű, toxikológiai és májfunkció vizsgálatokra alkalmas sejtkultúra készíthető.

Folytatták annak vizsgálatát, hogy mi okozza a patkány és a humán hepatociták eltérő reakcióját gyógyszerkezelés hatására. Az epesó homeosztázisban fontos szerepet játszó ABCB11 és SLC10A1 transzporterek aktivitásának változását tanulmányozták néhány *in vivo* kolesztázist okozó gyógyszerrel történő kezelést követően. Kimutatták, hogy a humán hepatociták sokkal érzékenyebben reagáltak ciklosporin-A kezelésre, míg a patkánysejtek transzport folyamatait a bosentan jobban befolyásolta. Humán és patkány hepatocitákon vizsgálták a nagyon széles körben használt lipidcsökkentő szerek, az atorvastatin, fluvastatin, pravastatin, rosuvastatin hatását a máj transzporterek működésére és expressziójára egyszeri és többszöri adagolás után. Igazolták, hogy többszöri adagolás után az atorvasztatin csökkenti, míg a fluvasztatin megemeli az epesók (taurokolát) bejutását a hepatocitákba. A fajok közötti különbség a transzport folyamatok változásában gyógyszerek vagy gyógyszerjelölt molekulák hatására fontos információt jelent a gyógyszerfejlesztők számára. Ezek a vizsgálatok a gyógyszerfejlesztés korai stádiumában jelezhetnek hepatotoxikus mellékhatást, vagy káros gyógyszer-interakciót. A vizsgálatokban együttműködő partner a SOLVO Biotechnológiai

Zrt. volt. A Szent István Egyetemmel kooperálva a terápiarezisztenciáért felelős transzporterek és oxigén-függő fehérjék jelenlétét határozták meg és jellemezték állati tumorokban, különös tekintettel a fotodinamikus terápiában (PDT) részt vevő transzporterekre.

Gyógyszer-kölcsönhatások vizsgálata

Kidolgozták a CYPtest™ diagnosztikai eljárás szakmai alapjait, amely a szervezet gyógyszer-lebontó képességének meghatározásával lehetővé teszi az egyénre szabott gyógyszeres terápia kialakítását. A diagnosztikai rendszer egyfelől a gyógyszer-metabolizmusban résztvevő citokróm P450 enzimek expressziójának meghatározásán (CYP-fenotipizálás), másfelől a DNS-analízissel megállapítható génhiba kimutatásán (CYP-genotipizálás) alapul. A módszer klinikai alkalmazásra került olyan betegcsoportoknál, ahol több hatóanyagot együttes adagolnak, vagy ahol az egyéni gyógyszeres kezelés jelentősen javíthatja a gyógyszerek hatékonyságát és nagyban csökkentheti a toxicitás kockázatát. Az eljárás piaci bevezetését a Toxi-Coop Toxikológiai Kutató Központ Zrt. vállalta fel.

A CYPtest™ eljárás szabadalmi oltalmi igénye bejelentésre került az Európai Szabadalmi Hivatalnál (EP 11184319.9) és a CYPtest™ védjegyet a Nemzetközi Unióban (EU, Japán, USA) bejegyezték. Megkezdődött az eljárás bemutatása orvos szakmai és társadalmi fórumokon.

Oligoszacharidok reakcióinak tanulmányozása

A heparin hatás-szerkezet összefüggés tanulmányozására három heparin tetraszacharidot szintetizáltak biológiai vizsgálatok céljára. E tetraszacharidok szintézise a korábban kidolgozott ortogonális védőcsoportstratégia segítségével egyetlen közös intermedierből történt. Ugyancsak biológiai vizsgálatokhoz további azacukrokat, a heparánáz enzim új típusú inhibitorait, állították elő.

Folytatták a glikozilezési reakciók sztereokémiai eredményét befolyásoló tényezők szisztematikus vizsgálatát. Részletesen vizsgálták az oldószerek befolyását a szubsztituensek által okozott sztereoszelektivitás változásokra. Meghatározták azokat az oldószereket, melyekben a kívánt sztereoszelektivitás változás maximális, továbbá azokat az oldószereket is, amelyekben a szubsztituens által okozott nem kívánt hatás minimalizálható. Az oldószernek a szubsztituens hatásra gyakorolt befolyását elméletileg is értelmezték.

Biológiailag aktív szénhidrátok szintézise

A C-glikoaminosavakat tartalmazó peptidomimetikumok előállítására jelenleg rendelkezésre álló irodalmi módszerek hátránya az, hogy a célvegyületek soklépéses szintézis során nyerhetőek. Emiatt az utóbbi években jelentősen megnövekedett a szintetikus lépés-hatékony többkomponensű reakciók használata a biológiailag aktív hatóanyagok kutatásában. A nagyfokú szerkezeti diverzitásuk miatt, a többkomponensű reakciók alkalmasak kisebb molekulakönyvtárak létrehozására és elősegítik az új vezérmolekulák (lead compounds) könnyebb felfedezését.

Szénhidrát-módosított peptidmimetikumok szintézisét 4CR-Ugi reakcióval valósítottuk meg *C*-glikozil aldehid és keton valamint L-aminosavakból előállítható királis aldehid és keton származékokból kiindulva. Az Ugi-reakcióban, további reaktánsként, az amin és savfunkciót egy molekulában tartalmazó L-aminosavakat (alanin, szerin, treonin, prolin), valamint különböző izonitrileket (glikozil izonitril, glicinből előállítható etil 2-izociano-acetát, terc-

butilizonitril) alkalmaztunk. A reakcióban képződő α-aminoacil-amid diasztereomerek aránya (dr) a királis karbonil vegyület, valamint a használt aminosav szerkezettől függően 1.5 és 9 értékek között változott.

Organokatalitikus reakciók tanulmányozása

A kutatócsoport az általuk kifejlesztett, s világszerte alkalmazott kinin-alapú organokatalizátor alkalmazási lehetőségét vizsgálta az organokaszkád reakciók területén. Jelentősen bővíteni tudták a katalizátorcsalád alkalmazási körét, s számos olyan komplex molekula szintézisét valósították meg, amelyek szintetikus szempontból elérhetetlenek voltak. Az általuk előállított molekulák fő felhasználási területe a gyógyszerfejlesztés lehet.

A nemrégiben felfedezett frusztrált Lewis sav-bázis párok területe egy alapvetően új stratégiát hozott a kismolekulák aktiválásában, amelyek közül kiemelkedik a hidrogén aktiválása. A koncepció megfogalmazása mellett, egy gyógyszeripari szempontból jelentős molekulacsalád esetén demonstrálták is a tervezési elv hatékonyságát. Számos kinolin gyűrűs vegyület, illetve alkaloid hatékony, szelektív redukcióját valósították meg. Részletes mechanizmus kutatásuk pedig egy érdekes reakcióút felismeréséhez vezetett, amely alapja lehet a jövőbeni katalitikus rendszerek tervezésének.

A méretkizárásos elv további kiaknázását valósították meg az un. hidroszililezési folyamatokban, itt nem H_2-t hanem trialkil-szilánokat alkalmaztak redukáló szerként. A méretkizárásos elvnek köszönhetően olyan szelektív reakciók voltak megvalósíthatók oxo-vegyületek körében, amelyek eddig sem katalitikusan, sem sztöchometrikus redukálószerek esetén sem volt elérhető a szintetikus vegyészek számára.

Vizsgálták annak lehetőségét, hogy egyes, gyógyszerkémiai szempontból fontos, egzotikus szerkezeti felépítésű aromás rendszerek kialakítása megoldható-e organokatalitikus módon. Végül több szintetikus módszert fejlesztettek ki 3, 4 illetve 5 szubsztituált aromás vegyületek előállítására, amely módszerben az aromás gyűrűt két egymást követő kondenzációs lépéssel alakították ki.

A palládium katalizált C-C kötés kiépítése a modern szerves kémia nélkülözhetetlen elemévé vált. Előállítottak néhány alkaloid ciklopropán származékát, ami egyedülálló ezen a területen.

Sikerült a rangszámkülönbségek összegén alapuló, analitikai módszerek és modellek rangsorolására szolgáló eljárás elméleti megalapozása és validálása, véletlenszerűségi teszt elméleti eloszlásának levezetése és gyakorlatban alkalmazható számítógépes program kifejlesztése. A rangsorolás, nemcsak kémiai tárgykörben használható, hanem általánosan, pl. egyetemek, bankok, országok rangsorolására is.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatások egyik célja olyan szintetikus eljárások kifejlesztése, amely lehetővé teszi a toxikus fémek helyettesítését, illetve mennyiségük jelentős csökkentését szintetikus kémiai gyakorlatban. E célkitűzések nagymértékben megegyeznek az EU által is megfogalmazott „beyond 2020” megfogalmazásokkal.
A kutatók részt vettek elsősorban a középiskolásoknak szervezett tudományt népszerűsítő programokban. Számos ismeretterjesztő előadást tartottak a kémia évében.
A Nemzeti Fejlesztési Ügynökség TÁMOP 4.2.3/KMR pályázatára benyújtott „Immerzív kommunikációs csatornák a természettudományos ismeretterjesztés szolgálatában” című projekt keretében részt vettek a *Kémiai Panoráma* folyóirat és a *Kémia Portálja* online magazin (http://www.kemiaportal.hu) és a Lángész tudományos ismeretterjesztő portál

(http://www.langesz.hu) szerkesztésében. Két ismeretterjesztő cikket publikáltak a Biokémia és Kémiai Panoráma folyóiratokban. Három előadást tartottak doktoranduszoknak, gyógyszer-biokémikusoknak és sztereokémikusoknak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Az intézet kutatói a Semmelweis Egyetemen működő MTA Neuromorfológiai és Neuroendokrinológiai Laboratóriumával „A Glu-GABA cserefolyamatban résztvevő célfehérjék anatómiai és immunhisztokémai lokalizációja" című témában eredményesen dolgoztak együtt.

Részt vettek „A Glu-GABA cserefolyamat hatása *in vivo* neuronális aktivitásra" című téma vizsgálatában az MTA Pszichológiai Intézet kutatóival kooperálva.

A Creative Labor Kft. partnerrel közösen, nanoSEN9 projekt keretében közös kutatás-fejlesztési tevékenységet végeztek „Sejtvonalak előállítása immunfestési metodika tesztelésére" című témában.

A LuminoChem Kft. céggel az „Új Na^+ ion-szelektív fluoreszcens festékek fejlesztése" című témában eredményesen dolgoztak együtt nanoSEN projekt keretében.

A Nanochem Kft. partnerrel együttműködve részt vettek – nanoSEN9 pályázati támogatással – az „Ultraérzékeny fluoreszcens detektor fejlesztése" című téma megvalósításában.

Az intézet tudományos együttműködést folytat a BioBlocks Magyarország Kft.-vel a „Növényi alkaloidok α-kimotripszin kötődésének vizsgálata" című témában a szintetizált indolokinolin alkaloidok enzimkötődésének sikeres kimutatása és részletes vizsgálata céljából. Az együttműködés során egy közös publikáció született.

A Virtua Drug Kft. partnerrel közösen eredményesen kutatnak a „Gyógyszer-humán szérum albumin kötődési kölcsönhatások jóslására alkalmas on-line platform létrehozása" című témában. A gyógyszer-szérum albumin kötődés jóslására röntgenkrisztallográfiai adatok és a szupport vektor gép modell együttes alkalmazásával egy nyilvános, web alapú on-line platformot hoztak létre. A közös eredményeket egy publikációban ismertették.

A Cyclolab Kft.-vel együttműködve az „Új ciklodextrinek királis szelektor hatékonyságának és komplex képző sajátságainak vizsgálata" című témában a szintetizált ciklodextrin származékok részletes vizsgálatát végezték el. Az együttműködés során egy publikáció jelent meg.

Együttműködést alakítottak ki a Richter Gedeon Nyrt.-vel a „Neuroszteroidok alegység-szelektív, GABA-A receptorokat potenciáló hatásáról" című témában, s eredményeiket közös közleményben publikálták.

Az EGIS Gyógyszergyár megbízásából vegyületek hatásvizsgálatát végezték el TBPS és GABA kölcsönhatására membrán preparátumban.

A HepaRG, humán hepatoma sejtvonal transzporter proteinjeinek jellemzésének kutatásaiban együttműködő partner a Biopredic International (Rennes, Franciaország) szervezet volt. A HepaRG sejtvonal helyettesítheti a nagyon korlátozottan rendelkezésre álló humán primer

hepatocitákat *in vitro* toxikológiai vizsgálatokban. Igazolták, hogy az efflux transzporterek gyógyszer-interakciós vizsgálatai hasonló eredményre vezettek a két sejttípusban.

A „Komplex sejtkultúra- és membránvezikula-alapú *in vitro* szolgáltatáscsomag fejlesztés kolesztatikus anyagok nagy érzékenységű preklinikai szűrésére" című témában a Solvo Biotechnology céggel eredményesen kooperálnak (GOP 111-09/1). Hepatobiliáris uptake és efflux transzporterek experessziójának változását határozták meg a kultúra idejének függvényében. A gyógyszer-interakciók vizsgálatára alkalmas teszteket dolgoztak ki humán és patkány hepatociták felhasználásával. Egy tudományos publikáció született az együttműködés során.

A „Redox szabályozás az endoplazmás retikulum lumenében" című témában a Semmelweis Egyetemmel működik együtt az intézet ETT pályázat keretében. Olyan gyógyszerek hatását vizsgálták a bilirubin-glukuronidok (BG) eliminációjára, amelyek klinikai alkalmazásuk során kolesztázist okoztak. Több vizsgált hatóanyag jelenlétében a BG szinuszoidális transzportja megnőtt, aminek következtében a transzport eltolódott a szinuszoidális tér irányába. Ez jellegzetes kolesztatikus hatás, amely konjugált hiperbilirubineamiaként jelentkezik.

Az Uzsoki Utcai Kórházzal együttműködve az „ER – stressz kialakulásának vizsgálata metabolikus szindrómában" című témában módszert dolgoztak ki, amely során tumoros májból reszekcióval eltávolított szövet egészséges részéből izoláltak hepatocitákat. Májfunkciós vizsgálatokkal igazolták, hogy a műtéti mintákból jó életképességű sejtkultúra készíthető.

A Delta Services Kereskedelmi és Szolgáltató Kft.-vel együttműködve a „Virtuális Laboratórium gyógyszerinterakciók vizsgálatára" című témában transzport kísérletekkel támasztották alá, hogy *in silico* vizsgálatok alapján humán ABCG2 és ABCB1 transzporterek szubsztrátjainak jósolt gyógyszerek eliminációjában valóban ezek a transzporterek játszanak-e szerepet. A témában egy közös publikáció jelent meg.

A „Hepatobiliáris transzporterek szerepe a gyógyszerindukált kolesztázis patomechanizmusában" címmel egy PhD-hallgató képzése és a disszertáció kísérletes munkája folyik a Semmelweis Egyetem PhD Doktori iskolájának keretében.

A „Személyre szabott gyógyszeres terápia kialakítása a beteg gyógyszer-lebontó képessége alapján" című témában az intézet együttműködik a Fővárosi Önkormányzat Egyesített Szent István és Szent László Kórházzal, a Gottsegen György Országos Kardiológiai Intézettel, a Semmelweis Egyetem, Transzplantációs és Sebészeti Klinikával, Semmelweis Egyetem Pszichiátriai és Pszichoterápiás Klinikával, Heim Pál Kórházzal, a Madarász Utcai Gyermekkórházzal és a Fejér Megyei Szent György Kórházzal. A CYPtest™ alkalmazásával vizsgálják a betegek gyógyszer-lebontó (méregtelenítő) képességét, és közösen kialakítják a betegek egyéni gyógyszeres terápiáját. Hat közös publikációt jelentettek meg.

Intézmények közötti együttműködési megállapodás keretében az intézet kooperál az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont Enzimológiai Intézetével „DNS metilációjának meghatározása" című és a „K-vitamin transzportjának tanulmányozása" című témákban. A korábban kidolgozott LC/MS/MS alapú metilációs profilmeghatározást alkalmaztuk számos biológiai mintán. Az eredményekről két cikkben számolnak be. Módszert dolgoztak ki K-vitamin és metabolitjának LC/MS/MS alapú meghatározására. A módszert sikeresen alkalmazták éles biológiai mintákon. A kutatás eredményeit két publikációban közölték.

Kutatás-fejlesztési tevékenységet végeztek a Servier Kutatóintézettel és a Richter Gedeon Nyrt.-vel.
A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen részt vettek a Szerves Kémia és Technológiai Tanszék oktatási tevékenységében és kutatásában. A kutatási téma címe: „Aszimmetrikus biotranszformációk folyamatos csőreaktorban" volt.

A magyar–indiai kétoldalú kutatási egyezmény keretében, a „Szintetikus kémiai kutatások heterociklusok körében" című témában eredményes együttműködést alakított ki az indiai egyetemmel (Sardar Patel University, Vallabh Vidyanagar–388120, Gujarat, India). A kutatómunka lehetővé tette egy új, izokinolinnal kondenzált triciklusos gyűrűváz egyszerű szintézisének kidolgozását. Eredményeiket egy közleményben tették közzé.
A „Synthesis and biological activity of new nitrogen-, sulfur-, and oxygen containing condensed heterocyclic compounds" címmel örmény–magyar kétoldalú akadémiai egyezménnyel az Örmény Tudományos Akadémia Finom Szerves Kémiai Intézetével működött együtt az intézet. A telített heterociklusos vegyületcsalád tagjainak néhány, a magyar laboratóriumban kidolgozott és sikeresnek bizonyult átalakításaira került sor.

Az „Új célpontok és új gyógyszerjelöltek az epilepszia leküzdésére: a gamma-aminovajsav transzport fehérjék altípusainak megkülönböztetésére szolgáló szelektív spirociklusos gátlószerek tervezése" című témában (ERA-2010 Chemistry) sikeresen pályázatot készítettek el.

A Turkui Egyetem Farmakológiai Tanszék kutatójával közös kutatómunkát végeztek a rekombináns GABA-A receptorkötődés tanulmányozására.

A „HepaRG, humán hepatoma sejtvonal transzporter proteinjeinek jellemzése" kutatási témában az intézet a Biopredic International szervezettel (Rennes, Franciaország) kooperál. A HepaRG sejtvonal helyettesítheti a korlátozottan rendelkezésre álló humán primer hepatocitákat in vitro toxikológiai vizsgálatokban. Igazolták, hogy az efflux transzporterek gyógyszer-interakciós vizsgálatai hasonló eredményre vezettek a két sejttípusban.

A „Bioaktív emlőrák ellenes glikózaminoglikán oligoszacharidok kifejlesztése emlőrák kezelésére" címmel az intézet eredményes kutatási tevékenységet fejtett ki (TÉT 10-1-2011-0053). Együttműködő partner a szingapúri egyetemmel (Department of Anatomy, National University of Singapore, Singapore) volt.

Nemzetközi konzultációkat és tudományos előadásokat tartottak a Lonza (Svájc) és Sanofi (Franciaország) cégeknél.

Egy akadémiai csereprogram keretében az intézet együttműködik a Poznani Műszaki Egyetemmel (Lengyelország) „Hibrid nanorendszerek inverz gázkromatográfiás és kemometriai jellemzése" című témában, amelynek keretében perlit és abrazív töltőanyagok csoportosításával és hasonlóságaiknak kimutatását végezték. A közös munka eredményeként eddig öt publikáció jelent meg.

Az „Eltérő kemometriai és analitikai módszerek összehasonlítása" című témában különböző analitikai mérési, mintakezelési, extrakciós stb. módszereket rangsoroltak és hasonlítottak össze. Együttműködő szervezet a Novi Sad-i egyetem volt. Egy közös publikáció jelent meg.

Az intézet kutatói előadásokat tartottal a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar Doktori Iskolájában.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az intézet 2011-ben „Új szintézismódszerek kidolgozása és alkalmazása célzott hatásterületen aktív heterociklusos molekulák szintézisére" című témával Az OTKA-pályázat támogatási mértéke 30 M Ft volt. 2011-ben a multidrog-rezisztenciát gátló új vegyületcsaládot fejlesztettek ki, valamint elvégezték az új átrendeződések kimutatását és elméleti értelmezését a heterociklusos kémia területén. Egy speciális kísérleti technika: a „flash vákuum pirolízis" felhasználásával a gyűrűtranszformáció kialakítását is megvalósították.

A „Bioaktív rákellenes glikózaminoglikán oligoszacharidok kifejlesztése emlőrák kezelésére" című témában sikeres TÉT-pályázatot nyertek el. A pályázati támogatás mértéke 54 M Ft, 2011-ben: 20 M Ft.

„A 4,5,6,7-(klórmetil)indolok előállítása és alkalmazásuk indolvázas alkaloidok szintézisében" című témával sikeresen pályáztak (OTKA). Előállították az ergolinvázas alkaloidok néhány képviselőének ciklopropán származékát.

A „D3/D2 parciális receptor agonisták vizsgálata dopamin, GABA és glutaminsav kibocsátási mintázatok meghatározásával akut agyszeletben" címmel pályázatot (Richter témapályázat) nyert el az intézet. A pályázati támogatás mértéke 4 M Ft.

A GOP-1.1.1-09/1-2009-0001 sorszámú pályázat keretében 200 M Ft-ot nyert az intézet, amelyből 2011-ben 79 millió Ft volt a támogatás „Egyéni gyógyszeres terápia kialakítását támogató molekuláris diagnosztikai szakértői rendszer és szolgáltatás kidolgozása" című témában. 2011-ben befejezték a CYPtest^{TM} eljárás módszereinek (CYP-fenotipizálás és CYP-genotipizálás) beállítását és validálását, valamint megkezdték a klinikai kipróbálást.

A „Virtuális laboratórium gyógyszerinterakciók vizsgálatára" címmel elnyert pályázat (KMOP 1.1.1-09/1-2009-0044) keretében 2011-ben feltérképezték 10 hatóanyag citokróm P450 enzimeken keresztül megvalósuló gyógyszerinterakcióját. A támogatás mértéke: kb. 140 M Ft.

Az intézet a „Különböző analitikai és kemometriai módszerek összehasonlítása" című témában 1,46 M Ft támogatást nyert, amelyből tárgyében 0,73 M Ft-ot kapott (TÉT, RS-9/2009).

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Daragics K, Szabó P, Fügedi P: Some observations on the reductive ring opening of 4,6-*O*-benzylidene acetals of hexopyranosides with the borane trimethylamine-aluminium chloride reagent. Carbohydrate Research 346: (12) 1633-1637 (2011)

2. Varga Sz, Jakab G, Drahos L, Holczbauer T, Czugler M, Soós T: Double diastereocontrol in bifunctional thiourea organocatalysis: iterative Michael-Michael-Henry sequence regulated by the configuration of chiral catalysts. Organic Letters 13:(20) 5416-5419 (2011)

3. Németh K, Tárkányi G, Varga E, Imre T, Mizsei R, Iványi R, et al. (5): Enantiomeric separation of antimalarial drugs by capillary electrophoresis using neutral and negatively charged cyclodextrins. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 54:(3) 475-481 (2011)

4. Molnár T, Dobolyi Á, Nyitrai G, Barabás P, Héja L, Emri Zs, et al (2): Calcium signals in the nucleus accumbens: Activation of astrocytes by ATP and succinate. Bmc Neuroscience 12: 96 (2011)

5. Temesvári M, Paulik J, Kóbori L, Monostory K: High-resolution melting curve analysis to establish CYP2C19*2 single nucleotide polymorphism: comparison with hydrolysis SNP analysis. Molecular and Cellular Probes 25:(2-3) 130-133 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: KK Biomolekuláris Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:	0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				48
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				41
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	41
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	40
Könyv[8]	magyarul:	1	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	122,009	Összes független hivatkozás száma:	1148
Összes hivatkozás száma[11]:	1348		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 1	külföldi oltalmak száma[14]: 1

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			18
		poszterek száma:	17
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			12
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	10	PhD:	11

Kémiai Kutatóközpont
NANOKÉMIAI ÉS KATALÍZIS INTÉZET
1025 Budapest Pusztaszeri út 59-67; 1525 Budapest, Pf.: 17.
telefon: 1-438 1132; fax: 1-438 1164
e-mail: valyon.jozsef@ttk.mta.hu; honlap: http://www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet feladata a nemzetközi színvonalú tudományos kutatás folytatása főként a katalízis, a nanokémia és felületkémia területén.

A heterogén katalíziskutatások a megújuló energiaforrások hasznosítására, az energiakonverzió hatékonyságának javítására, a pórusos anyagok szintézisére és módosítására, a felületi és szerkezeti tulajdonságok meghatározására, valamint a fizikai-kémiai és katalitikus tulajdonságok közötti összefüggések tanulmányozására vonatkoznak. Intenzív kutatásokat végeznek az alkoholoknak, elsősorban üzemanyagként, H_2-forrásként és tüzelőanyag cellákban történő hasznosítása céljából. Figyelmet fordítanak a katalizátorok felületén lejátszódó folyamatok, valamint a reagensek és a katalizátorok kölcsönhatásának vizsgálatára is. Az intézet egészségvédelemmel összefüggő kutatási irányai között kiemelkedő az orvosi célú szerves és szervetlen alapú nanorendszerek előállítása, amely alkalmas a hatóanyagok és szenzormolekulák célzott bevitelére, valamint az előállított és jellemzett nanorendszerek biológiai hatásának és toxicitásának vizsgálatára.

A széles spektrumú felületkémiai kutatásoknak köszönhetően az intézet részt vesz bioszenzorok fejlesztésében, tervezett tulajdonságú nanorészecskéket és nanoszerkezetű bevonatokat készít és jellemez, az elektromos energiatárolás új eszközeit fejleszti (szuperkondenzátorok), illetve intelligens anyagokat (öngyógyító és elnyújtott védő hatású bevonatok, mikrokapszulák) állít elő.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Biológiai nanokémiai kutatások

Új kinázgátlót tartalmazó liposzómás és micellás rendszereket állítottak elő és jellemeztek. A különböző méretű és összetételű, sztérikusan stabilizált liposzómák héjszerkezetére pontos leírást adtak az ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) ID02 mérőállomásán kivitelezett kisszögű röntgenszórási adatok alapján. A modell-membrán rendszerekben a polialmasav, dendrimer, illetve a TRIS puffer által foszfolipid kettősrétegek szerkezetében okozott változásokat jellemezték.
A multilamellás vezikula modellrendszerek mellett változatos összetételű kétdimenziós lipid szerveződéseket – oldatfelszínre terített Langmuir-monorétegeket, szilárd hordozós monorétegeket, valamint hordozott lipid kettősrétegeket – állítottak elő és rezgési spektroszkópiával determinálták az egyes szerkezeti jellemzőiket. Meghatározták a lipid-rétegek (DPPG/$DPPCd_{62}$) és kémiai anyagok, polimerek (hialuronsav, PAMAM G5.0 (amino) és G4.5 (karboxilát) dendrimerek 0.05 mg/ml koncentrációban) közötti kölcsönhatásokat. Célzott hatóanyag-bevitelre alkalmas szilárd, kompakt és mag-héj összetételű nanohordozókat fejlesztettek ki és jellemeztek. Terápiás fibrinolízis céljára proteázzal töltött liposzómákat állítottak elő, illetve azok elhelyezkedését tanulmányozták a fibrin mátrixban.

A nemesfém kolloid rendszerek biomedicinális alkalmazása az irányított gyógyszerbevitelnél nyújt segítséget, mely az egyik legfontosabb megoldandó feladat a modern terápiás eljárásokban. Ehhez olyan kolloidálisan stabil hordozó részecskék szükségesek, amelyek egyrészt képesek megkötni a hatóanyag molekulákat, másrészt a kolloidális stabilitásukat megőrzik a biológiai környezetben is. Ilyen rendszereknek számos egyéb feltételnek is meg kell felelniük. Egyik potenciális lehetőség a kolloidális arany részecskéknek gyógyszer-hordozó anyagként történő alkalmazása. A biológiai környezetben megkívánt kolloidális stabilitás biztosításához új típusú stabilizáló anyagok és új szintézismódszerek is szükségesek. A tématerülethez kapcsolódóan új szintézis módszert dolgoztak ki, amelyben cukorzsírsav-etoxilátumokat alkalmaztak az arany nanorészecskék kolloid rendszereinek stabilizálására. Megállapították, hogy az ezekkel a molekulákkal borított arany részecskék rendkívül hosszú távú, 12 hónapos stabilitással rendelkeznek. A kolloidok stabilitásukat nemcsak az eredeti, vizes közegükben őrzik meg, hanem fiziológiás só koncentrációt tartalmazó körülmények között is. A stabilitás időtartama a felhasznált felületaktív anyagban lévő etilén-oxid lánc hosszától függően 5-30 nap között változott. Az elért eredményekre alapozva már hatóanyagot tartalmazó terápiás készítmények előállítása is tervezhetővé válik.

Megvalósult a tervezett mikrofluidikai „*lab-on-a-chip*" biológiai sejtvizsgálatok céljaira kifejlesztett multifunkcionális eszköz, amely szimultán elektrokémiai és optikai stimulációra, valamint adatgyűjtésre alkalmas. Az eszköz gazdasági hasznosítására tervet készítettek.

Felületmódosítási és nanoszerkezet-vizsgálatok

Szénalapú szuperkondenzátorok kutatási terén tanulmányozták különböző anyagminőségű és fajlagos felületű elektródok (szénszövet, aktív szén, szénnanocső (CNT)) elektrokémiai jellegzetességeit. Megállapították, hogy a CNT alapú elektródok a kis pórusellenállásuk és jó vezetőképességük következtében kiemelkedően nagy teljesítménysűrűséggel rendelkeznek, nagy frekvenciájú alkalmazásra kiválóak, míg az aktív szén, illetve szénszövet alapú elektródoknak – a nagyobb fajlagos felületüknek köszönhetően – energiatároló képességük kiváló. Megállapították továbbá, hogy a CNT növesztése során az alkalmazott katalizátor összetételének és koncentrációjának szisztematikus változtatásával a szénnanocső átmérője és falvastagsága, valamint a CNT-réteg sűrűsége szabályozható. Az optimalizáció során sikerült 60 F/g specifikus kapacitást elérniük, amely megközelíti az egyfalú szénnanocső szerves elektrolitokban elméletileg elérhető maximális kapacitását (80F/g).

A réz korróziójának csökkentését vizsgálták 5-IPBDT inhibitorral. A kutatás során szkenning elektronkémiai mikroszkóp (SECM) sikerült az 5-(4'-izopropilbenzilidén)-2,4-dioxotetrahidro-1,3-tiazolnak (5-IPBDT), mint korróziós inhibitornak a réz felületén történő időbeli réteg kialakulását követni és egyúttal igazolni, hogy az 5-IPBDT egy jó korróziós inhibitor.

Széles körben tanulmányozták a nanokémiai eljárások alkalmazhatóságát nikkel, kobalt, mangán és vas nanorészecskék, valamint az ezekből felépülő nanoszerkezetű kompozit anyagok előállítási lehetőségeit. Módszert dolgoztak ki az izometrikus, illetve pálcika és egyéb speciális alak-anizometriával rendelkező nikkel nanorészecskék előállítására. Tanulmányozták ezen anyagok mágneses jellemzőinek változását a szemcseméret és az alak-anizotrópia függvényében. Megállapították, hogy a pálcika alakú részecskéknél a mágneses hiszterézis görbéből származtatható koercitív erő értéke mintegy 2/3-dal nagyobb, mint a gömb alakú részecskék esetén. E kutatási eredmény azért is lényeges, mivel a fém nanorészecskék, közöttük is a nikkel számos vezető kutatási terület számára rendkívül fontos, így például alapanyagként használható optikai, elektronikai eszközökben, katalitikus eljárásokban valamint mágneses anyagokat igénylő berendezésekben. Kiemelkedően nagy

fontosságú terület az állandó mágnesek új generációját jelentő nanoszerkezetű állandó mágnesanyagok fejlesztése, a részecskék mágneses anizotrópiájának növelése oly módon, hogy a szemcseméret egyidejűleg a nanoméret-tartományban maradjon. A kutatási eredmények egyrészt új lehetőségeket tárnak fel ezen anyagok kémiai úton történő előállításához, másrészt bővítik a mágneses részecskék fizikai/kémiai tulajdonságairól rendelkezésre álló ismereteket.

Pásztázó elektrokémiai mikroszkóppal kimutatták a mikrokapszulák korrózióvédő hatását acéllemezeken. Kutatásokat végeznek a mikrokapszulák bevonatban való alkalmazási lehetőségeinek kidolgozására, vizsgálják a kapszulák fizikai tulajdonságait, foglalkoznak a hatóanyagot elhúzódó időben leadó mikrogömbök mátrix anyagának vizsgálatával, a hatóanyag kioldódásával, a mikrorészecskék festékbe építhetőségének és a biolerakódás időbeli alakulásának megismerésével is.

Elemzik a komplex hatású – korrózió és biolerakódás gátló – nanorétegek kialakításának lehetőségét fémfelületen molekuláris, önszerveződő és Langmuir-Blodgett filmekkel, s polimer rétegekkel; valamint tanulmányozzák a szilárd hordozóra felvitt rétegek tulajdonságait, illetve a rétegek kialakításának (rétegszám, koncentráció, utókezelés) hatását a fémek kioldódásra.

Hidrogén-energia kutatások

A polimer elektrolit membrán (PEM) tüzelőanyag cellák elektrokatalizátorainak fejlesztése során irányított felületi reakcióval – jól szabályozott körülmények között – Pt_3Sn (fcc) ötvözet fázist alakítottak ki, ami rendkívül aktívnak mutatkozott szénmonoxid (CO) elektrooxidációjában, így az anód katalizátorok CO-toleranciáját jelentős mértékben sikerült növelni; a CO-oxidációjának kiindulási potenciálja 500 mV-tal csökkent a csak Pt-t tartalmazó katalizátorhoz képest. Szintén a CO-tolerancia, valamint a hidrogén elektrooxidációja aktivitásának növekedését eredményezte az aktív szén módosítása $Ti_xW_yO_2$ elektromosan vezető vegyes oxidokkal, amelyek előállítására új módszert dolgoztak ki. Mintegy hatszoros aktivitásnövekedést sikerült elérni a módosítatlan katalizátorokhoz képest. A $Ti_xW_yO_2$ vegyes-oxidban a rutil/anatáz fázisarány változása nagy hatással van az elektrokatalitikus aktivitásra. A kifejlesztett katalizátorok és membrán elektród együttesek kiválóan teljesítettek a tüzelőanyag-cellákban. A hagyományosan alkalmazott 0,8 mg Pt/cm^2 nemesfém igényt mérsékelték 0,55 mg Pt/cm^2–re úgy, hogy közben a cella elektromos teljesítménye elérte, és túl is szárnyalta a kereskedelmi forgalomban kapható membrán-elektród együttesekét: 0,5 V kapocsfeszültség mellett 1,2 A/cm^2 áramsűrűség értéket lehetett mérni. A kifejlesztett katalizátorokat hazai vállalkozások alkalmazzák elektromos motor meghajtáshoz az általuk kifejlesztett termékekben.

Kis mennyiségű átmeneti fémet (Me) tartalmazó $Pt/TiMe_xO_y$ fotokatalizátorok hatékonynak bizonyultak fotokatalitikus metanol reformálásban. A módosítatlan Pt/TiO_2 katalizátoron 4 ml/h míg a $Pt/TiSn_{0.005}O_2$ katalizátoron 30 ml/ h hidrogéngáz fejlődött. A megnövekedett aktivitás elsődleges forrása, hogy a módosítók lényegesen befolyásolták a TiO_2 fényelnyelési tulajdonságait, azaz a félvezetők tiltott sáv szélességét. A környezetbarát módon, csak a napfény energiáját felhasználó eljárásban előállított hidrogén PEM tüzelőanyag-cellákban alkalmazható.

Hidrogénüzemű PEM cellák katalizátorai érzékenyek a hidrogénben gyakorta előforduló CO szennyezőre. Az alkalmazott katalizátorok CO toleranciájának növelése mellett szükséges a CO terhelés csökkentése is, amelynek egyik lehetősége a CO szelektív oxidatív (PROX reakció) eltávolítása. Az e célra alkalmazható arany katalizátorok működésének molekuláris szintű megértését célzó *in situ* modellkísérletek sorozatát hajtották végre. Megállapították,

hogy az arany felület még alacsonyan koordinált hibahelyekkel ellátva sem képes aktiválni az oxigént, így a felületen adszorbeált CO oxidációjára nem kerül sor. A víz alacsony hőmérsékleten fiziszorbeálódik mind a sima, mind a nanomorfológiával ellátott arany felületre. Bár az arany felület önmagában a vizet sem aktiválja, a víz adszorbeátumok hidrogénkötés jellegű kémiai kapcsolatot hoznak létre a felületen megkötött CO-val. Az eredmények a CO oxidáló arany katalizátorok bifunkciós jellegét támasztják alá, míg a CO adszorpciója az arany alacsony koordinációs számú hibahelyein valósul meg, az oxidálószert akár atomos oxigén, akár hidroxilcsoportok formájában az oxid hordozó szolgáltatja.

Az etanol és a dimetiléter adszorpcióját és bomlását vizsgálták hordozóra felvitt arany katalizátoron. Jelentős eredménynek számit, hogy CO-mentes hidrogént állítottak elő a hangyasav bontásával szén (Norit) hordozóra felvitt platina fémeken. A nitrogén-módosított TiO_2 felületen az etanol fotóindukált bomlása jelentősen megnőtt, hidrogén és acetaldehid volt a fő termék. Adalékolt Rh/Al_2O_3 katalizátoron a szintézisgáz képződését vizsgálták a CO_2 + CH_4 reakciójában. Elektron- foton- és ion spektroszkópiával (AES, XPS, LEIS, RAIRS), valamint STM-mel tanulmányozták a kétfémes nanoszerkezetek képződését és fizikai-kémiai sajátságait egykristály titándioxid felületen. Az arany-ródium rendszer estében mag-héj szerkezet kialakulását figyeltek meg. Ennek eredményeképpen az arany vált dominánssá a felületen. Hasonló szerkezet alakul ki titanát nanokompozitokon (nanoszál és nanocső) is. Mindezek az eredmények energetikai szempontból hasznosíthatók.

Mikro- és mezopórusos anyagok kutatása

Katalitikus, termokémiai és biológiai átalakítással biomasszából könnyen lehet karbonsavakat előállítani. A karbonsavak karboxil csoportjának alkohollá történő szelektív hidrokonverzióját vizsgálták újfajta, kétfémes, Ni- és In-tartalmú, Al_2O_3 hordozós katalizátorokon oktánsav modell reaktáns alkalmazásával 21 bar nyomáson 300-400 °C hőmérséklet tartományban. A katalizátort úgy állítják elő, hogy In_2O_3 port kevernek a jó hidrogénező aktivitású Ni/Al_2O_3 katalizátorhoz, majd pedig redukáló atmoszférában kezelik. Azt tapasztalták, hogy indium hozzáadás hatására a Ni/Al_2O_3 katalizátor aktivitása, illetve szelektivitása drasztikusan megváltozik. Indium hatására a kiindulási szénhidrogénláncnál rövidebb szénláncú paraffint eredményező hidrodekarbonilezési reakció háttérbe szorul. Elsődleges reakcióvá válik a szerves sav alkohollá történő szelektív redukciója. Rámutattak továbbá arra, hogy az alkohol dehidratálódása is, ami főként hordozó hatás, jelentősen visszaszorul. A kiemelkedően nagy alkohol szelektivitás igen széles nikkel, ill. indium koncentráció tartományban fennáll. Az újfajta $Ni,In/Al_2O_3$ katalizátor, a zsíralkoholok előállítására alkalmazott ipari hidrogénező Adkins katalizátorhoz (72 % $CuCr_2O_4$ and 28 % CuO) képest aktívabb, szelektívebb és kevésbé terheli a környezetet.

A zsírsavak hidrokonverziójakor a katalizátoron kapott kedvező termékeloszlás aktív Ni_2In ötvözetfázis létrejöttéhez rendelhető. A hidrogénezési átalakulás függése a reaktánsok parciális nyomásától Langmuir-Hinschelwood kinetikára és sebesség meghatározó felületi reakcióra utal. Az indiumos adalékolás hatékony szerepének felismerése a karbonsavak redukciója során új utat nyithat a katalizátor fejlesztés területén.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet kutatói részt vettek a Lángész projekt keretében megrendezett tudománynapokon, budapesti és vidéki óvodákba, középiskolákba látogattak el és tartottak interaktív előadásokat és kísérleti bemutatókat a nanotechnológiáról (Nanomozaik). A programot a Múzeumok Éjszakája című rendezvényen is népszerűsítették. Részt vettek a kémiai iránt érdeklődő

kiemelkedő képességű középiskolásoknak szervezett, „AKI kíváncsi kémikus” elnevezésű programban.

Témavezetőként középiskolás diákokat oktattak és munkájukat irányították a következő három kiírt témában: „Hogyan épül fel a sejtmembrán?”, „Korszerű üzemanyagok előállítása katalitikus eljárással” és „A Családi házak energiaellátására alkalmas hidrogén tüzelőanyag-cellák”.

Az emberi és az állati táplálkozásra alkalmatlan biomassza egyre inkább kívánatos megújuló energia-, ill. nyersanyagforrás. Jelenleg a biomassza átalakítása értékes kémiai intermedierek, valamint könnyen szállítható energiafajták (elektromos energia és vezetékes gáz) vagy energiahordozók (hidrogén és elsődlegesen folyékony üzemanyagok) minél gazdaságosabb előállítására irányul. Az etanol, közvetlenül felhasználható, mint motorhajtó anyag. A cukrok és a keményítő az etilalkohol előállítás régóta ismert nyersanyagai, ugyanakkor felhasználásuk nagymennyiségű üzemanyag előállítására jelentős élelmiszerár emelkedést okoz, továbbá számos szociális, gazdasági és környezetvédelmi problémát vet fel. Ezzel szemben a szerves hulladékok (pl. a cellulóztartalmú melléktermékek) hasznos törekvés. A biomassza feldolgozásának lehetséges módja termokémiai vagy biológiai lebontása levegőtől elzárt körülmények között. Mindkét esetben, főleg cellulóz tartalmú alapanyag feldolgozásakor, a fontos termékek a kismolekulájú karbonsavak, főleg az ecetsav.

A biológiai úton előállított folyadék állapotú termék biológiai úton biogázzá, heterogén katalitikus hidrogénezéssel pedig alkoholokká, elsősorban bioetanollá alakítható. A kutatás eredménye újszerű katalitikus eljárás tudományos megalapozása, amely a biokarbonsavak bioalkolokká való hatékony átalakítását teszi lehetővé.

A termokémiai biomassza feldolgozás, nevezetesen a pirolízis, cseppfolyós terméke a pirolízisolaj. A pirolízisolaj közvetlen hasznosítása korlátozott, gyakran káros a környezetre. A szerves savak kinyerése és alkohollá alakítása bizonyos pirolízis olajok egy részének hasznosítására jelenthet megoldást. Az olaj teljes tömegének ártalmatlanítására és hasznosítására alkalmas eljárás az olaj elgázosítása és a gáz felhasználása energiahordozóként, amivel az intézet évek óta foglalkozik. Együttműködő partnerével. a Terra Humana Kft.-vel közleményt jelentettek meg a „Figyelő” című hetilapban („Gázfröccsre várnak” 2011./32. szám - augusztus 11.) A kutatók eredményeikről az EuroNanoFórum 2011 budapesti nemzetközi rendezvényen számoltak be, illetve ismertették a megújuló energia kutatási eredményeiket Renewable Energy Handbook 2011 kiadványban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A „Rendezetlen fehérjék vizsgálata kisszögű röntgenszórással” című téma keretében kutatási együttműködés valósult meg az MTA SZBK Enzimológiai Intézettel, s előméréseket végeztek a hamburgi Szinkrotron B1 mérőállomásán.

Eredményes kooperáció keretében (együttműködő partner: Richter Gedeon Nyrt.) a „Liposzómás hatóanyag szerkezeti jellemzése” című témában röntgenszórásos vizsgálatokat végeztek. E hazai gyógyszergyárral együttműködésben a „Hialuronsav és sóinak fiziko-kémiai jellemzése, és a bőr víz háztartását befolyásoló hatásának vizsgálata” című kutatás során a kisszögű röntgenszórásos, reológiai és morfológiai vizsgálatokat végeztek és meghatározták a hialuronsav-származékok szerkezetét.

A „PEM (proton exhange membran) típusú tüzelőanyag-cellák ötrétegű MEA (membrane electrode assembly) kutatás-fejlesztése új típusú anód katalizátorokkal” című kutatási témában a Kontakt-Elektro Ipari, Kereskedelmi Kft. partnerrel működött együtt az intézet.

Membrán elektród együtteseket alakítottak ki a kifejlesztett $Ti_xW_yO_2$-vel módosított anód elektrokatalizátorok segítségével. A katalizátorokat a gázdiffúziós rétegre különböző technikákkal vitték fel (hagyományos tintasugaras nyomtató, impregnálás, szitanyomtatás).
Az MTA Izotópkutató Intézettel együttműködve, az „Inverz oxid/fém határfelületek genezise, jellemzése és alkalmazása modell rendszerben" című OTKA-pályázatban az arany hordozón létrehozott vas-oxid réteg, úgynevezett „inverz modellkatalizátor" segítségével vizsgálatokat végeznek az arany/átmenetifém-oxid katalizátorok működési mechanizmusának jobb megértése érdekében. A közös munka eredményéről két publikációban számoltak be.

Az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése" című NKFP támogatású konzorciális pályázat keretében, az *UWATECH Környezet- és Víztechnikai Kft.-vel* partnerrel egy közös előadásban számoltak be az eredményekről.

Az „Innovatív bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus fejlesztése" című témában (GOP-1.1.1-08/1-2008-0010), a Terra Humana Kft. résztvevővel három közös előadás révén kerültek bemutatásra az eredmények.

Az intézet a TÁMOP 4.2.1/B-09/1/KONV-2010-0003 4.1 és 4.2 alprojekthez kapcsolódó intézményi szakértői megbízás keretében a Pannon Egyetemmel és az MK-VFI-MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszékével kutatásokat végeznek a „Benzinfrakciók további benzol- és aromástartalom csökkentése katalitikus úton" és „Motorbenzinek- és gázolaj-keverőkomponensek előállítása melléktermékként keletkező olefinekből" című témákban. A közös munka során két közös publikáció és egy előadás született.

Az EXCELL FP7 projekt keretében, az „Exploring cellular dynamics at nanoscale" című együttműködést alakítottak ki a Dán Műszaki Egyetemmel (Danish Technical University, Koppenhága, Dánia) és a Potsdami Egyetemmel (University of Potsdam, Potsdam, Németország). Megoldották galvanikus helyettesítés módszerével a szilíciumból kialakított mikrostruktúrák felületének aranyréteggel történő stabil bevonását. A bevonat adhézióját hőkezeléssel, az Au/Si eutektikus rendszer szabályozott, optimalizált kialakításával javították. A végső bevonat alkalmazhatóságát adhéziós és elektrokémiai mérésekkel elemezték. A kifejlesztett bevonat vizsgálataik alapján alkalmas háromdimenziós rendszerek teljes fémes bevonására és kompatibilis a fotolitográfia adta struktúra kialakítási lehetőségekkel is, így többfunkciós szenzorok kialakítására is módot nyújt. Az eredmények két poszterben kerültek bemutatásra. Megvalósították a biomimetikus, membránfehérje alapú redoxszenzor fejlesztését. A kidolgozott felületmódosítási stratégia alkalmas intracellulárisan alkalmazható elektródstruktúra bevonására is. Az eredményeket három poszterben és egy előadásban prezentálták.

A MoVTeNb vegyes oxidok kombinatorikus tervezése és katalitikus tulajdonságaik nagyáteresztő vizsgálatát végezték el a „Propán szelektív oxidációja" című kutatási szerződés keretében a németországi Süd Chemie AG (Heufeld) céggel együttműködve. Az akrilsav hozam a legjobb kompozíciókon meghaladja az 50 %-ot.

Az intézet MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot alakított ki a Bolgár Tudományos Akadémiával (Institute of Organic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Szófia, Bulgária) „Mikro- és mezopórusos szilikátok szerkezeti és savas tulajdonságainak módosítása és alkalmazásuk katalizátor és adszorbens anyagként" című témában. A kooperáció során két fő bolgár és két fő magyar kutató látogatást tett a partnerintézménynél. A közös munkát és

annak eredményét publikációk összeállítása, valamint a projekt folytatásának előkészítése, az együttműködés munkatervének egyeztetése jellemzi. A témában öt közös publikáció jelent meg és egy előadásban ismertették a témához kapcsolódó eredményeket.

A „Monolit fém-zeolit katalizátorok fejlesztése" című pályázatban (TÉT, AR-4/2008; együttműködő partner: INCAPE, FIQ, UNL-CONICET, Santa Fe, Argentína) egy fő argentin kutató egy hónapos tanulmányúton volt a magyar intézetnél. Az eredményekről két közös publikációt jelentettek meg és négy közös előadást is tartottak.

Az MTA-CNR egyezmény keretében, a „A Fischer-Tropsch Mechanizmus vizsgálata" címmel Institute of Nanostructured Materials, National Research Council of Italy kutatói között kölcsönös tanulmányútra került sor. Az együttműködés során elkészítették és benyújtották a FESR Basilicata pályázatot „Összetett lézertechnológia" címmel.

A Magyarország Románia Határon Átnyúló Együttműködési Program (HURO/0901/090/2.2.2) keretében „A bio-etanol és a bio-metán konverziója" című kutatási témában vizsgálták az etanol katalitikus átalakítását hordozós kobalt és különböző foszfor-volframát katalizátorokon, amiről egy közös dolgozatban számoltak be.

A „Lonsdaleite szintézis nagy nyomáson és magas hőmérsékleten" című kutatási téma keretében az intézet kutatói az együttműködő japán partnernél (Geodynamics Research Center, Ehime University) voltak tanulmányúton (MTA-JSPS bilaterális rövid idejű mobilitás). Szintetizálták a pályázatban előállítani tervezett lonsdaleite fázist. A kutatás hozzájárult a lonsdalite szerepének jobb megértéséhez a gyémánt képződés során, továbbá a lonsdaleite kedvező fizikai és mechanikai tulajdonságai új, fejlett technológiai alkalmazásoknak nyithatnak teret.

A kutatóhelynek szoros kapcsolata van a Szegedi Tudományegyetemmel, részt vesz a Természettudományi Kar Doktori Iskoláinak munkájában, vizsgáztatásban és PhD-témavezetésben.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben az intézet egy kutatói ösztöndíjat (Researcher Excellence Grant – Joint Research Project, European Association of National Metrology Institutes) nyert el a „Metrological characterisation of micro-vesicles from body fluids as non-invasive diagnostic biomarkers", és „Chemical and optical characterisation of nanomaterials in biological systems" témákban. A pályázat 2012-ben indul. A pályázati támogatás összege 168 000 EUR; 2011-ben 0 EUR.
2011-ben a „Biomimetikus nanoszenzorok alkalmazása proteolitikus folyamatok követésére" című OTKA pályázattal 11,28 M Ft támogatást nyert el. A pályázat 2012-ben kezdődik. A pályázati támogatás 2011-ben 0 Ft.

A „Katalitikus hidrogéntermelés megújuló energiaforrásokból" című sikeres OTKA pályázattal az intézet 23,55 M Ft támogatást szerzett. 2011-ben 6 M Ft volt a támogatás mértéke. A pályázat keretében 2011-ben végzett munka fontosabb eredménye: a reduktív előkezelés hatására oxigén vakanciák (F-centrum hibahelyek) keletkeznek a hordozón, amelyek jelentősen befolyásolják a katalitikus aktivitást. Az F-centrumok hatására bizonyos felületi reakciók magasabb hőmérsékleten már a hordozón is lejátszódnak, amelyek eredményeképp felületi acetátokat és acetil-csoportokat sikerült DRIFT spektroszkópiával azonosítani. Az *in situ* DRIFT eredmények arra utalnak, hogy a felületi acetátok magasabb

hőmérsékleteken (400°C felett) demetanizálódás révén karbonátokká alakulnak. Ugyanakkor az is valószínűsíthető, hogy a makroszkópikusan megfigyelhető metánképződés nem ennek a felületi reakciónak tulajdonítható.

Az intézet elnyert egy NKFP támogatású konzorciális pályázatot az „Új biológiai szennyvíztisztító berendezések és technológia kutatása és fejlesztése" címmel. A pályázat támogatási mértéke összesen 67 M Ft, 2011-ben 6 M Ft. A projekt egy 200–20 000 lakos-egyenérték (l.e.) kapacitású, nagyhatásfokú, gazdaságos és környezetbarát kommunális szennyvíztisztító (SZVT) technológia kifejlesztésére irányul. A projekt célja a jelenlegi eljárásokban használt részegységeknél (bio-reaktor, levegőztető, iszapleválasztó, vízszagtalanító/fertőtlenítő) hatásosabb és gazdaságosabb berendezések kifejlesztése. Elkészítették a demonstrációs kísérleti berendezés terveit, beszerezték a referencia berendezésként üzemelő forgó-merülő tárcsás technológia egységeit. Megkezdődött Reziben a demonstrációs és kísérleti szennyvíztisztító építése. A projekt eredményeit szóbeli előadás formájában bemutatták a Magyar Kémikusok Egyesülete szervezésében a X. Környezetvédelmi Analitikai és Technológiai konferencián „Korszerű kommunális szennyvíztisztító technológia kifejlesztése és alkalmazása a Balaton térségében" című előadás prezentálásával.

Az „Innovatív Bio-energetikai és környezetvédelmi eljárás és prototípus fejlesztés" címen (GOP) az intézet, mint a Terra Humána Kft. kutató-fejlesztő partnere összesen 27,3 M Ft támogatásban részesült. A projektben végzett kutatások: nemesfémet nem tartalmazó, promoveált hordozós Ni-katalizátor kifejlesztése különböző eredetű és összetételű pirolízis gázok katalitikus, vízgőzös reformálására, a reakció és a katalizátor regenerálás körülményeinek optimalizálása, a katalizátor formázása, a méretnövelt katalizátor gyártás technológiájának kidolgozása, katalizátor készítés a reformáló reaktor prototípusához.

A „Katalitikus és gázszenzorikai 2D modellrendszerek" című OTKA pályázati témában dekorált Rh nanoszerkezeteket növesztettek TiO_2 (110) felületen. A szerkezetet STM technikával jellemezték. A témában megjelent egy dolgozat.

A „Jól definiált, alacsony szimmetriájú felületi szerkezetek előállítása és spektroszkópiai jellemzése" című OTKA pályázati kutatás során megállapították, hogy TiO_2(110) felületen a Rh-Mo kölcsönhatásakor ötvözet szerkezet alakul ki. Az eredményeket két publikációban ismertették.

A „Szénhidrogének és alkoholok reakciójának katalitikus és felületkémiai vizsgálata" című OTKA-pályázat során az etanol és dimetiléter adszorpcióját és bomlását vizsgálták hordozóra felvitt arany katalizátoron. Jelentős eredménynek számit, hogy CO-mentes hidrogént állítottak elő a hangyasav bontásával szén (Norit) hordozóra felvitt platina fémeken. A nitrogén-módosított TiO_2 felületen az etanol fotóindukált bomlása jelentősen megnőtt, hidrogén és acetaldehid volt a fő termék. A pályázati eredményként négy publikáció jelent meg a témában.

Az intézet OTKA-pályázatot nyert el a „Hidrogén előállítása biomasszából származó anyagok felhasználásával" című kutatási témával. A pályázat keretében vizsgálták a CO_2 + CH_4 gázelegy, a biogáz két fő komponensének az átalakítását különböző adalékolt Rh/Al_2O_3 katalizátorokon; megállapították, hogy a V_2O_5 jelentősen növeli a katalizátor aktivitását. Tanulmányozták az etanol konverzióját TiO_2-ra és titanátokra felvitt Au-Rh katalizátorokon. Az együttműködés során három publikáció jelent meg.

A 2011-ben elnyert OTKA–NKT–Marie Curie-pályázat „Mesterséges és természetes nanogyémántok szerkezete”(HUMAN-MB08A) címmel 2012.01.01-jétől kezdődik.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Goerigk G, Varga Z: Comprehensive upgrade of the high-resolution small-angle neutron scattering instrument KWS-3 at FRM II. Journal of Applied Crystallography 44: 337-342 (2011)

2. Wacha A, Varga Z, Vainio U, Hoell A, Bóta A: Small-angle X-ray scattering experiments and computer simulations to characterise anisotropy of activated carbons prepared from wood. Carbon 49:(12) 3958-3971 (2011)

3. Vargha V, Chetty A, Sulyok Z, Mihály J, Keresztes Z, Tóth A, Sajó I et al. (3): Functionalisation of polypropylene non-woven fabrics (NWFs). Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. DOI 10.1007/s10973-011-1940-8

4. Szabó T, Molnár-Nagy L, Bognár J, Nyikos L, Telegdi J: Self-healing microcapsules and slow-release microspheres in paints. Progress in Organic Coatings 72:(1-2) 52-57 (2011)

5. Szijjártó GP, Tompos A, Margitfalvi JL: High-throughput and combinatorial development of multicomponent catalysts for ethanol steam reforming. Applied Catalysis A-General 391:(1-2) 417-426 (2011)

6. Gergely A, Pászti Z, Mihály J, Szabó L, Kálmán E: Transformation of multi-walled carbon nanotubes to amorphous nano-spheres, micron-size rods and flakes by oxidative sulfation reaction. Diamond and Related Materials 20:(5-6) 826-832 (2011)

7. Lónyi F, Solt HE, Valyon J, Boix A, Gutierrez LB: The activation of NO and CH_4 for NO-SCR reaction over In- and Co-containing H-ZSM-5 catalysts. Journal of Molecular Catalysis A-Chemical 345:(1-2) 75-80 (2011)

8. Kollár M, Kolev I, Mihályi MR, Mavrodinova V: Transformation of alkylaromatics over delaminated MCM-22 zeolites and their composites with mesoporous MCM-41 silicate. Applied Catalysis A-General 393:(1-2) 59-70. (2011)

9. Majzik Z, Balázs N, Berkó A: Ordered SMSI decoration layer on Rh nanoparticles grown on TiO_2(110) surface. Journal of Physical Chemistry C 115:(19) 9535-9544 (2011)

10. Sarusi I, Fodor K, Baán K, Oszkó A, Pótári G, Erdőhelyi A: CO_2 reforming of CH_4 on doped Rh/Al_2O_3 catalysts. Catalysis Today 171:(1) 132-139 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: KK Nanokémiai és Katalízis Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:	0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				51
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				47
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	46
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	41
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	118,246	Összes független hivatkozás száma:	639
Összes hivatkozás száma[11]:	773		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	2	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			24
		poszterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	10	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	9		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			10
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	20

Kémiai Kutatóközpont
SZERKEZETI KÉMIAI INTÉZET
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.; 1525 Budapest, Pf.: 17.
telefon: 1-438 1120; fax: 1-438 1143
e-mail: kubinyi.miklos@ttk.mta.hu; honlap: http://www.chemres.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az intézet fő kutatási feladata az anyagtudományi és a biológiai kutatások területeiről származó molekulák és szupramolekuláris rendszerek szerkezetére vonatkozó kutatások folytatása volt. Klasszikus molekuláris dinamikai potenciálok fejlesztését végezték el az önszerveződő rendszerek tanulmányozására. A tömegspektrometria főbb kutatási területei az alapkutatásokat, a szerves- és biokémiai alkalmazásokat, valamint az orvosbiológiai kutatásokat ölelik fel. Az intézet kiemelt szerepet vállalt a hazai magasszintű szerves kémiai és biokémiai kutatások analitikai hátterének biztosításában. Partnereikkel való együttműködéseikből közös publikációk születtek. Az intézet széleskörű együttműködést folytat külföldi kutatóhelyekkel, s ennek eredményeként 2011-ben számos közös közlemény jelent meg rangos nemzetközi folyóiratokban. A kutatóhely munkatársai előadásokat tartanak az egyetemeken a szerkezeti kémiai vonatkozású kurzusok keretében, s laboratóriumi gyakorlatokat tartanak az intézet műszerein, valamint tagjai az egyetemi doktori iskoláknak és tanácsoknak. Az intézet és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem közös oktató-kutató Lézerspektroszkópiai Laboratórium működtet.

Az NMR laboratórium – számos kutatócsoporttal kooperálva – több területen kiemelkedő eredményt ért el (katalizátorok működése, peptidek, fehérjék szerkezete, polimerek szerkezete) a magmágneses spektroszkópiai módszerek széles körének alkalmazásával (oldat- és szilárdfázisú NMR, fehérjevizsgálathoz szükséges technikák).

2011-ben is az intézet egyik legeredményesebb kutatási területe az új, szilárd fázisú szupramolekuláris rendszerek, többek között aranykomplexek tervezése, építése (crystal engineering), azok alkalmazási lehetőségeinek (gázok megkötése, hangolható fényemisszió) kutatása.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szerkezeti biológiai és kémiai kutatások

Módszert dolgoztak ki igen kis (nanogramm) mennyiségű fehérjék triptikus emésztésére, s ezt sikerrel alkalmazták mikrovezikulumok proteomikai vizsgálatában. A módszer jobbnak bizonyult, mint a hagyományos, nagy térfogatban végzett emésztési eljárás. A módszer kifejezetten előnyös orvosi kutatásokban is (pl. szívbetegekből nyert AGP vizsgálatára), mivel a biológiai eredetű minták általában igen kis mennyiségben állnak rendelkezésre.

Algoritmust és számítógépes programot fejlesztettek ki az izolált glikoproteineken található oligoszaccharid struktúrák glikozilációs mintázatának, azaz a fehérje egyes glikozilációs helyein a különböző cukorszerkezetek minőségi és mennyiségi eloszlásának meghatározására.

A program segítségével sikeresen meghatározták standard és klinikai minták glikozilációs mintázatát.
A klinikai vizsgálatok során egészséges és érelmeszesedéses, illetve aneurizmás betegekből nyert α-1 savas glikoprotein (AGP) glikozilációs mintázatát határozták meg és hasonlították össze. Megállapították, hogy a három csoport mintázata jelentős mértékben eltér egymástól. A módszer prediktív ereje mintegy 90 % .

Sikerült kimutatniuk, hogy a glikoproteinek cukorszerkezete befolyásolja, modulálja a protein-protein kölcsönhatásokat. Megállapították, hogy a cukorláncon bekövetkező látszólag kis változás a protein-protein kapcsolat specificitását változtatja meg.

Relaxációs NMR-spektroszkópiai vizsgálatokkal feltérképezték a humán epesav-kötő fehérje főláncát jellemző dinamikai folyamatokat és ezek ligandumkötődés hatására történő változását. A szabad fehérjében azonosítottak egy lassú, *ms* időskálán zajló konformációs cserefolyamatot, amely lehetővé teszi a ligandumok kötőüregbe jutását. Az NMR-spektroszkópiai és biofizikai vizsgálatok alapján modellt állítottak fel a ligandumkötődés mechanizmusára vonatkozóan, hozzájárulva ezzel az intracelluláris epesav-transzport molekuláris szinten történő jobb megértéséhez.

A peptidek szekvenciája és fémkomplexeik szerkezeti és termodinamikai stabilitása közötti összefüggés ismerete elengedhetetlen, a peptidek biológiai funkciójának, valamint a fémek jelenlétében bekövetkezett szerkezeti és konformációs változásainak megértésében. A hisztidin oldallánc mellett a szabad N-terminális amino-csoport is szerepet játszik számos protein, közöttük a human serum albumin (HSA) vagy az amiloid precursor protein fémmegkötésében. Elvégezték a Gly-Gly-Gly-Hisztamin (GGGHa) és az N-terminális végén védett Boc-Gly-Gly-Gly-Hisztamin (BGGGHa) összehasonlító egyensúlyi és szerkezetvizsgálatát nikkel(II)- és réz(II)ionokkal ESR-spektroszkópia módszer alkalmazásával. Megállapították, hogy míg a BGGGHa esetén az egyfogú imidazol koordinációt követően valósul meg az amid-csoportok lépcsőzetes deprotonálódása, addig a GGGHa esetén a legtöbb komplexben makrokelát-koordináció valósul meg, az imidazol és az amino csoportok egyidejű kötődésével, nagyobb stabilitást adva ezeknek a komplexeknek.

A kétértékű, különösen a réz, ionok jelenléte lényeges változást okoz a membránok kettős lipidrétegében, amely változások összefüggésbe hozhatók egyes idegrendszeri zavarok kialakulásával. A Cu^{2+} ionok ESR-spektruma az ionok környezetével való kölcsönhatását tartalmazza és megfelelő interpretáció esetén annak lokális elhelyezkedésére vonatkozóan lényeges információk nyerhetőek. Megállapították, hogy egyértelműen azonosítható a spektrumban egy izotrop (gyors forgású) és egy anizotrop (erősen hőmérséklettől függő forgási sebességű gátolt forgású) Cu-komplex jele. Egy modellszámítás alapján meghatározták az izotrop és anizotrop komponensek arányát. Az Eyring-Polanyi és a Van't Hoff egyenletek felhasználásával meghatározták a réz ion kötődésére jellemző termodinamikai jellemzőket (adszorpciós és deszorpciós entalpia és az entrópia változásának értékei).

Különböző Mn-koncentrációval bíró $Mn_xZn_{1-x}Fe_2O_4$ mágneses nanoporokon elvégzett mérések alapján bemutatták, hogy az elektron paramágneses rezonancia (EPR), illetve a ferromágneses rezonancia (FMR) módszere milyen módon alkalmazható a nanorészecskéket mágneses szempontból jellemző fizikai mennyiségekről információ kinyerésére.

Nagyszámú, bifunkcionális tiokarbamid részt és tercier amin bázist tartalmazó organokatalizátor asszociátumot állítottak elő. Különösen új ezek szilárd fázisban való

átalakulásának és származékaik kristályainak megszerkesztése. Nehezen kristályosítható sokfémes sórendszerek (pl. új ferrocénium-reineckátok) kristályait növesztették és határozták meg. Kalixarének és zárványkomplexeik szerkezeti tulajdonságait vizsgálták. Többmolekulás rendszerekben szupramolekuláris effektusok által kiváltott morfotrópia első példáit mutatták be. Kémiai eszközökkel a kristályszerkezetet alakították át és új, megkívánt tulajdonságú anyagot állítottak elő.

Fotokróm spiropiránok fémionokkal történő komplexképzési kinetikáját és egyensúlyi állandóját határozták meg. Kimutatták, hogy a fotokóm sajátságok alapvetően megváltoznak kukurbit[8]uril makrociklusba-ékelődés hatására.

Részt vettek a vizes oldatokban jelen lévő hidroxidion új molekuláris dinamikai potenciáljainak fejlesztésében. A kölcsönhatási potenciálok segítségével felületi és az oldatban lévő hidroxidionok szerkezetét is tanulmányozták. Vizsgálták a $ZnCl_2$ vizes oldatnak elsősorban az extrém tömény oldatokban kialakuló oldatbeli szerkezetét, valamint a víz szerkezetét diffrakciós módszerek segítségével porózus anyagokban (MCM-41).

Új kvantumkémiai módszer fejlesztettek ki síkhullám bázison az atomon lokalizált bázisfüggvények megtalálására.

Kvantumkémiai számítások segítségével kimutatták, hogy egy újonnan előállított, nitroalkánok és aldehidek sztereoszelektív kapcsolására sikeresen alkalmazható organokatalizátor többszörös H-hidak kialakításával fejti ki katalitikus hatását.

Az effektív atompályák *„fuzzy atom”* formalizmus keretében való előállítására korábban javasolt módszerüket alkalmazták az SCF-egyenletek numerikus megoldásával kapott molekulapályák feldolgozására. Megállapították, hogy a számottevően betöltött atompályák száma mindig annyinak adódik, ahány pálya szerepel az adott atom klasszikus minimális bázisában. A javasolt módszerrel finomabb effektusok (a polarizációs függvények jelentősége, hipervalens atomok sajátosságai, stb.) is jól vizsgálhatók.

Multikonfigurációs eljárással meghatározták a CH_2BrI molekula intenzív lézertérrel történő disszociatív fotoionizációja során keletkező termékek kinetikus-energia eloszlását és azonosították a különböző energiájú termékeket eredményező mechanizmusokat. Az elméleti számításokkal sikerült értelmezni a kinetikus energiáknak az ionizáló impulzus fázis-modulációjától való függését.

Egyszerű tioészter-$(H_2O)_n$ modelleken végzett kvantumkémiai számítások segítségével megmutatták, hogy organokatalitikus enolizációs folyamatok kimenetelét a katalitikus hatást kiváltó hidrogén-híd donor csoportok térbeli pozíciója jelentősen befolyásolhatja.

Az eredmények rámutattak arra, hogy a katalizátorfejlesztés során a H-hidakon túlmenően más jellegű stabilizáló katalizátor-szubsztrátum kölcsönhatásokat is figyelembe kell venni.

Kvantumkémiai számítások segítségével felderítették a Pechmann-reakció lehetséges mechanizmusait. A számított szabadenergiaprofilok alapján megállapították, hogy a három lehetséges oxo utat nem lehet elkülöníteni, viszont a két lehetséges enolos út nagy biztonsággal kizárható. Az eredmények alapján számos kísérleti megfigyelés értelmezhetővé vált.

Az intézetben szintetizált új 1-cianoizobenzofuránok esetében számításokkal igazolták, hogy a cianocsoport nem változtatja meg az alapvegyület kinoidális karakterét.

Multikonfigurációs kvantumkémiai módszerrel meghatározták a $[Fe(terpy)_2]^{2+}$ komplex spin-átmeneteihez tartozó főbb potenciális-energia felületeket. Az eredmények segíthetnek megérteni a $[Fe(terpy)_2]^{2+}$ komplex magas spinű állapotának relatív stabilitását.

Kétdimenziós kísérleti NMR-vizsgálatokhoz kapcsolódó kvantumkémiai számításokkal meghatározták a $(bpy)_2(\mu\text{-dpp})Ru(CN)_4$ komplex két izomerjének szerkezetét és értelmezték azok spektroszkópiai tulajdonságait.

Ab initio MD-számítások segítségével azonosították a Wacker-reakció katalitikusan aktív Pd(II) specieszének szerkezetét és a hozzávezető reakciólépéseket. A számítások rámutattak a ligandumok eltérő transz-hatásának fontosságára. A katalitikusan aktív komplexben az olefin a víz ligandummal szemben található, és ez döntő hatással van a további lépések sztereokémiájára. A szimulációk segítségével a lehetséges ligandumcserék (Cl^- - H_2O, Cl^- - C_2H_4, H_2O - C_2H_4) mechanizmusát is feltárták.

Ab initio MD-szimulációk segítségével leírták a CO_2 lúgos közegben lejátszódó oldódását.
Ab initio kvantumkémiai és elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy elektronbecsapódás hatására a metán több, magasan gerjesztett elektronállapotba kerül, melyek általában kötött állapotok és a disszociáció nemadiabatikus átmeneteken keresztül, alacsonyabb elektronállapotokból játszódik le.

Klasszikus- és kvantummechanikai reakciódinamikai módszerekkel kiszámították, hogy az égések kémiájában alapvető $H + O_2$ reakció sebességi együtthatója a lángok hőmérsékletén két nagyságrenddel megnő, ha az O_2 molekula elektrongerjesztett állapotba kerül. E folyamat lehetővé teszi egyes égési folyamatok gyorsítását

Szupramolekuláris kémia, önszerveződő rendszerek kutatása

Napjainkban a cianid-hidas Au–CN–M kétfémes szupramolekulák széleskörű kutatási érdeklődésre tartanak számot, mivel szerkezeti változatosságuk mellet gyakran különleges ioncsere, mágneses, lumineszcens, vapokróm, kettőstörő és negatív hőtágulást mutató tulajdonságokkal rendelkeznek. A kidolgozott szilárdfázisú oldószermentes mechanokémiai eljárás lehetővé tette $[Au(CN)_2]$-alapú, többfémes koordinációs polimerek gyors, egyszerű és hatékony előállítását. Az így előállított egyik komplex illékony szerves vegyületek jelen-létében erőteljes színváltozást mutatott. A vapokróm vegyületek szenzorok fejlesztésében nyerhetnek alkalmazást.

Elvégezték az aranykomplexek szerkezetének meghatározását a kialakuló szupramolekuláris formák geometriai jellemzésére, valamint jellemezték a komplexek szolvátburok szekezet.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az IUCr Newsletter lapban, a magyar krisztallográfiai műhelyeket bemutató írást készítettek. Az European Crystallographic Association Végrehajtó Bizottság téli ülésére negyedik alkalommal került sor Budapesten, amelynek keretében vendégprofesszor látogatott az intézetbe.

Tudományos ismeretterjesztő cikket jelentettek meg az Élet és Tudomány folyóiratban (LXVI. évf. 7. szám „Munkára fogott baktériumok – Fehérjegyár a laborban"). Több cikket közöltek a Kémiai Panorámában („Molekuláris ízvarázs"; „Folyadékkristályos kijelzők" és „Módosított élelmiszerek" című publikációk).
A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Diákköri Konferenciáján hallgatóik két első és egy harmadik díjat nyertek el.

Az „AKI kíváncsi kémikus" című, tudománynépszerűsítő nyári tábor keretében két középiskolás diák bekapcsolódhatott a fotokróm anyagokon végzett kutatómunkába.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Az intézet kutatói az „Antimikrobiális peptidek hatásmechanizmusának vizsgálata" című témában közös kutatási tevékenységet folytattak az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) Szerves Kémia Tanszék, az ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport és az University of Karlsruhe (Germany) kutatóhelyekkel. Az együttműködés keretében meghatározták – az oldat- és szilárd fázisú NMR-spektroszkópiai vizsgálatok kombinációjával – a maximin-4 nevű antimikrobiális peptid konformációját különböző összetételű membrán mimetikumokban. Vizsgálataikkal új ismereteket tártak fel az ígéretesnek tekinthető új antibiotikum-jelölt működési mechanizmusáról, mely a hagyományos antibiotikumokkal szembeni fokozódó rezisztencia megoldásában nyújthat hasznos segítséget. Az eredményekről két publikáció jelent meg.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karának Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködve a „Módosított természetes alapú polimerek folyadék és szilárd fázisú NMR analízise" című témában kaprolaktonnal ojtott cellulóz- acetát mintákat vizsgáltak. Meghatározták az ojtási hatásfokot és az ojtott oldalláncok hosszúságát, valamint vizsgálták a lignin és ligningyanták szerkezetét.

A „Hidrogélek kölcsönhatása biológiai szempontból jelentős vegyületekkel" című témában ugyancsak a Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszékével együttműködve (OTKA-pályázat) vizsgálták a kétdimenziós szilárd fázisú ^{1}H módszerek felhasználásával polimer mátrix és kismolekulák kölcsönhatását. A megkezdett munkát 2012-ben egy újabb OTKA (K101861)-pályázat keretében is végezni fogják. A tárgyévben eredményeikről egy poszter formájában számoltak be.

A „Makromolekuláris hatóanyag-hordozó mátrixok és szilárd fázisú készítmények vizsgálata szilárd fázisú NMR-spektroszkópiával" című témában a polimer alapú mátrixban szerves és szervetlen hatóanyagok szerkezetét kutatták. Együttműködő partner a Szegedi Tudományegyetem Gyógyszertechnológiai Intézete volt. Az egyetemmel közös vizsgálatokat végeztek az átmenetifém komplexek területén, eredményeikről pedig három közlemény jelent meg.

Tudományos együttműködés keretében az ELTE Kémiai Intézetének Fizikai Kémiai Tanszékével a „Polielektrolitok és felületaktív anyagok kölcsönhatásának vizsgálata oldat fázisú NMR-spektroszkópiával" című témában kutatás-fejlesztési tevékenységet végeztek.

Az intézet a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemmel közös laboratóriumot üzemeltet a „Molekuláris optikai szenzorok és kapcsolók spektroszkópiai vizsgálata" című

projekt keretében. Fotokróm spiropiránok fémkomplexeinek egyensúlyi és kinetikai paramétereit határozták meg. Tanulmányozták az akridin tartalmú fluoreszcenciás gazdamolekulák komplexképzését fémionokkal, illetve királis vendégmolekulákkal. A téma keretében három közös publikáció jelent meg.
A Pannon Egyetemmel együttműködve „Tervezett fotofizikai tulajdonságokkal bíró ruténium-komplexek előállítása és jellemzése" című pályázatban megmérték az újonnan szintetizált ruténium-bipiridil komplexek spektrális és fotofizikai tulajdonságainak oldószer- és szubsztituens-függését és kvantumkémiai számításokkal értelmezték a megfigyeléseket. Az eredményeket egy közös publikációban jelentették meg.

A „Kapcsolható átmenetifém-komplexek vizsgálata" című témában a KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézettel (RMKI) közösen a multikonfigurációs módszerrel meghatározták a $[Fe(terpy)_2]^{2+}$ komplex spin-átmeneteihez tartozó főbb potenciális-energia felületeit.

Külföldi egyetemekkel (Université de Provence, Marseille, Franciaország; The Ohio State University, USA; Université Paris Descartes, Franciaország) együttműködve a „Reaktív oxigén specieszek és biológiai fontosságú komplexek ESR-vizsgálata" témában három közös publikációt jelentettek meg.

A „Living polimerizáció ESR vizsgálata" témában a Science & Technology of Polymers at CIQA (Saltillo Area, Mexico) partnerrel TÉT-pályázat keretén belül végeztek kutatómunkát.

Az „Alkaloidok fény hatására végbemenő folyamatai biológiai fontosságú rendszerekben" című témában feltárták alkaloidok fotokémiai átalakulásának mechanizmusát és kinetikáját. Meghatározták a fluoreszcenciás sajátságok változásának okát biológiai fontosságú anyagok jelenlétében. Együttműködő partnerével – Max-Planck-Institute for Bioinorganic Chemistry (Mülheim an der Ruhr, Germany) – három közös publikációban számoltak be az eredményekről.

Az „Ionos folyadékok és vízoldható kalixarének kölcsönhatásának termodinamikája" témában az intézet együttműködést alakított ki a Laboratory of Complex Polymer Systems, CNRS East Paris Institute of Chemistry and Materials Science, (Thiais, France). Feltárták az 1-alkil-3-metil-imidazólium típusú ionos folyadékok és 4-szulfonátokalixarének kölcsönhatását meghatározó tényezőket. Az eredményeket két közös publikációban jelentették meg.

Az intézet terjeszti a Cambridge Szerkezeti Adatbázist (Cambridge Crystallographic Data Centre, UK) Magyarországon. Nemzeti Társult Központként évente szabályos licenc-szerződéssel képviseli az Adatbázist és közvetít a sublease intézményeknek. A hazai jelentős kutatóegyetemek (BME, DE, ELTE, PPK, SOTE, SZTE) a Társközponton át kapják meg az adatbázist. Megjelent egy közös publikáció témához kapcsolódóan.

Az „Izostrukturalitás és molekuláris izometricitás vizsgálatok" című témában németországi kapcsolat révén az Institute for Organic Chemistry, Technical University Bergakademie (Freiberg, Németország) ritkán vizsgált peremen és laterálisan szubsztituált kalixarének konformációs viselkedésének és zárványkomplex képzését vizsgálták és jellemezték. A témában két közös publikáció jelent meg.

Az „Átmeneti fémek komplexeinek szerkezetvizsgálata és fejlődőgáz analízise vékonyfilmek előállítására" című témában az észtországi Department of Materials Science, Tallinn

University of Technology intézettel végzett kutatás alapján előállították és jellemezték az indium komplex prekurzort. Eredményeiket egy közleményben prezentálták.

A „Study of H-bond network in condensed phase" című pályázat keretében svédországi Angstroem Laboratory, University of Uppsala kutatóival együttműködve vizsgálták a hidroxidion hidratációját klasszikus kvantumkémiai és ab initio molekuláris dinamikai szimulációval. A hiperkoordinált hidroxidion esetén a valós (H-kötéses) és nem H-kötéses komplexeket egyértelműen szét lehetett választani. Egy közös publikáció jelent meg a kooperáció eredményeként. Továbbá az „Alumínium nitrát – nonahidrát kristályszerkezetének vizsgálata elméleti módszerekkel" című téma keretében közösen vizsgálták a nanohidrát kristályban lévő vizek dipólusmomentumának változását a tiszta gázfázisú vízhez képest. Kimutatták, hogy az alumínium első koordinációs szférájában levő vízmolekulák dipólusmomentuma jelentősen nagyobb (4,1 D), mint a gázfázisban. Új, minimalizációs elvet dolgoztak ki.

Az „Investigation of zinc containing solutions and surfaces" című OTKA-pályázat keretében megmérték a $ZnCl_2$ vizes oldatainak neutron diffrakcióját. Az extrém koncentrációjú oldatokban Zn–O–Zn láncok képződését figyelték meg. A témában négy közös publikáció jelentett meg az intézet Folyadékszerkezet Laboratóriuma.

A „Catalysis in water: A Computational Chemistry Challenge" címmel az Universitat Autonoma de Barcelona intézettel közösen (TÉT-pályázat) felderítették a Wacker reakció mechanizmusának első 3 lépését. Megállapították a katalitikusan aktív $[PdCl_2(H_2O)(C_2H_4)]$ komplex térszerkezetét és képződésének mechanizmusát. További szimulációkkal tisztázták a hidroxi-palladáció sztereokémiáját és szabadenergia-viszonyait, azaz kizárták a belső mechanizmust és magyarázatot adtak a külső-mechanizmusra. Rámutattak a ligandumok transz-hatásainak jelentőségére. Az eredményekről két közös publikációban számoltak be.

A „Enolát/enoil katalízis: Enolizáló organokatalizátorok fejlesztése" című témában alátámasztották a projekt egyik alapvető munkahipotézisét, miszerint az organokatalitikus enolizációs folyamatok kimenetelét a katalitikus hatást kiváltó hidrogén-híd donor csoportok térbeli pozíciója jelentősen befolyásolhatja. Együttműködő partner a finnországi University of Jyvaskyla volt. A témában két közös publikáció jelent meg.

A „Halomethán molekulák disszociatív fotoionizációjának vizsgálata időfelbontásos mérésekkel, illetve kvantumkémiai és kvantumdinamikai számításokkal" című pályázat keretében az alábbi intézményekkel dolgozott együtt az intézet: Department of Physics, Stony Brook University, New York, USA; Institute of Theoretical Chemistry, University of Vienna, Bécs, Ausztria; Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Madrid. Értelmezték a CH_2BrI molekula intenzív lézertérrel történő disszociatív fotoionizációja során keletkező termékek kinetikus-energia eloszlását és a kinetikus energiáknak az ionizáló impulzus fázis-modulációjától való függését, melyről egy közleményben számoltak be.

„A H atom és O_2 molekula reakciójának dinamikai vizsgálata" című pályázat keretében az intézet együttműködő partnere a University of New Mexico, Albuquerque, NM, USA volt. Klasszikus és kvantummechanikai reakciódinamikai módszerekkel kiszámították, hogy az égések kémiájában alapvető $H + O_2$ reakció sebességi együtthatója a lángok hőmérsékletén két nagyságrenddel megnő, ha az O_2 molekula elektrongerjesztett állapotba kerül. E folyamat lehetővé teszi egyes égési folyamatok gyorsítását.

A „Metán elektronbecsapódás hatására lejátszódó disszociációjának elméleti vizsgálata” című témában az intézettel, ab initio kvantumkémiai és elméleti reakciódinamikai módszerekkel megállapították, hogy elektronbecsapódás hatására a metán több, magasan gerjesztett elektronállapotba kerül, melyek általában kötött állapotok és a disszociáció nemadiabatikus átmeneteken keresztül, alacsonyabb elektronállapotokból játszódik le. A kooperáló partner Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, IL, USA volt.

Az „Energiadekompozíciós és kötésrendszámítási módszerek” című kutatásaikat az Department of Chemistry and Institute of Computational Chemistry, University of Girona (Spanyolország) intézménnyel közösen végezték. Jelentős eredményeket értek el az atomi teljes spinek (spin-négyzetek) precíz definíciója terén, különös tekintettel az alternatív definíció kritikus értelmezésére és a spin-négyzetek 3-dimenziós felbontása terén.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az intézet az akadémiai infrastruktúrális pályázat felhíváson a „Foszforeszcencia-egység FLS 920 berendezéshez” címmel. A pályázat keretében beszerezték és installálták a foszforeszcencia-egységet. A támogatás mértéke 6,5 M Ft.

A „Travel grant, Boehringer Ingelheim Fonds” pályázat keretében a „Crystallographic studies with a bacterial enzyme, 3-isopropylmalate dehydrogenase” című témában 1800 EUR támogatást kapott az intézet. Több mint 20 adatkészletet gyűjtöttek a berlini szinkrotronnál, ebből 6 új fehérje-ligandum komplex szerkezetét meghatározták, köztük a működő enzimre legjobban hasonlító komplex szerkezetét.

„A glikozilációs folyamatok feltérképezése és kapcsolata a rákos megbetegedések patofiziológiájával” témában. Az OTKA pályázati támogatás mértéke összesen 85,5 M Ft, amelyből 2011-ben 18 M Ft támogatást kapott az intézet. Mintaelőkészítési módszereket fejlesztettek vérszérumból történő proteomikai, glikoproteomikai vizsgálatokhoz. Kis mennyiségben rendelkezésre álló fehérjék és glikoproteinek emésztésére szolgáló protokollt dolgoztak ki. Elkezdték egy HPLC-alapú módszer kidolgozását, amelynek segítségével a vérplazmából glikoproteinek izolálása oldható meg. Algoritmust és számítógépes programot fejlesztettek az izolált glikoproteineken található oligoszacharid struktúrák glikozilációs mintázatának meghatározására. Vizsgálták glikopeptidek MS/MS fragmentációját, vizsgálták speciális cukorstruktúrák MS és MS/MS kimutathatóságát, és optimálták a kísérleti körülményeket a helyes glikopeptid találatok növelésére és az „álpozitív” találatok csökkentésére. A kidolgozott analitikai módszereiket felhasználták proteinek biológiai mátrixból történő vizsgálatára. A mikrovezikulumok vizsgálatával kapcsolatos eredményeiket publikálták is. Kifejlesztették az „*in silico golgi model*” első verzióját. Ennek segítségével néhány enzimkinetikai paraméterrel a glikozilációs mintázat sikeresen leírható. A következő lépésben ennek finomhangolása történik. Az eredményeket nemzetközi konferenciákon és tudományos publikációkban mutatták be.

„A sejtek közti kommunikáció újonnan azonosított mikrovezikulum-útjának vizsgálata” című témában sikeres OTKA-pályázatot dolgoztak ki. A támogatás összege 24 M, melyből tárgyévben 6 M Ft volt a támogatás mértéke. A membrán vezikulumok kutatásával egyre szélesebb körben foglalkoznak világszerte, hogy megértsék szerepüket a sejtek közötti kommunikációban. A kutatócsoportban egér csecsemőmirigyből izolált különféle membrán vezikulumok fehérje összetételét vizsgálták és mintegy 240 különböző fehérjét azonosítottak. Megállapították, hogy az apoptotikus testek hasonló fehérje összetétellel rendelkeznek, mint a

mikrovezikulumok, és az azonosított fehérjék ismerete arra enged következtetni, hogy mindkettő fontos szabályozó szerepet tölt be a csecsemőmirigy működésében.

„A zöldkémia eszköztárának alkalmazása és fejlesztése – szerves foszforkémiai reakciók megvalósítása környezetbarát körülmények között" című sikeres OTKA-pályázattal 24 M Ft támogatást kapott az intézet, melyből 2011-ben 4,5 M Ft realizálódott. A pályázat keretében a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen a környezetbarát (zöld) kémia eszköztárának alkalmazásával előállított különböző, főleg foszfortartalmú szerves vegyületek és ezek fémkomplexeinek szerkezetvizsgálatát végezte el a kutatócsoport.

V. 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Kubinyi M, Varga O, Baranyai P, Kállay M, Mizsey R, Tárkányi G, et al. (1): Metal complexes of mercyanine form of nitrobenzospiran: structure, optical spectra, stability. Journal of Molecular Structure 1000:(1-3) 77-84 (2011)

2. Miskolczy Zs, Megyesi M, Tárkányi G, Mizsei R, Biczók L: Inclusion complex formation of sanguinarine alkaloid with cucurbit[7]uril: Inhibition of nucleophilic attack and photooxidation. Organic and Biomolecular Chemistry 9:(4) 1061-1070 (2011)

3. Jobbágy C, Tunyogi T, Pálinkás G, Deák A: A versatile solvent-free mechanochemical route to the synthesis of heterometallic dicyanoaurate-based coordination polymers. Inorganic Chemistry 50:(15) 7301-7308 (2011)

4. Turiák L, Ozohanics O, Marino F, Drahos L, Vekey K: Digestion protocol for small protein amounts for nano-HPLC-MS(MS) analysis. Journal of Proteomics 74:(7) 942-947 (2011)

5. Rahaman H, Madarász Á, Pápai I, Pihko PM: Dual hydrogen-bond/enamine catalysis enables a direct enantioselective three-component domino reaction. Angewandte Chemie International Edition 50:(27) 6123-6127 (2011)

6. Tőke O, Bánóczi Z, Király P, Heinzmann R, Bürck J, Ulrich AS, et al. (1): A kinked antimicrobial peptide from *Bombina maxima*. I. Three-dimensional structure determined by NMR in membrane-mimicking environments. European Biophysics Journal 40:(4) 447-462 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: KK Szerkezeti Kémiai Intézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:	0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				67
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				67
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	62
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	62
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	181,41	Összes független hivatkozás száma:	1276
Összes hivatkozás száma[11]:	1536		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	2	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			27
		poszterek száma:	22
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	9		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			20
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	9

KFKI ATOMENERGIA KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.; 1525 Budapest, Pf.: 49.
telefon: 1-395 9159; fax: 1-395 9293
e-mail: gado@sunserv.kfki.hu; honlap: www.kfki.hu/aeki/

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

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.

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

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Reaktorfizikai és „multi-physics" kutatások

A jelenlegi és a közeljövőben létrehozandó reaktorok más energia-termelési módokkal versenyképes és egyben biztonságos üzemeltetésének feltétele a normál üzemi és üzemzavari limitiek és biztonsági sávok megalapozott, de nem túlzottan konzervatív kijelölése. A sávokhoz konfidencia szintek, valószínűségek tartoznak. 2011-ben folytatódott azoknak a módszereknek a kidolgozása, melyek révén ezek az adatok kiszámíthatók úgy a normál üzem, mint az üzemzavarok esetén. Ennek során az AEKI részt vesz az OECD NEA jelenleg folyó, WPRS UAM („Uncertainty Analysis in Modeling") nemzetközi együttműködésében, aminek keretében saját módszert dolgoztak ki, és ezzel meghatározták a saját fejlesztésű KARATE programrendszer reaktorfizikai részének a magadatok és a technológiai jellemzők hibájából származó bizonytalanságát immár a teljes reaktorra vonatkozóan is.

A multi-physics kutatások keretében on-line kapcsolatot hoztak létre a FRAPTRAN fűtőelemviselkedési és a TRABCO forrócsatorna termohidraulikai kód között, aminek használata révén arra a következtetésre jutottak, hogy a hagyományos módszerrel kapott eredményekhez képest a konzervativizmusok jogosan és szignifikáns mértékben csökkenthetők. A forrócsatorna termohidraulikai számításokat az OECD NEA PSBT benchmark keretében mérésekkel validálták.

A negyedik generációs reaktorokkal kapcsolatos kutatásokat a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség által finanszírozott NUKENERG projekt keretében végezték. Céljuk a zónatervezési részfeladatban a szuperkritikus nyomású vízhűtéses reaktor (Supercritical Water-Cooled Reactor, SCWR) európai változata, a HPLWR reaktor (High Performance Light Water Reactor) olyan stacionárius kapcsolt reaktorfizikai-termohidraulikai programrendszerének létrehozása, amely alkalmas a 2008 szeptemberében kialakult stabil áramlási viszonyokat eredményező zónakoncepció számítására. A hagyományos nyomottvizes reaktorok kazettáinál jóval több Gd kiégő mérget tartalmazó kazetták determinisztikus kiégési transzportszámítások segítségével előállított végtelen sokszorozási tényezőit összevetették az

MCNP-TIBSO Monte Carlo kiégési kód által számított referenciaeredményekkel. Jó egyezést találtak. Megvizsgálták a kiégett fűtőelemek radiotoxicitását és nyílt üzemanyagciklust feltételezve a mélységi tárolókban fontos szerepet játszó radioaktív hőfejlődésüket is, mely mutatók a jelenleg üzemelő nyomottvizes reaktorok kiégett fűtőelemeihez hasonló vagy némileg jobb értéket mutattak.

Az Euratom FP7 keretében létrejött *Supercritical Water Reactor - Fuel Qualification Test (SCWR-FQT)* projekt végső célja a csehországi LVR-15 kutatóreaktorban elhelyezni tervezett, fűtőelemeket tartalmazó szuperkritikus tartományban üzemelő besugárzó csatorna megtervezése és a hatósági engedélyezéshez szükséges elemzések elvégzése nemzetközi együttműködés keretében. Az AEKI a reaktivitás üzemzavarok elemzésének előkészítéseképpen 2011-ben kifejlesztette az LVR-15 reaktor Monte Carlo reaktorfizikai modelljét, elkészítette a reaktor zónájának és a fűtőelem szuperkritikus besugárzó csatornájának díffúziós csoportállandóit, melyek a stacionáris kiégési számításokhoz és a reaktivitás üzemzavarok későbbi dinamikai számításaihoz szükségesek.

Tovább folytatódott a Paksi Atomerőmű aktivitásterjedésének modellezésére alkalmazható kódrendszer fejlesztése. A SINAC környezeti szimulátor programrendszer segítségével modellezhetővé vált a környezetbe került radioaktív anyagok terjedése és kiülepedése, a kialakuló dózisok, a várható egészségi hatások, valamint a korai óvintézkedések bevezetésének hatásai. A LOCAREL programrendszer lehetővé teszi, hogy a hermetikus téri túlnyomással járó csőtöréses üzemzavarok esetén a hermetikus térben kialakuló nyomásból és dózisteljesítmény adatokból meghatározza a radionuklidok környezeti kibocsátását.

Termohidraulikai kutatások

A Paksi Atomerőmű a ZÜHR rendszerek csővezetékeire tett vízütéses megállapítások kísérleti igazolását is kérte, ugyanis több olyan bizonytalanságot tartalmaz az elméleti vizsgálat, amelyeket csak kísérlettel lehet tisztázni. A vizsgálatokat 2011-ben folytatták. Mivel a kondenzációból eredő vízütés fellépése nem determinisztikus, ezért további kísérletek szükségesek annak kijelentéséhez, hogy a kritikus csőszakaszokon nem alakul ki vízütés. Ezért egy 1:1 méretű modell megépítésével és több méréssorozat elvégzésével igazolták, hogy a megadott feltételek mellett nem alakul ki vízütés az erőmű vizsgált csőszakaszain.

A Paksi Atomerőmű szerkezeti elemeire elvégzett PTS elemzésekben alkalmazott közelítő módszerek megfelelőségének felülvizsgálatára volt szükség, különös tekintettel az üzemidő hosszabbítás engedélyezéséhez készített PTS elemzések konzervativizmusának csökkentése érdekében. Az eddig végzett vizsgálatok folytatásaképpen, a CFD számítások ellenőrzésére az egy ágat modellező plexi hidegág/gyűrűkamra modell mellé egy három-hurkos modellt építettek, amelyen a rendelkezésre álló lézeroptikai méréstechnikákkal, particle image velocimetry/laser induced fluorescence (PIV/LIF) módszer segítségével kísérleteket végeztek, s ezekkel a FLUENT kód további, mélyebb validálása vált lehetségessé.

Az AEKI új kutatási területet nyitott francia/cseh/szlovák együttműködésben, amelynek célja a IV. generációs gázhűtésű gyorsreaktor megvalósíthatóságának vizsgálata. Ehhez kapcsolódik az Európai Unió 7. Kutatási Keretprogramjának GoFastR projektje is: ennek keretében a laboratórium részletes CFD elemzéseket kezdett a kísérleti, keramikus fűtőelemeket tartalmazó fűtőelemkötegek hőmérsékleti viszonyainak vizsgálatára, valamint üzemzavar-elemzési számításokat a CATHARE kóddal mind az ALLEGRO kísérleti, mind a GFR gyorsreaktorra.

Az OECD PKL-2 projektben Magyarország a PMK kísérletek végzésével vesz részt. A kísérletek a blokk lehűtése közben fellépő kisméretű primerköri folyás következményeit vizsgálták, különös tekintettel az üzemzavar során a gőzfejlesztőben felgyülemlő nem-kondenzálódó gázok hatására. 2011-ben sor került a kísérleti adatok felhasználásával a számítógépes programok validálására. Az eredmények bizonyították, hogy a szekunderköri nyomáscsökkentés hatékonysága jóval kisebb a nem-kondenzálódó gázok jelenlétében, ami egyben magasabb fűtőelem-hőmérsékletekre vezet.

Fűtőelem kutatások

2011-ben az új technológiával gyártott cirkónium burkolat magas hőmérsékletű vizsgálatára került sor. Az elvégzett mechanikai mérések alapján meghatározták az oxidált ötvözetre jellemző képlékeny-rideg átmeneti tartományt. Az új ötvözetnél az elridegedés jóval hosszabb oxidáció után lép csak fel, mint a jelenleg használt ötvözet esetében. A minták részletes vizsgálata rámutatott, hogy a különböző mértékű eldridegedés oka az oxidréteg szerkezetében és a felvett hidrogén mennyiségében keresendő: az új burkolaton nem réteges oxidréteg jött létre, hanem kompakt szerkezetű réteg alakult ki, és a felvett hidrogén mennyisége is sokkal kevesebb volt, mint a régi ötvözetnél.

A szivárgó fűtőelemek kísérleti vizsgálatára létrehozták a LEAFE berendezést, amelyben inaktív körülmények között lehet mérni a fűtőelem szivárgását. A berendezés tervei a Paksi Atomerőműben használt fűtőelemek jellemzői alapján készültek. Először egy kisléptékű hurkot hoztak létre, amelyen el lehetett végezni a funkcionális próbákat, majd egy teljes léptékű berendezést állítottak össze, amelyben egy teljes hosszúságú fűtőelemrúd szivárog.

Az intézet szakemberei számítógépes modellt dolgoztak ki a szivárgó fűtőelemek tárolásának és a tárolás során végzett műveletek modellezésére. A modellt sikeresen alkalmazták a szivárgó fűtőelemek azonosítására használatos eljárások alkalmazása során várható aktivitáskikerülés becslésére.

A korábban létrehozott RING számítógépes program továbbfejlesztésével lehetővé vált egy olyan modul beépítése a Paksi Atomerőmű Vegyészeti Szakértői Rendszerébe, amely az on-line jód- és nemesgázaktivitás mérések alapján jelzi, hogy van-e szivárgó fűtőelem a zónában

Operátort segítő eszközök és szakértői rendszerek fejlesztése

A Paksi Atomerőmű még 2010 során megkezdte a munkákat az Erőművi Irányító Központ (EIK) új vezénylőjének kialakítására, továbbá az EIK hagyományos elemekből felépített sémafalának felújítására. Az AEKI a koncepcionális tervezési munkák vezetését és elvégzését vállalta, a CGM AB svéd tervező- és belsőépítész céggel együttműködve. A munka eredményeképpen 2011-ben elkészült az új EIK vezénylő koncepcionális terve, beleértve az új bútorzatot és az ergonómiai átvizsgálásokat is. Az elfogadott koncepcionális tervek alapján elvégezték a kiviteli tervezést.

2011-ben egy új fejlesztési projekt kezdődött el a Paksi Atomerőmű megrendelésére, a projekt célja egy olyan csatolt neutronfizikai-termohidraulikai kódrendszer kidolgozása, amely a jelenleg használt modelleknél részletesebben és pontosabban képes leírni a reaktor aktív zónájában fellépő áramlási és hőfizikai jelenségeket. A kódrendszerben a neutronfizikai jelenségek leírását a VERONA zónaellenőrző rendszer reaktorfizikai algoritmusai végzik,

míg a termohidraulikai modell az AEKI-ben kidolgozott RETINA kód továbbfejlesztésével jön létre. 2011-ben elkészült a csatolt neutronfizikai-termohidraulikai kódrendszer koncepciója és számítástechnikai rendszerterve, továbbá megvalósultak az 1. fázis fejlesztési feladatai.

A Paksi Atomerőmű 1-4. blokkján 2011-ben is folytatták a rendszeres reaktordiagnosztikai méréseket és a kapcsolódó kiértékeléseket. A havonta végzett mérések során keletkezett nagymennyiségű diagnosztikai mérési adatot elsősorban a blokkok állapotának szisztematikus figyelésére használták, az elemzések főleg az aktív zónán átáramló hűtőközeg forgalmának monitorozására és a zónán belüli szerkezetek rezgéseinek detektálására koncentráltak.

A fenti nagymennyiségű mérési adat emellett használható paraméter-becslési eljárások input adataként is. Az AEKI Alkalmazott Reaktorfizikai Laboratórium Diagnosztikai Csoportjának szakértői az elmúlt években a hűtőközeg hőmérséklet szerinti reaktivitás együtthatójának (az ún. MTC paraméternek) zajdiagnosztikai alapú meghatározására koncentráltak**.** A 2011-ben elvégzett fejlesztések során létrejött egy olyan MTC-kiértékelő modul, amely illeszkedik a szabványos zajdiagnosztikai kiértékelő rendszer (PAZAR-K) keretrendszeréhez.

Az ARL munkatársai által 2011-ben végzett munkák közül kiemelkedő fontosságúak az új paksi atomerőművi blokkok létesítésének előkészítésében végzett tevékenységek**.** Több fontos részterületen működtek közre, ezek közül a legfontosabbak az alábbiak:

- Részvétel az MVM Zrt. Lévai projekt által a szállítói tenderdokumentáció készítésére indított nagyszabású munkában. Számos tender-alfejezet írása mellett a laboratórium végezte az AEKI által végzett tender-munkák koordinálását is.
- A 2008-ban lezárult Teller projektben az AEKI vezetésével történt a potenciálisan létesíthető blokkok értékelése, elemzése. Ezt a tanulmányt 2011-ben ki kellett egészíteni egy újabb blokk, a Dél-Korea által gyártott és szállított APR-1400 típus értékelésével.
- Az új blokkok környezetvédelmi engedélyezési eljárásához kapcsolódik az Előzetes Konzultációs Dokumentáció (EKD) kidolgozása, ebben a munkában az ARL főleg a potenciálisan építhető blokktípusok jellemzőinek értékelésével vett részt.
- Fontos, az új blokkokhoz kapcsolódó elemzések folytak az Országos Atomenergia Hivatal megrendelésére is. Az egyik tanulmány önálló munka volt, ebben az új blokkok primerköri diagnosztikai rendszereinek tulajdonságait és lehetőségeit elemezték, továbbá javaslatokat tettek az új paksi blokkokkal szemben támasztandó hatósági követelményekre a diagnosztikai rendszerek vonatkozásában. A másik tanulmányt az ARL a SOM Systems Kft.-vel együttműködve készítette, ebben az új blokkok engedélyezésének kulcsfontosságú kérdéseit, az ún. „kiemelt engedélyezési követelményeket” tárgyalták.

Atomerőművi szimulációs kutatások

A Paksi Atomerőmű teljesléptékű szimulátorának rekonstrukciója befejeződött. Ennek során a reaktor modellt a KIKO3D kódra, a SMABRE kétfázisú termohidraulikai modellt a RETINA kódra cserélték. Ezek egymással csatolt háromdimenziós modellek, amelyek bevezetésére a gadolíniumos fűtőelemre történő többéves átállás miatt volt szükség: ezalatt a kevert zónák különleges tulajdonságaira is oktatni kell az üzemeltető személyzetet.

Az első szemeszter az új modellekkel 2011 januárjában kezdődött. Mint ilyenkor várható, a gyakorlatok során rengeteg olyan állapot keletkezik, amelyet a tesztelés során nem vizsgáltak. Mindig rendkívüli nehézségeket okoz a primer kör, a gőzfejlesztők feltelt állapota: a víz csak rendkívül kis mértékben nyomható össze, a numerikus megoldás tömeghibái igen nagy

nyomás gradienseket produkálnak, ez a modelleket a valós idő igénye miatti állandó lépésközzel futtatva instabillá teszi. Az első szemeszter során jónéhány alkalommal kellett a néhány modellen és interfészeiken módosítani.

A RETINA termohidraulikai kóddal nyert pozitív tapasztalatok alapján felmerült az igény e modellnek a VERONA reaktormonitorozó rendszerben történő használatára is. A projekt első fázisában egyelőre a radiális eloszlás számítása kazetta szinten történik, legfeljebb 50 axiális nódussal minden kazettában.

Anyagtudományi kutatások

Megvizsgálták, hogy a szuperkritikus tartományban levő anomáliák milyen szerepet játszhatnak a szuperkritikus vízhűtésű reaktorok termohidraulikájában. Kidolgoztak egy módszert, amelynek segítségével egyes nyomott vizes tartományban használt áramlástani kódok szuperkritikus tartományban is használhatók lesznek.

A korábban egyszerűbb folyadékokra alkalmazható stabilitási-túlhevítési modellt alkalmassá tették egyes komplexebb folyadékok vizsgálatára; megkezdték a víz túlhevítési határának feltérképezését. Elméleti úton kimutatták, hogy – hasonlóan a Nyquist zajhoz – a nyomás és a hőmérséklet is fehér zajként ingadozik a nanoméretek tartományában. Folyékony és szuperkritikus vízben keletkező hidratált elektronok hozamára a tapasztalattal jól egyező elméletet dolgoztak ki.

Meghatározták, hogy a cirkónium felülettel érintkező oldat mely – korróziós vagy hasadási eredetű – ionos formájú szennyezőinek együttes jelenléte esetében lép fel pozitív vagy negatív koadszorpciós hatás. Megállapították, hogy korróziós eredetű nanorészecskék jelenléte híg oldatok esetében a jodidionok adszorpcióját visszaszorítja, míg cézium- és uranil-ionokét segíti. 1 mmol/dm^3 koncentráció felett mindhárom vizsgált ion adszorpcióját csökkenti. Kombinált radio-elektrokémiai kvarckristály mikromérleges mérésekkel meghatározták a klorid-ionok arany és cirkónium felületen bekövetkező adszorpciójának elektródpotenciáltól való függését.

Folytatták a hagyományos elveken alapuló kutató berendezés, a szuperkritikus nyomású vízzel működő természetes, zárt cirkulációs ANCARA mérőkör építését, amely alkalmas lesz, mind a hurokban lejátszódó dinamikus áramlástani folyamatok neutron radiográfiával való megfigyelésére, mind az úgynevezett állandósult állapotbeli tömegáram-fűtő teljesítmény karakterisztikus összefüggés vizsgálatára. Felvállalták és bebizonyították, hogy a Budapesti Kutatóreaktornál eredményesen lehet bolométeres tesztméréseket végezni, amely növelheti Magyarország részvételi arányát, a fúziós reaktorkutatásban.

A tetrametilkarbamid (TMU) vizes oldatain végzett kisszögű neutronszórás mérések kiegészítésére meghatározták a TMU vizes oldatainak fagyáspontját az oldat összetételének függvényében. A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a szilárd fázisban nem észlelhető klatrátképződés. Tetrapropil-ammonium bromid vizes oldatának sűrűségmérési adatait elemezve szerkezeti és termodynamika következtetéseket vontak le.

A paksi tartályfelügyeleti program (1984–1993) keretén belül elvégzett szakítóvizsgálatok erő – keresztfej-elmozdulás diagramjainak lineárisan rugalmas szakaszai az analitikusan kiszámítható értékektől jelentősen eltértek és ingadoztak. Végeselemes számításokkal kimutatták, hogy ennek oka a próbatest és a befogópofa közt kialakuló kontaktus

bizonytalanságából származik. Létrehoztak egy végeselemes eljáráson alapuló módszert, mely segítségével meghatározhatják a szilárd testek és áramló folyadékok közti hőtranszportot jellemző időfüggő konvektív hőátadási tényezőt.

A paksi reaktortartályok inhomogén csonkvarratainak feszültségállapota az alkalmazott anyagok tulajdonságainak ismeretlen eloszlása miatt számításokkal egyelőre nem becsülhető. Az EU FP7 keretében finanszírozott STYLE projekt keretében létrehoztak, megépítettek egy csonk makettet, amelyen a gyártási hegesztési technológiával alakították ki a hegesztést. Létrehoztak egy szimulációs modellt maradófeszültségek lyukfúrásos technikával meghatározott mérési eredményeinek kiértékelésére.

Meghatározták a reaktortartályok plattírozása esetén a valódi feszültség-valódi alakváltozást és a valódi feszültség-valódi képlékeny alakváltozást leíró függvényeket. Kidolgozták a kritikus ridegtörési hőmérséklet részben hiányos mérési eredmények esetén történő meghatározási módszerét. Kidolgozták a neutronsugárzás hatására történő öregedés kinetikai modelljét. Meghatározták a feszültségkorrózió kritikus feszültségintenzitási tényezőjét leíró kinetikai egyenletet. Meghatározták a repedésterjedési sebesség kinetikai egyenletét a kritikus feszültségintenzitási tényezőt leíró kinetikai egyenlet, valamint az acélok folyásgörbéit meghatározó paraméterek felhasználásával.

Elkészültek a Paksi Atomerőmű Zrt. hideg túlnyomásvédelmi rendszerének vezérlését szabályozó p-T görbék alapját képező törésmechanikai számítások. A számítások elméletét kidolgozták. Elkészültek a Paksi Atomerőmű Zrt. reaktortartályai p-T görbéinek megalapozására végzett rugalmas- és rugalmas-képlékeny elemzések, amelyek az OAH vonatkozó útmutatójának megalapozását fogják szolgáltatni. Meghatározták a PA Zrt. tartályfal plattírozásában ébredő maradófeszültségeket. A mérések során innovatív, lyukfúrásos technikán alapuló, holografikus eljárást alkalmaztak, amely a mérési eredményeknek az eddigieknél sokkal jobb minőségű kiértékelését teszi lehetővé. A WPS hatás kiértékelésére alkalmas módszer alapjait vetették meg.

A Paksi Atomerőmű blokkjainak az élettartama rövidesen eléri a tervezett üzemidőt. A további üzemeltetéshez kidolgozták a monitorozó próbatest készletek terveit a tartályanyagok öregedési folyamatainak a figyelembe vételével, és legyártottuk azokat.

Sugárvédelmi és környezetfizikai kutatások

A kis dózisú ionizáló sugárzások egészségre gyakorolt hatásának feltárását célzó munka keretében kifejlesztésre került egy dinamikus kiülepedés-tisztulás modell. Az új numerikus modell a légzőrendszerben kiülepedő és onnan feltisztuló radioaktív részecskéket követi térben és időben. Az eljárás segítségével megadható a centrális légutakban kiülepedett, valamint a mély légúti régiókból feltisztult radio-aeroszolok okozta eredő terhelés térbeli és időbeni eloszlása adott külső sugárterhelés esetén. Megjegyezzük, hogy jelenleg nem létezik a világban olyan modell, amely ilyen jó felbontásban, akár a sejt vagy a sejtmag szintjén, képes lenne megadni a terhelést. Ezért a jelenlegi modelltől minőségi javulás várható a mikrodozimetria, és végső soron a sugárkockázat becslése terén. A modellt lakásra és uránbányára jellemző sugárexpozíciós környezetekre alkalmazták.

A sejt és szövetszintű hatások tanulmányozása terén is fontos előrelépések történtek. Egyik legfontosabb eredmény, hogy a sűrűn ionizálós sugárzásnak tartósan kitett bronchiális hámszövet sejtjeiben elsősorban a sugárzás által okozott sejtpusztulást kompenzáló fokozott

sejtosztódási gyakoriság miatt alakulnak ki mutációk, nem pedig a sugárzás által okozott DNS-sérülések miatt. Emiatt a differenciált sejteket érő sugárterhelésnek is lehet szerepe a mutációk kialakulásában.

Az AEKI-ben kifejlesztett *Pille-MKSz* dózismérő rendszer a Nemzetközi Űrállomás (ISS) orosz modulján a dozimetriai szolgálati rendszer része. Segítségével 2003 óta folyamatosan végeznek méréseket a dóziseloszlás feltérképezésére, mérik az űrhajósok személyi dózisát űrséták alatt és rendkívüli naptevékenység idején, illetve részt vesznek fedélzeti kísérletekben (ESA: Matroshka, RKA: Protective Water Curtain). A nyert több ezer mérés eredményét 2011-ben – a korábbi évekhez hasonlóan – feldolgozták és nemzetközi szakmai fórumokon ismertették.

A *Pille* tapasztalatai alapján az AEKI-ben kifejlesztett földi, kereskedelmi célú *PorTL* rendszert az AEMI Atomenergia Mérnökiroda Kft. sikeresen hasznosítja.

Elkészültek a 4π térszögben közel egyenletes érzékenységgel rendelkező háromtengelyű szilícium detektoros űrdozimetriai teleszkóp (*TriTel*) Nemzetközi Űrállomás fedélzetére szánt változatainak repülő példányai. Sikerrel befejeződtek a műszer minősítő tesztjei is. A TriTel egy példánya – egyetemi hallgatókkal együttműködve – Pille bura dózismérők kíséretében sikeres méréseket végzett Észak-Svédországban a BEXUS-12 sztratoszferikus ballon fedélzetén a REXUS/BEXUS program keretében. Elkezdődtek az előkészületi munkák a RISESAT japán műholdra fejlesztett TriTel műszerrel kapcsolatban. A készülék az elnyelt dózis mellett a LET (lineáris energiaátadási tényező) és a sugárzási minőségi tényező meghatározására is alkalmas, így segítségével kiszámítható a sugárzás biológiai károsító hatására jellemző dózisegyenérték.

Az ESA üstököskutató űrszondája, a *Rosetta* 2014-ben éri el a 67P/Csurjumov-Geraszimenko üstököst. Az AEKI közreműködésével két műszer készült (a *ROMAP/SPM* plazma- és a *SESAME/DIM* pordetektor) az űrszonda leszálló egységére. Az AEKI munkatársai 2011-ben is részt vettek a műszerek repülés alatti ellenőrzésében, valamint a tesztadatok kiértékelésében.

A Nemzetközi Űrállomás kozmikus sugárzási viszonyainak felmérése, az Orosz Tudományos Akadémia Orvosbiológiai Problémák Intézetével (RAS IBMP) együttműködésben a továbbfejlesztett eszközök alkalmazásával folytatódott a Nemzetközi Űrállomás három orosz moduljában, melyeket orosz Progressz típusú teherűrhajók juttattak a fedélzetre. 2011-ben új feladatként jelentkezett az Űrállomás orosz asztronautáinak személyi dozimetrálása is szintén az IBMP-vel együttműködésben. Az új feladat elvégzésére tervezett eszközöket egy az asztronautákat is szállító Soyuz jutatta az Űrállomásra 2011-ben.

Az ESA és a Japán Űrkutatási Ügynökség (JAXA) által szervezett Matroshka-2B-KIBO program keretében az űrhajósok egész testét, illetve az egyes szerveiket ért sugárdózis meghatározásának mérései zajlottak az űrállomáson 2011-ben. A kiértékelő munka jelenleg is folyamatban van. Folytatódott és lezáródott több korábbi űrdozimetriai mérés, a kalibrációs célból besugarazott detektorok kiértékelése, valamint az eredmények interpretálása és publikálása.

Az AEKI-ben készült mérőegységek is beletartoznak azon eszközök sorába, melyekkel Magyarország hozzájárul a Nemzetközi Űrállomáson a nagy LET értékű neutron- és

kozmikus sugárzás spektrumának és az integrális dózisnak a meghatározásához, ezzel jelentősen növelve hazánk műszaki és tudományos hírnevét.
Svájci együttműködés keretében magyar és svájci mélygeológiai tároló alapkőzetének szorpciós kapacitását vizsgálták. A Bodai Aleurolit Formáció és a svájci Opalinus agyag kőzeteiből készült csiszolatokon kidolgoztak egy olyan vizsgálati eljárást, amivel mikroszkopikus szinten meghatározható, mely ásványok játszanak döntő szerepet a radionuklidok megkötésében. A vizsgálatok alapján kijelenthető, hogy a nikkel az illit ásványszemcsékhez kötődik. Fontos felismerés továbbá, hogy az illit lemezek között megjelenő nanoméretű hematit pikkelyek szerepet játszanak a nikkel megkötődésében.

A Budapesti Kutatóreaktor Működésének főbb eredményei

A kutatóreaktorban előállított radioaktív izotópokkal az ország 60 kórházát látják el, és használják fel azokat diagnosztikai és terápiás célokra. A függőleges besugárzó csatornákat anyagvizsgálati célokra, szerkezeti anyagok sugárkárosodási vizsgálatára is használják. A kutatóreaktor egyik jelentős feladata, hogy biztosítja a neutronokat az alap és alkalmazott kutatásokhoz. A reaktor körüli nagyberendezések hatékony kihasználását a Budapest Műszerközpont (BKM/BNC) koordinálja. BKM elismert tagja az európai neutronközpontok hálózatának, és partnere az EU által támogatott NMI3 programnak. A nemzetközi „user" program keretében hazai és külföldi tudósok pályázhatnak mérési időre. A pályázatokat egy nemzetközi bíráló bizottság értékeli. A rendkívül nagy mérési idő igény miatt a BKM csak kiváló és nagyon jó pályázatok számára tud hozzáférést biztosítani. A BKM fontos feladatának tekinti, hogy berendezéseinek folyamatos fejlesztésével kiszolgálja a kb. 500 neutron „user" igényeit a közép-kelet-európai régióban.

Tovább folytatódott az elmúlt évek során kialakult szoros együttműködés a kelet-európai kutatóreaktorok között (Eastern European Research Reactor Initiative, EERRI) az oktatás-tréning, az izotópgyártás, a reaktor nagyberendezéseinek hasznosítása, és az anyagvizsgálat-besugárzás területén.

A Nemzetközi Atomenergia Ügynökséggel együtt megszervezték a „Concerted Actions in Research and Applications with Neutron Beams in Europe" konferenciát. Az elhangzott előadások és kerekasztal beszélgetések során egységes vélemény alakult ki arról, hogy a „kis" és „közepes" neutronközpontok működése, mint amilyen a BKM (angolul BNC) továbbra is fontos a nagy európai központok mellett, jelentős a szerepük az oktatás és a tréning területén az új és „niche" kutatási területek kialakításában, berendezés fejlesztésben, „pilot" kísérletek megvalósításában. Továbbá hozzájárulnak a nemzeti és nemzetközi kutatás-fejlesztési stratégiák kialakításához.

Az EERRI megalakulásától kezdve már 5 sikeres tréning programot tartott a fejlődő országokból érkező hallgatók számára. A 4. program (4th EERRI Research Reactor Group Fellowship Programme) keretében 8 hallgatót (3 chilei, 4 jordán, 1 mexikói), oktattak kutatóreaktoros témákban (üzemeltetés, karbantartás, hasznosítás, dozimetria, környezet-ellenőrzés, vízkémia).

A sikeres EERRI együttműködésről beszámoltak a marokkói konferencián; International Conference on Research Reactors: Safe Management and Effective Utilization.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

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

Néhány példa:
2011.03.23.: Duna TV, Heuréka – Megtaláltam! (BEXUS)
2011. augusztus: Zöld Energetika Magazin (Izgalmas ballontúra kockázatos landolással)
2011.09.26.: Űrvilág hírportál megjelenés (BEXUS-12 küldetésről)
2011.10.26.: Dunántúli Napló (Svájci–Magyar együttműködés a nagyaktivitású hulladék mélygeológiai tárolása témájában, éves projektbeszámoló az MTA pécsi székházában)

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A 2010 nyarán megalakult magyar Fenntartható Atomenergia Technológiai Platform 2011-ben folytatta tevékenységét, ennek során kidolgozták a következő néhány év legfontosabb nukleáris kutatásainak tervét, figyelembe véve a magyar atomenergetika igényeit és a nemzetközi trendeket is. A platform céljai megfelelnek az intézet kutatási célkitűzéseinek és a nukleáris ipar jelenlegi igényeit is kielégítik valamint a jövő céljait is szolgálják, ennek ellenére a finanszírozás nem megoldott, így a platform jövője kétségessé vált.

Az intézet 2010 során együttműködési megállapodást írt alá egy cseh és egy szlovák kutatóintézettel az ALLEGRO berendezés tervezésének és építésének előkészíte céljából. Az ALLEGRO a gázhűtéses gyorsreaktork demonstrátora lesz. 2011 során az előkészítő tevékenységek folytak.

Az intézet kutatói mind az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, mind pedig a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen aktívan részt vesznek mind az alapoktatásban mind pedig a posztgraduális képzésben. Az ELTE-n az AEKI kutatói a vegyészet, ezen belül a fizikai kémia oktatásában tevékenykednek, a BME-n pedig a nukleáris technika, ezen belül elsősorban a reaktorfizika területén.

Nemzetközi kapcsolataik fontos részét képezi az EU-projektekben való részvétel, kiterjedt kapcsolataik vannak számos kutatóintézettel és egyetemmel, elsősorban Európában, de a tengerentúlon is.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

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. E projekt befejeződik, folytatása sajnos nem látszik biztosítottnak.

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

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Maráczy Cs, Hegyi Gy, Hordósy G, Temesvári E: HPLWR equilibrium core design with the KARATE code system. Progress in Nuclear Energy 53: 267-277 (2011)

2. Schulenberg T, Maraczy Cs, Heinecke J, Bernnat W: Design and Analysis of a Thermal Core for a High Performance Light Water Reactor. Nuclear Engineering and Design 241: 4420–4426 (2011)

3. Hózer Z, Horváth M, Kunstár M, Matus L, Nagy I, Novotny T, Perez-Feró E, Pintér-Csordás A, Vér N, Vimi A, Windberg P: Experimental simulation of the Paks-2 cleaning tank incident through separate effect and integral tests. Nuclear Engineering and Design 241: 573-581 (2011)

4. Beneš O, Van Uffelen P, van de Laar J, Győri Cs, Konings RJM, Hózer Z: Kinetic studies of the α–β phase transition in the Zr1%Nb cladding for nuclear reactors. Journal of Nuclear Materials 414: 88-91 (2011)

5. Kiss S, Lipcsei S, Végh J: Development and overall testing of the traditional MTC estimation based on noise diagnostics at all four units of the Paks NPP. Nuclear Engineering and Design 241: 2933-2941 (2011)

6. Lipcsei S, Végh J, Kiss S: Results of the Coordinated Research Project titled Advanced Surveillance, Diagnostics and Prognostics Techniques Used for Health Monitoring of Systems, Structures, and Components in Nuclear Power Plants. IAEA Nuclear Energy Series Report D-NP-T-3.14, IAEA, Vienna, Austria (2011)

7. Madas BG, Balásházy I: Mutation induction by inhaled radon progeny modeled at the tissue level. Radiation and Environmental Biophysics 50: 553-570 (2011)

8. Farkas Á, Hofmann W, Balásházy I, Szőke I, Madas BG, Moustafa M: Effect of site-specific bronchial radon progeny deposition on the spatial and temporal distributions of cellular responses. Radiation and Environmental Biophysics 50: 281-297 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: KFKI Atomenergia Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	189			Ebből kutató[2]:	39
PhD, kandidátus:	28	MTA doktora:	7	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					11

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				93
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				85
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	10	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	41
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	1	idegen nyelven:	40
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	2	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	89	Összes független hivatkozás száma:	345
Összes hivatkozás száma[11]:	345		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora:	1

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			57
		poszterek száma:	20
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	3		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			11
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	7

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	564 513	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 5 — Teljes saját bevétel:	1 269 022	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	749	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	158 761	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	21	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	83 158	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	15	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	186 678	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	16	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	30 303	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	810 122	EFt

KFKI RÉSZECSKE- ÉS MAGFIZIKAI KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest Konkoly-Thege Miklós út 29-33.; 1525 Budapest Pf.: 49.
telefon: 1-392 2512; fax: 1-392 2598
e-mail: sznagy@rmki.kfki.hu; honlap: www.rmki.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az MTA KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet alapító okiratában rögzített feladatainak, valamint az MTA közfeladatainak ellátásából ráháruló teendőknek megfelelve eredményes kísérleti és elméleti felfedező kutatást végzett a részecskefizika, a magfizika, a gravitációfizika, a plazmafizika, a hűtött atomok fizikája, az űrfizika, a nukleáris szilárdtest-fizika, a nukleáris anyagtudomány és a fizika biológiai alkalmazásai területén. Fejlesztési tevékenységének területei: lézerfizika, nukleáris analitika, fúziós plazmadiagnosztika, űrtechnika, nagy sebességű adatfeldolgozás, egyes spektroszkópiák, speciális igényeket kiszolgáló elektronikai, mechanikai és információ-technológiai eszközök, valamint szoftverek létrehozása és fejlesztése. A Magyar Euratom Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálta a szabályozott magfúziós energiatermelés megvalósításához hozzájáruló magyar kutatás-fejlesztési tevékenységet. Működtette és fejlesztette nagyberendezéseit, az EG-2R gyorsítót, a hozzá kapcsolt NIK nehézion-implantert, az MBE molekulanyaláb-epitaxia berendezést, a GINA polarizált neutron-reflektométert, a kutatást kiszolgáló Grid rendszerű és más nagykapacitású számítógépeit. 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.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Nagyenergiájú kísérleti részecske- és nehézion-fizika

A CERN nagy hadron ütköztetőjénél, az LHC-nél, 2011-ben folytatódtak a kísérletek 7 TeV energián. Az ütközési hozam több nagyságrenddel nőtt (5 fb^{-1} proton-proton (p+p) ütközés 7 TeV, és 80 millió Pb+Pb nehézion-ütközés 2,76 ATeV energián) és számos fizikai eredmény került publikálásra. A CERN LHC ALICE, ATLAS, CMS, TOTEM, a CERN ASACUSA és NA61, valamint a GSI FOPI, CBM és BNL RHIC PHENIX nemzetközi részecske- és magfizikai kísérletek magyar csoportjait továbbra is RMKI-s kutatók koordinálják.

A CMS-kísérlet detektorának a magyar csoport által épített és üzemeltetett része, a barrel-müon-detektor helyzetmeghatározó rendszere, 2011-ben végig hibátlanul működött. Az RMKI kutatói a korábbinál sokkal pontosabban és gyorsabban működő új algoritmust hoztak létre a szükséges modellszámítások elvégzésére, és sikeresen bekapcsolódtak a CMS nyom-követő rendszere elemeinek összehangolásába, ami a részecskepályák meghatározásának kulcskérdése. A CMS-kísérlet kvantumszíndinamikai (QCD) kutatócsoportjának eredményes-ségében – az év során 12 CMS QCD cikkük jelent meg – az intézet kutatóinak döntő szerepe volt, mivel a CMS kísérlet egész QCD-csoportját, valamint a spektrumokkal foglalkozó alcsoportot is RMKI-s munkatárs vezeti (convener). A magyar CMS-csoport tagjai vezető szerepet játszottak az ólom-ólom ütközéseknél fellépő gyakori események tulajdonságainak vizsgálatában is. A proton-proton ütközésekben korábban már sikeres pixel-számlálás

módszerét eredményesen alkalmazták a töltött hadronok multiplicitás-eloszlásának mérésében. Az eredményeket bemutatták a Quark Matter 2011 konferencián.
A magyar ALICE csoport tagjai a két- és három-jet események vizsgálatával a kvark- és gluon-jetek hadrokémiai tulajdonságait térképezték fel. Meghatározták az LHC energiákon várható részecskehozamokat p+p és Pb+Pb ütközésekben, valamint a Pb+Pb ütközésekben keletkezett erősen kölcsönható anyag sűrűségét és opacitását. Nagy impulzusokra megjósolták a barion/mezon és anti-barion/mezon arányokat. A VHMPID együttműködésben befejezték a HPTD (trigger modul) fejlesztését és tesztméréseket végeztek a megépített HPTD kamrákon. 2011-ben a magyar csoport adta az ALICE egyik Period Run koordinátorát.

Az ATLAS kísérletben az RMKI kutatói francia kollégákkal együttműködve a detektorrendszer modellezését végezték. Megvizsgálták, hogy az elektromágneses kaloriméter záróegységeiben (EMEC) a gravitáció hatására létrejövő mechanikai deformitások hogyan befolyásolják a mérési eredményeket. Elvégezték az elektronazonosítás optimalizálását, munkacsoport vezetőt adtak a J/ψ mezonok észlelésével végzett elektron-hatásfok mérésben.

A TOTEM kísérletben befejeződött a p+p szórás diffrakciós vizsgálata, meghatározásra került a rugalmas szórás differenciális hatáskeresztmetszete. A kis impulzusátadás tartományában elvégzett kísérlettel elsőként sikerült meghatározni a p+p ütközés teljes hatáskeresztmetszetét 7 TeV energián. Az RMKI kutatói jelentős szerepet játszottak az 5. ütközési pontnál található mágnesek terének kalibrálásában és a detektorvezérlő rendszer továbbfejlesztésében.

Az SPS NA61/SHINE kísérletben magyar tervezésű és gyártású az adatgyűjtő rendszer, ezért a hardver és a szoftver folyamatos fejlesztése is magyar feladat. 2011-ben 20-160 GeV energiájú protonokból és pionokból álló nyalábbal bombáztak szén és cseppfolyós-hidrogén céltárgyat. Befejezték a nagy statisztikájú adatgyűjtést, és megkezdték az adatok analízisét.

A CERN antiproton-lassítójánál tovább pontosították az anyag-antianyag szimmetriáját kimondó CPT-invariancia kísérleti ellenőrzését: antiprotonos héliumatomokban az antiproton mágneses momentumát lézer-mikrohullám-lézer hármas rezonancia módszerrel, az antiproton tömegét pedig energia átmenetek két, egymással szemben haladó lézersugár segítségével történő Doppler-mentes gerjesztésével mérték. Az antiprotonos hélium segítségével meghatározott antiproton tömegének pontossága hamarosan meghaladja a hagyományos módszerekkel mért protontömeg pontosságát. A nemzetközi CODATA adatgyűjtemény a CPT-invariancia feltételezésével az ASACUSA antiproton-tömegét is felhasználja a proton tömegének pontosabb meghatározásához.

Publikálták a LEP gyorsító L3 kísérletében vizsgált e^+e^- ütközések femtoszkópiai elemzését. A fő eredmény egy antikorrelációs tartomány kísérleti felfedezése az e^+e^- ütközések Bose-Einstein korrelációs függvényében, amely a részecskekeltés korábbi femtoszkópiai modelljeinek túlnyomó többségét kizárja ezen a területen. Egyben lehetővé vált a részecskesugarak téridőbeli fejlődésének helyreállítása. Eredményeik hatására a CERN LHC CMS kísérlet a publikált módszerrel az L3 eredményhez hasonló anti-korrelációs tartományt fedezett fel a 7 TeV-es p+p ütközések Bose-Einstein korrelációs adataiban is.

A CERN RD51 keretében, az RMKI és az ELTE együttműködésében (REGARD) kifejlesztett új típusú sokszálas gázdetektorok kiválóan szerepeltek a CERN-es tesztméréseken. Megtörtént az ALICE kísérlet VHMPID HPTD aldetektorához és az NA61 kísérlet új típusú TPC-jéhez készített prototípusok bemérése, ez utóbbi berendezés az év végén LMPD néven beépült az NA61 kísérletbe. A HPTD detektorból létrehoztak egy „kozmikus müon

tomográf”-ot. Ez a mobilis, energiagazdaságos és olcsó eszköz a világűrből érkező kozmikus sugárzás segítségével képes új barlangi üregek felfedezésére. A detektor az extrém természeti körülmények között is kiválóan működött a Molnár János és a Pilis Ajándék barlangokban.

A Virgo kutatócsoport kidolgozta a bespirálozó kettőscsillagok által kibocsátott gravitációs hullámok (GH) keresőalgoritmusának sokprocesszoros (GPUs) implementációját, amellyel az analízisek mintegy 150-szer gyorsabban futnak le. Így lehetővé vált újfajta, asztrofizikailag is releváns (spinnel rendelkező, excentrikus) csillagkettősök által kibocsátott GH-k vizsgálata.

Anyagtudomány kísérleti magfizikai módszerekkel

Saját kutatásaik számára, és külső felhasználók számára szolgáltatásként, a HIPP konzorcium, valamint a Budapesti Neutroncentrum részeiként üzemeltették az 5 MV-es EG-2R iongyorsítót, a NIK nehézion-implantert, a molekulanyaláb-epitaxia (MBE) berendezést valamint a GINA polarizált neutron-reflektométert. Kutatóik rendszeresen használják több nagy európai kutatási infrastruktúra mérőnyalábjait is.

Nemrezonáns rugalmatlan röntgenszórással (NRIXS) a stuttgarti Max Planck Intézettel együttműködésben a 2–9 nm^{-1} impulzusátadás-tartományban megmérték alkálifémek plazmonspektrumának nyomásfüggését 0 és 43 GPa között. A szabadelektrongázt talán legjobban közelítő Na esetén is eltérést találtak a mért és a szabadelektrongáz-modell szerinti nagynyomású viselkedésből jósolt értékek között. Az eredményeknek a DFT-számításokkal történt összevetése azt mutatja, hogy a növekvő nyomással a szabadelektrongáz-viselkedéstől való növekvő eltérés oka nem az elektronkorreláció, vagy a kicserélődési kölcsönhatás változása, hanem az elektron-ion kölcsönhatás növekedése.

Tisztázva a reciprocitás és az időtükrözés, valamint a reciprocitás és a 180°-os forgatás kapcsolatát, a reciprocitás fogalmának a szóráselmélet fogalmi rendszerén alapuló új értelmezését adták. Mössbauer-szórási példákat adtak nem-reciprok- és reciprok-viselkedésre. Reciprocitás-tételük alkalmazásával magyarázatot adtak az ún. diffúz ω-szkenek aszimmetriájára.

Az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetével közösen eljárást dolgoztak ki nanoszerkezetek méretének, alakjának és összetételének meghatározására mm átmérőjű ionnyalábbal végzett Rutherford-visszaszórás segítségével. A technika alkalmazhatóságát SiO_2 nanogömbökön végzett kísérletekkel igazolták. Az ún. nanogömb-litográfia alkalmazásával, azaz SiO_2 nanogömbök monorétegét besugárzó maszkként alkalmazva, a merőleges mágneses anizotrópiájú FePd vékonyrétegben szabályos laterális mágneses mintázatot hoztak létre.

Ionbesugárzással eredményesen sikerült csökkenteniük neutrontükör-bevonatok belső feszültségét a neutronoptikai és polarizációs tulajdonságok jelentéktelen romlása mellett. Elméleti eredményeik alkalmazásaképpen új típusú neutron monokromátor, illetve sávszűrő rétegrendszereket dolgoztak ki, amelyek a közeljövőben partner vállalatnál ipari alkalmazásba kerülhetnek.

Polarizált neutron-reflektogramok alapján összehasonlították a Fe és a Co hatását a vele kontaktusban lévő szupravezető vanádiumban indukált mágneses réteg keletkezésében. A GINA reflektométerhez rádiófrekvenciás adiabatikus spinflippert fejlesztettek.

Az RMKI Van de Graaff-gyorsítójának levegőre kihozott milli-nyalábjával végzett PIXE méréseik fontos és rendszeresen igényelt részévé váltak a CHARISMA EU FP7 kutatási programnak. Egy ilyen, több ezer éves vas műtárgyakkal kapcsolatos vizsgálat egyik fő következtetése éppen a PIXE mérések által szolgáltatott eredményeken alapszik.

Elméleti fizika

A kutatók a részecske- és magfizika alapkutatási kérdéseivel, és ezzel összefüggésben kvantumtérelméleti, relativitáselméleti és statisztikus fizikai problémák megoldásával foglalkoznak. Így folytatták az AdS/CFT korrespondencia vizsgálatát a termodinamikai Bethe Ansatz (TBA) módszerrel. Vizsgálták a TBA egyenletekben szereplő függvények analitikus tulajdonságát, és NILE egyenletekké való átalakítását. Az első eredményeket publikálták.

Kidolgozták a komplex trigonometrikus Ruijsenaars-Schneider rendszer két különböző valós formája között fennálló dualitási reláció geometriai értelmezését. A relációt a klasszikus hamiltoni redukciós módszer Poisson-Lie általánosításával értelmezték. Ebben a képben magától értetődővé vált az a fontos állítás, hogy a dualitást egy kanonikus transzformáció reprezentálja, és a Poisson-Lie csoportok kvantálása révén adódó kvantumcsoportok trigonometrikus Ruijsenaars rendszerekben játszott szerepe is természetes magyarázatot nyert.

A bimonádok kutatása során definiálták a „gyenge bimonádokat”. Igazolták, hogy bármely Cauchy-teljes fonott monoidális kategóriában minden gyenge bialgebra indukál egy gyenge bimonádot, illetve jellemezték is az így előálló bimonádokat. Ezen kívül definiálták a jobb illetve bal Hopf-monádok gyenge megfelelőiként a jobb illetve bal gyenge Hopf-monádokat. Igazolták, hogy egy Cauchy-teljes fonott monoidális kategóriában egy gyenge bialgebra pontosan akkor indukál jobb Hopf-monádot (a jobbról való tenzor szorzás révén), ha maga gyenge Hopf-algebra, és pontosan akkor indukál bal Hopf-monádot is, ha antipódja bijektív.

Az Einstein-elmélet poszt-Newtoni közelítésében egy új korrekciót fedeztek fel, amely aszimptotikusan sík téridőben a térbeli végtelenben az Arnowitt-Deser-Misner energiához tart. Ez a tag gömbszimmetrikus téridőben pozitív, és eltűnése jellemzi a téridő sík voltát.

Megvizsgálták az akkréciós folyamatokat a Preston-Poisson téridőben. Megmutatták, hogy az akkréciós diszk sugara csökken és a marginálisan stabil pályák a perturbációk hatására eltolódnak a fekete lyuk irányába, továbbá az akkréciós diszk sugárzási intenzitása nő és spektruma kékeltolódást szenved. Megmutatták, hogy a perturbációk hatására az akkréció során csökken a tömeg elektromágneses sugárzássá történő átalakulásának hatékonysága.

A nehézion ütközésekben gyors hadronizációt és kifagyást feltételezve tanulmányozták a hadronok kollektív folyásában tapasztalható kvark szám skálázást. Felismerték, hogy a v1-es folyás jellege megváltozik, és pozitív irányba fordul a magasabb LHC energiákon. Vizsgálták, hogy az ütközésben résztvevő nukleonok számának kezdeti véletlen fluktuációja miatt mekkora a tömegközéppont rapiditásának fluktuációja és a v1-es folyás változása.

A frankfurti Goethe Egyetem kutatóival szoros együttműködésben megvizsgálták az erősen kölcsönható anyag egy effektív modelljének, a vektor mezonokkal kiterjesztett három „flavour”-os lineáris szigma modellnek nulla hőmérsékleten mérhető tulajdonságait. Meghatározták a spontán sértett elméletből származtatható vektor-mezon spektrumot.

Termodinamikai rendszerek hőmérsékletét vizsgálva megmutatták, hogy a Tsallis-féle kompozíciós szabály esetén mi a feltétele a különböző q-paraméterű rendszerek egyensúlyának.

A Regge elméletben a diffrakció egy pomeron elnevezésű objektummal írható le. A QCD-ben ezt a jelenséget rendszerint egy végtelen gluon lépcsőből álló Feynman típusú diagrammal azonosítják. Az RMKI kutatói – ettől a megközelítéstől eltérő újszerű módszerként – sikerrel alkalmaztak véges számú lépcsőből álló diagramm-technikát a diffrakció leírására.

Plazmafizika és hűtött atomok fizikája

Az RMKI kutatói az általuk kifejlesztett lítium nyalábon alapuló nyalábemissziós spektroszkópia (NyES) segítségével részletes vizsgálatokat végeztek a TEXTOR tokamakon, amelyek kvantitatív eredményei az ELM-ek kialakulásának megértéséhez járulnak hozzá. A TEXTOR tokamakon végzett plazmaturbulencia kísérletek eredményeként meghatározták a Geodesic Acoustic Mode térbeli szerkezetét és viselkedését ergodikus perturbációk esetén. Az angol CCFE fizikusaival közösen egy kétdimenziós turbulencia mérő NyES rendszert fejlesztettek ki és installáltak a MAST szférikus tokamakon. 2011-ben a kísérleti berendezések végső kalibrációja, és az adatgyűjtő és vezérlő szoftverek kifejlesztése után meghatározták a MAST teljes kis sugara mentén mérhető turbulencia fluktuációs amplitudót, a turbulens struktúrák jellemező élettartamát, illetve poloidális és radiális korrelációs hosszát. Ily módon a struktúrák terjedése is követhető, amiből az áramlási sebességre, illetve annak változásaira lehet következtetni. A szélplazmában elsősorban az L-H átmenet kialakulását, és a turbulens struktúrákra való hatását vizsgálták. A koreai KSTAR szupravezető tokamakra felépítettek egy prototípus NyES mérést, aminek a segítségével meghatározták a turbulencia tulajdonságait. A 2010-ben kezdődött koreai-magyar együttműködésben keretében sor került a KSTAR fűtőnyalábjára telepített egyszerűsített NyES rendszer tervezésére, kivitelezésére és helyszíni beüzemelésére is. A sikeres munka elismeréseként az év során az RMKI-ban megalakult a koreai-magyar közös fúziós laboratórium.

Az ASDEX Upgrade tokamakon üzemeltetett diagnoszikai kamera rendszerükbe sikeresen integráltak két ultragyors CMOS kamerát (Photron SA5, EDICAM), és megfigyelték, hogy a pellet és látható sugárzást kibocsátó felhője együtt mozog. A magyar pellet kamera megfigyelő rendszer segítségével azt is megállapították, hogy a pelletek ablációja nem különbözik 1-es típusú ELMi is mágneses perturbált (ELM mentes) H-módokban.

Az RMKI és a BME-NTI kutatói a holland ITER-NL csoporttal együttműködve megvizsgálták egy fluktuációs NyES berendezés beépítésének lehetőségét a dél-franciaországban épülő ITER kísérleti fúziós erőműbe. A prototípus spektrométeren szerzett tapasztalatok szükségesek ugyanis annak eldöntéséhez, hogy az ITER-en működhet-e a CXRS diagnosztika ilyen irányú bővítése.

A *hideg plazma és atomfizika erős terekben* témakörben rövid lézerimpulzusok és többszintű atomok kölcsönhatását vizsgálták. Kiemelten tanulmányozták a populáció-átvitel, a koherens szuperpozíciós állapotok létrehozásának lehetőségeit erős térben, és az atomok mechanikai mozgatását rövid lézerimpulzusokkal.

Új sémát javasoltak az alapállapot és gerjesztett állapot közötti szuperpozíció extrém robusztus létrehozására rövid lézerimpulzus párral lambda szerkezetű atomban. Eredményeik azt mutatják, hogy el lehet érni a koherencia maximális értékét (0,5) az alap és a gerjesztett

atomi állapot között. Az ilyen koherensen előkészített anyagban jelentősen csökken a küszöbintenzitás a lézerplazma generálásnál, a különböző nemlineáris keverési folyamatokban, valamint a Raman oldalsávok előállításánál gázokban és szilárdtestekben.

Kidolgoztak egy olyan új modellt, amelyben a populáció és koherencia kontrolljával optikai információ írható atomi rendszerekbe frekvencia-csörpölt lézerimpulzusok sorozatával. A módszer új utakat nyit meg optikai fázis és amplitúdó információ beírására és kezelésére hosszú élettartamú atomi alapállapotokban. Az információ könnyen kiolvasható egy ezt követő „kiolvasó" lézerimpulzus Raman szórásával.

A Max-Planck-Institut für Quantenoptik intézettel közösen elvégeztek egy kísérletsorozatot, amelyben mérsékelt lézerenergián kollimáltan haladó, a relativisztikusan oszcilláló tükör (ROM) mechanizmussal szilárdtest-plazma felületen keltett magas harmonikusokat figyeltek meg. Abszolút méréssel meghatározták a harmonikusokba történő konverziós hatásfokot, ami egy átlagos harmonikusra ~10^{-4}-nek adódott. A módszer lehetővé teszi a néhány ciklusú lézerrel keltett, egyedülálló attoszekundumos impulzusba való konverzió megvalósítását is.

Megvizsgálták az optikai kristályokba ültetett ritka-földfém ionok és lézerimpulzusok kölcsönhatását, és kidolgoztak egy modellt, amely az ionok belső állapotát, valamint a kristályrácsban végzett rezgési állapotait is tartalmazza. A lézerimpulzusok kristályban való terjedését így vizsgálva megállapították, hogy egyetlen lézerimpulzus terjedésekor a kristályba ültetett ritka-földfém ionok közegében is létrejön önindukált átlátszóság.

A frekvenciamodulált lézer központi frekvenciájának stabilizálásával lehetővé tették az impulzusok frekvencia-menetének pontosabb beállítását. Az előzetes elméleti számítások alapján a frekvenciacsörp és intenzitás optimális beállításától nagyobb gyorsító hatás fellépését várják. A mérésekben tanulmányozott, nagyintenzitású lézerterek és hűtött atomok kölcsönhatásakor fellépő folyamatok vizsgálatának eredményei hasznosak lesznek a jövőbeli ELI-ALPS lézerrendszerrel végzendő nagyobb léptékű kísérletekhez.

Űrfizika és űrtechnika

Véglegesítették a Nemzetközi Űrállomásra kerülő Plazma Hullám Mérőrendszer három számítógépből álló adatgyűjtő szoftverét és sikeresen lezajlott a repülőpéldány tesztelése Moszkvában. Befejezték a tartalék repülőpéldány gyártását és kiszállították Moszkvába. Az év során elkészítettek és leszállítottak hat speciális konténert. A konténerekkel a tudományos adatokat tartalmazó adattároló egységek szállítása történik az űrállomásról a Földre.

Elkészült a 2014-ben a Merkur kutatására induló ESA szonda, a BepiColombo PICAM (Planetary Ion Camera műszer) kísérlet tápegység elektronikájának az elektromos modellje, majd a kvalifikációs példánya, és átadták azokat a kísérlet integrálásáért felelős grazi Institut für Weltraumforschung (IWF) kutatóinak.

A Cassini űrszonda CAPS nevű plazma műszerének adataira támaszkodva megvizsgálták a Szaturnusz magnetoszférájának egyenlítői régiójában elhelyezkedő, és a magnetoszféra tulajdonságait jelentősen befolyásoló plazma struktúra, az ún. „mágneses lemez" szerkezetét. Kiderült, hogy a mágneses és elektron adatokban egységesnek tűnő mágneses lemeznek valójában finomstruktúrája van, amely az ion adatok alapján megismerhető. Az új eredmények arra utalnak, hogy a plazma oxigén-tartalmú nehezebb ionjai rendkívül keskeny

tartományban helyezkednek el a mágneses egyenlítő körül, és ez a lepel „fodrozódik”, időnként visszahajlik, rétegeket alkot.

Kidolgoztak egy olyan modellt, amely képes leírni a Szaturnusz magnetoszférájának a fentiekben leírt szerkezetét. Kiderítették, hogy a bolygóval és annak mágneses terével együtt forgó plazmára ható mágneses és centrifugális hatások képesek létrehozni a megfigyelt struktúrákat abban az esetben, ha figyelembe veszik, hogy a plazma nincs termikus egyensúlyban, továbbá ha figyelembe veszik a plazma semlegességét biztosító ambipoláris elektromos tér hatásait is. Az így kialakuló sűrű plazma visszahat az őt csapdába ejtő mágneses mezőre, tovább erősítve a folyamatot. Az elméleti eredményeket numerikus modellezéssel is alátámasztották.

Az Ulysses űrszonda mérései szerint a csillagközi eredetű porszemcsék iránya 2005-ben kb. 30 fokkal déli irányba tolódott el a korábbi irányhoz képest, amire eddig nem született kielégítő magyarázat. Ennek a problémának a megoldására kifejlesztettek egy dinamikai modellt, ami képes számot adni a megfigyelésekről. Megmutatták, hogy a részecskék irányának eltolódásáért a bolygóközi tér elektromos tere a felelős, mert elhajlítja az elektromosan töltött 0,2-0,3 mikron méretű porszemcsék trajektóriáit. Mivel az elektromos tér iránya függ a Nap mágneses terének polaritásától (fókuszáló/defókuszáló tér), az eltérítés iránya is időfüggő lesz.

Megvizsgálták a napszélbe befagyott mágneses fluxus térbeli és időbeli változásait a helioszféra különböző helyein tartózkodó űrszondák mágneses tér mérései alapján. A mágneses fluxus bonyolult, komplex módon változik a Naptól mért távolság, a Nap aktivitása, és a napszél sebességének függvényében. Megállapították, hogy a változások nagy része az átlagos mágneses térre rárakódó fluktuációk következménye, amelyek hatása kiküszöbölhető. Ennek alapján új számítási módszert vezettek be a helioszféra mágneses fluxusának meghatározására, amellyel a 11 éves napciklus során végbemenő változások jól tanulmányozhatók, akár időben visszafelé is az űrkorszak kezdetéig. A vizsgálatokból megállapították, hogy a mágneses fluxus sűrűségének abszolút értéke nem függ a heliografikus hosszúságtól és szélességtől, a fluxus egyenletesen terül szét a helioszférában.

Biofizika

A mikroelektróda rendszerekkel mért elektromos potenciálok elemzésére kidolgozott módszerük alkalmazásával olyan jelenségeket figyeltek meg az idegsejteken, méghozzá az akciós potenciálok során *in vivo*, amelyeket korábban csak *in vitro* optikai mérésekkel tudtak kimutatni. Így többek között akciós potenciálok visszaterjedését a bazális dendritekbe és az akciós potenciált megelőző, előre terjedő áramforrás hullámokat.

Összehasonlították a stimulus által kiváltott- és spontán neurális aktivitást az agykérgi jelfeldolgozás bayesi modellje segítségével levont következtetésekkel és feltételezésekkel, és azt jósolták, hogy ha a modell optimális, akkor a kettőnek egyeznie kell. A jóslatukat éber görények látókérgi aktivitásának elemzésével igazolták. Az elért eredmények a Science-ben kerültek publikálásra, jelentős nemzetközi és hazai visszhangot kiváltva.

Megvizsgálták a dendritfa szerepét idegsejtekből álló hálózatokban és kimutatták, hogy ha az idegsejtek membránpotenciálja korrelált, és a sejtek digitális jelekkel kommunikálnak, akkor a számítások hatékony kivitelezéséhez nemlineáris dendritfára van szükség még akkor is, ha a számítás maga lineáris. Megmutatták, hogy az elméletből levezethető kölcsönhatások nagyon

hasonlítanak az idegsejtek dendritfájában mérhető nemlineáris hatásokra, illetve azt, hogy a modell segítségével a posztszinaptikus sejt dendritfájának tulajdonságai alapján megjósolhatóak a hozzá kapcsolódó preszinaptikus sejtek egyes tulajdonságai.

Irányított jeltovábbító hálózatokban meghatározták a szerkezet által meghatározott kauzalitás és a hálózatelemek funkcionális szerepe közötti kapcsolatot. Az eredményeket valós hálózatokra alkalmazva kiszámolták a meghatározó elemek eloszlását preferenciális mechanizmussal növesztett hálózatok esetén. Megmutatták, hogy valós hálózatokra a funkcionális csoportok között a kapcsolatrendszer nagy léptékben véletlenszerű, kis léptékben kevésbé az.

Informatika, e-tudomány (e-science)

A Worldwide LHC Computing Grid együttműködés keretében továbbfejlesztették az RMKI BUDAPEST grid állomást, amely 2011 végére 500 processzorral és 291 Terabyte tárolókapacitással rendelkezett, és az év folyamán 96% fölötti megbízhatósággal (rendelkezésre állással és elérhetőséggel) működött. Ezzel az állomás a közel száz hasonló Tier-2 központ között egyike volt a legeredményesebbeknek, a CMS kollaborációban érintett ötven központ közül pedig az előkelő negyedik helyen szerepelt.

Az RMKI grid állomás részt vett az EU FP-7 EGI-InSPIRE projektjében, és ennek keretében a magyar Nemzeti Grid Iniciatíva (NGI) kialakításában, működtetésében és fejlesztésében is kulcsszerepet töltött be. A magyar NGI erőforrásainak túlnyomó részét, az összes központi szolgáltatást, továbbá az operatív feladatokat és a technikai koordinációt az RMKI grid csoportja nyújtotta.

2011-ben elkészítették a Mobil SegítőTárs rendszer portálásának első fázisát a Windows Mobile operációs rendszerről Android operációs rendszerre. Ehhez részben egy szabad forráskódú Text-to-Speech programot használtak (eSpeak), amelynek hibáit is ki kellett javítani, részben pedig a BraiLab TTS-t portálták.

Sikerült a telefon, névjegyzék, SMS ill. a diktafon felvevő és lejátszó programokat elindítani, valamint a power management, a ki-bekapcsolás és a braille maszk kezelését megoldani. A programokat három különböző sebességű gépen és kétféle verziószámú Androidon is tesztelték. A maszkok tervezését saját kézbe vették.

A morse nyelv tanulásának folyamatát autista és nem autista személyeken tesztelték különböző hangkép sebességekkel. Befejezték az elektronikus akadálymentesítés monitorozását. Részt vettek az IASTED konferencia programbizottságának munkájában.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az RMKI kutatói tevékenyen részt vettek a középiskolai és felsőoktatásban. Rendszeres egyetemi előadásaik mellett a középiskolásoknak 2011-ben is megszervezték a CERN-központú nemzetközi részecskefizikai diákműhelyt az RMKI-ban, és a középiskolai fizikatanárok továbbképzését a CERN-ben. A nagy érdeklődésre való tekintettel még két további diákműhelyt is szerveztek, egy elméletit és egy kétnapos kísérletit, és mindkét alkalommal videokonferenciás beszélgetést biztosítottak a diákok számára a CERN-ben dolgozó magyar fizikusokkal. Számos ismeretterjesztő cikket írtak és előadást tartottak fizikatanári ankétokon és középiskolákban.

Számos előadást tartottak hazai középiskolákban, illetve az általuk szervezett természettudományos önképzőkörökben és azok nyári táboraiban (Berze TÖK, Dobó TÖK, Batthyány Lajos Gimnázium), és egyéb fórumokon, amelyek célja a tudományterület ismertetése (egyelőre) laikusokkal. Az intézet egyik munkatársa meghirdette a Magyar Természettudományos Önképzőkör Mozgalmat is. Ezen kívül a kutatóknak több olyan cikke is megjelent hazai folyóiratokban, amelyeknek a célközönsége nem a tudós társadalom, hanem a laikus közönség (pl. Természet Világa).

Az intézet kutatóival 2011-ben több mint 15 interjút készítettek kutatásaikkal kapcsolatban, ide értve magyar tudományos és ismeretterjesztő szaklapokat, hírportálokat, az MTV, az MR és az Info Rádió különböző műsorait, valamint olyan külföldi médiumokat is, mint például a CERN Courier. Előadással vettek részt az MTA Rutherford emléknapján, egynapos szimpóziumon mutatták be a GINA neutronreflektométert.

Nagy érdeklődést váltott ki a 2011-ben hetedik alkalommal megrendezett Simonyi Nap. Az RMKI kutatói, az intézet dolgozói és a szélesebb közönség előtt (120 résztvevő) közérthető nyelven számoltak be legújabb kutatási eredményeikről.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Hazai kapcsolatok

Az RMKI aktív szakmai kapcsolatot tart fenn számos MTA kutatóintézettel, elsősorban a KFKI Telephely kutatóintézeteivel, valamint az ATOMKI-val. Így az RMKI az SZFKI-val, az AEKI-vel és az MFA-val együtt alkotja a KFKI Condensed Matter Research Center (CMRC) konzorciumot, az SZFKI-val, az AEKI-vel és az IKI-vel a BNC konzorciumot. A BNC-n belüli SZFKI-IKI-RMKI konzorcium alkotja a CHARISMA (Cultural Heritage Advanced Research Infrastructures: Synergy for a Multidisciplinary Approach to Conservation/Restoration) EU FP7 projekt egyik FIXLAB platformját, amelynek sokoldalúságát az RMKI a kihozott nyalábos PIXE mérések lehetővé tételével növeli. A hagyományosan erős ATOMKI kapcsolatokat a nagyenergiájú fizika területén közös pályázatok, a hazai ionnyaláb-fizikai berendezések hatékonyabb működtetése és fejlesztése céljából létrehozott „Magyar ionnyaláb-fizikai platform" (Hungarian Ion-beam Physics Platform, HIPP, http://hipp.atomki.hu/) és a European Centre for Theoretical Studies in Nuclear Physics and Related Areas (ECT, Trento, Olaszország) tevékenységében való együttes részvétel céljából megalakított „ECT-Hungary" konzorcium fémjelzik. Az RMKI aktív munkakapcsolatokat tart fenn a KK, a SZTAKI, a Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet és az SZBK kutatóival is. Az RMKI SzHK az NIIF program regionális központja. Az RMKI tagja a Magyar Grid Kompetencia Központnak is, amelynek további tagjai a BME, az ELTE, az NIIFI és a SZTAKI.

Az RMKI egy-egy munkatársa az elnöke a széles magyar tudományosság számára elérhető Nemzetközi Elméleti Fizikai Műhelynek (NEFIM) és a Szinkrotron Bizottságnak. Ezen testületek adminisztratív és pénzügyi feladatait is az RMKI látja el.

2011-ben tovább folytatódott a Szegeden épülő Extreme Light Infrastructure (ELI) beruházás előkészítése, az attoszekundumos lézer berendezés építése. Az RMKI kutatócsoportjai együttműködnek az ELI-ben részt vevő magyar egyetemekkel, így a SZTE-el, PTE-el, és BME-el, valamint az SZFKI-val, és tagjai lettek a nyertes HELIOS projektnek is.

Az RMKI kutatói másodszor rendeztek szimpóziumot az intézetben a grafikus processzorok tudományos kutatásokban való alkalmazhatóságáról (25 résztvevő) a terület magyar szakértőinek részvételével.

Az RMKI számos munkatársa tisztségviselője vagy tagja különféle akadémiai bizottságoknak és testületeknek, NIH-bizottságoknak, az Eötvös Loránd Fizikai Társulatnak, különböző szakmai kuratóriumoknak, a hazai űrkutatás irányító testületeinek, stb.

Felsőoktatás

Az intézeti kutatócsoportok utánpótlásának biztosítása érdekében az RMKI kiemelkedő fontosságot tulajdonít a felsőoktatási intézményekkel kialakított szoros kapcsolatoknak. Nagyon fontos az egyetemi oktatásban való intézeti részvétel, BSc szinten a tudományos diákköri témák, MSc szinten a diplomamunkák, PhD szinten a doktori témák felajánlása és a kiválasztott témák vezetése. Az RMKI különösen szoros kapcsolatot ápol az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME TTK-n folyó mérnök-fizikus képzéssel, valamint a debreceni, a gödöllői, a szegedi és a pécsi egyetemek fizikai intézeteiben folyó oktatással. 2011-ben mintegy 1300 órányi tananyagot adtak át a kurzusra bejelentkező diákoknak, valamint emelt szintű kísérleti laborgyakorlatot tartottak magfizikai és biofizikai témákban. Doktori iskolák törzstagja 12 RMKI-s kutató, további 7 munkatárs témavezetőként tevékenykedik. Az RMKI kutatóinak aktivitása eredményeképpen 2011-ben 7 TDK-dolgozatot, 6 BSc- és 8 MSc-dolgozatot nyújtottak be az intézettel kapcsolatban lévő diákok, valamint 3 PhD-dolgozat megvédésére került sor. Jelenleg 14 PhD-dolgozat készül az intézetben. A kutatók részt vesznek az egyetemi bizottságok munkájában. 2011 során 3 RMKI-s kutató kapta meg az MTA doktora címet.

Nemzetközi kapcsolatok

Az RMKI-ban szinte valamennyi kutatás nemzetközi együttműködések keretében folyik, a legfontosabb szálak a CERN-hez, az ESA-hoz és az EURATOM-hoz kapcsolódnak, továbbá 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. Az RMKI kutatói aktív részvételével az elkövetkező években is fontos eredmények várhatók a kvark-gluon plazma előállítását megcélzó PHENIX és az ALICE nagyenergiás magfizikai kísérletekben. Külön kiemelendő az a tény, hogy az LHC CMS együttműködésben a QCD munkacsoport társ-koordinátora két évig az RMKI kutatója. Az RMKI kutatói továbbra is fontos szerepet játszanak a neutrinó tömegét mérő KATRIN (Németország) részecskefizikai kísérletben. Az RMKI kutatói aktívan részt vesznek a gravitációs hullámokat mérő olaszországi VIRGO kísérletben. A kutatók fontos szerepet kapnak a külföldi, elsősorban európai nagyberendezések (szinkrotronok, iongyorsítók, neutronforrások, tokamakok, sztellarátorok) mellett végzett, vagy azok létrehozására irányuló (pl. ITER, ELI) kutatásban. 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, amelyek között a megfelelő szakterület legnevesebb intézményei szerepelnek, felsorolásuk messze meghaladná a beszámoló kereteit. Ezen túlmenően azonban az eredmények elérésében nagy szerepe volt az MTA bilaterális kapcsolatain alapuló megállapodásoknak és a TéT-együttműködéseknek. Ezek megújítása nagyon fontos lenne, ebből a szempontból a 2011 nehéz év volt. Az RMKI a magyar fúziós programot a Magyar

EURATOM Fúziós Szövetség vezetőjeként koordinálja, és a többi magyar intézmény (AEKI, Széchenyi Egyetem, ATOMKI, BME, ELTE, Dunaújvárosi Főiskola) az RMKI közvetítésével vesz részt ebben a munkában. Az RMKI kutatói ezen a területen is számos nemzetközi bizottságban tevékenykednek, és már a mostani fázisban bekapcsolódtak a világ leendő első fúziós reaktorának, az ITER-nek a tervezési munkáiba.

2011-ben tizenegyedszer rendezték meg a „Zimányi Winter School on Heavy Ion Physics" nehézion-fizikai iskolát, amely a kutatási terület egyik fontos nemzetközi rendezvényévé vált (50 résztvevő). 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.

Az RMKI kutatói 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, a NUPECC bizottság, az EURATOM Scientific and Technical Committee, az EFDA Science and Technology Advisory Committee (vice-chair), a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (IAEA) szakértői bizottságai, a Joint Undertaking for ITER Governing Board, az EFDA Steering Committee, az Európai Fizikai Társulat (EPS), az Int. Astronautical Academy (Board of Trustees, International Space Science Committee), a COSPAR, az European Science Forum on Research Infrastructures, az Európai Bizottság mellett működő FP7 Research Infrastructures programbizottság, a IUPAP, a COST DC MPNS (Domain Committee for Materials, Physcial and Nanosciences), a COST TDP SAB (Trans-Domain Proposals Standing Assesment Body), az ESF Standing Committee for Physics and Engineering (PESC), a European Neural Network Society Executive Committee, a EuGridPMA (European Policy Management Authority for Grid Authentication), és a Linux kernel Netfilter/IPtables komponensének fejlesztését végző nemzetközi munkacsoport.

Az RMKI számos munkatársa nemzetközi folyóiratok referense, több kutatója tagja nemzetközi folyóiratok szerkesztő és tanácsadó bizottságának, nemzetközi konferenciák tanácsadó vagy programbizottságának, külföldi kutatóintézetek tudományos tanácsának és referensi bizottságainak. Az RMKI kutatóinak elismertségét nemcsak a számos konferencia-előadásra szóló meghívás jelzi, hanem a rangos nemzetközi bíráló-bizottsági részvételre szóló ismételt felkérések is (pl. ERC Advanced Grant Evaluation Panel, ERC Starting Grant remote evaluation, COST Proposal Evaluation Board, CNRS, stb.).

Az RMKI megalapította a „Zimányi Medal on Nuclear Theory" érmet, amelyet első ízben a Quark Matter 2011 konferencián nyújtottak át a felkért nemzetközi bizottság által kiválasztott fiatal japán tudósnak. A Varga Imre szobrászművész által készített éremhez a Zimányi család pénzjutalmat társított.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az RMKI-ban folyó kutatások anyagi fedezetét az MTA költségvetési támogatása és a korábban elnyert külső források nyújtották 2011-ben is. Ez utóbbiak nagysága erőteljesen csökkenni kezdett: sem 2011-ben, sem 2010-ben nem került sor hazai K+F pályázatok

kiírására, a korábban említett sikeres projekteket még 2009-ben hirdették meg. Kivétel volt az OTKA. 2011-ben két OTKA-pályázat nyert 96 és 26 millió Ft támogatást, valamint egy kutató a hővezetés kísérleti és elméleti vizsgálatára a BME-vel közösen nyert el támogatást.

Az NKTH átszervezésével kapcsolatos bonyodalmak 2011-ben megoldódtak, a korábban elnyert támogatások folyósítására (esetenként komoly ellenőrzések elvégzése után) lényegében minden esetben sor került. Új pályázatok kiírása azonban nem történt meg, ami jelentős mértékben visszavetette az intézetben folyó K+F tevékenységet. Ugyanakkor egy korábban, még az NKTH által támogatandónak ítélt TéT Magyar–Dél-Afrikai projekt elkezdődött. Sikeresen zajlanak a TéT Magyar–Szerb és Magyar–Vietnami projektek.

Az MTA és a koreai KRFC által kiírt pályázaton nyerve az intézetben létrejött a Koreai – Magyar Fúziós Közös Laboratórium. A svájci NSF SCOPE pályázatán a kutatók elnyertek egy jelentős összegű kutatási támogatást a zürichi ETH intézettel való együttműködésre, a CERN CMS-ben való közös svájci-magyar kutatások finanszírozására. Az EU FP7 program keretében továbbra is támogatást kap az EGI InSPIRE projekt, amelynek célja a nemzetközi grid-technológia fejlesztése. Résztvevői a Magyar Grid Kompetencia Központ tagjai, köztük az RMKI. A CHARISMA EU FP7 projekt pénzügyi támogatása is folytatódott 2011-ben, ezzel lehetővé vált az érdemi munka folytatása. Az RMKI folytatta a Plan for European Cooperating States (PECS) keretében támogatott űrkutatási tevékenységét a „Participation in the Assessment Study for the Jupiter Ganimede Orbiter" projektben.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Diósi L: A Short Course in Quantum Information Theory - An Approach From Theoretical Physics (2nd edition) Lecture Notes in Physics, Vol. 827: Springer, Berlin (2011)

2. Hori M, Sótér A, Barna D, Dax A, Hayano R, Friedreich S, Juhász B, Pask T, Widmann E, Horváth D, Venturelli L, Zurlo N: Two-photon laser spectroscopy of antiprotonic helium and the antiproton-to-electron mass ratio. Nature 475: 484-488 (2011)

3. Friedreich S, Barna D, Caspers F, Dax A, Hayano RS, Hori M, Horváth D, Juhász B, Kobayashi T, Massiczek O, Sótér A, Todoroki K, Widmann E, Zmeskal J: First observation of two hyperfine transitions in antiprotonic 3He. Physics Letters B 700: 1-6 (2011)

4. Khachatryan V, ... Aranyi A, Bencze G, Boldizsár L, Debreczeni G, Hajdu Cs, Horváth D, Kapusi A, Krajczar K, László A, Sikler F, Vesztergombi G, Pásztor G ... (2172 szerző): First measurement of the cross section for top-quark pair production in proton-proton collisions at sqrt(s)=7 TeV. Phys.Lett. B695: 424-443 (2011)

5. Varga D, Hamar G, Kiss G: Asymmetric multi-wire proportional chamber with reduced requirements to mechanical precision. Nucl. Instrum. Meth. A 648: 163-167 (2011)

6. Vértesi R, Csörgő T, Sziklai J: Significant in-medium eta' mass reduction in sqrt(s(NN))=200 GeV Au+Au collisions at the BNL Relativistic Heavy Ion Collider. Phys.Rev.C 83: 054903 (2011)

7. Merkel DG, Bottyán L, Tanczikó F, Zolnai Z, Nagy N, Vértesy G, Waizinger J, Bommer L: Magnetic patterning perpendicular anisotropy FePd alloy films by masked ion irradiation. J Appl Phys 109: 124302 (2011)

8. Zolnai Z, Nagy N, Deák A, Battistig G, Kótai E: Three-dimensional view of the shape, size, and atomic composition of ordered nanostructures by Rutherford backscattering spectrometry. Physical Review B 83: 233302 (2011)

9. Loa I, Syassen K, Monaco G, Vankó G, Krisch M, Hanfland M: Plasmons in sodium under pressure: Increasing departure from nearly free-electron ehavior. Phys Rev Lett 107: 086402 (2011)

10. Kocsonya A, Kovács I, Szőkefalvi-Nagy Z: Comparison of the detection limits in the analysis of some medium atomic number elements measured with a portable XRF and an external proton beam PIXE spectrometer system. X-Ray Spectrometry 40: 420-423 (2011)

11. Biro TS, Van P: Zeroth Law compatibility of non-additive thermodynamics. Physical Review E 83: 061147 (2011)

12. Lévai P: Jet energy loss in heavy ion collisions from RHIC to LHC energies. Nuclear Physics A862-863: 146 (2011)

13. Fehér L, Klimcik C: Poisson-Lie interpretation of trigonometric Ruijsenaars duality. Commun. Math. Phys. 301: 55–104 (2011)

14. The L3 Collaboration (Achard P, Csörgő T, Kittel W, Metzger W, Novák T et al.): Test of the τ-Model of Bose-Einstein Correlations and Reconstruction of the Source Function in Hadronic Z-boson Decay at LEP. Eur.Phys.J. C71: 164 (2011)

15. Rácz I, Tóth GZs: Numerical investigation of the late-time Kerr tails. Class. Quantum Grav. 28: 195003 (2011)

16. Berkes P, Orbán G, Lengyel M, Fiser J: Spontaneous Cortical Activity Reveals Hallmarks of an Optimal Internal Model of the Environment. Science, 331(6013) 83-87

17. Bányai M, Diwadkar V, Érdi P: Model-based dynamical analysis of functional disconnection in schizophrenia. NeuroImage 58(3): 870-877 (2011)

18. Sándor N, Bakos JS, Sörlei Zs, Djotyan GP: Creation of coherent superposition states in inhomogeneously broadened media: Application in optical information writing and storage. J. Opt. Soc. Am. B 28: 2785-2796 (2011)

19. Tál B, Bencze A, Zoletnik S, Veres G, Por G: Cross-correlation based time delay estimation for turbulent flow velocity measurements: Statistical considerations. Phys. Plasmas 18: 122304 (2011)

20. Craciunescu T, Lang P, Murari A, Szepesi T, Kálvin S, Kocsis K, Alonso A, Tiseanu I, Zoita V and JET EFDA Contributors: Determination of Pellets Parameters by Image Processing Methods. Fusion Engineering and Design 86: 1186 (2011)

21. Németh Z, Szegő K, Bebesi Z, Erdős G, Földy L, Rymer A, Sittler EC, Coates AJ, Wellbrock A. AIon distributions of different Kronian plasma regions. J. Geophys. Res., 116: A09212, doi: 10.1029/2011JA016585. (2011)

22. Kecskeméty K, Logachev YuI, Zeldovich MA, and Kóta J: Modulation of the galactic low-energy proton spectrum in the inner heliosphere. Astrophys. J. 738: 173, doi: 10.1088/0004-637X/738/2/173 (2011)

23. Arridge CS, André N, Bertucci CL, Garnier P, Jackman CM, Németh Z, Rymer AM, Sergis N, Szegő K, Coates AJ, Crary FJ: Upstream of Saturn and Titan. Space Science Reviews 162(1-4): 25-83 (2011)

24. Balogh A, Erdős G: The heliospheric magnetic field. Space Sci. Rev. doi: 10.1007/s11214-011-9835-3. (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	211			Ebből kutató[2]:	121
PhD, kandidátus:	68	MTA doktora:	25	Rendes tag és levelező tag:	2
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					39

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				731
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				719
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	8	idegen nyelven:	1
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	689
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	575
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	2
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	3

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	1840,332	Összes független hivatkozás száma:	6710
Összes hivatkozás száma[11]:	10972		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	3	MTA doktora: 3

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			118
		poszterek száma:	21
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	18	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	24		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			12
Témavezetések száma: TDK munka:	7	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	14

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		894 940	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	15	Teljes saját bevétel: 707 024	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			19
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		115 851	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			15
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		257 899	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			5
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		61 761	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			11
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		223 227	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			7
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		111 819	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

KONKOLY THEGE MIKLÓS CSILLAGÁSZATI KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest, XII. Konkoly-Thege út 15-17.
telefon: 1-391 9360; fax: 1-275 4668
e-mail: abraham@konkoly.hu; honlap: www.konkoly.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

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*
  - Gamma-kitörések
  - Csillagászattörténet

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

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A csillagok belső szerkezete és pulzációja

Kidolgoztak egy analitikus módszert a Blazskó-effektust mutató RR Lyrae csillagok fénygörbéinek matematikai leírására, amely az amplitúdó- és frekvenciamodulációt az elektronikus távközlés elméletében szokásos módon kezeli. Ennek a megközelítésnek sok előnye van, pl. magyarázatot ad számos, a Blazskó-jelenséget mutató RR Lyrae fénygörbe jellemzőjére, illetve az észlelt fénygörbék Fourier-spektrumának számos jellegzetességére is, mint amilyen a magas rendű multiplettek megjelenése, az oldalcsúcsok amplitúdóinak viselkedése, vagy a modulációs frekvencia és harmonikusainak megjelenése. A formalizmus egyébként tetszőleges fénygörbe-moduláció leírására alkalmas, nemcsak a Blazskó-modulált RR Lyrae-kére.

Elkészült a prototípus RR Lyrae űrfotometriájának elemzése, amit a Kepler-űrtávcső az első 127 napja során észlelt. A mérések azt is jól példázzák, hogyan lehetséges a telítésbe ment fényes csillagokról jó minőségű fotometriai adatsort kapni. A viszonylag ritka mintavételezés

(29,4 perc/pont) ellenére a millimagnitúdós pontosság egészen finom részletek tanulmányozására is módot adott. A Blazskó-csillagoknál szokásos multiplettek a második rendig jelentek meg a Fourier-spektrumban. A periódusketttőződésből adódó fél-egész frekvenciák egyértelműen kimutathatók. A jelenségnek valószínűleg köze van a még szintén nem értett Blazskó-effektushoz. A mért három Blazskó-ciklusról kimutatható volt, hogy nem teljesen egyformák, amit további hosszabb periódusú moduláció(k), vagy esetleg az effektus nem teljesen reguláris volta okozhat.

Elméleti oldalról már korábban igazolták, hogy az RR Lyrae periódusketszereződése az alapmódus és a 9. (strange) módus 9:2 arányú rezonanciájának eredménye. A legfrissebb eredményeik alapján kiderült, hogy ez a kölcsönhatás nem csak az előbbi bifurkációt eredményezi, de hatására az alapmódus új állapotának a stabilitása is szignifikánsan megváltozik, a periódusketszereződéssel párhuzamosan. A strange módus nélkül az alapmódus csak önmagában, tisztán periodikusan létezne. Azonban az alapmódus periódusketszerezett változata az első felhang által okozott perturbációkkal szemben instabil. Az alapmódus stabilitásának ez a másodlagos bifurkációja egy speciális három módusú állapotot eredményez, amely igazából kétmódusúnak látszik, mert a 9. felhang rejtve marad.

Egy új javaslatot, az ún. Stothers-mechanizmust vizsgálták a Florida-Budapest kód segítségével. Az elképzelés konvektív ciklusokkal magyarázza az RR Lyrae csillagoknál megfigyelt Blazskó-effektust. Számításaik alapján a konvekív tulajdonságok változásai hosszú, több száz napos periódussal képesek csak megfelelő mértékű sugárváltozást előállítani, ami ellentmondásban van a rövid modulációs periódusú csillagoknál megfigyelt változásokkal.

Az elmúlt mintegy 120 év megfigyelései alapján megvizsgálták az M3 gömbhalmaz 134 RR Lyrae típusú változócsillagának periódusváltozásait. A legszabályosabb periódusváltozást mutató változók átlagos periódusváltozási üteme jól egyezik a horizontális ági csillagok fejlődési modelljeiből számítható elméleti előrejelzésekkel. Mindazonáltal a halmaz számos RR Lyrae csillagának periódusváltozási üteme nem magyarázható a csillagfejlődés hatásával. A vizsgált RRab csillagok kb. 50%-ának a fénygörbéje nem stabil, ezek a változók Blazskó-effektust mutatnak. A pekuliáris változók magas részaránya arra utal, hogy a szabályos, ám fejlődési állapotukkal össze nem egyeztethető ütemű periódusváltozást mutató csillagoktól szintén várható valamilyen instabilitás a pulzációs fénygörbéjükben vagy a periódus-változásukban.

Egy triplán fedő kompakt hierarchikus hármascsillagot fedeztek fel a Kepler-mezőben. A központi csillag egy vörös óriás, amely körül két vörös törpe szoros párja kering. Extenzív földfelszíni mérésekkel (lucky imaging, spektroszkópia, interferometria) jellemezték a hármas rendszer főkomponensét, fénygörbe-modellekkel pedig megbecsülték a törpecsillagok paramétereit. A vörös óriás szoláris oszcillációinak hiánya teljes meglepetés volt, ami arra utal, hogy valamilyen mechanizmus csökkenti a konvektív gerjesztésű rezgések amplitúdóit.

A CoRoT 102781750 jelű csillag a CoRoT-űrtávcső egyes „színeiben” egymástól különböző, rejtélyes fényességváltozásokat mutatott. Vizsgálataikkal kimutatták, hogy az űrteleszkóp minden bizonnyal egynél több csillagot mért össze. A különböző típusú és időskálájú változásokat szétválasztva sikerült az összemért fénygörbe minden tulajdonságára egységes, konzisztens modellt alkotni. Megmutatták, hogy a fő célpont egy aktív csillag, legalább két aktív hosszúsággal. Az aktív vidékek fejlődése segítségével sikerült meghatározni a periódusváltozást és a differenciális rotációs paramétert is. Egy másik csillag csak a kék sávban volt mérhető és egyszerre mutatott egy gyors és kis amplitúdójú pulzációt, valamint fedési jellegű fényváltozást. A legvalószínűbb magyarázata a jelenségeknek egy fiatal, pulzáló β Cep csillag, amelyet egy korrotáló porkorong vesz körül.

Egy hat obszervatórium részvételével szervezett mini-kampány keretében 24 lehetséges független frekvencia, illetve amplitúdóik és fázisaik meghatározására nyílt lehetőség a PG 2303+243 jelű DA fehér törpénél. Az analízis 8,4 μHz-es frekvenciakülönbségekkel jellemezhető rotációs frekvenciafelhasadást is feltárt, ami a csillag 16,5 órás forgási periódusára utal. Az ismert frekvenciák nagy száma miatt ez a csillag jó jelöltnek tűnik asztroszeizmológiai vizsgálatok elvégzésére.

22 évet átfogóan, 1986 és 2008 között, nemzetközi kampányokat is magába foglalva került sor a PG 0122+200 jelű GW Virginis (PG 1159 típusú) változó megfigyelésére. A PG 1159 típusú, közvetlenül a fehér törpe fejlődési állapot előtt lévő csillagok gyorsan hűlő fázisban vannak, aminek az időskálája a millió éves nagyságrendbe esik. Az elméleti modellek szerint a magjukban keletkezett neutrínók fontos szerepet játszanak a hűlési folyamatban. A leghűvösebb PG 1159-es csillagok fejlődési időskálájának mérése egyedülálló lehetőséget nyújt arra, hogy empirikus úton kapjuk meg a neutrínókibocsátási rátát. A megfigyelt frekvenciaváltozások sokkal nagyobb mértékűek és rövidebb időskálán mennek végbe az elméleti modellek által jósoltnál.

Már publikált radiálissebesség-mérések alapján új spektroszkópiai kettősöket találtak a cefeidák között: XX Sagittarii (V=8,9 magnitúdó) és X Puppis (V=8,6 magnitúdó) a Tejútrendszerben, HV914 a Nagy Magellán-felhőben, HV1338 és HV1365 a Kis Magellán-felhőben. Ezek az esetek megerősítik azon korábbi megállapításukat, hogy a cefeidák között rengeteg spektroszkópiai kettős vár felfedezésre (a kettőscsillagok előfordulási gyakorisága e változócsillag-típusnál kb. 50%). A két Magellán-felhőben több mint 8000 cefeida közül eddig mindössze 5 csillagról ismert a spektroszkópiai kettősség.

Aktív jelenségek csillagokon

Az RS CVn-típusú K-óriás zéta Andromedae felszíni foltjainak időbeli fejlődését kísérték nyomon a Doppler-leképezés segítségével. Rekonstruálták a csillag felszíni hőmérséklet-eloszlását, a csillagfoltok időbeli átrendeződését, a differenciális rotáció nyomait. Az általuk kifejlesztett keresztkorrelációs technika segítségével meghatározták a felszíni nyírási paramétert, amely jó egyezést mutatott korábbi eredményekkel.

A V405 And egy rövid periódusú fedési kettős rendszer, amelynek főkomponense radiatív magból és konvektív burokból áll, míg a másodkomponens teljesen konvektív. Az elméletek szerint a csillagok szerkezete függ az aktivitásuk mértékétől: a mágnesesen aktív M-törpék sugara nagyobb kell legyen. Korábbi méréseik alapján a V405 And valóban így viselkedik: a főkomponens sugara jóval nagyobb az inaktív fősorozati csillagokra jósolt értéknél (ennél a csillagnál a legnagyobb az eltérés az ismert csillagok közül), míg a másodkomponens sugara jól illeszkedik a tömeg-sugár relációra. A V405 And újabb fénygörbéi alapján a foltos felszín jelentős változásokat mutat. Ezeket modellezve további bizonyítékot találtak a jelenségre.

Hosszú időt átfogó fotometriai és spektroszkópiai adatok alapján elkészítették az első részletes tanulmányt a fényes, aktív, K színképtípusú csillagról, a HD 123351 = CZ CVn-ról. A csillagot egyvonalú spektroszkópiai kettősnek találták, közel 148 napos periódussal és igen nagy excentricitással. A csillagra kapott pályamegoldás az eddigi legpontosabb egy aktív kettősről. A rotációs periódus 58,3 napnak adódott, ami arra utal, hogy a csillag erősen aszinkron módon rotál. A 12 évnyi mérés alatt a csillagon két állandó aktív terület volt jelen. Ezt egy differenciálisan rotáló felszínen levő két aktív hosszúsággal magyarázták. A rekonstruált mágneses tér szignifikánsan függ a pályamenti helyzettől. Az ellentétes fázisú változást a kromoszféra és a mágneses fluxus között úgy magyarázták, hogy két mágneses teret tételeztek fel egy időben, az egyik egy lokális tér a foltokhoz kapcsolható, a másik,

globális tér pedig a (kistömegű) másodkomponens felé mutat. Valószínűsíthető, hogy a két csillag közötti mágneses tér az oka a főkomponens lassú és aszinkron rotációjának.

Napaktivitás

Felhasználva a naptevékenységi minimum nyújtotta viszonylag egyszerű mágneses szerkezetet a Napon és a helioszférában, a Napból érkező nagyenergiájú részecskék (solar energetic particles, SEPs) eredetét vizsgálták a 2007. január 24-én történt űrbéli észlelések és mágneses tér modellezés felhasználásával. A SEP-ek eredete régóta vitatott, miszerint a részecske-gyorsítás a Nap alsó koronájában mágneses átkötődés során vagy a bolygóközi térben a koronakitörések (coronal mass ejection, CME) által keltett lökéshullám-frontban történik. Kimutatták, hogy egy kemény röntgensugárzást produkáló fler és jet, és nem a lassú CME volt a SEP forrása. A nyitott mágneses erővonalak jelenlétét a fler és jet konfigurációban a III-as típusú rádiókitörés észlelés is megerősítette, mivel az utóbbi a fénysebesség mintegy harmadával megegyező sebességű elektronok által keltett rádió-sugárzás, amint a bolygóközi tér felé nyitott erővonalak mentén spirálozva elhagyják a Napot. A kitörést kísérő CME túl lassú volt ahhoz, hogy részecske-gyorsító lökéshullámot keltsen.

Statisztikai vizsgálatokat végeztek a napfoltkatalógusaik alapján. Az eddigi eredmények: (i) A foltcsoportok vezető-követő polaritás-szeparációja gyenge függést mutat a területtől, ami a mágneses tenzió csekély befolyására utal. (ii) A vezető és követő részek kompaktsága különböző, a vezető részben többnyire kevesebb és nagyobb folt található. (iii) A foltcsoportok fejlődési görbéjét órás felbontásban és a vezető-követő részeket külön is vizsgálták. A tanulmányozott esetekben a vezető rész később érte el maximumát, de az magasabb volt, mint a követő részé. (iv) a foltcsoportok mágneses tengelyének dőlésszögeire a korábbinál részletesebb leírást adtak: a pozitív/negatív dőlésszögek aránya a ciklus elején nagyobb, majd fokozatosan csökken.

Felhasználva a RHESSI műhold adatait, megvizsgálták az egymást követő flerek közötti időtartam eloszlását. Azt találták, hogy kapcsolat van ezek között az események között. A kapcsolatot egy Sedov-Taylor-féle adiabatikus lökéshullám közvetíti. A fler lökéshullámot kelt, amely újabb kitörést vált ki.

Csillagkeletkezés és az intersztelláris anyag fizikája

Az optikai és közeli-infravörös fényváltozások a fiatal csillagok jól ismert jellegzetességei közé tartoznak. Az elmúlt évek eredményei alapján azonban az is egyre nyilvánvalóbb, hogy a fiatal csillagok egy jelentős része közép-infravörös hullámhosszakon is változékony. Vizsgálataik keretében elkészítettek egy közép-infravörös színképatlaszt, amelyben 68 kis- és közepes tömegű fiatal csillag mérései szerepelnek. A méréseket az ISO és a Spitzer űrtávcsövek archívumaiból töltötték le, majd saját IDL rutinokkal újrafeldolgozták őket. Azon 49 forrás esetén, ahol több, időben különböző spektrum is elérhető volt, megvizsgálták a közép-infravörös változékonyságot éves, vagy évtizedes időskálán. A források egy része hullámhossz-független változásokat mutat, valószínűleg az időben változó akkréciós ütem következményeként. 13 olyan rendszerben, amely erős 10 μm-es szilikát csúcsot mutatott, a 6-8 μm-es kontinuum sugárzás és a szilikát emisszió csak gyengén korrelált. Lehetséges magyarázat erre, hogy a korong belső része, amely a szilikát emisszióért felelős, leárnyékolódik egy olyan korong-struktúra által, amelynek magassága változhat.

Feldolgozták a [KOS94] HA11 jelzésű fiatal változócsillagról 1999 és 2010 között összegyűjtött optikai és infravörös fotometriai, valamint optikai spektroszkópiai adatokat. Az

égitest Nap típusú fiatal csillag a Lynds 1340 molekulafelhőben, mintegy 600 parszek távolságban. Az elmúlt évtizedben néhány éves időskálájú, nagy amplitúdójú változásokkal hívta fel magára a figyelmet. Spektrális energiaeloszlásának alakja azt mutatja, hogy a csillag a protosztelláris és a fősorozat előtti fejlődési fázisok közötti határ közelében tart a fejlődésben. Színképében számos, intenzív akkrécióra és szélre utaló emissziós vonal látható. A közeli-infravörös színindexek változása kizárja, hogy a nagy amplitúdójú fotometriai változások oka a változó előtér-extinkció, az emissziós vonalak változásai pedig arra utalnak, hogy a fotometriai változásokkal párhuzamosan változik a tömegbefogási ráta és a szél. A fiatal csillag jellemzői azt bizonyítják, hogy ez az égitest az eruptív fiatal csillagok újabban feltűnt harmadik típusát képviseli: hasonlít az általuk korábban vizsgált PV Cephei-hez és V1647 Orionis-hoz. Ezek a csillagok az EXor típushoz hasonlóan ismétlődő kitöréseket produkálnak, de mivel sokkal mélyebben beágyazottak, mint az EXorok, a meglóduló akkréció nyomán megemelkedett centrális hőmérséklet és luminozitás gyökeresen átalakítja a cirkumsztelláris korong és burok belső régióit.

A gázban gazdag primordiális korongokat és a ritkásabb portartalmú, gázban szegény törmelékkorongokat általában a csillagkörüli anyag fejlődésének két jól elkülönülő fázisának tekintik. Azonban van egy nagyon érdekes objektum a környezetünkben, a 49 Ceti, amely valószínűleg egyfajta átmenetet képez a két fejlődési állapot között: míg korongjának portartalma a törmelékkorongokhoz hasonló, a korong gáztartalma sem elhanyagolható. Ahhoz, hogy a csillagkörüli korongok gáztartalmának fejlődését megértsük, további, 49 Ceti-hez hasonló rendszereket kell keresni. Ezen célból az Atacama Pathfinder EXperiment (APEX) rádióteleszkóp felhasználásával 20 fiatal törmelékkorongot vizsgáltak meg a szénmonoxid 3–2-es rotációs átmenetén (345 GHz-en). Megfigyeléseik nyomán sikerült megtalálniuk a második 49 Ceti-hez hasonló korongot, a 30 millió éves, A3 színképtípusú HD 21997 jelű csillag körül, amelyet a szénmonoxid két rotációs átmenetén (2–1-es, illetve 3–2-es) sikerült detektálni. A Columba mozgási halmaz tagjaként a csillag korbecslése igen megbízható és ezáltal a rendszer még a 49 Ceti-nél is tisztább példája az „öreg” gázt is tartalmazó korongoknak. Érdekes, hogy bár a HD21997 és a 49 Ceti infravörös luminozitási aránya nem különösebben nagy, ezen két csillag körül találhatók a legkiterjedtebb korongok a mintán belül. A HD21997-nél mért kétcsúcsú profilt sikeresen illesztették egy kepleri korongmodellel. Hasonlóságaik alapján a 49 Ceti és a HD21997 az első reprezentánsai lehetnek a viszonylag öreg (≥8 millió év), a por mellett gázt is tartalmazó korongok (eddig még nem felismert) osztályának.

Exobolygórendszerek

A HATNet-programmal együttműködésben felfedeztek 14 extraszoláris bolygót, melyek a lehetséges bolygótömegek széles skáláját ölelik át, a Neptunusz viszonylag kis tömegétől a Szaturnuszon át egészen a Jupiternél is sokkal nehezebb bolygókig. Három az érdekesebb rendszerekből: (i) A HAT-P-18b és HAT-P-19b bolygók K típusú fősorozati csillagok körül keringenek 5,5 és 4,0 nap periódusokkal. Mindkét bolygó tömege közel van a Szaturnuszéhoz. A HAT-P-19b esetében egy hosszabb periódussal keringő külső kísérő objektumra következtettek a radiális sebességekben megfigyelhető hosszútávú változás miatt. A bolygómodellek és a mért sugarak alapján mindkét bolygónak nagyon kicsi központi magja lehet és majdnem teljes tömegükben hidrogénből és héliumból állnak. (ii) A HAT-P-26b egy kis tömegű bolygó, amely 4,2 nap periódussal kering egy K1 típusú fősorozati csillag körül. Mivel sugara a Jupiter sugarának csak 60%-a, ezért az általa okozott fedés közbeni elhalványodás is kicsi, amelynek detektálása a méréstechnikai nehézségeket figyelembe véve komoly siker. A HAT-P-26b a ma ismert 26 kis tömegű (vagyis Neptunusz, vagy annál kisebb tömegű) bolygó között van. Itt található 20 Kepler, egy CoRoT és egy másik, a MOST

űrtávcsővel felfedezett bolygó. A bolygómodellek segítségével becsült belső tömegeloszlásra azt kapták, hogy a tömeg mintegy fele összpontosul a magban, míg a másik fele a hidrogénben és héliumban gazdag külső burokban található.

A Kepler exobolygós programmal együttműködésben földfelszíni spektroszkópiával hozzájárultak a Kepler-16 komplex rendszerének felfedezéséhez, amelyben egy Szaturnusz-méretű fedési bolygó kering egy szoros kettőscsillag körül. A szerencsés geometriának köszönhetően a bolygó az egyébként fedési kettőscsillagot alkotó pár mindkét komponense előtt átvonul, ezért a Kepler ultraprecíz adataiban négy különböző fedés azonosítható. A Kepler-16 az első bizonyított „cirkumbináris", azaz kettős körüli exobolygó pontosan ismert sugárral, illetve erősen megkötött tömeggel és sűrűséggel. Mivel a bolygó pályája gyakorlatilag teljesen egybeesik a kettőscsillag pályasíkjával, a bolygókeletkezés a cirkumbináris protoplanetáris anyagkorongban játszódhatott le. A Kepler-16 létezése azt sugallja, hogy a bolygókeletkezés a csillagkeletkezés természetes kísérőjelensége mind a magányos, mind a kettőscsillagokban.

Elsőként detektálták és sikeresen magyarázták a KOI-13 jelzésű Kepler bolygójelölt aszimmetrikus fénygörbéjét. Ebben a rendszerben a gyorsan forgó központi csillagot egy szubsztelláris kísérő fedi el periodikusan. A Kepler-adatok alapján a kísérő pályasíkja erősen hajlik a csillag egyenlítői síkjához képest, amit az árul el, hogy a gravitációs szélsötétedés következtében nem egyenletes felületi fényességeloszlású csillag korongját ferdén metszi a fedő égitest pályája. Vizsgálatuk azt demonstrálta, hogy a pályasík dőltségét a precíz spektroszkópiai méréseket igénylő Rossiter-McLaughlin-effektus kimérése nélkül is lehet detektálni, ami új irányt nyit az erős dinamikai kölcsönhatásokat mutató exobolygó-rendszerek statisztikai vizsgálataiban.

Folytatták vizsgálataikat az exobolygók körül keringő kísérők kimutatása és jellemzése témakörében. Legújabb kutatásukban bemutatták, hogy hogyan mutathatjuk ki egy exohold létezését az exobolygó-tranzitgörbék lokális szórásának finom elemzéséből.

Naprendszer égitestjei

A „TNOs are Cool!" Herschel Open Time Key Program célja mintegy 140 Neptunuszon túli égitest fizikai és termális tulajdonságainak megismerése a Herschel infravörös űrtávcső mérései alapján. Fontos célja a programnak, hogy albedó- és méreteloszlásokat határozzanak meg bizonyos dinamikai osztályokra, valamint a teljes mintára is. 2011-ben két ilyen „minta-tanulmányt" fejeztek be a plutinókról, illetve a szórt-korong objektumokról:

– 18 plutinó fotometriai vizsgálatát végezték el, meghatározták méretüket és albedójukat termális modellek segítségével. Azt találták, hogy a vizsgált plutinók mérete 150 és 730 km között változik, míg az albedójuk 0,04 és 0,28 között. Első alkalommal kalibrálták a plutinó méretskálát: azt találták, hogy az eloszlás hatványkitevője q=2 a 120-400 km mérettartományban, és q=3 nagyobb méretek esetén. Egyértelmű bizonyítékot találtak arra, hogy azok a plutinók, amelyek felszínén jegek találhatók, egyértelműen magasabb albedót mutatnak, mint a minta átlaga.

– Meghatározták 15, a szórt koronghoz, vagy a lecsatolódott objektumokhoz tartozó égitest méretét, albedóját és termális tulajdonságait. Az égitestek átmérői 100 és 2400 km között adódtak, a geometriai albedók pedig 0,04 és 0,85 közöttinek.

A 2,2 m-es ESO MPG chilei teleszkóppal detektálták a Hale-Bopp-üstökös magját (és esetleg halvány kómáját) messze túl a Neptunusz heliocentrikus távolságán. Mindez minden idők legtávolabbi üstökösmag-detektálása volt, a megfigyelt jellemzők pedig nehezen hozhatók összhangba az üstökösök anyagtermelésére vonatkozó hagyományos elképzelésekkel. Az

adatok két értelmezést engednek meg: vagy egy halvány, felbontatlan kómát detektáltunk, vagy pedig a mag albedója nőtt meg jelentős mértékben az elmúlt években. Utóbbit a felszínre frissen kifagyott jégréteg magyarázhatja.
Folytatódott az ekliptikai üstökösökmagok fizikai tulajdonságainak jellemzésére a Hubble Űrteleszkóppal korábban megkezdett megfigyelési program. Összefoglalták és publikálták a HST Planetary Camera 2-vel tíz ekliptikai üstökös magjáról és magkörüli kómájáról a HST 9. megfigyelési ciklusa során végzett megfigyelési eredményeket. Minden egyes üstököst nyolc egymás utáni HST keringés alatt mindegy 11 órán keresztül sikerült megfigyelni. A megfigyelések minden esetben standard R szűrővel történtek, négy esetben V szűrővel is, illetve két esetben B szűrővel is. A kapott teljes, illetve rész fénygörbék idősor-analízisével az üstökösmagok tengelykörüli forgásidejének meghatározása történt.

Folytatták a 2010-ben indított Piszkéstető Supernova and Trojan Asteroid (PISTA) Survey programot, melynek keretében 744 kisbolygó felfedezését ismerte el ideiglenes jelöléssel a Minor Planet Center. Ezek között volt egy Jupiter trójai és három földközeli kisbolygó. Felfedeztek továbbá két távoli, nagy luminozitású szupernóvát is (SN 2011ab, SN 2011ba).

Egyéb témák, interdiszciplináris kutatások

Gamma-kitörések. Sokasodnak azok a tények, amelyek arra utalnak, hogy a rövid, illetve hosszú időtartamú gamma kitörések között léteznie kell közepes csoportnak is. A Swift mesterséges hold méréseit felhasználva a többváltozós matematikai statisztika diszkriminancia analízisének felhasználásával összehasonlították a különböző csoportokhoz tartozó gamma-kitörések γ és Röntgen tulajdonságait. Az analízis két kanonikus diszkrimináns függvényt eredményezett, amelyek a csoportok közötti legnagyobb távolságot adják. Az első diszkrimináns függvényhez a legerősebb járulékot a γ, illetve a Röntgen tartományban kisugárzott energia adja, míg a második csaknem azonos a kitörések γ spektrális keménységét leíró fotonindex-szel. Az eredmény megerősíti a korábban kapott eredményüket, amely szerint a csoportok a Röntgen tartományban mért tulajdonságaikban is különböznek.

Csillagászattörténet. Temesvári Pelbárt 15. századi ferences szerzetes művein keresztül tanulmányozták a kor csillagászati műveltségét Magyarországon. Megmutatták, hogy az eddigi állítások ellenére Pelbárt ugyanúgy elfogadta az asztrológia nagy részét, mint Mátyás király udvara. Kora csillagászatát ismerte, és ezt műveiben terjesztette is. Mivel a magyar nyelvű kódex-irodalom sokszor fordított Pelbárt műveiből, így a latinul nem tudók felé is közvetíthette ismereteit. A középkori és kora újkori asztrológia nem tűnt el a 19. században sem. Egy 1802-ben írott, csillagászati indíttatású levél tartalma alapján (OSZK) kimutatták milyen forrásokat használtak, és mely szerzők ismerete maradt fent.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A csillagászat azon kevés természettudományok egyike, amelyre a szélesebb közvélemény is figyel. Eredményei rendre megjelennek az írott és elektronikus sajtóban. Az érdeklődés fenntartásában, az új eredmények szélesebb megismertetésében és a külföldi szakmai eredmények szakszerű tolmácsolásában az intézet kutatói tudatosan és nagy elkötelezettséggel vesznek részt. Csak néhány fontosabbat kiemelve ebből a tevékenységből: a nagy sikerű hirek.csillagaszat.hu hírportál gondozása (főszerkesztőként, állandó és alkalmi szerzőkként), évente százas nagyságrendben ismeretterjesztő előadások tartása, riportok, interjút adása a legkülönfélébb sajtótermékeknek. Utóbbiakra az aktuális események, mint például a Kepler-űrtávcső legújabb (esetenként magyar) felfedezései, az augusztusi fényes tűzgömb, vagy a

Piszkéstetőn felfedezett kisbolygók és szupernóvák adták az alkalmat. Az MTA Lendület-programját is komoly sajtóérdeklődés kíséri, ami az intézetben folyó Lendület-kutatásra, az exobolygók vizsgálatára is igaz. A Mindentudás Egyeteme 2.0 programjában való részvétellel a Lendület-csoport igen széles körű nyilvánosságot kapott. Az intézeti kutatásoknak a nagyközönséghez való közelebb vitelét szolgálják az évente kétszer megrendezett nyílt napok, de az is, hogy a Piszkéstetői Obszervatórium egész évben nyitva áll az érdeklődő csoportok előtt. A látogatások nemzetközi színvonalú lebonyolításához látogatócentrumok kialakítására lesz szükség mind Budapesten, mind Piszkéstetőn. Ezek tervezése, az igények és lehetőségek felmérése megkezdődött. Népszerű volt „Határ a csillagos ég" című pályázatuk, amellyel a középiskolás korosztályt célozták meg. A nyertes az egyik mátrai távcsövön észlelhette kedvenc objektumát. Folyamatosan tudatosítják a közvéleményben és a döntéshozókban a fényszennyezés gazdasági, környezeti, kulturális kártételeit. Esetenként speciális szaktudást igénylő szakértői feladatokat is vállalnak (pl. bírósági ügyekben).

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Hazai kapcsolatok: A beszámolási időszakban is ápolták a korábban kialakult intézményi kapcsolatokat a hazai csillagászati kutatóhelyekkel (SZTE Obszervatóriuma, Bajai Obszervatórium, ELTE szombathelyi Gothard Obszervatóriuma). A Kepler-űrtávcső KASC konzorciumához kapcsolódó közös munka folyt a BKMÖ Bajai Obszervatóriumának és az ELTE Gothard Obszervatóriumának munkatársaival.

Az intézet kutatói a beszámolási időszakban is részt vettek az egyetemi oktatásban graduális és doktori képzésben meghirdetett előadásokkal, gyakorlatok tartásával, valamint szakdolgozati és doktori témavezetéssel. Előadásokat tartottak az ELTE-n, a (i) Bsc és Msc hallgatóknak: Asztrofizikai megfigyelési módszerek, Asztrometria, Obszervációs Csillagászat, Változócsillagászat, Kettőscsillagászat, Műszertechnika II., Bevezetés a csillagászatba III., Bevezetés a csillagászatba IV, A Naprendszer peremén, A napfizika legújabb eredményeiből, Fiatal csillagok fényváltozásai, Szeminárium a csillagkeletkezés és csillagközi anyag kutatásának legújabb eredményeiről, Asztrostatisztika 1., Asztrostatisztika 2., Csillagrendszerek dinamikaja, Galaktikus csillagászat, Csillaglégkörök fizikája, Planetológia, Összehasonlító Planetológia, A Naprendszerkutatás legújabb eredményei, Csillagászati földrajz, Marskutatás, A bolygókutatás legújabb eredményei; (ii) a doktori iskola hallgatóinak: A Naprendszer peremén, A Fizika Tanítása, Csillagaktivitás - aktív csillagok I., Csillagaktivitás - aktív csillagok II., Fiatal csillagok fényváltozásai, Szeminárium a csillagkeletkezés és csillagközi anyag kutatásának legújabb eredményeiről, illetve a PTE TTK-n: Űrkutatás- és űrtechnológiák.

Nemzetközi kapcsolatok: A hosszabb ideje meglevő és folyamatosan gyümölcsöző nemzetközi együttműködéseken túl 2011-ben is folytatódott két, új űrtávcsövekhez kapcsolódó, és az EU FP7 keretprogramja által támogatott projekt. Az egyik az IRSES (International Research Staff Exchange Scheme), amely a Kepler-űrtávcső csillagpulzációt vizsgáló KASC konzorciumához kapcsolódik, míg a Cesar (Cryogenic Electronics for Space Applications and Research), amelyben a Saclay asztrofizikai intézettel működnek együtt, az ESA jövőbeli űrtávcsöveinek kifejlesztéséhez járul hozzá. Szoros kutatási együttműködés alakult ki a University of Sydney-vel.

2011-ben is számos esetben sikerült elnyerni észlelési időt csillagászati nagyműszerekre nemzetközi együttműködésben pl. a NASA Spitzer infravörös űrtávcsőre, és a VLT-re (ESO, Chile). A benyújtandó pályázatok közös kidolgozásában együttműködtek a MPIA Heidelberggel, STSI Baltimore-ral. Szoros együttműködés volt a Harvard Smithonian Center

for Astrophysics intézettel (HATNet) az exobolygók kutatásában. Rendszeres megfigyeléseket végeztek a Teide Obszervatóriumban.

Rendezvények, mobilitás: Az év során két jelentős nemzetközi találkozót is szerveztek az intézet kutatói: az IBVS jubileumi ülésszaka a 6000. szám megjelenésének alkalmából; az ESA GAIA űrtávcső projektjének CU7 munkacsoportjának ülése (2011. május 11–13.).

Az intézet kutatói több hosszabb tanulmányutat tettek, az MPI für Astronomie-ba (Heidelberg, Németország), CEA Saclay-ba (Franciaország) és a Laboratoire d'Astrophysique-ba (Marseille, Franciaország). Vendégkutatókat fogadtak Örményországból és Bulgáriából.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben elindult két új OTKA-pályázat: a Kepler-űrtávcső KASC konzorciumában végzett munkához (2011–2015, 39,438 M Ft), valamint nemzetközi együttműködésben a MATISSE műszer fejlesztéséhez. Elkezdődött egy francia–magyar TéT-együttműködés is.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Strassmeier K G, Carroll T A, Weber M, Granzer T, Bartus J, Oláh K, Rice J B: Binary-induced magnetic activity?. Time-series echelle spectroscopy and photometry of HD 123351 = CZ CVn. Astron. Astrophys 535: A98 (2011)
2. Benkő J M, Szabó R, Paparó M: Blazhko RR Lyrae light curves as modulated signals. MNRAS, 417: 974 (2011)
3. Doyle L R, (+35 társszerző), Fűrész G, Geary John C, (+11 társszerző): Kepler-16: A Transiting Circumbinary Planet. Science, 333: 1602 (2011)
4. Li C, Matthews S A, van Driel-Gesztelyi L, Sun J, Owen C J: Coronal Jets, Magnetic Topologies, and the Production of Interplanetary Electron Streams. Astrophys. J. 735: 43 (2011)
5. Paparó M, Chadid M, Chapellier E, Benkő J M, Szabó R, Kolenberg K, Guggenberger E, Regály Zs, Auvergne M, Baglin A, Weiss W W: Periodicity search as a tool for disentangling the contaminated colour light curve of CoRoT 102781750. Astron. Astrophys. 531: A135 (2011)
6. Kolláth Z, Molnár L, Szabó R: Period-doubling bifurcation and high-order resonances in RR Lyrae hydrodynamical models. MNRAS 414: 1111 (2011)
7. Kun M, Szegedi-Elek E, Moór A, Kóspál Á, Ábrahám P, Apai D, Kiss Z T, Klagyivik P, Magakian T Yu, Mező Gy, Movsessian T A, Pál A, Rácz M, Rogers J: Inner disc rearrangement revealed by dramatic brightness variations in the young star PV Cep. MNRAS, 413: 2689 (2011)
8. Derekas A, Kiss L L, Borkovits T, Huber D, Lehmann H, Southworth J, Bedding T R, Balam D, Hartmann M, Hrudkova M, Ireland M J, Kovács J, Mező Gy, Moór A, Niemczura E, Sarty G E, Szabó Gy M, Szabó R, Telting J H, Tkachenko A, Uytterhoeven, K, Benkő J M, Bryson S T, Maestro V, Simon A E, (+19 társszerző): HD 181068: A Red Giant in a Triply Eclipsing Compact Hierarchical Triple System. Science, 332: 216 (2011)

9. Lamy P L, Tóth I, Weaver H A, A'Hearn M F, Jorda L: Properties of the nuclei and comae of 10 ecliptic comets from Hubble Space Telescope multi-orbit observations. MNRAS, 412: 1573 (2011)

10. Jurcsik J, Szeidl B, Clement C, Hurta Zs, Lovas M: Long-term photometric monitoring of Messier 5 variables - II. Blazhko stars. MNRAS, 411: 1763 (2011)

11. Moór A, Pascucci I, Kóspál Á, Ábrahám P, Csengeri T, Kiss L L, Apai D, Grady C, Henning Th, Kiss Cs, Bayliss D, Juhász A, Kovács J, Szalai T: Structure and Evolution of Debris Disks Around F-type Stars. I. Observations, Database, and Basic Evolutionary Aspects. Astrophys. J. Suppl. Series, 193: 4 (2011)

12. Hartman J D, Bakos G Á, Kipping D M, Torres G, Kovács G, (+18 társszerző): HAT-P-26b: A Low-density Neptune-mass Planet Transiting a K Star. Astrophys. J. 728: 138 (2011)

13. de Ugarte Postigo A, Horváth I, Veres P, Bagoly Z, Kann D A, Thöne C C, Balázs L G, (+12 társszerző): Searching for differences in Swift's intermediate GRBs. Astron. Astrophys. 525: A109 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	75			Ebből kutató[2]:	46
PhD, kandidátus:	10	MTA doktora:	12	Rendes tag és levelező tag:	0
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					17

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				243
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				212
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	156
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	76
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	2
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	422,691	Összes független hivatkozás száma:	1478
Összes hivatkozás száma[11]:	1478		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	4	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			40
		poszterek száma:	41
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	15	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	11
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	12		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			18
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	7

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		288 671	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	3	Teljes saját bevétel: 244 011	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			8
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		45 806	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		60 160	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		160 276	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		23 575	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

MŰSZAKI FIZIKAI ÉS ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓINTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.; 1525 Budapest, Pf.: 49.
telefon: 1-392 2225; fax: 1-392 2226
e-mail: barsony@mfa.kfki.hu; honlap: www.mfa.kfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A 2011. év az MTA MFA utolsó működési éve volt önálló kutatóintézményként.
A kutatást az előző évekhez hasonlóan hat tudományos osztály-szerkezetben folytatták, választott négy fő kutatási iránnyal (vékonyréteg, nanotechnológia, fotonika és mikrotechnológia) meghatározott stratégia, a multidiszciplináris kutatási irány mindenképpen követendőnek, és sikeresnek bizonyult. Tudományos munkájukat 2011 májusában az MTA elnöke által felkért Külső Tanácsadó Testület értékelte. Megállapították, hogy „*the research carried out at the Institute is of high average level, with internationally recognized peaks”*, így a stratégiában különösebb változtatásra nincs szükség.

A fentieket támasztja alá az intézet példátlan sikere, hogy 2011-ben az MTA legmagasabb tudományos kitüntetését, az Akadémiai díjat a kutatómunkáját felügyelő mindkét MTA tudományos osztály, a Műszaki Tudományok Osztálya és a Fizikai Tudományok Osztálya is az MFA kutatóinak ítélte.

Az 5000 m^2-nyi területen működő intézet számára a legnagyobb kiadást továbbra is a nagy kutatási infrastruktúra – beleértve a tiszta munkatereket és nagy analitikai laboratóriumokat – működtetése, karbantartása és fejlesztése jelenti. A minőségbiztosítási rendszer sikeres működése folytatódott, a 2010-ben Akkreditált Vizsgáló Laboratóriumuk (ellipszometria) a 2011-es felülvizsgálati auditot is sikerrel vette. 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.

Gazdaságilag az év az előzőhöz hasonlóan kritikus volt, hiszen a 2011. év is a likviditási gondok növekedését és a bürokrácia folyamatos növelését hozta. *Az intézet az MTA vezetés által tudottan és elismerten 14 éve szenved 180 M Ft ellátmányi forráshiányban.* Egy kísérletes kutatóintézet esetében ez a kutatási infrastruktúra működtetését teszi lehetetlenné, nem beszélve annak megújításáról. 2011-ben hazai pályázati források elapadtak, a nemzetközi társfinanszírozott programok (ENIAC JTI) hazai forrásfolyósítását is leállították az első két év pályázatainak finanszírozása után. Ezzel a nemzetközi forrásbevonás lehetősége is beszűkült. Mivel a korábbi elismert teljesítések kifizetését a KPI – NFÜ ellenőrzések címén blokkolta, az év folyamán négy alkalommal is kellett több tízmilliós áthidaló kölcsönt kérniük, amit év végéig visszaadtak. Egyébként az intézet összes FP7 és hazai projektjének elszámolás-ellenőrzése hibamentesen zárult.

2011-ben tíz EU FP7-es pályázatuk fut (beleértve egy 2008-ban elnyert ENIAC JTI pályázatot). Az ENIAC 2. pályázati fordulóban 2009 során nyertes pályázatuk (CAJAL4) szerződéskötésére az NIH korábbi nemzetközti kötelezettségvállalása ellenére eddig nem került sor, a részvétel támogatás nélkül, önerőből alacsony szinten folyt. Az év folyamán két MTA doktora címet, egy PhD-fokozatot, és számos tudományos elismerést szereztek

munkatársaik. Jelenleg tíz posztdoktoruk dolgozik külföldi vezető intézményekben, hazatérésüket a Lendület program támogatásával tervezik.
Egy alapítványi és MTA pályázati támogatással beszerzett kulcsberendezés, a lézeres ábragenerátor üzembevételével, a kerámia labor és pár dolgozószoba saját erőből végzett felújításával tovább javították a munkakörülményeket.

Az MFA kivételesen fegyelmezett gazdálkodásának és a munkatársak vezetőségbe vetett bizalmának köszönhetően a 2011-es évet az elviselhetőnek mondható mintegy 1,5 Mrd Ft-os forgalommal, adósság nélkül tudták zárni. *Az MTA alapfinanszírozás hiánya, a pályázati lehetőségek, az ipari megrendelések elégtelensége folytán azonban év végére már világossá vált, hogy 2012-ben nem kizárt a csődhelyzet előállása.*

Ezt tetézte az év közben előkészített majd a Közgyűlés által jóváhagyott „intézethálózati megújítási folyamat". Az MFA esetében a nagy Természettudományi Kutató Központba történő szervezeti betagozással, az adminisztrációs önállóság elvesztésével, a gyökeresen eltérő tematikájú, kutatási kultúrájú, szervezettségű intézetek több telephelyes működtetéséből adódóan *a működés nehézkesebbé és drágábbá válása prognosztizálható volt.* Így az elrendelt létszámcsökkentések, zárolások, központi költségek és az általános kutatástámogatási környezet miatt a 2012. év nem sok jóval kecsegtet. *Az a fejlődési lendület, a 14 éves kutatóintézeti pályaív, amit az MTA MFA alapításától önállósága elvesztéséig büszkén vállalhat, végleg megtörik.*

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatás 2011-ben is 6 osztályvezető irányításával, önálló témagazdálkodású kutatócsoport ill. laboratórium kereteiben folyt. *A beszámoló követi a szervezeti sémát.*

Nanoszerkezetek Osztály (15 fő, 9 kutató, 6 PhD-hallgató)

Az osztály tudományos tevékenységének fókuszában a különféle nanoarchitektúrák (egyedi nanoszerkezetekből felépülő nanorendszerek) létrehozása és jellemzése áll. Ezen belül a szén nanoszerkezetek kutatása – különös hangsúllyal a grafén (egyetlen atom vastag grafit) alapú nanoszerkezetek és nanoarchitektúrák előállítása és vizsgálata –, valamint a természetes fotonikus kristályok kutatása és a bioinspirált mesterséges fotonikus nanoszerkezetek előállítása a kiemelkedő témák. Az osztály különféle, nanométeres felbontású, nem konvencionális litográfiás módszereket is fejleszt nanoszerkezetek és nanoarchitektúrák létrehozásának céljával.

A grafénkutatás és a szén nanoszerkezetek témakörében elért eredményeik:

- Grafén nano-építőelemeket alakítottak ki meghatározott atomi végződéssel (karosszék típus élekkel).
- Új módszert dolgoztak ki a kémiai leválasztással előállított grafén szemcseszerkezetének feltárására.
- Elsőként térképezték fel a kémiai leválasztással előállított polikristályos grafén szemcsehatárainak elektromos viselkedését nanométeres pontossággal.
- Atomi felbontású alagútmikroszkópos és alagútspektroszkópiás módszerekkel kimutatták, hogy a funkcionalizált szén nanocsövek elektronszerkezete lokálisan módosul a funkciós csoportok kapcsolódási pontjai körül.

- A Landauer mechanizmusra alapozva megmagyarázták az általuk hullámcsomag dinamikai szimulációval kimutatott, a Fermi energia közelében meglévő anizotróp töltésterjedést grafénon az alagútmikroszkóp tűje alatt.
- Hullámcsomag dinamikai módszerekkel megmutatták, hogy a grafén krisztallitok közötti szemcsehatárokon a töltésnek mintegy 10%-ka halad át.
- Sikeres kísérleteket hajtottak végre elektronsugaras litográfiát kombinálva a grafén karbotermikus marásával. Ennek eredményeként megnyílhat az út az atomi pontosságú grafén megmunkálás és az elektronsugaras litográfia lehetőségeinek ötvözésére.

Természetes eredetű fotonikus kristályok és más optikailag aktív nanoszerkezetek kutatása terén az évben elért új eredmények:

- Spektroszkópia segítségével megvizsgálták kilenc azonos élettérben előforduló boglárka lepke faj hímjeinek kékjét és megmutatták, hogy az egyes fajok fényvisszaverési spektruma (színe) olyan mértékben tér el egymástól, ami lehetővé teszi a fajok spektrális azonosítását.
- A fent említett kilenc faj pikkelyeiről készült pásztázó és transzmissziós elektron-mikroszkópos felvételek részletes elemzését mesterséges neurális hálózat alkalmazásával kombinálva kimutatták, hogy az egyes fajok pikkelyeinek nanoarchitektúrája jellemző az illető fajra.
- Megmutatták, hogy a fenti kilenc lepkefaj színérzékelése eltér az emberi színérzékeléstől és ezáltal, valamit a fajra jellemző repülési idő eltérésével lehetséges a fajok biztonságos megkülönböztetése.
- A lepkeszárnyak gőzök/gázok hatására fellépő reflexiós spektrum változásait alkalmazva megmutatták, hogy ezek a nanoarchitektúrák alkalmasak a szelektív és kvantitatív gőz/gáz érzékelésre.

Komplex Rendszerek Osztály (8 fő, 7 kutató)

Az osztály feladata a komplex rendszerekben megfigyelhető jelenségek kutatása a statisztikus fizika módszereivel az evolúciós játékelméleti modellekben, a nemegyensúlyi szilárdtest-fizikai rendszerekben, és a népdalkincs szerkezeti analízisében, továbbá a kép- és jelfeldolgozás multidiszciplináris alkalmazásainak fejlesztése.

- Új számítógépes algoritmusok kifejlesztésével és összehasonlításával segítették a párhuzamosan működő grafikus processzorok alkalmazásának hatékonyságnövelését különböző rácsmodellek vizsgálatánál. A kifejlesztett algoritmusok segítségével tanulmányozták a kristályos felszínen az atomok leválasztásának következtében kialakuló barázdált szerkezet időfüggését illetve a társadalmi és biológiai rendszerekben fontos szerepet játszó kihalási folyamatok lelassulását az inhomogén gráfokon.
- Evolúciós játékelméleti modellekkel a társadalmi dilemmák elkerülhetőségének feltételeit vizsgálták azokban az irányokban, amelyeket már kísérleti eredmények is megerősítettek. Bevezettek egy olyan közlegelő játékot, ahol a négyzetrácson elhelyezkedő játékosoknak az élősködés vagy együttműködés választása mellett lehetőségük volt az egyéni vagy intézményes büntetés alkalmazásával segíteni a tisztességes magatartás fennmaradását. A numerikus eredmények a közösség meglepően összetett és érzékeny viselkedését mutatták, amikor változtatták a nyereményeket illetve a büntetések nagyságát és költségét. Ezen kívül tanulmányozták az önzés és testvériesség illetve más személyi tulajdonságok evolúciós versengésének következményeit olyan sokszereplős térbeli rendszerekben, ahol

lehetőség van a stratégiai társulások kialakulására. Néhány hónapja a kutatásaikat kiterjesztették az ultimátum játékokra illetve a potenciáljátékokra épülő modellekre is.
- Társintézetek kutatóival együttműködve mostanra sikerült a különböző népcsoportok népzenéjének elemzéséül szolgáló adatbázist 32 000 dallamra bővíteni, ami 31 kultúrát képvisel. Az adatbázis bővítése mellett továbbfejlesztették azokat az öntanuló algoritmusokat is, amelyek alkalmazásával áttekinthetőbbé és könnyebben felismerhetővé váltak az egyes népzenei kultúrák jellegzetességei, illetve a közöttük meglévő hasonlóság vagy rokonság számszerűsítése és megjelenítése. Az öntanuló algoritmusok megfelelően módosított változataival nyelvész és genetikus kollégákkal kezdték el feltérképezni és összehasonlítani a nyelvi-, népzenei- és genetikai rokonságokat.
- Néhány vállalat igényét követve az osztály mérnökei továbbfejlesztették azokat a korábban létrehozott képfeldolgozási és lényegkiemelő szoftverjeiket, amelyek a használhatóságukat ipari körülmények között igazolták.

Vékonyréteg-fizika Osztály (28 fő, 15 főállású kutató, 3 emeritusz, 5 PhD-hallgató)

Az osztály kutatási témái három, egymást erősítő szálon futnak: felfedező kutatások keretében modell rendszereket alkotnak, hogy azok tanulmányozásával megértsék a nano-léptékű anyagrendszerek szerkezetépítő alapfolyamatait; ipari alkalmazást ígérő kutatásokat folytatnak nanokompozitok, félvezető eszközök és kontaktusaik vizsgálatában; alapkutatás jelleggel módszereket fejlesztenek és ismereteket gyűjtenek az elektronok és ionok szóródása, illetve az ezek által keltett keveredések és analitikai jelkeltés témakörében, amiknek eredményeit az előbbi két témakörben is hasznosítják.

- A Cu-Mn rendszerben feltérképezték a vékonyréteg (nem egyensúlyi) fázisdiagramot a benne lévő fázisokkal és morfológiákkal egyetemben. Megállapították, hogy a szétválási tartomány közepén nanokompozit jellegű morfológia alakul ki, amelynek szemcseméretе 1-3 nm. Leírták a komponensek keveredési és szétválási folyamatait.
- A Cu-Ag rendszerben vizsgálták a spinodális szétválás folyamatát a növekedés kezdeti szakaszában, 2-10 nm méretű ötvözet szemcsékben. Megállapították, hogy a szétválási folyamat ezekben a szemcsékben megfigyelhető és jól leírható az irodalomból ismert elméleti számításokkal. A munka az ELTE fizikus BSc TDK-i hallgatók bemutatóján első helyezést ért el.
- A CORRAL FP7 projektben (a partnerekkel közösen) acélra sikeresen készítettek új típusú korrózióálló bevonatot, amelynek tulajdonságai – a tesztmérések szerint- mintegy tízszeresen felülmúlják a korábbi standard bevonatok korrózióállóságát.
- Megmutatták, hogy TiN rétegek növekedési textúráját az oxigén tartalom határozza meg. Kb. 15% oxigéntartalom alatt <111> textúra, míg magasabb oxigén tartalom esetén <002> textúra fejlődik.
- Megmutatták, hogy Ti1-xAlxN rétegek szerkezetfejlődésében a versengő növekedés következtében elsődlegesen olyan oldott Ti-t tartalmazó textúrált AlN réteg jön létre, amelynek túltelített Al(Ti)N szemcséiben spinodális szétválás következik be, létrehozva egy koherensen illeszkedő TiN és AlN nanoszemcsékből álló finom nanoszerkezetet.
- Az előző évben kifejlesztett szemcsehatár-jellemző módszer segítségével megmutatták, hogy Si-vékonyrétegek esetén is megfigyelhető az az alacsony dimenziós fém-rétegeken korábban leírt jelenség, hogy a tömbi anyagban megfigyelhetőtől eltérő szemcsehatár típusok is kialakulnak a határ összterületének minimalizálásával (szemben a tömbi anyagban majdnem kizárólagos, a határ fajlagos energiáját minimalizáló mechanizmussal). A két határ típus karakterisztikusan eltérő szögeloszlást mutat.

- Megmutatták, hogy a Moiré-ábra segítségével egyszerűen megkülönböztethetőek olyan egy-egy atomi rétegű rendszerek mint a bórnitridre (BN) tett grafén (G), illetve a két azonos réteg (BN/BN vagy G/G) egymás felett. Az azonosítás mind HRTEM, mind STM képek alapján elvégezhető.
- A MORGaN FP7 projekt keretében polikristályos gyémántra növesztett GaN-det tanulmányoztak, hiszen a éppen korábbi eredményeik (háromféle orientációjú egykristály gyémánt hordozóra is a c tengellyel kifele nő a gyémánt) sugallták, hogy ezeken is növeszthető jó minőségű GaN.
- A RODSOL FP7-es projekt egy újszerű, SIS (semiconductor, insulator, semiconductor) Si szálakból álló napelem kifejlesztésével sikeresen zárult. A napelem hatásfoka 9 %, hosszú stabilitást mutat. A szimulációk szerint ezzel a szerkezettel a 15%-os hatásfok is elérhető. Igazolták, hogy az ALD-vel növesztett rétegek megfelelnek a SIS szerkezetek szigetelőrétegeivel szemben támasztott szigorú követelményeknek Előremutató eredményeket értek el a GaN nanoszálak növekedésének leírásában és igazolták, hogy azokat egy második lépcsőben sikerült InGaN-del bevonni, ami nagy hatásfokú napelemek létrehozását teszi lehetővé.
- Megállapították, hogy AlN-re molekulasugaras epitaxiával növesztett AlGaN rétegekben az AlGaN/GaN szuperrácsok effektíven szűrik a diszlokációkat.
- NTPCRASH (NKFP) projekt keretében aláfutásgátló építése céljából szén- és bio-szállal erősített többréteges anyagokat tanulmányoztak és új funkcionálási eljárást javasoltak.
- Néhány nm vastag TaC és SiC vékonyrétegeket hoztak létre közepes energiájú (20-30 keV) ionbombázással. A rétegvastagságot a bombázó ion energiájának és dózisának változtatásával hangolni tudták. Kihasználva a FIB lehetőségeit, ezeket a jó minőségű vékonyrétegeket nm-es laterális felbontással meghatározott template szerint lehet létrehozni.
- 600°C-ig egyenirányító Ti/Cr/Al kontaktusokat készítettek n-GaN-hez. 900°C-on a Ti_2AlN, Cr_3GaN és CrN fázisok megjelenése magyarázza a kontaktusok ohmos viselkedését.
- Különféle hordozókra helyezett grafén-t vizsgáltak atomisztikus szimulációkkal, különös tekintettel a síkból való kitérésre, deformációra. Fémes hordozókon (pl. Ru(0001), Cu(111)) pásztázó alagút mikroszkópos vizsgálatok azt mutatják, hogy néhány nm-es periodikus szupercellák alakulnak ki, amelyek 0,1-0,3 nm körüli korrugációt mutatnak. Molekula dinamikai szimulációkkal sikerült reprodukálni a jelenséget.
- Újgenerációs mágneses adatrögzítés céljából megkezdték 1 pont-1 bit mintázat kialakítását mágneses vékonyrétegekben, 193nm-es Ar-F excimer lézer impulzusokkal. Az új megoldással a vékonyrétegek nanomintázása mind fotoreziszt-, mind fotoreziszt mentes technológiákkal lehetővé válik.
- A nagyfeloldású transzmissziós elektronmikroszkópos mérések pontosabbá tételére kalibrációs módszert dolgoztak ki; Au referencia részecskék in situ alkalmazásával kimutathatók a nanorendszerekben helyileg létrejött atomi rácstorzulások.
- Meghatározták azokat az effektusokat, amik nanorészecskék HRTEM megfigyelésénél műtermékeket okoznak. Megmutatták, hogy csak bizonyos pontosság-korlátok között lehetséges eldönteni a HRTEM képről, hogy mag-héj szerkezetet látunk-e.
- OTKA posztdoktori kutatás keretében magas SiO_2-tartalmú vulkáni üvegekben kialakuló, 4-5 at% vasat tartalmazó rendezett nanodomének szerkezetét magyarázták a tridimit/cristobalit/nontronit nanokompozit szerkezeti modellel, mely kielégítően magyarázza a mért kémiai összetételt, diffrakciós intenzitásmaximumok helyét és a textúra hiányát.

Mikrotechnológia Osztály (34 fő, 11 kutató, 6 PhD-hallgató (4 MSc-, 4 BSc-hallgató))

Az intézet legnagyobb infrastruktúráját, a mikrotechnológiai tisztalabort üzemeltető osztálya. Feladata integrált mikrorendszerek, mikrofluidikai és fotovillamos szerkezetek kutatása, beleértve a nanoszerkezetek beágyazását. Az év legfontosabb kutatási eredményei:

- 2011-ben fejeződött be a „Nanoelectronics for Safe, Fuel Efficient and Environment Friendly Automotive Solutions" – SE2A, ENIAC JTI projekt, melyben fő feladatuk járművek gumiabroncsába integrálható telemembrános 3D erőmérő szenzor kifejlesztése volt. A WESZTA-T Kft-vel az érzékelő MEMS eszköz új típusú tokozását valósították meg, és a gumiba integrált erőmérő eszközzel vezeték nélküli táplálással és kiolvasással valós körülmények között autóra felszerelt kereken sikeres demonstrációs méréseket valósítottak meg az eszköz alkalmazhatóságának bizonyítására a jármű- biztonság növelésében.
- A SE2A projekt keretében kifejlesztettek egy nano-WO_3 alapú gázérzékelőt, ami alkalmas NH_3 gáz kis koncentrációjú (100 ppm NH_3 N_2 gázban) detektálására. alacsony hőmérsékleten, teljesítményigénye <3, 3 mW. Szeletkötéssel kialakított nyomásmérő MEMS szenzoruk alkalmazhatóságát is demonstrálták autóipari környezetben.
- Az ENIAC JTI „Chip Architectures by Joint Associated Labs for European diagnostics" CAJAL4EU projekt keretében mikrofluidikai rendszerek kutatása folyik. Üveg-Si alapú mikrofluidikai chipen feladatuk alkalmas szerkezet kialakítása a vérmintákban jelenlévő alakos elemek és a plazma szétválasztására. A Zweifach-Fung hatás kihasználásával 10–40 μm csatornaszélesség, 30°-os elágazás alkalmazásával 80%–90%-os szeparációs hatásfokot értek el.
- Ugyanebben a projekben a nanopórusos bioszenzorok kutatás-fejlesztése során <1μm vastagságú fémezett membránstruktúrát készítettek Si chipen, majd fókuszált ionsugárral 30-80 nm átmérőjű lyukakat fúrtak a membránba. Elektronsugár-segített oxidleválasztási módszerrel érték el a megkívánt 5–30 nm átmérőjű lyukméretet. A nanopórusok mikrofluidikai környezetben integrálva és funkcionalizálva fehérjék, különféle biomolekulák nagyon kis koncentrációjának detektálására alkalmasak. A projekt folytatásaként kardio-vaszkuláris betegségek diagnosztikájában fontos biomarkerek kimutatására teszik alkalmassá a nanopórusos eszközt.
- Polimer (PDMS, SU8) alapú mikrofluidikai szerkezetek kutatása a cél a „Polymer Photonics Multiparametric biochemical SENSor for Point of care diagnostics" – P3SENS EU FP7 projekt keretében. Megfelelően kezelt, higított és kevert analizálandó folyadékot kell az optikai érzékelő felületéhez eljuttatni. A mikrofluidikai csatornákba építhető keverőstruktúrákat modelleztek, terveztek és az optimalizált struktúrákon a fluoreszcencia mérésekkel igazolták a megfelelő hatásfokú keverést a projektpartnerek számára.
- Vékony dielektrikum-membrán felületén valósítottak meg termooszlop (thermopile) szerkezeteket a „Terahertzes forrás, érzékelő, és feldolgozó struktúrák spektrális képalkotáshoz" – TERASTART - OTKA CNK 77564 kutatási program keretében. A SZTAKI-val közösen beszerzett folyamatos üzemű 100–500 GHz-es forrással tesztelt minták az irodalomban található értékeknél jobb, 70 mV/W érzékenységet mutattak.
- Transzparens vezető ZnO/Al_2O_3 ALD multirétegek fizikai tulajdonságait XPS, SNMS, optikai és elektromos mérésekkel a „Co-evaporated four-component semiconductor thin films for photovoltaics" – OTKA 73424 vizsgálták. A rétegben lévő Al atomok 10%-a található elektromosan aktív helyen, a létrehozott réteg rétegellenállása <9E-04 Ohmcm. Egykristályos zafír hordozóra leválasztott ALD réteg is egykristályos.
- A mély reaktív ionmarás többszöri alkalmazásával eltemetett mikrofluidikai csatornával rendelkező mélyagyi elektródákat állítottak elő Si-ból. Orvosbiológiai alkalmazásokban az

unikális eszközzel a vizsgált agyterületre közvetlenül, az agy-vér gát megkerülésével lehet hatóanyagot bejuttatni.

Nagy előrelépés a mikrotechnológiai labor infrastruktúrális fejlesztésében 2011-ben a pályázati források (75 M Ft) felhasználásával beszerzett Heidelberg DLW66 típusú lézeres ábragenerátor. Ezzel 1 μm vonalszélességgel a teljes maszkfelületen, ill. direkt írással közvetlenül a megmunkálandó szelet felületén lehet geometriai ábrát létrehozni.

Az osztály munkatársai 2011-ben két új szabadalmat nyújtottak be:

- CMOS technológiába integrálható eljárás egykristályos Si alapú, eltemetett mikrofluidikai csatorna hálózattal rendelkező eszköz előállítására, a szubsztrátfelület planaritásának megőrzése mellett (Szellemi Tulajdon Nemzeti Hivatala) 2011. 04. 30., P1100170
- Gumijavító foltba ágyazott piezorezisztív elvű szilícium szenzor autógumi deformációjának közvetlen méréséhez induktív táplálással és kommunikációval (Szellemi Tulajdon Nemzeti Hivatala) 2011. 11. 21., P1100636

Fotonika Osztály (25fő, 17 kutató, 4 PhD-hallgató (8 MSc-hallgató))

Az osztály feladata roncsolásmentes vizsgálati módszerek kutatása és fejlesztése optikai (ellipszometria és Makyoh-topográfia), valamint mágneses (hiszterézis) elven, félvezető fotonikai szerkezetek, integrált optikai érzékelők és jelzésmentes bioérzékelés kutatása optikai kiolvasással.

Főbb kutatási eredmények 2011-ben:

- Az „Orvosi alkalmazású nanoméretű mágneses részecskék detektálása” NANOMAGDYE FP7-projekt keretében a külső mágneses tér hatását vizsgálták a mágneses mérőfejük működésére, majd az optimalizált mágneses szondával végeztek sikeres méréseket nanomágneses részecskéket tartalmazó gél mintákon.
- A mágneses hiszterézis alhurkok mérésén alapuló roncsolásmentes méréstechnikájuk fejlesztése keretében neutronnal besugárzott orosz és japán standard szerinti valamint hegesztési radioaktívanyagmintákat vizsgáltak az AEKI meleglaboratórimában, különleges biztonsági intézkedések betartása mellett. Olyan eljárást fejlesztettek ki, ami a felületi hatást jelentősen csökkenti. Egyértelmű kapcsolatot mutattak ki a neutron besugárzás és a mágneses jellemzők között. Ez a jövőben a reaktor tartály falának öregedését kimutató jelenlegi roncsolásos vizsgálatok kiváltást teszi lehetővé.
- Folytatták a Makyoh topográfia sikeres alkalmazását a MORGAN FP7-projektben gyémánt/Si, AlN/Si és GaN/AlGaN/AlN/Si minták morfológiájának meghatározására. OTKA-projektben kutatták a megvilágítás koherenciatulajdonságainak, a véges fényforrásméretnek és a hullámhossznak a hatását.
- Hangolható törésmutatójú és egyéb polimer-kompozit rétegek *ex situ* és *in situ* ellipszometriás vizsgálatát, polikristályos, nanokristályos és fotonikus szerkezetek modellezését, óriás mágneses ellenállású (GMR) elektrolitikus multirétegek minősítését végezték FP7-es és OTKA-támogatással.
- Az MFA-ban, saját szabadalom alapján kifejlesztett szélesszögű ellipszométer egy példányát adták el a Toledo Universitynek (Ohio, USA) és installálták egy napelemgyártó sor vákuumkamrájára. A pontforrásból pin-hole kamerába leképező dual-spektrumú (350–650, 600–1000 nm) szélesszögű ellipszométer jól működik, közös publikációk tárgya és eszköze.
- OTKA-projektben, olasz és SZFKI együttműködéssel 3,5 MeV-os energiájú N implantációval tellurüvegben és BGO kristályokban 1,55 μm távközlési hullámhosszon is

sikerült hullámvezetést kimutatniuk, majd kissé-eltérő-energiájú implantációval, kiszélesitve a „barrier" réteget ezt megismételniük.
- Vékonyréteg napelemtechnológiákhoz ellipszometriás kiértékelési módszert fejlesztettek (NKFP PVMET08) és a módszereket amorf ill. mikrokristályos szilicium, és átlátszó-vezető oxid rétegek minősítésére alkalmazták (NKFP TFSOLAR2).
- Mozgó alkatrész nélküli nagy érzékenységű, optikai érzékelőt valósítottak meg rács-csatolt hibrid hullámvezető interferometriával a svájci Creoptix cég szabadalma alapján. Az újfajta, többcsatornás, stabil műszer érzékenysége már jobb mint 10^{-7}.
- Optikai hullámvezetővel fehérjék, emberi embrionális őssejtek és nanorészecskék felületi viselkedését monitorozását folytatták OWLS (Optical Waveguide Lightmode Spectroscopy) módszerrel és modellezték a változások kinetikáját.
- A „Polymer photonic multi-parametric biochemical sensor for point of care diagnostics" FP7 P3SENS-projektben fő eredményük CRP antitestek immobilizálása biotin-neutravidin-biotin keresztkötés segítségével OWLS szenzorfelületen. Kidolgozták a polietilén-iminen (PEI) alapuló immobilizációs kémiát és igazolták a CRP antigen-antitest kölcsönhatást a műanyag csipes assay-beli alkalmazáshoz.
- Az MFA-ban növesztett a-Si/Ge:H nanostrukturákon a termikus stabilitást tanulmányozták a Debreceni Egyetemmel és az IMEM-mel (Párma) együttműködve. A hidrogén tartalmat ERDA vizsgálattal, a Si-H, Ge-H komplexek koncentrációját IR abszorpciós mérésekkel állapították meg az amorf Si és Ge mintákban a hidrogéntartalom és hőkezelés függvényében.
- LED-es fényforrások fotobiológiai vizsgálatát végezték el az emberi szervezetre esetlegesen káros (szem és bőr) közeli infravörös tartományban a besugárzási és sugársűrűségi értékek, ill. spektrális eloszlásuk mérésével 1400 nm-ig kiterjesztett hullámhossztartományban, kielégítve az IEC szabvány követelményeket. Az integrált besugárzási értékeket 1 – 3 μm tartományban mérték a szemre és bőrre vonatkozó termális hazard meghatározásához.

Kerámia és Nanokompozitok Osztály (16 fő, 8 kutató, 4 PhD-hallgató (8 MSc-hallgató)

Az osztály feladata a kiterjedt nano-preparációs és kerámia-technológiai módszerekkel új tulajdonságú szerkezetek, kompozitok előállítása és vizsgálata, különös tekintettel a méreteffektusok nyújtotta előnyök kiaknázására.

- A biogén (tojáshéj, kagyló) anyagokból előállított nano-hidroxiapatit osseogenerációra és csontpótlásra való alkalmasságát *in vitro, in vivo* és humán klinikai vizsgálatokkal (koreai együttműködés) bizonyították. A tojáshéjból előállított nano-hidroxiapatitjuk finomabb újcsont-szerkezetet, valamint gyorsabb felszívódást eredményezett, mint a kereskedelmi nano-hidroxiapatit. A tojáshéjból előállított MFA nano-hidroxiapatit fogászati implantátumok bevonására is alkalmas (OTKA, TéT).
- Kis rétegszámú nano-grafitlemezkékből álló nanoport állítottak elő őrléssel kerámia kompozit alkalmazásokhoz reprodukálhatóan, olcsón, viszonylag nagy mennyiségben.
- Szén nanocsővel és grafénnel erősített kerámia alapú kompozitok kisszögű neutronszórásos (SANS) vizsgálatával bizonyították, hogy a nanocsövek agglomerátumot képeznek, a grafén lapok azonban egyenletesen oszlanak el a kerámia mátrixban, ezért a mechanikai tulajdonságok az utóbbi kompozitban jelentősen javultak (OTKA).
- Elektro-fonás technológiával volfrámoxiddal adalékolt polimer szálakat, majd lassú oxidációval volfrámoxid szálakat állítottak elő.

- Új kutatási témájuk a diszpergált oxidkerámia szemcsékkel erősített nanoszerkezetű tömbi acélok fejlesztése portechnológiai módszerrel (intenzív őrlés és diszpergálás, szinterelés). A vegyes őrléssel mind az ausztenites, mind a martenzites minták nanoszerkezetűek lettek.
- Statikus mellett sikeresen alkalmazták a dinamikus mechanikai karakterizációt egyedi cinkoxid nanoszálakra. Nedveskémiával növesztett vertikális cink oxid nanorudak felülete és egy platina bevonatú AFM tű közötti kontakt potenciált Kelvin módszerrel mérve a rudak tetején és oldalfalán ~0.4 V a kontakt-potenciál különbség.
- ZnO nanoszálak fehérjékkel történő vezetőképesség-modulációjának vizsgálatához PMMA/fotoreziszt kombinációval és oxigén plazma alkalmazásával sikerült a nedves kémiai eljárással növesztett ZnO elektródákat elszigetelni az oldattól, hogy elkerüljék a Faraday vezetést.
- Vízszintesen növesztett ZnO multi-szál szerkezeten a Z domén/IgG kombináció moduláló hatását vizsgálták. Egészen kis koncentrációtól (25 nM) nagyobb koncentráció felé haladva a moduláló hatás telítési jelleget mutat, mert a detektálni kívánt IgG molekulák számára csökken a bekötődésre alkalmas aktív, Z-doménnel borított felület (OTKA).
- P-típusú félvezető polimer és egy fullerén módosulat segítségével sikerült olyan tömbi heteroátmenetes hibrid napelemeket készíteniük, amelyekben nanoszerkezetű cink-oxid szolgál előoldali elektróda gyanánt. Az eszközök a szerves napelemeknél megszokott nitrogén környezet helyett szabad levegőn képesek 0,47 %-os hatásfokkal üzemelni.
- A hibrid ZnO/félvezető polimer tömbi heteroátmenetes (BHJ) eszközöket optimalizálták és új típusú festékérzékenyített nanpelemeket (DSSC) hoztak létre, melyekben a nagy fajlagos felületet egy „kaktuszszerű" hierarchikus ZnO nanoszerkezet biztosította. Egy második nedves kémiai lépésben vékony (15-30 nm) hosszú „oldalágakat" növesztettek megnövelve az elektróda fajlagos felületét. A nanostrukturált elektródát festékkel érzékenyítve és lyukvezető polimerrel feltöltve sikerült működő és ígéretes napelemet előállítaniuk.

2011-ben ipari megrendelések alapján tovább bővült az osztályon kifejlesztett hagyományos műszaki kerámia-termékek előállítása (ANTE Kft.).

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az MFA szakmai vezetésével működő IMNTP – Integrált Mikro/Nanorendszerek Nemzeti Technológiai Platform a hazai mikro- és nanoelektronikai és fotovillamos kutatás-fejlesztés Stratégiai Kutatási Tervét és a Megvalósítási Tanulmányt 2010-ben publikálta: *http://www.imntp.hu/index.php?pg=menu&id=41*. Az IMNTP szakértőként közreműködik közre nemzeti és nemzetközi stratégiai anyagok véleményezésében is. Az IMNTP irodát támogatás és szponzorálás híján az MFA 2011-ben saját erőből tartotta fenn. A Platform folyamatosan frissíti a honlapot, eseményekről, pályázatokról informálja a tagságot és a közvéleményt. Ennek kapcsán hazai médiumok is megkeresték az MFA-t és a Platformot fotovillamos, elektronikai és nanotechnológiai kérdések véleményezésére, pl. a HVG, index.hu, Lánchíd rádió, MR1.

Az MFA/IMNTP alapító tagja volt (2011. március) a Nemzeti Elektronikai Kerekasztal szövetségnek, mely társadalmi és kormányzati párbeszédet kezdeményezett a hazai elektronikai iparért. A NEK célul tűzte ki a műszaki és természettudományos életpálya modell lehetőségeinek megismertetését a fiatalabb generációval, elsősorban sajtóközleményekben, rendezvényeken.

Magyarország EU-elnökségének kiemelt K+F rendezvénye volt a *EuroNanoForum 2011* konferencia és kiállítás. Ebben mérvadó partner volt az MTA MFA ill. az IMNTP a szakmai programban, valamint szervezőként. Az ENF'11 konferencia egyik kiemelt témája a kutatási eredmények hasznosítása ipari és társadalmi szinten, a másik a nanotechnológia lehetőségeinek és veszélyeinek bemutatása. Ez utóbbihoz kapcsolódva pályázati pénzekből, szponzor-támogatással és saját forrásból, egy csuklós Ikarusz busz átépítésével, a NanoDemo ötletpályázat eredményeiből és tetemes intézeti szakmai munkával az MTA MFA utazó interaktív nanotechnológiai kiállítást (Nanobusz) *www.mfa.kfki.hu/hu/nanobusz* hozott létre. A Nanobuszt sajtótájékoztatón az MTA elnöke adta át az üzemeltető Csodák Palotája képviselőjének az MTA parkolójában. A kiállítás 2011-ben megjelent még a Tudományok hídja rendezvényen majd a Kutatók éjszakája programon (Miskolc, 2011. október) és a GE-Tungsram látogatóközpont avatóján is nagy közönségsikerrel. A témában számos sajtóközlemény és interjú született.

A Nanoszerkezetek Osztály 2003-tól folyamatosan üzemelteti és frissíti az eredményeiről magyar és angol nyelven is közérthető formában beszámoló honlapot *(http://www.nanotechnology.hu)* a nagy sikerű, szabadon hozzáférhető saját fejlesztésű szimulációs programcsomaggal (Web-Schrödinger 2.1), amely a kvantummechanika egyes jelenségeit mutatja be vizuális formában. Hasonló oldalakat működtetnek a mikrotechnológiai és fotonikai terület *http://www.MEMS.hu és http://www.ellipszometria.hu* címen. Több tudomány-népszerűsítő előadással vettek részt többek közt a Mindentudás Egyeteme II. kerekasztal-beszélgetésén, az ország középiskoláiban, egyetemi szakirány népszerűsítésen, állásbörzéken.

2011-ben is két FP7 projektben (HIGH-EF és RodSol) vettek részt, melyek célja a megújuló energiatermelés eszközeként újfajta anyagokból és új elveken, javított hatásfokkal működő napelemek kifejlesztése . A témában 2011.02.24-én jelent meg róluk riport a Világgazdaság „Energia" mellékletében.

2011-ben 24 Kárpát-medencei középiskolás számára biztosított egy hetes lehetőséget az aktuális tudományos kutatásba történő bekapcsolódásra az intézet által hagyományosan megszervezett MFA Nyári Iskola http://alag3.mfa.kfki.hu/mfa/nyariiskola/. A lelkes résztvevő diákok tapasztalataikról több kéziratban számoltak be az Élet és Tudomány hasábjain.

Az MFA Nyílt Napok (tavaly 120–150 látogatóval) többek között az érdeklődő adófizetőknek biztosítanak lehetőséget az intézet kutatómunkájába való betekintésre.

Öt esetben készültek TV-felvételételek 2011-ben az MFA-ban az agyi elektródáktól a biológiai fotonikus kristályok alkalmazásáig terjedő témákban.

Népszerűsítették (egyetemi előadássorozatok, szemináriumok, blogos találkozó) nagy érdeklődés közepette a társadalomtudományok számára természettudományos hátteret biztosító evolúciós játékelmélet módszereit és eredményeit.

A különböző népcsoportok kultúrája (zenéje és nyelve) és genetikai jellemzői közötti rokonság (hasonlatosság) számszerűsítésére kidolgozott, Szervátiusz Jenő-díjjal jutalmazott módszerük eredményeit a média széles körben ismertette.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A Nanoszerkezetek osztály keretében 64 M Ft-os beruházással korszerű STM/AFM műszerbázison sikeresen működik a Koreai-Magyar Nanotudományok Közös Laboratórium az MTA és a Koreai Alapkutatási Tudományos Tanács közötti egyezmény alapján.
A European Materials Research Society konferenciájának szervezésében vettek részt, Nizzában 2011 májusában.
A EuroNanoForum 2011 egyik kiemelt plenáris előadója volt az intézmény egyik professzora.
Az ENF'11 harmadik, ún. Nanofuture Platform Napját szervezték meg Budapesten.
A Metal Oxide / Polymer Nanocomposites and Applications (MOPNA) nemzetközi Workshopot http://www.mfa.kfki.hu/en/mopna szervezték meg az MTA Székházban 2011. szep. 21-én.
Az E-MRS 2012 tavaszi ülésszakára szerveznek speciális ellipszometriás szekciót, az EMRS 2012 őszi ülésszakára grafénkutatási szekciót szerveznek.
Rendszeres a kapcsolat a Cranfield Egyetemen Prof. Jeremy Ramsden csoportjával, aki az MFA tanácsadója.
Új műszert eredményez a kutatási együttműködés a svájci Creoptix céggel (Kaspar Cottier).
Koreai-magyar TéT projekt keretében folyik az MFA és a Gangneung-Wonju Nemzeti Egyetem Fogászati és Korrekciós Arcsebészeti Klinikája együttműködésében a hazai nano-hidroxiapatit gyakorlati kipróbálása csont helyreállító műtéteknél, egy koreai vendégkutató kolléga tartós MFA közreműködésével.
Az FP7-ICT OSIRIS: Towards an Open and Sustainable ICT Research Infrastucture Strategy programban csatlakoztak a számítógépes szimulációk bővítését célzó európai együttműködéshez.
A 2011-ben zárult CORRAL és NANOMAGDYE FP7-es projektjeiket az EU kutatási magazinja méltatta.
Nagy MFA sikert hozott az ENIAC JTI SE2A projekt eredményeinek demonstrációja 2011. novemberben Helmondban (Hollandia).

Az MFA oktatási kapcsolatainak eredményessége

2011-ben MTA doktora címet kapott 2 fő, PhD-fokozatot 1 fő szerzett.
Az MFA-ban nyolc emeritus és hat kinevezett egyetemi tanár (két tanszékvezető), egy docens, két főiskolai tanár és négy habilitált doktor dolgozott 2011-ben. Vezető munkatársaik zöme oktat az ELTE, BME, SE, PE, DE, ME, SZTE, PTEK, PPKE, ÓE különböző kurzusain, doktoraik tagjai a fenti egyetemek 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-ral közös Nanokémiai Laboratórium, az ÓE KKVMK-val közös Molekulasugaras Epitaxiás Laboratórium, a BME TTK-val közös Elektronsugaras Litográfiai labor és a PPKE Információs Technológiai Karral közös MEMS laboratórium. Preparatív és analitikai laborjaikban rendszeres gyakorlatokat tartanak a graduális és posztgraduális képzés számára külső támogatás nélkül. 2011-ben 25 hallgató folytatta PhD-kutatásait az MFA-ban.

Részvétel a hazai tudományos közéletben

Az MFA és kutatói adnak egy rendes és egy levelező MTA-tagot, három fő MTA doktorképviselőt, egy-egy tagot az Élettelen Természettudományi Szakbizottságban; az MTA Vagyonkezelő Testületben. Az MFA munkatársa közül kerül ki az MTA Elektronikai Eszközök és Technológiai Bizottság titkára és hét tagja, az MTA Szilárdtestfizikai Bizottság

öt tagja, az Informatikai Bizottság egy tagja, VEAB egy tagja, a VEAB Nanotechnológiai Munkabizottság négy tagja, a VEAB Egészségügyi Informatikai Munkabizottság elnöke.
Az MFA delegálta az OTKA Kollégium két tagját, a Fizika elnökét és a Elektrotechnikai és Elektronikai Zsűri egy tagját, az ELFT FB egy tagját, az ELFT Vákuumfizikai Szakcsoport vezetőségi két tagját, ELFT Atom-, Molekulafizikai és Kvantumelektronikai Szakcsoport egy vezetőségi tagját, a Magyar Mikroszkópos Társulat elnökét és egy vezetőségi tagját, a NJSzT Orvosbiológiai Szakosztály elnöke, a Kémiai es Kohászati Munkabizottság elnökét, a Magyar Anyagtudományi Egyesület elnökét és titkárát, az Integrált Mikro/nanoszerkezetek Nemzeti Technológiai Platform szakmai vezetőjét és irodavezetőjét, az Informatikai Kollégium (Nemzeti Erőforrás Minisztérium) egy tagját,. a Nemzetközi Kardiológiai Társaság vezetőségi tagját.

Nemzetközi szervezeti, szerkesztőbizottsági tagságok

Thin Solid Films, Romanian Physics, Acta Physica Slovaca, MICRON, Nanopages valamint a „The Int. Res. and Rev. J. for Microscopy", „IEEE Sensors Journal" szerkesztőbizottsági tagja. IUPAP C13 Biz. tag, International Society of Electrocardiology vezetőségi tagja, IUVSTA hazai képviselő, IUVSTA Nemz. Bizottság több tagja, a vékonyréteg divízió vezetőségének tagja, EUROSENSORS International Steering Committee tagja, a EUROSENSORS Fellow Award Committee elnöke, ENIAC Scientific Council tagja, az ISA tanácsadó testületének tagja, a Universal Network for Magnetic Nondestructive Evaluation (UNMDE) elnöke.

A nemzetközi kapcsolatok

Az MFA 2007 óta tagja a World Materials Research Institute Forum szervezetnek, és 2011-ben lett tagja az International Solid-State Lighting Association szervezetének.
Az MFA kutatói közül többen rendszeres pályázati, ill. projektbírálók szakértőként az Európai Bizottságnál FP7 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, J. Kepler Uni. Linz, Krakow, Wien, a Max Planck és Fraunhofer intézetek sora, Akita Research Center, stb.) mellett 2011-ben is olyan ipari cégekkel dolgoztak együtt, mint THALES, Mahle, Volvo, GE Hungary, Tateyama, Picosun Oy, Weszta-T, Állami Nyomda, Semilab, BEH, stb.
Gyümölcsöző a kutatási-oktatási kapcsolat a Babes-Bolyai Egyetemmel (Kolozsvár) és a Sapientia Egyetemmel.
Az intézet a beszámolási évben egy-egy orosz, belga, cseh, szlovák, lengyel, ukrán és bolgár MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatot ápolt. TéT támogatással két szlovén, egy-egy japán, dél-afrikai, osztrák, horvát és szlovák kapcsolatuk volt.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

OTKA:
A tárgyévben hat új OTKA-pályázatuk nyert támogatást.

Nemzetközi pályázatok

TÉT (Magyar–Indiai) 10-1-2011-0305 Wolfrám- és molibdénoxid vékonyrétegek gázérzékelők és elektrokróm rétegek céljára

TÉT (Magyar–Indiai) 10-1-2011-0288 Alumínium-alumíniumoxid nanokompozitok fejlesztése és jellemzése – nanoszínterelés és szemcsenövekedés kutatása.

Díjak, címek, fokozatok:

Akadémiai díj – műszaki tudomány 1 fő,
Akadémiai díj - fizikai tudomány 1 fő,
Akadémiai Ifjúsági Díj 1 fő,
MTA Főtitkári Elismerés 1 fő,
VEAB Kiemelkedő Ifjú Kutatója díj 1 fő,
Dr. Frenczi György Emlékdíj 1 fő,
Szervatiusz Jenő-díj 1 fő,
Kutató Professor Emeritus 1 fő,
European Materials Society Outstanding Paper Award 2011 1 fő,
MFA díj (PhD-hallgató) 1 fő,
MFA díj (posztdoktori) 2 fő,
MFA díj (kutatói) 1 fő,
MFA Kiváló Kutatástámogatásért Díj 1 fő.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Nemes-Incze P, Yoo KJ, Tapaszto L, Dobrik G, Labar J, Horvath ZE, Hwang C, Biro LP: Revealing the grain structure of graphene grown by chemical vapor deposition RID C-2298-2008. Applied Physics Letters 99 (2) : Paper 023104. (2011)
2. Biro LP, Vigneron JP: Photonic nanoarchitectures in butterflies and beetles: valuable sources for bioinspiration RID A-3057-2010. Laser & Photonics Reviews 5 (1) : 27-51 (2011)
3. Zolnai Z, Nagy N, Deak A, Battistig G, Kótai E: Three-dimensional view of the shape, size, and atomic composition of ordered nanostructures by Rutherford backscattering spectrometry. Phys Rev B Condens Matter Mater Phys 83 (23) (2011)
4. Kozma P, Hamori A, Kurunczi S, Cottier K, Horvath R: Grating coupled optical waveguide interferometer for label-free biosensing. Sensor Actuat B Chem 155 (2): 446-450 (2011)
5. Fried M, Juhász G, Major C, Petrik P, Polgár O, Horváth Z, Nutsch: A Expanded beam (macro-imaging) ellipsometry. Thin Solid Films 519 (9) :2730-2736 (2011)
6. Erdelyi R, Nagata T, Rogers DJ, Teherani FH, Horvath ZE, Labadi Z, Baji Z, Wakayama Y, Volk J: Investigations into the Impact of the Template Layer on ZnO Nanowire Arrays Made Using Low Temperature Wet Chemical Growth. Cryst Growth Des 11 (6) : 2515-2519 (2011)
7. Tapasztó O, Tapasztó L, Markó M, Kern F, Gadow R, Balázsi C: Dispersion patterns of graphene and carbon nanotubes in ceramic matrix composites. Chem Phys Lett 511 (4-6): 340-343 (2011)

8. Szolnoki A, Szabó G, Czakó L: Competition of individual and institutional punishments in spatial public goods games. Phys. Rev. E 84: 046106: 1-10 (2011)
9. Kelling J, Ódor G: Extremely large-scale simulation of a Kardar-Parisi-Zhang model using graphics cards. Phys. Rev. E 84 061150: 1-7 (2011)
10. Barna A, Kotis L, Lábár JL, Sulyok A, Tóth AL, Menyhard M et al. (7): Growing imbedded Ni(3)C-rich layer with sharp interfaces by means of ion beam mixing of C/Ni layers. Journal Of Physics D-Applied Physics (ISSN: 0022-3727) 44: (12) Paper 125405: 8 (2011)
11. Grand L, Pongrácz A, Vázsonyi E, Márton G, Gubán D, Fiáth R, Kerekes B P, Karmos G, Ulbert I, Battistig G: A novel multisite silicon probe for high quality laminar neural recordings. Sensors and Actuators A: Physical, 166 (1): 14-21 (2011)
12. Szentpáli B, Matyi G, Fürjes P, László E, Battistig G, Bársony I, Károlyi G, Berceli T: Thermopile-Based THz Antenna. Microsyst Technol, DOI 10.1007/s00542-011-1387-7 Published online 03.Dec.2011, (2011)
13. Ehiasarian AP, Vetushka A, Gonzalvo YA, Sáfrán G, Székely L, Barna, PB: Influence of high power impulse magnetron sputtering plasma ionization on the microstructure of TiN thin films. Journal of Applied Physics, 109(10) Sp.Iss. 104314 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	130			Ebből kutató[2]:	76
PhD, kandidátus:	40	MTA doktora:	13	Rendes tag és levelező tag:	1
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					29

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				137
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				133
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	6	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	102
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	81
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	175	Összes független hivatkozás száma:	2351
Összes hivatkozás száma[11]:	2636		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora: 2

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 3	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			67
		poszterek száma:	34
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	54		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			20
Témavezetések száma: TDK munka:	30	Diplomamunka (BSc):	13
Diplomamunka (MSc):	20	PhD:	23

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	527 595	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 10 Teljes saját bevétel:	677 124	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	41 959	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	18	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	69 183	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	9	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	163 752	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	14	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	86 367	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	12	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	145 860	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	33 963	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	142 588	EFt

RÉNYI ALFRÉD MATEMATIKAI KUTATÓINTÉZET
1053 Budapest, Reáltanoda u. 13-15; 1364 Budapest, Pf.: 127.
telefon: 1-483 8302; fax: 1-483 8333
e-mail: palfy.peter.pal@renyi.mta.hu; honlap: http://www.renyi.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet, mint a nemzetközi matematikai élet jelentős központja, 2011-ben is eleget tett alapító okiratában leírt fő feladatának, az elért kutatási eredményekkel megőrizte az évek során kivívott rangját a világ matematikai kutatásainak élvonalában.

Az intézet tevékenysége kilenc tudományos osztály keretei között folyik. A Lendület program támogatásával létrejött csoportok (*kriptográfiai kutatócsoport* 2009-től, *alacsony dimenziós topológia kutatócsoport* 2010-től) is folytatták munkájukat a Diszkrét Matematika Osztály, illetve az Algebrai Geometria és Differenciáltopológia 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 2011-ben két kutató szerzett akadémiai doktori címet, továbbá három kutató PhD-fokozatot. Az év végén 14 akadémikus (az átlagos statisztikai állományi létszám szerint 12), továbbá 29 (st. átl. 23) akadémiai doktor, 35 (st. átl. 30) 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. 2011 folyamán további három új fiatal kutatót alkalmaztak az Akadémiától kapott két új, illetve a megüresedő álláshelyen. Az intézet kutatói a Közép-Európai Egyetemmel közösen folytatott PhD-képzés keretében 14 doktorandusz munkáját irányították. Az utóbbi években kinevezéssel felvett fiatalok mellett, a korábbi években odaítélt, de még le nem járt fiatal kutatói ösztöndíjakat is beszámítva, 2011-ben is 16 fő ígéretes tudományos kutatói utánpótlás nevelésére volt az intézetnek lehetősége.

Az intézet munkatársai – a megelőző évekhez hasonló számban – 2011 során 157 dolgozatot publikáltak, amelyből 153 tudományos, 4 pedig ismeretterjesztő publikáció. A tudományos publikációk közül 2 szerkesztett mű, 2 akadémiai doktori értekezés, 3 PhD-értekezés, 1 könyv, 7 tudományos könyvfejezet, 2 egyetemi jegyzet, 23 konferenciacikk, 113 pedig referált folyóiratban világnyelveken jelent meg, amelyből 94 külföldi folyóiratban, 19 pedig nemzetközileg elismert hazai angol nyelvű kiadványokban került publikálásra.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Algebra Osztály

- Sikerült azon csoportokat osztályozni, amelyek Noether-száma legalább a csoport rendjének a fele, és meghatározták mindezen csoportok Noether-számát. Az új tétel természetes elméleti határvonalat ér el az eddigi ismeretekhez képest. Az eredménynek programozott algoritmusokra vonatkozó következménye is van.

- Belátták, hogy egy magasabb rangú egyszerű Lie-csoport tetszőleges rácsainak sorozata lokálisan konvergál a triviális csoporthoz.
- Bebizonyították, hogy egy egyszerű csoportséma lokálisan véges test feletti realizáltjainak nincs nemtriviális invariáns véletlen részcsoportja.
- Megmutatták, hogy egy csoport akkor és csak akkor expanzív, ha expanzív egyszerű csoportok és Abel-csoportok direkt szorzata.
- Wiegold egy problémáját megoldva megmutatták, hogy minden nem-kommutatív egyszerű csoportnak egy alkalmas direkt hatványa két elemmel generálható.
- Megadták egy adott test algebrai lezárását egy felette vett (végtelen dimenziójú) vektortérnek az endomorfizmusgyűrűjében. Megszámlálható dimenziójú vektortér esetén leírták, mikor lehet az adott testnek az endomorfizmusgyűrűben algebrailag zárt testbővítése.
- Jelentős részeredményeket nyertek kommutatív félcsoportok összes hányadosfélcsoportjának a leírása irányában.

Algebrai Geometria és Differenciáltopológia Osztály

- Igazolták, hogy tetszőleges összefüggő algebrai csoport étale fundamentális csoportjának maximális *p*-hez relatív prím faktora kommutatív, továbbá valamennyi *p*-hez relatív prím fokú Galois-fedésen bevezethető algebrai csoportstruktúra.
- Explicit formulát találtak kommutatív algebrai csoportok Brauer-csoportjában az l-primér torziórészcsoport korangjára.
- Bebizonyították, hogy a rögzített szingularitás-halmazú, rögzített (generikus) sajátértékekkel rendelkező reziduumú logaritmikus konnexiók modulusterében a látszólagos szingularitás-fibrálásnak bizonyos speciális fibruma (ti. a Fuchs-féle egyenleteket tartalmazó részhalmaz) egyúttal fibruma a parabolikus fibrálásnak is.
- Egy adott link-diagram által megadott Dehn-műtéttel megszerkesztett 3-sokaságon létező stabil sima leképezések létezésével kapcsolatban, a 3-sokaság leképezését konstruálták adott linkhez. Példát mutattak homeomorf, de nem diffeomorf 4-sokaságokra, amiket megkülönböztetnek a rajtuk létező lehetséges stabil leképezések szinguláris halmazainak algebrai, ill. kombinatorikai tulajdonságai.
- Tovább folytatták kutatásaikat a Heegaard–Floer-invariánsok kombinatorikus leírásáról. Egy formulát találtak a homológia generátorai által meghatározott spin^c struktúrára. Kiterjesztették az elméletet egy **Z** felett definiált kombinatorikus elméletté és megmutatták, hogyan lehet csomókra és láncokra kiterjeszteni a zárt 3-sokaságokra használt kombinatorikus definíciót. Belátták, hogy bizonyos egyszerűen definiálható 2-dimenziós csomók mentén elvégzett Gluck-transzformáció a standard 4-dimenziós gömböt adja vissza.
- Befejezték a *Milnor fiber boundary of a non-isolated surface singularity* című könyvüket, amely a Springer kiadó Lecture Notes of Mathematics sorozatában jelenik meg.
- Folytatták a negatív definit gráf-3-sokaságokhoz rendelt „rácspont kohomológiával" kapcsolatos tanulmányaikat. Bebizonyítottak egy redukciós tételt, ami annak a rácsnak a rangját redukálja, amelyben a kohomológia komplexusa szerkesztődik.
- Megtalálták a kapcsolatot a Seiberg–Witten-invariánsok és a rácspont kohomológia Euler-karakterisztikája között.
- Ellenpéldát találtak a 35 éves Durfee-sejtésre, ami összekapcsolja egy felületszingularitás Milnor-számát és geometriai génuszát. Új egyenlőtlenséget fogalmaztak meg a régi helyett, és ezt bizonyították homogén szingularitásokra.

Algebrai Logika Osztály

- A jelenlegi tudományos gondolkodás „anyanyelvét”, az ún. elsőrendű predikátumkalkulust „lefordították” egy igencsak egyszerű L(Df3) nevű modális kijelentés-kalkulusba, megoldva ezzel egy régóta nyitott problémát.
- A számítástudományban használatos Kleene-algebráknak két motivációs részosztálya van, az ún. nyelvi modellek és az ún. relációs modellek, e két motivációs osztály azonosságelmélete megegyezik. Megvizsgálták, hogyan változik a két osztály azonosságelmélete, ha a műveletek közé felvesszük a „metszet” műveletét (ez a programok párhuzamos futtatásának felel meg), illetve ha a metszet hozzáadásával egyidejűleg elhagyjuk az üres szóból álló nyelvet (ami a semmit sem csináló programnak felel meg).
- Tudományos szenzációnak számított, hogy a CERN kísérlete szerint esetleg létezhetnek fénynél gyorsabban mozgó neutrínók. Megmutatták, hogy van a relativitáselméletnek olyan logikai felépítése, mely ezt megengedi (bizonyítva, hogy a kísérlet nem cáfolja a relativitáselméletet). Kidolgozták a relativisztikus dinamika (ütközések, tömeg) olyan verzióját, amely fénynél gyorsabban mozgó próbatestekre is vonatkozik. Azt kapták, hogy érdemes negatív tömegeket is megengedni. Ez összecseng a gyorsulva táguló Univerzum kozmológiai elméletéből adódó negatív energiasűrűségek lehetőségével.

Analízis Osztály

- Erdős és Grünwald klasszikus, interpolációra vonatkozó tételét általánosították. Vizsgálták a többváltozós polinomokra vonatkozó pontos súlyozott L_2-normára vonatkozó Markov-konstans tulajdonságait a Laguerre- és Hermite-súlyok esetén. Vizsgálták a reguláris konvex testek közelítését konvex algebrai szintfelületekkel, és megadták ennek a közelítésnek a pontos nagyságrendjét. Ezen kívül vizsgálták a pontos Markov-típusú egyenlőtlenségeket L_2-normában a többváltozós polinomok deriváltjaira vonatkozóan. Pontos becsléseket adtak az Hermite- és vegyes Hermite–Laguerre-súlyok esetén. Magasabb rendű Hermite–Fejér-típusú eljárásokat is vizsgáltak integrálható függvényekre.
- A többváltozós polinomiális Bernstein-egyenlőtlenséggel kapcsolatban bebizonyították, hogy Sarantopoulos valós geometriai módszere és Baran pluripotenciálelméleti módszere a konvex testeken teljes általánosságban ekvivalens egymással. Eredményt értek el Chung és Goldwasser egy halmazokról szóló megoldatlan sejtésének a bebizonyítása irányában. Felső becslést adtak olyan [0; 1]-beli halmazok mértékére, amelyekben nem oldható meg az $x + y = 3z$ egyenlet.
- A véges dimenziós lineáris terek különféle vektorrendszereinek több problémájával foglalkoztak. Korábban kidolgozott Fourier-analitikus megközelítéssel újabb eredményeket értek el torzítatlan bázisok létezésével kapcsolatban. Ezek az eredmények a mátrixelmélethez kapcsolódnak. A mátrixelméletről és annak alkalmazásairól egy könyv is készül.

Diszkrét Matematika Osztály

- Számos tételt bizonyítottak többrészes Sperner-rendszerekről, illetve azok általánosításairól részben rendezett halmazok elméletében.
- Gráfsorozatokkal kapcsolatban klasszikus kérdés, hogy milyen gráfok lehetnek Benjamini–Schramm-féle konvergens gráfsorozatok határértékei. Bebizonyították, hogy reguláris unimoduláris véletlen gráfok bizonyos gyenge értelemben közelíthetőek.

- Bebizonyították a Haggkvist-sejtést, mely szerint minden elég nagy teljes páros gráf felbontható egy adott páros gráf éldiszjunkt példányaira, feltéve, hogy a triviálisan szükséges oszthatósági feltételek fennállnak.
- Vizsgálatokat végeztek randomizált adatfolyam-algoritmusokkal kapcsolatban és optimális mintavételi algoritmust találtak, ami olyan fontos problémákra is megoldást nyújt, mint az adatfolyamokban található duplikátumok megkeresése.
- A titkos adatmegosztási problémákkal kapcsolatban új konstrukciót adtak biztonságos aukció-protokollra.
- Meghatározták adott területű háromszögben a leghosszabb rácsutak hosszát. Hasonlóan alsó korlátot bizonyítottak adott térfogatú testekben a konvex rácspolitópok számára.
- Tovább folytatták vizsgálataikat ε-hálókkal kapcsolatban és éles alsó korlátokat bizonyítottak azok méretére különféle terekben.
- Vizsgálták irányítatlan gráfok kromatikus számának kapcsolatát az összes lehetséges irányítás lokális kromatikus számának maximumával és bebizonyították, hogy bár ezek különbözők lehetnek, a tört (fractional) változatuk mindig egyenlő.
- Lineáris csoportok approximáló részcsoportjaira vonatkozó struktúra tételeket bizonyítottak, ami magában foglalja véges egyszerű csoportok szorzattételét és számos más korábbi tételt, mint speciális esetet.
- Tételeket bizonyítottak és algoritmust találtak a klasszikus „farkas-kecske-káposzta” probléma gráfelméleti általánosításaira.

Geometria Osztály

- Ergodikus tételt bizonyítottak a sík véletlen pontjain áthaladó leghosszabb konvex láncokra. Egyúttal új, az eddiginél erősebb aszimptotikus alsó becslést is adtak a várható lánchosszra.
- Valószínűségszámítási módszerekkel meghatározták, hogy a megfelelően skálázott *n*-dimenziós keresztpolitópok közül melyek extremálisak az átlagszélességre nézve.
- Sikerült a gömbfelületen az origóra szimmetrikus kúptérfogat mértékeket karakterizálniuk. Az eredmény a Monge–Ampère-differenciálegyenletek egy fontos osztályának megoldását is jelenti.
- Egy Banach-algebrákra vonatkozó ismert eredményt, amely idempotens elemek halmazának struktúrájára vonatkozott, kiterjesztettek tetszőleges adott polinomegyenletet kielégítő elemekre, ahol a polinomnak minden gyöke különböző.
- Belátták, hogy uniform tereknek olyan osztálya, amely szorzatra és alterekre zárt, továbbá amely önmagában bizonyos algebrai tulajdonságokkal rendelkezik (a kétféle struktúráról nincs semmi kompatibilitás feltéve), csak triviális lehet.
- Leírták, hogy a 3-dimenziós szférikus térben egy tetraéder lapterületei hogyan viszonyulhatnak egymáshoz.
- *k*-kvázi-síkgráfnak nevezünk egy gráfot, ha lerajzolható a síkban úgy, hogy ne legyen *k* páronként metsző éle. (*k* = 2 esetben ez épp egybeesik a síkgráf fogalmával.) Régóta sejtik, hogy tetszőleges rögzített *k* egész számra az *n*-pontú *k*-kvázi-síkgráfok maximális élszáma *n* nagyságrendű. Megjavították a legjobb ismert felső korlátot abban a speciális esetben, amikor a gráf bármely két élének legfeljebb egy közös pontja van.
- Sikerült bebizonyítani, hogy 1-síkgráfok lista-színezési száma legfeljebb hét.
- Bizonyos esetekben sikerült bebizonyítani az általánosságban mindmáig megoldatlan thrackle sejtést.

Halmazelmélet és Topológia Osztály

- Arhangelszkij egy több mint 40 éves problémájának vizsgálatában értek el jelentős eredményeket: többféle halmazelméleti modellt konstruáltak, melyekben léteznek tetszőlegesen nagy számosságú ún. Jakovlev-terek, és így kompakt gyengén első megszámlálható terek is.
- Felbonthatósági tételeket bizonyítottak kompakt terekre.
- Vizsgálták a szeparabilitás bizonyos általánosításai közötti összefüggéseket. Ez a kutatás szorosan kapcsolódik a nemzetközileg is intenzíven kutatott „Selection Principles in Mathematics" programhoz.
- Folytatták a lokálisan kompakt diszpergált (LCS) terek számosságsorozatainak a vizsgálatát. Konzisztens leírását adták szeparábilis LCS terek számosságsorozatainak egy újabb magassági tartományban.
- Felfedeztek egy teljesen új fraktáldimenzió-fogalmat, amelynek máris számos alkalmazását találták. A fogalom pontosan leírja a kompakt tereken értelmezett generikus folytonos függvények szinthalmazainak klasszikus Hausdorff-dimenzióját, de emellett új ismereteket ad a Mandelbrot-féle fraktál-perkolációról és a Brown-mozgásról is, valamint messzemenő általánosítását adja B. Kirchheim egy tételének.
- Vaught egy máig megoldatlan sejtése szerint, ha egy elsőrendű formulahalmaznak megszámlálhatónál több páronként nem-izomorf modellje van, akkor kontinuum sok ilyen modellje van. Ennek egy változatában nem-izomorf modellek helyett páronként egymásba elemien nem beágyazható modelleket keresnek. Sikerült igazolni, hogy számos, az eredeti kérdéssel kapcsolatos részeredmény teljesül az újabb változatra, illetve az egyenlőség-mentes logikákban is.

Számelmélet Osztály

- Az ikerprím sejtés közelítéseként néhány évvel ezelőtt igazolták, hogy a prímek között végtelen sok kis hézag van, amelyek az átlag hézaghoz képest akármilyen kicsinyek lehetnek, de nem tudtak sokat mondani az előforduló kis hézagok gyakoriságáról. Most bebizonyították, hogy az ilyen kis hézagok az összes hézagok pozitív százalékát teszik ki.
- 2011-ben igazolták, hogy egy általánosabb sejtésből (amely kapcsolatos prímek számtani sorozatokban történő egyenletes eloszlásával, de a Liouville-féle lambda függvényt is tartalmazza) következik az ikerprím sejtés.
- A Hecke–Maass-csúcsformák szuprémumára vonatkozó felső becslésben elérték a lélektani Weyl-kitevőt a szint aspektusban. A bizonyítás a korábbi módszerüket finomítja, kihasználva a spektrális súlyok speciális aritmetikai szerkezetét.
- Bebizonyították, hogy egy igen általános valós függvény felírható egy bizonyos függvény-sorozat elemeinek a lineáris kombinációjaként. E függvénysorozat automorf formákkal kapcsolatos vizsgálatok során merült fel, és szoros kapcsolatban áll a Groenevelt holland kutató által nemrég bevezetett Wilson-függvényekkel.

Valószínűségszámítás és Statisztika Osztály

- Megvizsgálták a hézagos sorok permutációit: bár e sorok számos független, azonos eloszlású változókra vonatkozó határértéktételt elégítenek ki, viselkedésük általában nem permutáció-invariáns.
- Meghatározták a több felhasználót kiszolgáló zajos csatornák titkos kulcsoktól függő kapacitását, vagyis az elérhető legnagyobb átviteli sebességet.

- Pólya György klasszikus tétele szerint a rácson való bolyongásra az origóba való visszatérés ideje a rács komplexitásától függ. A jelenség mélyebb megértése érdekében új topológiát alakítottak ki: a síkrácsnak csak a jobb felét használjuk, de alul kiütjük a vízszintes szakaszokat, és a bolyongást változó idejű Wiener folyamattal közelítették.
- Meghatározták, hogyan követi a véletlen függvények valamely osztályában vett maximuma az osztály bonyolultságát.
- A véletlen eloszlások hasonlóságát mérő mennyiségek kapcsolata történelmileg érthető módon azokra az esetekre a legkidolgozottabb, amikor az egyik komponens a Gauss-eloszlást követi. Ezeket az összefüggéseket általánosították az osztály tagjai olyan esetekre, amikor az egyik komponens csak nagy vonásokban rendelkezik a Gauss-eloszlás tulajdonságaival.
- Meghatározták két véletlen bolyongó részecskének a dinamikáját abban az esetben, ha van köztük energiacserével járó ütközés.
- A véletlen bolyongás segítségével a sztochasztikus kapcsolatokra olyan mérőszámot adtak, amely akkor és csakis akkor nulla, ha a komponensek függetlenek.
- Minden ismert becslésnél élesebb egyenlőtlenséget találtak a binomiális és normális eloszlás távolságára.

Alkalmazások

A Rényi Intézet fő profiljába a matematikai felfedező (alap)kutatások tartoznak. Alkalmazott (matematikai, bioinformatikai, informatikai) kutatásokat a Diszkrét matematika és a Valószínűségszámítás és statisztika osztályokhoz köthető kutatócsoportok, azaz a bioinformatikai, adatbázis kutatási, információelméleti és a matematikai immunológiai kutatócsoportok folytatnak. A továbbra is igen szűkös hazai pályázati lehetőségek mellett konkrét alkalmazott kutatási témákon a bioinformatikán és a *Lendület program* támogatta kriptográfián kívül 2011-ben nem dolgoztak. Az akadémiai *Lendület program* keretében létrejött 10 tagú kutatócsoport tovább folytatta munkáját a kitűzött kriptográfiai témákban. Számos fontos eredményük közül kiemelik a *titokmegosztás* területén az elmúlt év munkáira épített további eredményeiket az úgynevezett online titokmegosztás terén. Sikerült pontosan meghatározni bizonyos gráfok online és (szokásos) offline komplexitását, továbbá éles becsléseket adtak az *n* hosszúságú körök és utak bonyolultságára. Elsőként foglalkoztak a titokmegosztások kapcsán fellépő lineáris programozási (rövidítve LP) feladatokkal, illetve az ezek megoldása során fellépő problémákkal. Titokmegosztási rendszerek hatékonyságának meghatározásakor hatalmas méretű, gyakorlatban megoldhatatlan LP feladatok állnak elő. Főbb eredményük ezek méretének lényeges redukálása információelméleti eszközök segítségével, ezáltal több konkrét rendszer hatékonyságára pontos becslések adódtak. Az eredmények alkalmazásával sikerült egy korábban megoldhatatlannak tartott feladatot megoldaniuk.

A „Comparative Genomics and Next Generation Sequencing” projekt keretében folytatták a genetikai eredetű, bioinformatikai, ill. diszkrét matematikai jellegű problémák vizsgálatát. A fő kutatási témák továbbra is a genom-átrendeződések tanulmányozására, szekvencia-illesztések és evolúciós törzsfák kapcsolatának vizsgálatára és új statisztikai módszerek kidolgozására irányultak. A konzorciumi munkamegosztásban az intézet végzi az új generációs szekvenálási módszereket tartalmazó szoftverfejlesztés nagyobb részét.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézet alapkutatási témái nem alkalmasak a társadalommal folytatott párbeszéd közvetlen tárgyának. Ugyanakkor több olyan tevékenység és esemény is zajlott az intézetben, ill. az intézet szervezésében, ami szélesebb körű érdeklődésre tarthat számot.

Az intézet munkatársai jelentős szerepet vállalnak a matematika népszerűsítésében, számos ismeretterjesztő előadást, filmvetítést, vitákat tartottak egyetemisták és középiskolások számára, többek között a Tudomány Ünnepe keretében is. Ugyancsak aktívan részt vesznek a matematikai tehetségek gondozásában, 2011-ben is tucatnyi matematikai tábort és egyéb programokat szerveztek általános és középiskolás diákok számára, amelyeknek eredményességét bizonyítja, hogy az országos tanulmányi versenyek első díjasainak és helyezettjeinek többsége az adott évben, ill. korábban ezeknek a programoknak résztvevője volt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Hazai kapcsolatok

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 kilencedik évébe lépett. Jelenleg 25 PhD- és 14 MSc-hallgatója van a tanszéknek. A program tanárait továbbra is nagyobb részt az intézet adja, munkatársai a két félév folyamán 15 kurzust oktattak. Valamennyi egyetem hallgatóit figyelembe véve 2011-ben intézeti témavezető irányításával 35 PhD-hallgató, 21 szakdolgozó (14 MSc és 7 BSc) és 5 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. 2011-ben az intézet 43 munkatársa, a kutatók 61%-a oktatott valamelyik hazai felsőoktatási intézményben. Az intézet kutatói által 2011-ben tartott egyetemi tanórák száma több mint 5000.

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 Matematikai Osztályában, ennek bizottságaiban, az AKT-ben és az AKT Matematikai és Természettudományi Szakbizottságában, az OTKA bizottságaiban, a Bolyai János Matematikai Társulat vezetőségében való részvétel. A Bolyai János Matematikai Társulat elnöke, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Kuratóriumának elnöke, az MTA Fiatal Kutatói Testület matematika szakterületi koordinátora, az MTA Matematikai Tudományok Osztályának elnöke, az MTA Matematikai Bizottság elnöke és titkára, a Matematikai Osztály Doktori Bizottságának elnöke, az MTA Biometriai és Biomatematika Bizottságának elnöke, az MTA SZTAKI Külső Tanácsadó Testületének elnöke, valamint a CEU Matematika Doktori 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. Ezek az együttműködések általában nem igényeltek intézményes formát, ugyanakkor eredményességüket mutatja például a nagyszámú közös tudományos cikk. 2011-ben az intézet 45 munkatársa vett részt (multiplicitással számolva) nemzetközi konferenciák vagy workshopok szervezésében, melyek közül 13-at részben vagy teljes egészében a Rényi Intézet szervezett.

Az MTA kétoldalú egyezményes kapcsolatok keretében megvalósult utazások eredményesen szolgálták a tudományos együttműködést, segítségükkel eredményes közös kutatások folynak, hasznos információcserére és időnként konferencia-részvételre nyílik lehetőség.

Az intézet kutatói 2011-ben 12 nemzetközi tudományos bizottsági tagságot, 101 nemzetközi folyóirat szerkesztőségi tagságot mondhattak magukénak, 235 előadást tartottak nemzetközi konferenciákon, sokat közülük meghívott, illetve plenáris előadóként. Ezek közül kiemelkedik az intézet egyik munkatársának meghívott előadása a Galois bicentenárium ünnepségén a párizsi Sorbonne Egyetemen.

Az intézetből 9 kutató töltött 6 hónapnál hosszabb időt szakmai célból a következő intézményeknél: University College of London (Nagy-Britannia), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svájc), Universitat Politècnica de Catalunya – Barcelona Tech (Spanyolország), Auburn University (USA), University of Delaware (USA), University of Chicago (USA), City University of New York (USA), National Science Foundation (USA). A költségeket a meghívó fél fedezte.

Az Európán kívüli országokból, de részben Európából is érkeztek további vendégek más forrásokból (Fulbright, OTKA, akadémiai csere, és egyre nagyobb mértékben az intézettől független, a látogató által szervezett forrásból) finanszírozott látogatások keretében. Az intézet matematikus látogatóinak száma 2011-ben – a konferencia-résztvevőket nem is számítva – közelíti a másfélszázat.

A teljesen vagy részben az intézet által szervezett nemzetközi tudományos tanácskozások időrendi sorrendben az alábbiak voltak:

- 2nd Emléktábla Workshop, 2011. január 24-27.
- Paul Turán Memorial Lectures, 2011. június 1-3.
- Higher Order Fourier Analysis Summer School, 2011. június 2-4.
- Summer Symposium in Real Analysis XXXV, 2011. június 6-11.
- Infinite and Finite Sets, Conference in honor of András Hajnal, 2011. június 13-17.
- 3rd Emléktábla Workshop, 2011. június 27-30.
- Beyond Next Generation Sequencing Workshop, 2011. július 20-23.
- Memphis-Budapest Summer School in Combinatorics, 2011. augusztus 7-20.
- Topology of Manifolds Summer School, 2011. augusztus 15-19.
- Paul Turán Memorial Conference, 2011. augusztus 22-26.
- Workshop in honor of the 70th birthday of Péter Vértesi, 2011. augusztus 27.
- European Conference on Combinatorics, Graph Theory and Applications (EuroComb'11), 2011. augusztus 29-szeptember 2.
- Conference in honor of the 70th birthday of Gyula Katona, 2011. szeptember 3-4.

Az intézet által rendezett konferenciák közül kiemelkedik a EuroComb'11, a legnagyobb európai kombinatorikai konferencia – ezen adják át a diszkrét matematikai Európai Díjat is – mintegy 50 hazai és több mint 220 külföldi résztvevővel. A Katona Gyula 70. születésnapjára rendezett konferenciával együtt a résztvevők száma közel járt a 300-hoz. A diszkrét matematikai kutatások elismerése, hogy a kétévente tartott konferencia rendezési jogát az intézet számos más pályázatot megelőzve nyerte el.

Kiemelendő még a Turán Pál születésének 100. évfordulójára rendezett konferencia (közel 60 magyar, több mint 120 külföldi résztvevő), a Hajnal András 80. születésnapjára rendezett konferencia (több mint 20 magyar, mintegy 60 külföldi résztvevő) és a Valós Analízis Nyári Szimpózium (tucatnyi magyar, több mint 60 külföldi résztvevő).

Ezeknek a konferenciáknak az akadémiai és egyéb hazai támogatásokon kívül nemzetközi pénzügyi támogatói is voltak, úgymint European Research Council, Center for Discrete Mathematics, Number Theory Fundation.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Hazai pályázatok

Az intézeti kutatócsoportok a korábbi évekhez hasonlóan jól szerepeltek a hazai OTKA pályázatokon, újabb négy kutatási és három posztdoktori pályázat nyert el támogatást 2011-ben. Ez a jó szereplés azonban relatív, csak a nyertes pályázatok számához képest jó, sajnos országosan rendkívül kevés pályázatot támogattak. Ennek megfelelően – akárcsak 2010-ben – az ezekből a projektekből származó összbevétel alacsonyabb a korábbi évek szintjénél. Ezzel együtt sikerült fenntartani azt a helyzetet, hogy az intézet kutatói – szinte kivétel nélkül – részt vesznek különböző OTKA-projektekben. Azonban a bevételek összvolumenének csökkenése egyre súlyosabban kihat a kutatások finanszírozására.

Továbbra is különösen értékesek, az intézet részére nagyon fontosak az akadémiai *Lendület program* keretében meghirdetett pályázatok. A 2009-ben elnyert *kriptográfiai kutatási* és a 2010-ben elnyert *alacsony dimenziós topológiák* kutatására kapott második Lendület projekt együttes támogatottsága adta a hazai, nem OTKA finanszírozású pályázati bevételek nagy részét.

Az intézet 2010-ben elnyert és 2011-ben megvalósított egy könyvtári adatbázis- és honlapfejlesztésről szóló TÁMOP-projektet, összesen 17 millió Ft értékben, melynek keretében létrehozták a MatEK Matematikai Egyesített Katalógust (http://matek.ek.szte.hu/matek/opac). A MatEK jelenleg hét kutatóintézeti és egyetemi matematikai könyvtárban tud keresni (BME OMIKK, Debreceni Egyetemi és Nemzeti Könyvtár, ELTE Egyetemi Könyvtár, MTA Könyvtára, MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet Könyvtár, MTA SZTAKI Könyvtár, SZTE Egyetemi Könyvtár), lefedve ezzel a nagyobb magyarországi matematikai közgyűjteményeket.

A fentieken kívül 2011 folyamán Magyarországon semmilyen más pályázati lehetőség nem állt rendelkezésre sem az elméleti, sem az alkalmazott kutatásokra.

Nemzetközi pályázatok

A 7. keretprogram új típusú pályázati elemeként jelentkező, a European Research Council ún. Starting Independent Researcher és Advanced Investigators Grant-jei egy-egy még kevésbé

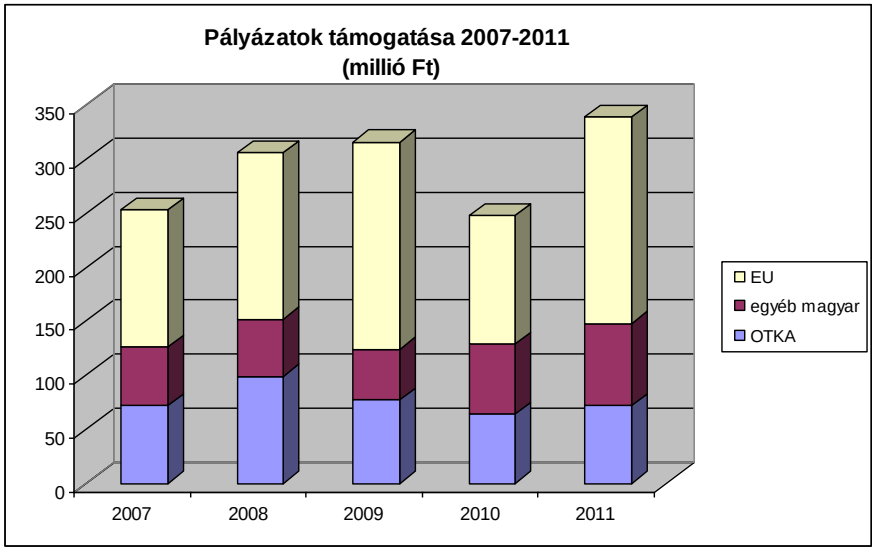
tapasztalt, ill. tapasztalt tudós vezetésével létrehozott kis kutatói csoportok kutatásainak segítését célozzák meg hosszabb távra, jelentősebb, projektenként akár több millió eurós támogatással. Ennek megfelelően viszonylag kevés projektet támogatnak és igen nagy a verseny. Nagy sikernek könyvelhető el, hogy a 2008-ban nyertes PRIMEGAPS és a 2010-ben nyertes DISCONV projektek után az Advanced Investigators Grant fordulóban egy újabb, intézeti kutató által vezetett és több más munkatársat is magába foglaló projekt nyert támogatást. A támogatott kutatás a szerződés megkötése után, 2012 első felében indul, így természetesen anyagi támogatás is csak 2012-től érkezik. Ezzel háromra nő az intézeti ERC Advanced grantek száma, ami a legmagasabb az európai matematikai kutatóhelyek között.

A 7. keretprogram keretében három egyéni kutatói mobilitási program futott 2011-ben, melyek egy-egy külföldi vagy hazatérő magyar kutató alkalmazását tették lehetővé. Az ezen projektek támogatásával hosszabb távra érkező külföldi tudósok eredményesen vesznek részt az intézeti kutatásokban, előadásaikkal, konzultációikkal új nemzetközi együttműködési lehetőségeket nyitottak meg.

A Rényi Intézet tagja egy német és dán kisvállalkozások vezette nemzetközi konzorciumnak, mely 2009-ben benyújtott és 2010-ben elnyert egy EU 7 „Research for the benefit of specific groups" projektet „Comparative Genomics and Next Generation Sequencing" címmel. A 2010-ben megindult, közel két éves munkafeladat összes támogatottsága 600 ezer euró körül lesz. A 2011. évi feladatokat a munkaterv szerint elvégezték, a projekt félidős, éves jelentését elfogadták, a projekt teljes finanszírozása folytatódik a végéig, 2012 őszéig.

Összességében, a csökkenő hazai pályázati lehetőségek ellenére az intézet 2011. évi pályázatokból származó bevétele meghaladta a 2010. évi hasonló bevételeket. Az OTKA-tól és a Lendület projektekből érkező támogatások kis mértékben meghaladták az előző évi hasonló bevételeket, míg az EU-ból származó nemzetközi pályázati bevételek a 2010-es mélypont után újra nagymértékben, közel 60%-kal emelkedtek. Így mindösszesen a 2011. évi pályázati bevételek rekord magasságúak voltak. A futó Lendület, OTKA és EU-s, illetve a 2011. év végén elnyert, 2012-től futó új EU-s pályázatok együttesen biztosítják, hogy ezek 2012-ben ne csökkenjenek. A további évekre az intézet pályázati sikeressége nagymértékben függ majd attól, hogy megnyílnak-e újabb magyar vagy nemzetközi pályázati lehetőségek.

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



V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Anh PN, Kim JK: Outer approximation algorithms for pseudomonotone equilibrium problems. Computers & Mathematics with Applications, 61 (9): 2588-2595 (2011)

2. Balog A, Cojocaru AC, David C: Average twin prime conjecture for elliptic curves. American Journal of Mathematics, 133 (5): 1179-1229 (2011)

3. Aistleitner C, Berkes I, Tichy RF: On permutations of Hardy-Littlewood-Pólya sequence. Transactions of the American Mathematical Society, 363 (12): 6219-6244 (2011)

4. Ball KM, Böröczky KJ: Stability of some versions of the Prékopa-Leindler inequality. Monatshefte für Mathematik, 163 (1): 1-14 (2011)

5. Domokos M, Szabó E: Helly dimension of algebraic groups. Journal of the London Mathematical Society-Second Series, 84 (1): 19-34 (2011)

6. Aydinian H, Czabarka E, Erdős PL, Székely LA: A tour of M-part L-Sperner families. Journal of Combinatorial Theory Series A, 118 (2): 702-725 (2011)

7. Füredi Z, Riet AE, Tyomkyn M: Completing partial packings of bipartite graphs. Journal of Combinatorial Theory Series A, 118 (8): 2463-2473 (2011)

8. Guralnick RM, Maróti A: Average dimension of fixed point spaces with applications. Advances in Mathematics, 226 (1): 298-308 (2011)

9. Némethi A: The Seiberg-Witten invariants of negative definite plumbed 3-manifolds. Journal of the European Mathematical Society, 13 (4): 959-974 (2011)

10. Fox J, Pach J, Tóth CD: Intersection patterns of curves. Journal of the London Mathematical Society-Second series, 83 (2): 389-406 (2011)

11. Hiai F, Mosonyi M, Petz D, Beny C: Quantum f-divergences and error correction. Reviews in Mathematical Physics, 23 (7): 691-747 (2011)

12. Jaikin-Zapirain A, Pyber L: Random generation of finite and profinite groups and group enumeration. Annals of Mathematics, 173 (2): 769-814 (2011)

13. Balogh J, Bollobás B, Simonovits M: The fine structure of octahedron-free graphs. Journal of Combinatorial Theory Series B, 101 (2): 67-84 (2011)

14. Simonyi G, Tardos G: On directed local chromatic number, shift graphs, and Borsuk-like graphs. Journal of Graph Theory, 66 (1): 65-82 (2011)

15. Bhupal M, Stipsicz AI: Weighted homogeneous singularities and rational homology disk smoothings. American Journal of Mathematics, 133 (5): 1259-1297 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	90			Ebből kutató[2]:	70
PhD, kandidátus:	30	MTA doktora:	23	Rendes tag és levelező tag:	12
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					6
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					15

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				157
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				153
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	19
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	94
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	93
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	6

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	77,423	Összes független hivatkozás száma:	1665
Összes hivatkozás száma[11]:	2061		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	3	MTA doktora: 2

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			235
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	12	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	32		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			43
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	14	PhD:	35

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	465 423	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 11 — Teljes saját bevétel:	280 881	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	24	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	72 107	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	3	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	78 830	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	5	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	190 723	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	5833	EFt

SZÁMÍTÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓINTÉZET

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

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet (MTA SZTAKI) nemzetközi mércével mérhető alapkutatási eredményekre építi 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 PhD-tanulmányához, alkotó tevékenységük megkezdéséhez.

A magas szintű kutatási tevékenység elengedhetetlen velejárója a megfelelő *infrastruktúra*. Ennek szellemében folytatták egy *korszerű irányítástechnikai kísérleti laboratórium* felállítását robotjárművek és UAV-k (unmanned aerial vehicles) robusztus, hibatűrő irányítási algoritmusainak kutatására és demonstrálására. Jelentős lépéseket tettek egy *SmartFactory* laboratórium kialakítására, melyben újszerű termelésirányítási kutatásokat szándékoznak folytatni, beleértve az autonóm rendszereket, valamint a valós és virtuális gyártás integrálását.

Az *EU VII. keretprogramjában* jól megválasztott területeken, a lehetőleg legerősebb, nyerési eséllyel rendelkező konzorciumokban szándékoztak részt venni, olyan témákban, melyek esetén a hazai felhasználói háttér is biztosítottnak látszik. Továbbra is kiemelkedő fontosságot tulajdonítottak legfontosabb ipari partnereiknek: GE Hungary ZRt, Paksi Atomerőmű Zrt, Hungary ZRt, AUDI Motor Hungaria Kft, Robert Bosch Kft, Knorr Bremse Fékrendszerek Kft.

A 2010 elején bevezetett belső ösztönzési rendszer szerves folytatásaként intézkedéseket kívántak tenni kutatási portfóliójuk további koncentrálására, ütőképes méretű szervezeti egységek kialakítására, melyek képesek az alapkutatási eredményekre támaszkodó kutatás-fejlesztési tevékenység legalább prototípus szintig történő végig vitelére. Ugyanakkor természetes módjának tartják a nagyobb lélegzetű feladatoknak megfelelő kutatói közösségek létrehozásának a hazai és nemzetközi együttműködések, konzorciumok, virtuális laboratóriumok alapítását és működtetését.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

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

Alapkutatási főirányok

Számítástudomány

Számítástudományi kutatásaik során több, egymással összefüggő terület szinergiáit aknázzák ki: algoritmusok elmélete, kiemelten a párhuzamosítás, az új hardver-architektúrák kihasználása céljából; adatbányászat és információ-visszakeresés; gépi tanulás, adatbázisok elmélete, illetve nagyméretű (extremális) gráfok.

Céljuk az üzleti intelligencia, a Web adatbányászata és a tudomány területén jelentkező extrém méretű információfeldolgozási problémák megoldása, az adatokban rejlő mintázatok, szabályszerűségek felismerése, kinyerése. Jellemző a matematikusi és mérnöki munka együttélése: a kutatás alapvetően kísérleti jellegű, ugyanakkor az adatok óriási mérete miatt az eljárások mély algoritmuselméleti és valószínűségszámítási ismereteken, matematikailag bizonyítható alapokon kell, hogy álljanak. Az ember-gép kommunikáció egyre inkább a természetes nyelven (magyar, angol) lefolytatott dialógus irányába tolódik. Kutatási-fejlesztési portfóliójukban a dialógushoz szükséges összes – szó-, mondat-, és párbeszéd-szintű – technológia szerepel.

2011-ben elért főbb eredményeik:

- Egyik fiatal kutatójuk 2011-ben elnyerte az European Research Council kiemelkedő presztízsű Starting Grantját. Ő az első magyar kutató a Számítástudomány területéről, aki ebben a támogatásban részesült. Az 1,15 M Euro összegű, 5 év időtartamú PARAMTIGHT projekt keretében 2012. január 1-jével új kutatócsoport alakul az intézetben, mely hatékony algoritmusok tervezésével, elemzésével foglalkozik, elsősorban a paraméteres bonyolultság eszközeit használva.
- Képek vizuális tartalmát dolgozták fel és fejlett gépi tanulási eszközökkel osztályozták (Gauss keverék felbontás grafikus ko-processzorok, GPGPU segítségével, Fisher kernel módszerek). Gráfelméleti módszereken alapuló eljárást dolgoztak ki képek fókuszált területeinek kiválasztására. Publikáltak egy új eljárást képi leírók alapján épített gráfok analízisére, melynek célja a leírók osztályozása, hatékonyságuk elemzése.
- Az „IEEE Visual Analytics Science and Technology Challenge 2011" versenyen az „Outstanding Integration of Computational and Visual Methods" díjat nyerték el.
- Optimális elrendezéseket adtak meg elosztott adattárolásra és biztonságos visszanyerésre, a rendszert és a visszanyerési feltételeket leíró paraméterek több tartományában.
- Gráfokra és halmazrendszerekre a megengedett felosztások részeinek maximális számára pontos felső korlátokat bizonyítottak, különféle előírt feltételek mellett.
- Több kombinatorikus optimalizálási feladatra bebizonyították, hogy gyors algoritmussal nem approximálhatók tetszőleges pontossággal (nincs rájuk polinom idejű approximációs séma).
- A Regularitási Lemma új alkalmazásait fejlesztették ki a Ramsey elméletben. Erdős, Frankl és Rödl eredményeit javították a Behrend konstrukció segítségével.
- Alapkutatási eredményeikre támaszkodó kutatás-fejlesztési tevékenységüket a T-Online, az Econet.hu, a Magyar Telekom NyRt., AEGON Magyarország Általános Biztosító ZRt., a FORNAX és hazai kis- és középvállalkozások (Schibsted Media Group, GVI, Universitas Press) együttműködésével végzik. A T-Online, Econet.hu és az AEGON a webes naplóállományok és a webes felhasználói szokások vizsgálatában partnerük. A Magyar Telekom, Vodafone és az AEGON az általuk fejlesztett magyar nyelvű keresőrendszer felhasználói, valamint a KKV-k mellett a szöveges adatbányászati K+F eredmények kísérleti terepe.

Rendszer- és irányításelmélet

Az irányítási rendszerek elméleti és módszertani hátterét a matematikai rendszer- és irányításelméleti kutatások adják. Ezek alapozzák meg az automatizált irányítási rendszerek alkalmazásával kapcsolatban az intézetben végzett egyéb kutatás-fejlesztési tevékenységet is.

A kutatás fő tématerületei a rendszermodellezés és -identifikáció, az adaptív és robusztus irányítási, jelfeldolgozási és szűrési módszerek, az elosztott és hálózatba kapcsolt rendszerek irányítása, valamint a folyamatrendszerek. Lineáris és nemlineáris rendszerek, folytonos és diszkrét idejű megközelítésben, valamint a determinisztikus és sztochasztikus szemléletmód egyaránt figyelmet kapnak.

Az időinvariáns geometriai rendszerelmélet módszerkészletének kiterjesztése az időben változó és/vagy állapotfüggő paraméterű lineáris modellstruktúrákra (LTV, LPV és qLPV modellek) a kutatási módszertan egyik stratégiai irányvonala. Az LPV és qLPV modellosztályokkal leírható irányítási feladatok dualizálásával fontos eredményeket várnak hasonló rendszerekre vonatkozó szűrési és detektálási feladatok megoldásában és a szűrési és irányítási algoritmusok robusztussági tulajdonságainak javításában. Az átkapcsolást végző (switching) rekonfigurálható irányítórendszerek különböző osztályainak vizsgálata, az adaptív szűrési és irányítási módszerek kutatása kiemelkedően fontos a környezetállóság és rendszer paraméter változásokkal szemben vett érzékenységének (robusztusság) javítása tekintetében.

Az elméleti kutatás lépést tart a gyorsan fejlődő irányítástechnikai technológia által felvetett új problémákkal, rendszerelméleti megalapozó válaszokat keresve pl. a földi, légi és űrjárművek, az elosztott és hálózatba kapcsolt rendszerek speciális irányítási és szűrési problémáira, a kommunikációs technológiákra épülő nagyméretű rendszerek által felvetett kérdésekre.

Hangsúlyos figyelem fordul a kidolgozott elméleti módszerek gyakorlati alkalmazhatóságára, így a módszerek robusztusságára és a rendszerek performancia tulajdonságainak valós környezeti feltételek melletti vizsgálatára. Ehhez igazodóan az irányításelméleti kutatási tevékenység egyenszilárdságú módon támaszkodik alapvetően elméleti kutatásokat támogató projektekre (OTKA, FP7), az eredmények gyakorlati hasznosítását előkészítő projektekre (FP7, NFÜ), valamint ipari partnerekkel végzett közös K+F tevékenységekre.

A kutatási célokban szereplő módszerek és megközelítések alkalmazásával 2011-ben fontos eredmények születtek földi és légi járművek különféle irányítási feladatainak megoldásában. Robotrepülőgépek kutatása terén a korszerű repülésben alkalmazható navigációs berendezések és az autonóm mozgást megvalósító irányítórendszerek kutatása hozott új eredményeket. Kiemelkedő sikereket értek el a nagy-megbízhatóságú (jármű) irányítórendszerek, a hibadetektálás és diagnosztika, valamint a repülési vészhelyzetek felismerésére kifejlesztett érzékelő rendszerek területén is. A racionális ortogonális bázisok továbbfejlesztéseként létrejövő hiperbolikus wavelet konstrukciók – a jel- és rendszer-modellezési, valamint rendszer-identifikációs alkalmazási lehetőségek mellett – utat nyitottak az indefinit metrikájú rendszerek leírása, ezen keresztül egy hiperbolikus rendszerelmélet megalkotása felé. Ennek egyik első eredménye volt egy, a rendszerek pólusainak meghatározását újszerű módon lehetővé tevő identifikációs algoritmus kidolgozása.

A rendszer- és irányításelméleti eredmények primer felhasználói az energia, jármű és közlekedésipar. Az ipari partnerek (Airbus, Bosch, Knorr-Bremse) bevonásával végzett európai és nemzeti kutatási projektekben (ADDSAFE-FP7, TRUCKDAS-NFÜ) az elméleti eredmények gyakorlati alkalmazhatóságát szem előtt tartva folytattak kutatási tevékenységet. Ipari felhasználásra előkészített eredmények születtek korszerű járműfedélzeti irányító-rendszerek hibatűrő kialakításának tervezésére, a jármű flották koordinált irányítására, az

intelligens vezető nélküli járműirányítási megoldásokra, szenzorfúziós módszerek alkalmazására és az elektronikus fék és kormány alkalmazásának integrált irányítási módszereire.

Mérnöki és üzleti intelligencia

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

A mérnöki és üzleti intelligencia téren folytatott kutatások fő célja olyan modellek, módszerek és technikák kutatása és kifejlesztése, melyek alkalmasak a változó, bizonytalansággal terhelt környezetben működő, összetett műszaki és gazdasági rendszerek valósidejű működtetésére, egyensúlyt teremtve az optimálás, autonómia és kooperáció terén. A kutatás több tudományterület – jellemzően a számítástudomány, az operációkutatás, a gyártástudomány és a tudásalapú módszerek – együttes művelését igényli.

A 2011-ben elért alapkutatási eredményeik közül elsősorban a következők emelendők ki:
- Hatékony algoritmusokat fejlesztettek ki nagyméretű termelésütemezési problémákra, véges kapacitású erőforrások (gépek, anyagok, munkaerő), alternatív folyamattervek és az átállások figyelembevételével, többcélú optimalizálási kritérium mellett.
- Az erőforrás-kiegyenlítő (resource levelling) problémára a korábbi módszereknél gyorsabb, bizonyítottan (közel) optimális eredményt nyújtó, egzakt algoritmust adtak.
- Olyan kétszereplős játékelméleti problémák terén értek el új eredményeket, ahol az egyik szereplő teljes információval rendelkezik a másik viselkedéséről, és saját cselekvését a másik fél várható racionális viselkedését feltételezve határozza meg. Az eredmények felhasználásától termelési láncok hatékonyságnövelése várható.
- Négy különböző számítási megközelítést (dekompozíción alapuló, integrált, koordinált, kétszintű programozás) hasonlítottak össze termelési láncokon belüli raktárkészletek-meghatározására és kimutatták a koordinált és a kétszintű tervezés előnyeit.
- Szélerőmű-farmok karbantartás-ütemezésének optimálására adtak új algoritmust, amely a termelésben szokásos feltételrendszerek mellett speciális körülményekre (pl. időjárás-előrejelzés) is tekintettel van.
- Új adatbányászati eljárásokat fejlesztettek ki nagyméretű termelésinformatikai, illetve ügyfél adatbázisokban tárolt, hibás és zajos adatokat is tartalmazó adattömeg tisztítására, termelésoptimálási, illetve marketing és csalásfelderítés céllal.
- Kvadratikus feladatok kezelésére új, jelentős hatékonyságnövelő technikákat fejlesztettek ki konvex belső pontos algoritmusokhoz. A lineáris programozási feladatok megoldására kifejlesztett relaxációs technikát általánosították nemszeparábilis feladatokra, és bebizonyították az eljárás konvergenciáját.
- Egészértékű programok megoldásához új vágósík generáló eljárást hoztak létre, amely egyesíti a „lift-and-project” és a „reduce-and-split” módszer előnyeit.
- Egy általuk koordinált, kiemelkedő külföldi társszerzőkkel jegyzett áttekintő cikkükben rámutattak, hogy a hatékony, de egyben fenntartható gyártás egyaránt megköveteli a cégek kooperációját és gyors válaszadási képességét, és lefektették a Cooperative and Responsive Manufacturing Enterprises (CRME) alapjait.

A kutatások részben EU által támogatott projektek keretében folynak, melyekben néhány esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak. A 2011-ben több mint 10, impaktfaktoros publikációban is megjelenített elméleti eredmények alkalmazott, iparban is hasznosuló kutatásokat alapoztak meg (lásd a Termelésinformatika és logisztika, illetve az Energia és fenntartható fejlődés pontokat).

Gépi érzékelés és interakció

Egyre nagyobb jelentőséggel bír a géppel érzékelt világ adatainak felismerése, a különböző források adatainak térbeli és tér-időbeli fúziója, a térben és időben különböző mérések közötti kapcsolatok felfedése, geometriai feldolgozása és modellezése; a mérési és felismerési/csoportosítási adatok adatbázisba szervezése, kezelése és megjelenítése; kül- és beltéri objektumok és színterek statikus és dinamikus rekonstrukciója, szerkesztése, animációja.

Különleges hangsúlyt fektetnek gépi tanulási, multimodális adatbányászati, emberi érzékelési, geometriai, optikai, optimalizáló és variációs analízis módszerekre, olyan területeken, mint a kép- és videó-feldolgozás, biometrikai azonosítás, kapcsolatok szenzor-hálózatokkal és számítógépes grafikával. Szenzorokat és új érzékelési elveket is fejlesztenek, optikai, Lidar és infra felvételek fúzióját végzik, THz-es érzékelést és képalkotást valósítanak meg.

Leginkább kiemelésre érdemes 2011-es eredményeik:
- Elvileg új eljárást dolgoztak ki alakzatok körvonalának és textúrájának különválasztására, 98-99% hatékonyság mellett.
- Új energiafüggvényt definiáltak parametrikus aktív kontúr eljárásokhoz, mellyel 91%-os pontosságot értek el összetett körvonalú alakzatok kontúrjának felismerésében.
- Különböző típusú multimédiás adatot kezelő és visszakereső szoftverrendszert fejlesztettek ki új, hash kód alapú eljárások alkalmazásával, melyek a nagy multimédiás adatbázisokon történő nagy adat-dimenziójú kereséseket segítik.
- A nagy tömegű adatokat jól leíró tulajdonságok minősítéséhez új, geometriai gráfokon alapuló eljárást dolgoztak ki.
- Nagy érzékenységű, erősítővel és jelkonverterrel integrált, multi-spektrális THz-es érzékelőtömböt készítettek 90nm-es szilícium technológiával.
- 4D Stúdiót hoztak létre és valósidejű 4D rekonstrukciót valósítottak meg grafikus kártyán.

Kutatás-fejlesztési tevékenységek

Járműipar és közlekedés

Az *intelligens és kooperatív járműirányítási* kutatásaik keretében az elektronikus fék és kormány tervezésének integrált módszerei, a korszerű szenzorfúziós és hálózati kommunikációs eljárások, valamint a járműfedélzeti irányítórendszerek hibatűrő kialakítása emelendők ki mint fő eredmények (TRUCKDAS projekt). *Járműflották* hatékony és gazdaságos üzemeltetésére kidolgozott módszerük a járműoszlop menetstabilitásának biztosítása mellett jelentős mértékben csökkenti az üzemanyag felhasználást és a károsanyag kibocsátást.

Kutatják, hogy a *közúti közlekedés* nyilvánvaló előnyeinek (rövid eljutási idő) minél jobb kiaknázása mellett miként enyhíthetők a kapcsolódó lokális és globális károk. Az elmúlt évben sikerült kidolgozni olyan többkritériumú szabályozási algoritmusokat, amelyek az optimalizálás során egyaránt figyelembe veszik az említett szempontok gazdasági és társadalmi elvárásait.

Az *intelligens vezetőnélküli közúti és légi járművek* esetén is a legnagyobb kihívást az egyre növekvő autonómia iránti igény támasztja. A járművek esetében megfigyelhető, hogy az egymástól független funkciók ellátására kifejlesztett rendszerek, mint pl. a radaros távolságmérésen alapuló tempomat és a kamera-információkat felhasználó sávtartó asszisztens, egyre fokozottabban összekapcsolódnak, és a nagy mennyiségű információt felhasználva egyre intelligensebb feladatok elvégzésére válnak alkalmassá. Azonban a magas fokú autonómia megköveteli a nagy megbízhatóságot is, mely területen szintén jelentős

kutatási eredményeket értek el. A robotrepülőgépek egyre sokoldalúbb és intelligensebb viselkedésének megvalósításán egy, az USA haditengerészetének kutatási hivatala által támogatott projekt keretében foglalkoztak, ahol autonóm ütközés elkerülő rendszer kifejlesztése folyik több független rendszer nagyfokú integrációja útján.

A *járművek* nagyobb fokú *megbízhatóságát* hibadiagnosztikai módszerekkel igyekszenek javítani az ADDSAFE EU FP7 projekt keretében, ahol az Airbus hathatós együttműködésével folyik a repülőgépipar számára felhasználható hibadiagnosztikai módszerek tesztelése. Intézeti belső pályázat kapcsán olyan hibatűrő robotrepülőgép architektúra kialakításán dolgoznak, mely kedvező ára mellett lehetővé teszi a kis méretű robotrepülőgépek tanúsítását, ezáltal alapot teremtve e repülőgépek közös légtérbe való integrációjára.

Kifejlesztettek egy autógumi-bordázatot mérő optikai rendszert, amit beépítésre került a német API (Automotive Process Institute) vállalat futómű-diagnosztikai rendszerébe, mely prototípusa a párizsi Equip Auto 2011 kiállításon a „Services - Service Stations" kategóriában innovációs fődíjat (Golden Trophy) nyerte el.

Termelésinformatika és logisztika

A termelési és kapcsolódó logisztikai rendszerek tervezését és hatékony működését támogató, ugyanakkor a versenyképesség mellett a fenntarthatósági követelményeket és társadalmi elvárásokat is figyelembe vevő megoldások kifejlesztése és alkalmazása napjaink egyik kulcskérdése. A terület kiemelt szerepet kap mind az Európai Unió (*Manufuture, Factory of the Future*), mind hazánk gazdaság- és tudománypolitikájában (Új Széchenyi Terv).

Ez irányú K+F tevékenység termelő, szolgáltató és logisztikai rendszerek tervezését és modellezését, valamint működésük digitalizálását, irányítását, és optimalizálását célozza, mégpedig üzemi, vállalati és hálózati szinten egyaránt. Olyan világszínvonalú megoldások kifejlesztésére törekszenek, melyek jól használhatók mind globalizált nagyvállalatokban, mind pedig a velük együttműködő kis- és középvállalatokban, akár szolgáltatások (*e-service*) formájában is. A témakörrel kapcsolatos alkalmazott kutatás-fejlesztés és ipari bevezetés jó része a 2010-ben az intézetben megalakult *Fraunhofer-SZTAKI Termelésmenedzsment és – informatika Projektközpont* keretében folyik.

A legfontosabb, 2011-ben elért eredmények a következők:
- Saját alapkutatási eredményeken alapuló, általános célú, a kapcsolatos nemzetközi szabványoknak (ISA-95, ISA-88) megfelelő, a kis- és középvállalatok speciális igényeit is kielégítő termelésütemező rendszert fejlesztettek ki, melyet elsőként a Bosch-Rexroth magyarországi gyárában telepítettek.
- Szélerőmű-farmok karbantartás-ütemezésére kialakított rendszerük prototípusát átadták a szélerőmű ipar világszerte egyik legjelentősebb cégének (Gamesa). Az ipari bevezetést a cég és a SZTAKI szakemberei közösen készítik elő.
- Korábban létrehozott termékkövető eljárásukat kiterjesztették gyorsan romló élelmiszerek követésére. Tovább vizsgálják az IoT (Internet of Things) potenciális lehetőségét és hatását a termelési és logisztikai rendszerekre.
- Eljárást fejlesztettek ki programozható logikai vezérlők (PLC-k) kódvisszafejtésére gyártórendszer-topológiák automatikus feltárására.
- A Siemens Corporate Research számára továbbfejlesztették a belső pontos módszeren alapuló optimalizáló motorjukat.
- Robotikai kutatásaik során a présszerszám nélküli, robotokkal végzett fém és műanyag lemezalakítási folyamatok irányításában értek el új eredményeket.

Az eredmények ipari felhasználása kiemelkedő vállalatoknál, úgymint az Audi Hungaria Motors, Knorr-Bremse Fékrendszerek Kft, Bosch Rexroth Pneumatics Ltd., Hitachi, Gamesa,

CAMPDEN Kht. történik. Külön kiemelkedő a SZTAKI és a HITACHI cég több éve folyó, több, közösen benyújtott szabadalomhoz is vezető kutatás-fejlesztési együttműködése, mely most már a félvezetőiparon túl az energetikai gépek és berendezések gyártására is kiterjed.

Energia és fenntartható fejlődés

A fenntartható fejlődés egyik alapvető feltétele az energiatermelő, -szállító, és -átalakító rendszerek adaptálása a változó igényekhez és lehetőségekhez. E rendszerek irányítása és felügyelete területén a megújulás egyik kulcsa az informatikai eszköztár megnövelt adatfeldolgozási, -tárolási és -továbbítási kapacitása, ami az automatizálás és a hatékonyság növelése terén is új lehetőségeket nyit, valamint új problémákat vet fel. Kiemelten foglalkoznak az alábbi témákkal:

- *Energiatermelő rendszerek irányítása és felügyelete*: A SZTAKI új megoldásokat fejlesztett az erőművi működés biztonságának és folyamatosságának garantálása és verifikációja terén, melyek közül kiemelkednek az alábbi, a Paksi Atomerőmű élettartam-hosszabbítását támogató munkák:
  - az erőmű szabályozási célú, a primer- és szekunderköri dinamikákat leíró matematikai modelljének elkészítése;
  - az erőmű irányítástechnikai rekonstrukciójának egyik lépéseként a Szabályozó és Biztonságvédelmi Rendszer (SzBVR), illetve azon belül a Reaktorteljesítmény Szabályozó (RTSz) felújításához szükséges specifikációk összeállítása;
  - az erőmű tesztrendszereinek újratervezése és újraimplementálása;
  - a megtervezett védelmi logikák helyes működésének igazolására olyan formális modellek és algoritmusok fejlesztése, amelyek hatékonyan kezelik a védelmi rendszerek extrém nagy (pl. 10^{13} állapotot tartalmazó) állapotterét.
- *Energiahálózatok optimálása*: az elektromos hálózatok üzemeltetésének legnagyobb kihívása a termelő és fogyasztó csomópontok közötti optimális energetikai egyensúly megteremtése úgy, hogy azzal biztosítható legyen a folyamatos, megbízható, költséghatékony és a törvényi előírásoknak megfelelő működés. Ez matematikai értelemben egy nemlineáris diszkrét feladat megoldását követeli meg egy 10^3-10^5 csomóponttal rendelkező hálózaton. A feladat megoldására kidolgozott algoritmusuk beágyazásra került egy világcég szoftvertermékeibe.
- *Szélerőművek felügyelete és karbantartás-tervezése*: a SZTAKI által e feladatokra fejlesztett megoldások bevezetés alatt állnak egy nagy európai szélerőmű-gyártó vállalatnál.

Biztonság és felügyelet

A biztonság fontossága rendkívüli méretekben megnövekedett az elmúlt években. Az informatikai rendszerek jelentősen hozzá tudnak járulni a biztonság fokozásához. Az *informatikai rendszerek biztonsága* (cyber security) napjaink egyik kulcskérdésévé vált, mely a kritikus infrastruktúrák (pl. energiatermelés, közlekedés) területén is egyre nagyobb jelentőségre tesz szert.

A *távfelügyelet, távérzékelés* kutatómunka célja új tudományos módszertan bevezetése különböző forrásokból származó és különböző időléptékkel készített 4D (tér- és időbeli) távérzékelt adatsorozatok automatikus értelmezésére, ami egyes területosztályok elkülönítésén és meghatározott objektumok és változásminták észlelésein túl lehetővé teszi a helyszínek komplex, többszintű leírását. Az elemzéshez légi fotókat, műhold felvételeket, infra és radar képeket, valamint földi és légi rögzítésű LiDAR pontfelhőket használnak fel. Feladatuk központi részét képezi több adatforrás regisztrációjának és intelligens fúziójának vizsgálata, 3D/4D minták reprezentációja és gépi tanulás alapú felismerése.

2011-ben elért főbb eredményeik:

- *Automatizált felügyeleti rendszer a viselkedés vizsgálatával*: Az EU THIS projekt során olyan valósidejű eljárásokat dolgoztak ki, melyek a közlekedési csomópontok megfigyelése során fellépő főbb események jelzéséhez biztosítanak automatikus eszközöket. Az elkészített algoritmusok alkalmazhatók egyrészt egy személy cselekvéseinek (pl. tárgy elhagyása, rendhagyó viselkedés, elesés), másrészt személyek közötti interakciók (pl. verekedés, üdvözlés, kézfogás) felismeréséhez.
- *Harcászati támogatás sokszenzoros hálózattal*: Az Európai Védelmi Ügynökség (EDA) támogatásával a MEDUSA projektben elkészült egy rugalmas, bővíthető és robusztus rendszer védelmi döntéstámogatáshoz városi harci környezetben, amiben számos multi-szenzoros feldolgozó modul képes térben szétszórt szenzorok adatainak fuzionált feldolgozására, alacsony és magas szintű események felismerésére, az események és riasztások megjelenítésére és a felhasználói modulok integrálására.
- Elkészült az ivóvíz automatikus monitorozására kifejlesztett színes digitális holografikus mikroszkóp az alga-klasszifikáló rendszerével együtt.
- Az Országos Atomenergia Hivatal felkérésére egy, a nukleáris létesítmények irányítástechnikai rendszereinek számítógépes biztonságát szabályozó útmutatót készítettek. Ipari felhasználása a magyar nukleáris létesítmények számítógépes irányítástechnikai rendszereivel kapcsolatos védelmi architektúra kialakítása során várható.

Hálózatok, hálózati rendszerek és szolgáltatások, elosztott számítások

A terület fontossága megkérdőjelezhetetlen. Az előkészítés alatt álló Horizon 2020 (FP8) programban kiemelt terület az információs és kommunikációs technológiákkal kapcsolatos alapkutatás, így a jövő internete. Az egész témakörre jellemző a nagy komplexitású rendszerek összekapcsolt, együttes kezelése, ami egyrészt rendkívül nagy adatmennyiségek feldolgozását igényli, másrészt lehetővé teszi a kisebb, vagy nagyobb, heterogén és/vagy ad-hoc közösségek információcseréjének és közös munkavégzésének segítését közös tudástárak kontextus-orientált létrehozásával.

A SZTAKI-ban eddig elért eredmények a következőkben foglalhatók össze:

- *Grid- és felhő-számítások*: Világszerte elismert és használt P-GRADE Grid portaljukra alapozva a SZTAKI által koordinált SCI-BUS FP7 projekt 27 Grid portált fog felállítani Európa országaiban. A SZTAKI Dekstop Grid technológiát használják Európa és Ázsia számos országában a szolgáltatás gridek és desktop gridek integrálására.
- *Ubiquitous computing*: Az ILI nevű GOP projekt keretein belül egy beltéri környezetbe telepíthető, flexibilis kontextus-orientált smart-space keretrendszert hoztak létre.
- *Service-oriented computing*: Szemantikus alapon kiterjesztettek egy multi-ágens erőforrás-foglalási algoritmust a szoftver licenszek alkalmazására, mely grid vagy SaaS környezetben használható. Az eredmények részlegesen kerültek felhasználásra a NUANCE (USA) számára cloud szolgáltatás fejlesztése során.
- *Szemantikus web*: Létrehoztak egy 11 millió triple-ből álló nyilvános LOD (Linked Open Data) szolgáltatást, melyet meglévő relációs, illetve hálós adatbázisok tartalmának konvertálásával töltöttek fel. Szemantikus keresőt implementáltak milliós nagyságrendű szabad szöveges címkében való kereséshez.
- *3D internet*: Magyarországon egyedülálló, de az Európai Unióban is kiemelkedő 3DVRR (Virtual Reality Room) laboratóriumot építettek fel, melyre kifejlesztették a VirCA (Virtual Collaboration Arena) platformot, az intézmények közötti gyors tudásmegosztást és azok kollaborációját.

- *Extrém nagy adatok hasznosítása*: Milliárd oldalból álló, sok Terabyte adat kereshetőségét és újszerű, jól skálázható gépi tanulási módszerekkel történő elemzését oldották meg, illetve sok százmillió ügyfélrekord azonosság-feloldására adtak eljárásokat. E területen is jelentősek az ipari hasznosítások: Ügyfélismeret (AEGON), Web analitika (archívumok, közvélemény-kutatók, piackutatás), közösségi média (Magyar Telekom, Vodafone), várostervezés és navigáció (NavNGo).
- *Közösségi intelligencia és mobil internet alkalmazások*: Kontextus-orientált middleware-t fejlesztettek a Mobil Innovációs Központ projekt keretében. Megújították a SZTAKI Szótárt, mely a közösségi szótárkészítés új platformját valósítja meg. A RICOH-nak (Japán) fejlesztett DONAU rendszer teljes egészében ipari megbízás alapján készült. A Web4Groups EU által támogatott projekt folytatásaként megvalósult és értékesítésre került a web4us rendszer (Web4us Software und Services GmbH által).
- *Képi információkeresés*: Egy kutatói (e-science) platformot hoztak létre, amely többféle képi és szemantikus keresési algoritmus kombinálását és tesztelését teszi lehetővé. Elosztott környezetben 10 milliós nagyságrendű kép indexelését és keresését kezelik haté-konyan. A „swarm intelligence" területén sok-kamerás követési eljárásokat dolgoztak ki.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Mint azt az előző pontban írtak is alátámasztják, a SZTAKI által művelt kutatási területek összhangban vannak a világ előtt álló nagy kihívásokkal (*big challenges*). Az informatika lehet a kihívásokra adandó válaszok egyik hajtómotorja. Az intézet által kiemelten kezelt K+F területek, mint a járműiparral kapcsolatos mechatronikai kutatások (elektromos jármű és járműirányítás), vagy mint a hagyományos és megújuló energiaforrások automatizálási és informatikai problémái pedig közvetlenül kapcsolódnak a kihívásokhoz. Természetes módon, a tématerületek harmonizálnak az *EU kiemelt K+F programjaival*, elsősorban az Information and Communication Technologies; Materials and New Production Technologies; Factory of the Future, Energy, Transport (including Aeronautics) programokkal.

Az *Új Széchenyi Terv* az egész gazdaság szempontjából prioritással kezeli a mobilitás, járműipar, és a logisztika; az informatika és a számítástechnika; és az új energetikai és környezetvédelmi fejlesztések K+F+I témaköröket. A termelésmenedzsment és -informatika területen létrejött *Fraunhofer – SZTAKI* kooperáció keretében sikeresen folyik a témakörben létrejött, elméleti kutatásokon alapuló alkalmazott kutatási eredmények ipari hasznosítása.

A SZTAKI internetes szótár szolgáltatása 16 éve áll a felhasználók rendelkezésére, és időközben a leglátogatottabb magyar internetes on-line szótárszolgáltatássá vált. Naponta 100–140 ezer látogató végez több mint 1–1,2 millió lekérdezést. Az intézet, saját társadalmi felelősségvállalása tudatában, belső finanszírozás segítségével fejlett nyelvtechnológia és internet szolgáltatások szemantikus technológiái alapján újította meg a szolgáltatást. A SZTAKI – BME közös szervezésében nagyméretű demonstrációk kerültek megrendezésre a 3D virtuális szobában. A SZTAKI a *Kutatók éjszakája 2011* rendezvénysorozaton két helyszínen is bemutatóval képviseltette magát. A tudomány társadalom iránti nyitottságát erősítették kutatóik, amikor jelentős számú tv- és rádióriportot adtak eredményeikről, minden alkalmat megragadtak azok megjelentetésére az írott sajtóban.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Nemzetközi kapcsolatok

Kiemelkedően szerepeltek az EU VII. Keretprogramjában, ahol eddig 37, támogatást nyert projektben résztvevők, 6 esetben konzorciumvezetői szerepet is ellátnak. A programok keretében Európa legkiválóbb cégeivel dolgoznak együtt az informatika-, az autó-, az energia- és a repülőgépgyártás területéről.

A Fraunhofer-SZTAKI együttműködés kapcsán is tovább erősödtek németországi kapcsolataik. Előkészületek folynak hasonló keretszerződések aláírására a Bosch-sal, a Hitachi Yokohama Research Laboratory-jával és a szélerőműveket gyártó spanyol GAMESA céggel.

Az intézet munkatársai eredményesen működnek a témakör legjelentősebb nemzetközi tudományos szervezeteinek (CIRP, IEEE, IFAC, IFIP, stb.) vezetésében és munkabizottságaiban. Számos munkatársuk tagja vezető nemzetközi szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának.

Az *International Academy for Production Engineering (CIRP)* 2011. augusztus 21. és 27. között Budapesten tartotta 61., éves Közgyűlését. A rendezvényen ünnepelték a gyártástudomány és -technológia legjelentősebb nemzetközi szervezetének 60. születésnapját, a kutatói és ipari szféra közel 550 neves képviselőjének és 120 kísérőjének részvételével.

A BME-vel közösen szervezték az IEEE Control Systems Society által szponzorált 9th *European Workshop on Advanced Control and Diagnosis (ACD 2011)* rendezvényt (november 17–18.), mintegy 90 résztvevő mellett. Szintén a BME-vel rendezték közösen a *CogInfoCom 2011 – 2*nd *International Conference on Cognitive Infocommunications* konferenciát (július 7–9.) 80 előadással. A *24*th *Annual Conference on Learning Theory (COLT 2011)* konferenciát is Budapesten rendezték meg, július 9 és 11 között, 80 kutató részvételével.

Hazai kapcsolatok, részvétel a felsőoktatásban

Az intézet az informatika és más tudományágak (anyag-, élet- és társadalomtudomány, matematika, mesterséges intelligencia, rendszer- és irányítástechnika, automatizálás, operációkutatás) és felhasználási területek (érzékelő számítógépek, járműipar, közlekedés, gyártásautomatizálás, gyártásszervezés, kulturális örökség, egészségügy, információs társadalom, adatbiztonság, gyógyászat) olyan interdiszciplináris kutatására, fejlesztésére koncentrál, melyek hosszabb távon alapozhatják meg az intézet jövőjét.

Projektjeikben olyan kiemelkedő szerepet betöltő nagyvállalatokkal működnek együtt, mint a GE, Audi, Magyar Telekom, MOL, Paksi Atomerőmű, Knorr Bremse, Bosch, ugyanakkor a kisvállalati résztvevők biztosítékot jelentenek arra, hogy eredményeik a lehető legszélesebb körben terjedjenek el.

Az *egyetemi graduális is 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. Törekszenek stratégiai partnerkapcsolataik megerősítésére, újabbak kialakítására.

Átlagosan mintegy 20 PhD-hallgató végzi kutatómunkáját az intézetben, vezető kutatók témavezetése mellett. A hazai doktori iskolákban munkatársaik 25 esetben szerepelnek külső, és 5 ízben belső alapító tagként.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben is jelentős számú, hazai, illetve nemzetközi pályázati projektjük indult, melyek során többségében kiemelkedő egyetemekkel, kutatóintézetekkel és több esetben világhírű cégekkel dolgoznak együtt (zárójelben a projektek főbb adatai, beleértve az intézet által a *teljes időszakra* elnyert támogatás mértékét is):

ITSSv6 IPv6 ITS Station Stack for Cooperative Systems FOTs,
(FP7, 224 800 €, 2011–2014)

A projekt az intelligens jármű és közlekedési rendszerekben használható mobil IPv6 kommunikációs protokoll kidolgozásával és az IPv6 címzési mód járművek geográfiai pozíció információval történő kiterjesztését célozza.

Visionair VISION Advanced Infrastructure for Research,
(FP7, 172 910 €, 2011–2015)

A projekt egy közös európai, tudományos kutatást támogató világszínvonalú vizualizációs infrastruktúrát hoz létre. A SZTAKI interaktív háromdimenziós virtuális szobájával kapcsolódik a hálózatba.

CAPINFOOD Improving the enabling environment and public awareness for innovation in the food sector in the South-East European countries through transnational collaboration, *(SEE, 153 064 €, 2011–2014)*

A projekt dél-kelet Európa élelmiszeripari szektorában, 9 országban az innovációs lehetőségek javítását célozza.

SMART FRAME Smart framework conditions for SMEs focused on Modern Industrial Technologies, *(EU-CE, 246 390 €, 2011–2014)*

A projekt célja közép-európai innovációs hálózatok fejlesztése ígéretes piaci technológiákra fókuszálva: anyagok, felületek, technológia-orientált folyamatok, érzékelők és aktuátorok, valamint ezek termékekbe és gyártásba történő integrációja.

GLOBAL Excursion Extended curriculum for science infrastructure online,
(FP7, 63 344 €, 2011–2014)

A projekt célja, hogy a közoktatásban a természettudományi tantárgyak tanmeneteit az e-infrastruktúrák bevonásával színesítsék. A SZTAKI a projekthez a Desktop Grid kutatási irányzattal kapcsolatban járul hozzá.

SCI-BUS SCIentific gateway Based User Support,
(FP7, 690 387 €, 2011–2014)

Az intézetben kifejlesztett WS-PGRADE portálra alapulva egy általános célú DCI portál kifejlesztése és erre alapulva 27 alkalmazás-specifikus portál létrehozása és szervizkénti működtetése felhasználói közösségek számára. A koordinátor szerep ellátásán felül az intézet feladata a WS-PGRADE portál továbbfejlesztése és kiterjesztése számítási felhőkre.

CRISP Cluster of Research Infrastructures and Synergies in Physics
(FP7, 50 000 €, 2011–2014)

A projekt kilenc ESFRI kutatási infrastruktúrát kapcsol össze. Célja, hogy magas szolgáltatásminőséget biztosítson az Európai Kutatási Térségben.

AgINFRA A data infrastructure to support agricultural scientific communities
(FP7, 320 000 €, 2011–2014)

Infrastruktúra kidolgozása, mely az agrártudomány területén elért tudományos és technológia eredmények hasznosítását teszi lehetővé. A SZTAKI elsősorban a gUSE és WS-PGRADE termékeire alapozva járul hozzá a projekt munkálataihoz.

ACTUATION 2015 Modular Electro Mechanical Actuators for ACARE 2020 aircraft and helicopters, *(FP7, 314 640 €, 2011–2014)*

A repülésben a technológia és magas ár miatt még nem elterjedt elektro-mechanikus aktuátorok kutatásával és a fejlesztéshez szükséges eszközrendszer kialakításával foglalkozik a projekt, a „teljesen elektromos repülőgép" célkitűzés érdekében.

VERYSCHOOL Valuable Energy for smart School, *(FP7, 125 975 €, 2011–2014)*

A projekt célja kifejezetten az iskolaépületek energiahatékonyságának felmérését és javítását célzó keretrendszer létrehozása.

RLW Navigator Remote Laser Welding System Navigator for Eco & Resilient Automotive Factories, *(FP7, 295 400 €, 2012–2014)*

Műszaki, gazdasági és környezeti szempontok alapján egyaránt hatékony robotos lézerhegesztési rendszerek tervezésére és működtetésre irányul a projekt, melyet az európai autóipar igényei motiválnak.

PARAMTIGHT Parameterized complexity and the search for tight complexity results, *(FP7, 1 150 000 €, 2012–2016)*

Cél az algoritmikusan nehéz problémák komplexitásának pontosabb megértése a paraméteres bonyolultság eszközeivel. Egyrészt annak pontos meghatározása, hogy a feladat különböző paraméterei hogyan befolyásolják a probléma megoldásához szükséges időt, másrészt olyan algoritmusok konstruálása, melyeknél a futási idő paraméterektől való függése optimális.

INARMERA-ICT Integrating Armenia Into Era: Information and Communication, Technologies, *(FP7, 80 678 €, 2012–2015)*

Az Örmény Tudományos Akadémia Informatikai és Automatizálási Kutató Intézete által koordinált projekt feladata elsősorban az intézmény (és rajta keresztül Örményország) kutatási tevékenységeinek bekapcsolása az EU-s kutatási programokba.

PROACTIVE Predictive Reasoning and Multi-source Fusion Empowering Anticipation of Attacks and Terrorist Actions in Urban Environments, *(FP7, 313 240 €, 2012–2015)*

A konzorcium által kitűzött cél a városi környezetben is megbízhatóan működő, döntéstámogató és terrorista tevékenységet előrejelző szenzor-fúziós rendszer létrehozása.

OTKA Nemlineáris rendszerek analízise és diagnosztikája mérnöki elvekre épülő modellekkel, *(2011–2015, 22 028 E Ft)*

Modell alapú módszerek alkalmazása a nemlineáris rendszerek dinamikus analízise és diagnosztikája területén felmerülő kutatási problémák megoldására a termodinamika, a mérnöki tudományok, és a rendszer- és irányításelmélet integrálásával. Ezen belül pozitív nemlineáris rendszerek fizikailag értelmes realizációinak, és ezek strukturális stabilitásának vizsgálata, valamint optimalizáláson alapuló nemlineáris energetikai és kvantum rendszerek paramétereinek becslésére alkalmas algoritmusok kifejlesztése és vizsgálata.

NKTH-OTKA Újszerű multimédia kiszolgálási-réteg fejlett optimalizálási technikákkal, *(2011–2013, 14 761 E Ft)*

A projekt célja formális és kombinatorikus optimalizálási módszerek alkalmazása multimédia kiszolgálásra szolgáló újszerű szétosztó réteg kifejlesztésében, amely hatékonyan képes kezelni a legkülönbözőbb minőségben, célokkal és követelményekkel keletkező és hasznosuló multimédiás adatok nagy tömegét.

OTKA Távérzékelt adatok átfogó elemzése, *(2012–2014, 11 999 E Ft)*

A projekt célja új mintafelismerési és rekonstrukciós módszerek kifejlesztése különböző távérzékelt adatok egységes kezelésére és automatikus feldolgozására. Modellek készülnek alakzatok, hierarchikus struktúrák és változásosztályok közös reprezentálására, kétdimenziós légi képek és radarképek illetve háromdimenziós LIDAR adatok alapján.

OTKA Kiloprocesszoros tömbszámítógép architektúrák komplex számításigényes problémák megoldására, *(2011–2014, 21 871 E Ft)*

A kutatás célja új algoritmusok létrehozása a sok ezer processzoros chipek világában, kihasználva a processzor és memória tömbök celluláris szerkezetében a fizikai, illetve logikai precedenciák meghatározó voltát. Az egyszerre kezelendő kritikus tervezési paraméterek a sebesség, disszipált teljesítmény, felület, számítási pontosság és a külső memória-elérés sávszélessége.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bacsó G, Tuza Z: Optimal guard sets and the Helly property. European Journal of Combinatorics 32: 28-32 (2011)
2. Benedek C: Detection of soldering defects in printed circuit boards with hierarchical marked point processes. Pattern Recognition Letters (32): 1535-1543 (2011)
3. Bozóki S, Fülöp J, Koczkodaj W: An LP-based inconsistency monitoring of pairwise comparison matrices. Math. and Computer Modelling 54: 789-793 (2011)
4. Corinto F, Gilli M, Roska T: On full-connectivity properties of locally connected oscillatory networks. IEEE Tr. on Circuits and Systems I 58 (5): 1063-1075 (2011)
5. Csetverikov D, Fazekas S, Haindl M: Dynamic texture as foreground and background. Machine Vision and Applications 22: 741-750 (2011)
6. Csuhaj Varjú E, Oswald M, Vaszil G: PC grammar systems with clusters of components. Int. J. of Foundations of Computer Science 22 (1): 203-212 (2011)
7. Drótos M, Kis T: Resource leveling in a machine environment. European Journal of Operational Research 212 (1): 12-21 (2011)
8. Farkas Z, Kacsuk P: P-GRADE Portal: A generic workflow system to support user communities. Future Generation Computer Systems 27 (5): 454-465 (2011)
9. Gerencsér L, Finesso L: A two-stage information criterion for stochastic systems revisited. Automatica 47 (12): 2791-2795 (2011)
10. Gyárfás A, Ruszinkó M, Sárközy G, Szemerédi E: Partitioning 3-colored complete graphs into three monochromatic cycles. Electronic Journal of Combinatorics 18 (#P53): 1-16 (2011)
11. Gyárfás A, Sárközy G: The 3-colour Ramsey number of a 3-uniform Berge cycle. Combinatorics, Probability and Computing 20 (1): 53-71 (2011)
12. György A, Kocsis L: Efficient multi-start strategies for local search algorithms. Journal of Artificial Intelligence Research 41: 407-444 (2011)
13. Kacsuk P, Kovács J, Farkas Z, Marosi A, Balaton Z: Towards a powerful European DCI based on desktop grids. J. of Grid Computing 9 (2): 219-239 (2011)
14. Kecskeméti G, Terstyánszky G, Kacsuk P, Németh Z: An approach for virtual appliance distribution for service deployment. Future Generation Computer Systems 27 (3): 280-289 (2011)

15. Kovács A, Erdős G, Viharos Z, Monostori L: A system for the detailed scheduling of wind farm maintenance. CIRP Annals – Manufacturing Technology 60 (1): 497-501 (2011)
16. Kovács A, Kis T: Constraint programming approach to a bilevel scheduling problem. Constraints 16 (3): 317-340 (2011)
17. Kovács A: Optimizing the storage assignment in a warehouse served by milkrun logistics. International Journal of Production Economics 133 (1): 312-318 (2011)
18. Mészáros C: Solving quadratically constrained convex optimization problems with an interior-point method. Optimization Methods & Software 26 (3): 421-429 (2011)
19. Poussot-Vassal C, Sename O, Dugard L, Gáspár P, Szabó Z, Bokor J: Attitude and handling improvements through gain-scheduled suspensions and brakes control. Control Engineering Practice 19 (3): 252-263 (2011)
20. Rödönyi G, Gáspár P: Iterative design of structured uncertainty models and robust controllers based on closed-loop data. IET Control Theory & Applications 4 (12): 2823-2836 (2010)
21. Rojas C, Hjalmarsson H, Gerencsér L, Martensson J: An adaptive method for consistent estimation of real-valued non-minimum phase zeros in stable LTI systems. Automatica 47: 1388-1398 (2011)
22. Szabó Z, Marcos A, Mostaza Prieto D, Kerr M, Rödönyi G, Bokor J, Bennani S: Development of an integrated LPV/LFT framework: modeling and data-based validation tool. IEEE Tr. on Control Systems Techn. 19 (1): 104-117 (2011)
23. Szederkényi G, Hangos K, Péni T: Maximal and minimal realizations of reaction kinetic systems: computation and properties. Match-Communications in Mathematical and in Computer Chemistry 65 (2): 309-332 (2011)
24. Szederkényi G, Hangos K: Finding complex balanced and detailed balanced realizations of chemical reaction networks. Journal of Mathematical Chemistry 49 (6): 1163-1179 (2011)
25. Szolgay D, Szirányi T: Optimal stopping condition for iterative image deconvolution by a new orthogonality criterion. Electronics Letters 47 (7): 442-444 (2011)
26. Tapolcai J, Ho P, Rónyai L, Babarczi P, Wu B: Failure localization for shared risk link groups in all-optical mesh networks using monitoring trails. Journal of Lightwave Technology 29 (10): 1597-1606 (2011)
27. Tapolcai J, Wu B, Ho P, Rónyai L: A novel approach for failure localization in all-optical mesh networks. IEEE/ACM Tr. on Networking 19 (1): 275-285 (2011)
28. Váncza J, Monostori L, Lutters D, Kumara S, Tseng M, Valckenaers P, Van Brussel H: Cooperative and responsive manufacturing enterprises. CIRP Annals – Manufacturing Technology 60 (2): 797-820 (2011)
29. Zarándy Á, Rekeczky C: 2D operators on topographic and non-topographic architectures-implementation, efficiency analysis, and architecture selection methodology. Int. J. of Circuit Theory and Applications 39 (10): 983-1005 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	277			Ebből kutató[2]:	115
PhD, kandidátus:	53	MTA doktora:	20	Rendes tag és levelező tag:	7
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					4
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					48

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				346
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				346
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	5	idegen nyelven:	12
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	102
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	71
Könyv[8]	magyarul:	2	idegen nyelven:	2
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	31

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	82,703	Összes független hivatkozás száma:	2019
Összes hivatkozás száma[11]:	2019		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	3	MTA doktora:	1

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			147
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	108	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	10
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	63		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			41
Témavezetések száma: TDK munka:	19	Diplomamunka (BSc):	18
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	27

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	943 642	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 14 — Teljes saját bevétel:	2 327 272	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	18	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	94 943	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	9	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	286 111	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	348 868	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	27	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	712 932	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	4	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	17 663	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	887 113	EFt

SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI KUTATÓINTÉZET
1121 Budapest, Konkoly-Thege M. út 29-33.; 1525 Budapest, Pf.: 49.
telefon: 1-392 2212; fax: 1-392 2215
e-mail: szfki@szfki.hu; honlap: http://www.szfki.hu/

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Alapkutatások végzése az elméleti és kísérleti szilárdtest-fizika (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. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Elméleti szilárdtest-fizikai kutatások

Erősen korrelált rendszerek. A kiterjesztett periodikus Anderson modell – ahol a vezetési elektronok egymással való kölcsönhatása is figyelembe van véve – részletes vizsgálatát a variációs módszer és az egzakt diagonalizálás módszerének együttes alkalmazásával végezték el. Megmutatták, hogy a kölcsönhatás lényegesen eltolja az f-pályák energia tartományát abba az irányba, ahol már a nehéz-fermion viselkedés megfigyelhetővé válhat.

Az 5/2-spinű fermion rendszerben, 1/6-os betöltöttség esetén a paramétertér háromdimenziós. Megmutatták, hogy abban az altérben, ahol a sokrészecske kölcsönhatás elhanyagolható, az alapállapot vagy antiferromágneses, vagy zéró fluxusú U(1) plaket fázis.

Komplex rendszerek. A mágneses súrlódás jelenségét olyan elrendezésben vizsgálták, ahol két q-állapotú Potts modellt tartalmazó rendszer állandó sebességgel mozog egymás fölött. A felületi spinek közötti kölcsönhatás következtében permanens energia-áram lép fel és a rendszer az egyensúlytól távoli stacionárius állapotban van. A rendezetlen mágneses rendszerek prototípusát jelentő rendezetlen, transzverz-terű Ising modell kritikus tulajdonságainak vizsgálatára az ún. erős rendezetlenségi renormálási csoport módszer egy nagyon hatékony algoritmusát fejlesztették ki. $D \leq 4$ dimenziós reguláris rácsokat vizsgáltak és pontosan meghatározták a kritikus paramétereket.

A hajtott diffuzív rendszerek prototípusát, az aszimmetrikus kizárási folyamatot véletlen-erő típusú rendezetlenség mellett átlagtér közelítésben vizsgálták. Az eredmények azt mutatták, hogy a kevésbé komplex átlagtér modell ugyanabba az univerzalitási osztályba tartozik, mint az eredeti probléma.

A pszeudopotenciál elméletet kiterjesztették a Bogoljubov-De Gennes egyenletek felé és ilyen módon meghatározták azt a többlet energiát, melyet egy atom hozzáadása jelent a csapdában lévő, páros számú részecskét tartalmazó szuperfolyékony Fermi rendszerhez.

Elektronállapotok fémekben. Az egzakt muffin-tin pályák alapján a sűrűségfunkcionál elmélettel megvizsgálták a tércentrált köbös (bcc) szerkezetű vas-magnézium ötvözetek extrém körülményeken – magas hőmérsékleten és magas nyomáson – való viselkedését. Azt

az eredményt kapták, hogy amíg a bcc vas minden hőmérsékleten instabil, addig a Fe-Mg stabillá válik magas hőmérsékleten. Kimutatták, hogy az 5 at.% magnéziumot tartalmazó Fe-Mg bcc ötvözet termofizikai tulajdonságai jó egyezésben vannak a föld belső magjáról kapott szeizmikus adatokkal.

Első elveken alapuló, relativisztikus elektronszerkezet számolással kiszámolták az Ir(100) felületre felvitt Fe vékonyréteg mágneses tulajdonságait. Megállapították, hogy – a kísérleti adatokkal megegyezően – mágnesezettség csak akkor lép fel, ha a Fe mono rétegek száma háromnál nagyobb.

Megmutatták, hogy az amorf fémek alacsony energiájú Raman spektrumában fellépő csúcs anomális hőmérsékletfüggése a lokalizált gerjesztésekhez rendelhető Debye-Waller faktor következménye lehet.

Félvezető nanoszerkezetek. A Lendület program keretében új típusú biomarkerek, ultraszenzitív magnetométerek és harmadik generációs napelemek fejlesztését kutatták.

A szilíciumkarbid (SiC) nanokristályokat, mint lehetséges biomarkereket, kiemelten vizsgálták elméleti és kísérleti kutatásokkal. A kísérleti csoport kidolgozott egy új eljárást a SiC nanorészecskék előállítására. A felszíni rezgésekre érzékeny infravörös spektroszkópiával sikerült felderíteni az előállított SiC nanorészecskék felületének összetételét. A kutatócsoport vezetőjének ötlete alapján kívánatos lenne, hogy ún. színcentrumokat hozzanak létre SiC nanorészecskékben, hogy a fluoreszcencia hatásosabb legyen. Számításaik megmutatták, hogy a volfrám, molibdén és egyéb fémszennyezések az infravörös tartományban világítanak.

A gyémántbeli nitrogén-vakancia hiba egyedülálló tulajdonságai teszik lehetővé ultraszenzitív magnetométer kifejlesztését. Számításokkal elemezték ezen szerkezet rezgéseit, valamint az elektronszerkezetére egy nagyon részletes csoportelméleti elemzést adtak nemzetközi együttműködés keretében. Emellett a hiperfinomtenzorait is sikerült nagy pontossággal meghatározni. Megmutatták, hogy a negatív töltésű nitrogén-vakancia hiba átmenetileg ionizálódik a gerjesztési folyamat során.

Azt is tanulmányozták, hogy a kis félvezető nanokristályok alakja hogyan befolyásolja az abszorpciós tulajdonságait, amely a nanokristály alapú napelemek alkalmazásában válhat fontossá. Azt találták, hogy az abszorpció a szimmetria csökkenésével a megfelelő energiatartományban növekszik.

Az időfüggő sűrűségfunkcionál-elméletet alkalmazták félvezetőbeli ponthibák gerjesztésének számításában. Az eredményeket egy kiemelt publikációban tették közzé, amelyet a közelmúltban egy Nature-cikkben idéztek.

Kísérleti szilárdtest-fizikai kutatások

Nem-egyensúlyi ötvözetek kutatása. Kitűnő lágymágneses tulajdonságaik miatt a FINEMET típusú nanokristályos/amorf kompozit anyagok hosszú idő óta állnak az érdeklődés középpontjában. A $Fe_{73,5}Nb_3Cu_1Si_{13,5}B_9$ összetételű amorf előfázis megfelelő hőkezelésével nanoméretű ferromágneses Fe-Si szemcsék válnak ki a visszamaradó amorf fázisban. Az ilyen szemcsés ötvözetek óriás mágneses ellenállás változási jelenséget mutathatnak, ha a szuperparamágneses nanoszemcsék mérete és távolsága megfelelő: ezt a viselkedést vizsgálták a visszamaradó amorf fázis Curie hőmérséklete közelében.

Fázisátalakulások elmélete. Egy egyszerű sűrűség-funkcionál technika keretében megvizsgálták az erősen nem-egyensúlyi folyadékokban történő kristálymag-képződés és -növekedés folyamatát. Bizonyították, hogy a kristálymag-képződés kétlépcsős. Az először megjelenő szilárd klaszter amorf szerkezetű, ami elősegíti a tércentrált köbös fázis

képződését, míg elnyomja a sűrűn pakolt szerkezetekét. Bizonyították továbbá, hogy extrém hajtóerő mellett a kristály-növekedés mechanizmusa a kolloid rendszerekben kísérletileg megfigyelthez hasonló diffúzió-kontrollált – diffúziómentes átmenetet mutat. A két növekedési módus egyazon kristály pereme mentén együtt létezhet, ami egy új mechanizmust jelent a fraktálszerű elágazó mintázatok képződésére.

Különleges szén nanoszerkezetek kutatása. Nanocsövek optikai tulajdonságait határozták meg széles frekvenciatartományban. Ezek az anyagok átlátszó vezető rétegekként használhatóak, kémiailag módosított változataik pedig nehézfémek kivonására lehetnek alkalmasak a környezetvédelemben.

A szén nanocsövek egydimenziós üregébe különböző molekulák tölthetők. A vasat tartalmazó szerves molekulák érdekes elektromos, mágneses és katalitikus tulajdonságokkal rendelkeznek, ezen molekulák nanocsőbe töltése által okozott változása jelenleg ismeretlen. Nanocsőbe töltött ferrocén molekulák viselkedését hasonlították össze tömbi megfelelőjükkel Mössbauer spektroszkópia segítségével. Nem találtak töltésátvitelt a ferrocén molekulák delokalizált elektronjai és a szén nanocsövek belső fala között, de a nanocsőbe töltött ferrocén molekulák Debye hőmérséklete jelentősen lecsökkent a tömbi kristályos értékhez képest, ami azok kis méretével magyarázható.

Atomi szintű szerkezet-meghatározás. Az általuk kifejlesztett „Charge flipping" szerkezetmegoldó eljárás egy egyszerű duális terű algoritmus. Az elmúlt évben egy olyan új változatát dolgozták ki, amely effektíven alkalmazható nem teljes mérési adatkészlet kezelésére. Megmutatták, hogy számos esetben egy szokásos adatsor 1/8-a is elég a szerkezet meghatározásához.

Komplex folyadékok kutatása

A metil vörös azofesték új származékát állították elő nemlineáris optikai vizsgálatokhoz. A festékkel bevont felülettel határolt folyadékkristályban polarizált fénnyel indukált instabilitást, sztatikus és dinamikus mintázatokat fedeztek fel.

Precíz elméleti leírást dolgoztak ki planáris folyadékkristályok egyen-, ill. váltófeszültséggel keltett flexoelektromos mintázataira. Számításaik megmutatták, hogy kisfrekvenciákon ezen egyensúlyi mintázat felvillanások formájában jelentkezik és a frekvencia növelésével a mintázat jellege megváltozhat, disszipatív elektrokonvekcióvá alakulhat át.

Elsőként mutatták ki hosszúkás mágneses részecskékkel dópolt folyadékkristályokban, hogy nagy mágneses térrel eltolható az izotróp átmenet hőmérséklete.

Gyors kamerával és rezgésdetektálással feltérképezték a hengerből kifolyó szemcsés anyagban keltett hang – „silózene" – terjedési sebességének helyfüggését.

Rádiófrekvenciás spektroszkópia

A Magyar Tudományos Akadémia és a Korean Research Council of Fundamental Science and Technology (KRCF) közötti megállapodásban rögzített kutatásban a Parkinson-kórban kulcsszerepet játszó α-szinuklein vad változatának és három pontmutánsának szerkezeti és dinamikai jellemzőinek a meghatározásában értek el eredményeket.

Fémkutatások

Elektrolitikus nanoszerkezetek. Vizsgálták 100 nm teljes rétegvastagságot el nem érő, elektrokémiai úton leválasztott Co/Cu multirétegek viselkedését. Tisztázták a leválasztás

során az elektrolit oldat komponenseivel történő redoxireakciók hatását a mágneses ellenállásra. A mágneses ellenállásmérésekkel párhuzamosan a minták felületi érdességét is megmérték. Kimutatták, hogy a mágneses anyag oldódása az oldatkomponensekkel való reakció eredményeként a leválasztás során drasztikusan csökkenti a mágneses ellenállást. A mágneses ellenállás szuperparamágneses járuléka a vastagsággal nagyjából lineárisan nőtt.

Számos kétkomponensű ötvözetet vizsgáltak reverz mélységprofil-analízissel. Kimutatták, hogy a preferenciálisan leváló komponens felhalmozódik a hordozó közeli zónában minden vizsgált elempár (Ni-Cd, Ni-Cu, Ni-Sn, Ni-Co) esetén.

Létrehoztak egy munkaállomást, amivel ipari méretekben végrehajtott savas acéllemez-pácolási eljárás laboratóriumi méretű szimulációját lehet elvégezni. Ezzel az eszközzel az ipari méretű folyamat optimalizálását lehet elvégezni. Az eszközt a Dunaújvárosi Főiskolán helyezték üzembe.

Fémtechnológia és mágnesség. Keresve a könnyű, nagy szilárdságú és magas hőmérsékletű szerkezeti anyagokat, Al-Ti alapú ötvözeteket állítottak elő mechanikai őrléssel. A kapott porokat melegen kompaktálták amorf és részlegesen nanokristályos pasztillák formájában és metallográfiai módszerekkel jellemezték.

A FINEMET típusú lágymágneses nanokristályos ötvözetek nagyfrekvenciájú alkalmazására új típusú magkonstrukciót dolgoztak ki, ami lehetővé tette a határfrekvencia kitolását 60 kHz-ről 1 MHz-re. Az ipari partner (Tommy-Invest Electronics Kft. - Szécsény) számára kidolgoztak egy újfajta nagyáramú szűrőtekercset.

Neutronspektroszkópia kondenzált anyagokban

A Gábor Dénes által kidolgozott holográfiát elektron- és röntgensugárzás esetében atomi felbontású leképezésre is lehet alkalmazni. Az eljárást neutronsugárzásra is kidolgozták. A Budapesti Kutatóreaktornál működő berendezésen inkoherens szóráson alapuló neutron holográfiai mérést és sikeres rekonstrukciót végeztek ammónium-klorid (NH_4Cl) rendszeren. Ez a mérés igazolja mind a dedikált neutron holográfiai műszer, mind az itt kifejlesztett ún. dupla rekonstrukciós módszer hatékonyságát. A kapott lokális szerkezet, és ezen belül a hidrogének rácsközi elhelyezkedése kiváló egyezésben van az elméletből ismert Frenkel modellel.

Neutronszórás

Reverse Monte Carlo (RMC), klasszikus molekuláris dinamikai (MD) és Monte Carlo (MC) számítógépes szimulációk sorozatát hajtották végre a legkisebb szénatom-számú alifás alkoholokon, azaz a metanol, etanol és az 1-propanol folyadékfázisain. Gyűrűs molekuláris aggregátumok leginkább az 1-propanolban voltak jelen.

Amorf $Ge_{20}Te_{80}$, $Ge_{15}Cu_8Te_{77}$ és $Ge_{15}Cu_5Te_{80}$ ötvözetek szerkezetét tanulmányozták diffrakciós módszerekkel, illetve EXAFS spektroszkópiával. A $Ge_{20}Te_{80}$-ban mind a Ge, mind pedig a Te atomok teljesítik a '8-N' szabályt; a szerkezet $GeTe_4$ tetraéderekből épül fel, amelyek vagy Te-Te kötésekkel, vagy pedig megosztott (azaz két Ge atomot összekötő) Te atomok által kapcsolódnak. Vizsgálták a szerkezet megváltozását a Cu beépülés hatására. A kísérleti eredmények arra utalnak, hogy a Cu atomok a befogadó mátrix üres helyeit foglalják el anélkül, hogy lényegesen torzítanák a Ge és Te atomok által kifeszített kovalens hálózatot.
A $Cu_{65}Zr_{35}$ és $Ni_{64}Zr_{36}$ összetételű fémüvegek lokális atomi szintű rendezettségét vizsgálták. Nagyméretű szerkezeti modelleket készítettek az RMC technika segítségével úgy, hogy egy időben illesztettek diffrakciós és EXAFS kísérleti adatokat. Azt találták, hogy míg a parciális koordinációs számokat tekintve nincs nagy különbség a két fémüveg között, az atomok

közötti átlagos távolságok jelentősen eltérnek. A különbségek a két fémüveg eltérő üvegképzési hajlamát tükrözik.

Lézerfény és szilárd anyag – főként nemlineáris – kölcsönhatásai

A kutatás az ultragyors és ún. erős-tér felületi plazmon jelenségek és femtoszekundumos technológiai fejlesztések köré összpontosult. Kísérletileg megvizsgálták a felületi plazmonok által erősített elektrongyorsítást csúcstechnológiás, ún. kevés optikai ciklusból álló, vivőburkoló fázisstabilizált lézerimpulzusokkal. Tudomásuk szerint elsőként észleltek erős tér jelenségeket felületi plazmon térben. A plazmonhullámokat pásztázó alagútmikroszkóppal is vizsgálták, és meghatározták felületi nanostruktúrák környezetében a lokális tér erősítését. A felületi plazmonok elbomlásakor keletkező fény fotonstatisztikájának vizsgálata során elsőként mérték meg a fotonritkulásból a fotoncsomósodásba való átmenetet az intenzitáskorrelációkban, s ezt az eredményt elméletileg is értelmezték.

Az elméleti kutatások során az attoszekundumos tudomány témakörében megvizsgálták a magasrendű felharmonikus keltési folyamatokat infravörös és THz-es tér egyidejű jelenléte esetén. Azt az eredményt kapták, hogy így akár még viszonylag hosszú (akár 12 fs-os), számos optikai ciklusból álló impulzusokkal is lehet izolált attoszekundumos impulzust kelteni. Ezen túlmenően, a nemlineáris felületi plazmonos elektronemissziót elemezve platómentes energiaeloszlást kaptak azokban az esetekben, amikor a gerjesztő lézer impulzus hossza összemérhető volt a felületi plazmonok élettartamával.

Gázlézerek és gázkisülések

Poros plazma kísérletekkel és molekuladinamikai szimulációkkal megmutatták, hogy a vizsgált két-dimenziós sokrészecske rendszerek nem-Newtoni viszkozitással, illetve komplex reológiával (viszkoelasztikus tulajdonságokkal) rendelkeznek. Kimutatták, hogy periodikus nyírás esetén egyrészecske és kollektív módusok rezonánsan gerjesztődnek.

Elektronegatív (CF_4) gázban üzemelő rádiófrekvenciás, alacsony nyomású gázkisülések részecske-szintű szimulációs vizsgálata során megállapították, hogy a szokásos alfa-, ill. gamma- üzemmódokkal szemben, itt a központi plazmában fellépő jelentős elektromos terek gyorsítják a töltött részecskéket, ezáltal hozzájárulva a kisülést tápláló ionizációhoz. Argon-vas, ill. argon-nikkel kisülésekben kísérletileg meghatározták a nemesgáz ionok és fém atomok között fellépő aszimmetrikus töltéskicserélő ütközések rátáját, amely fontos bemenő paraméter kisüléseken alapuló anyagvizsgálati eljárásoknál.

Biomedikában és nanotechnológiában alkalmazott felületi mikrohullámú gázkisülések numerikus vizsgálata során meghatározták az Ar-O_2 gázkeverékben üzemelő rendszerek sűrűség és részecskefluxus eloszlásait, a reaktív komponensek élettartamát az utókisülésben. Kimutatták az oxigén atomok és metastabil molekulák dominanciáját, valamint az UV sugárzó részecskék gyors lecsengését az áramlási zónában.

Az MTA MFA kutatóival a múlt évben közösen kifejlesztett első kiterjedt nyalábú leképező ellipszométer telepítésre került a Toledo Egyetemen (Ohio, USA), ahol a kísérleti gyártósor standard eszközeként kerül felhasználásra.

Lézeralkalmazások, amorf vékonyrétegek

A hELIos program keretén belül egy attoszekundumos impulzusok generálására alkalmas lézer-berendezést fejlesztettek, amelyhez több target-kamra csatlakozik. Interferometrikus és fényszórásos berendezéseket dolgoztak ki optikai felületek és optikai anyagok minősítésére.

Berendezést építettek az aeroszolok kiülepedésének vizsgálatára realisztikus tüdő-modellekben, amelyhez egy kompakt kontaktus-mentes lézeres Doppler-sebességmérő rendszert és egy programozható lélegeztető rendszert fejlesztettek ki. Korrelációs elven működő, nanorészecskék mérésére alkalmas méreteloszlás és sebességmérő berendezést hoztak létre.

Kutatásokat végeztek a nanokristályos gyémánt növesztése és tanulmányozása terén, megvizsgálták annak fluoreszcencia- és Raman-spektrumait, melyekből meghatározhatók a szerkezeti paraméterek.

Femtoszekundumos lézertechnika

A kutatócsoport kifejlesztett egy olyan, optikai szállézeres technológián alapuló új lézer modult, ami lehetővé tette az ún. CARS módszeren alapuló képalkotás megvalósítását. Az eljárás segítségével nagy időbeli és térbeli felbontással lehet képet alkotni különböző szövetekről anélkül, hogy azokat különböző fluoreszcens festékjelölésekkel látnák el. Az új eljárást sikeresen alkalmazták különböző mintákon, így például egér hátbőrén, zsírszövetén, izomszövetén, illetve szénnanocsöveken.

A nemlineáris 3D mikroszkóp egyik legfontosabb előnye, hogy anélkül lehet a biológiai szöveteket vizsgálni, hogy azokban észrevehető károsodás lépne fel. A módszer lehetővé teszi a méréseket kb. 200–500 mikrométeres mélységekig. Az eljárást már eddig is felhasználták bőrrák diagnosztizálására, a bőr öregedésének vizsgálatára, továbbá bőrön keresztül bevitt gyógyszerkészítmények monitorozására.

Optikai vékonyrétegek

Ultrarövid impulzusú lézerkészülékekben alkalmazható új optikai bevonatos optikai elemeket fejlesztettek ki, például: a) szélessávú kis diszperziójú antireflexiós bevonatot diszperzió kompenzáló üvegekre, b) nagy roncsolási küszöbű harmonikus szeparátor tükröket szuperpolírozott kvarcüveg hordozókon, c) nagy roncsolási küszöbű bevonatot rövid fókusztávolságú konvex kvarcüveg lencsékre és d) TiO_2/SiO_2 dielektrikum rezonátor tükröt GaAs szeleteken kialakított SBR struktúrákhoz.

A felsorolt kutatási feladatok megoldását és hasznosítását az Optilab Kft.-vel együttműködésben valósították meg.

Optikai egykristályok növesztése és vizsgálata

$YAl_3(BO_3)_4$ (YAB) egykristályokat növesztettek magvezérelt magas hőmérsékletű flux módszerrel. A kristályokban nagyfelbontású Fourier transzformációs (FT) spektroszkópiával és kristálytér számításokkal meghatározták a Pr^{3+}-ionok kristálytér átmeneteit. Az FT színképeken alapuló módszert dolgoztak ki a kristályok ritkaföldfém szennyezéseinek meghatározására.

$Li_6Y(BO_3)_3$ (LYB) anyagot állítottak elő Li_2CO_3 és Y_2O_3 alapanyagokból nedves kémiai eljárásokkal. A röntgendiffrakciós porelemzések alapján, optimalizált hőkezelés után, az anyag döntően a kívánt összetételű fázist tartalmazta. Bridgman és Czochralski módszerekkel LYB egykristályokat növesztettek, 80%-os kihozatalt elérve. Megolvasztott és gyorsan lehűtött kerámia mintákkal meghatározták a LYB összetételű fázis stabilitási határait.

Kristályfizika és nemlineáris optika

Sztöchiometrikus $LiNbO_3$ kristályok infravörös abszorpciójában új sávot figyeltek meg, melyet az OH ion nyújtási és egyik hajlítási módusának kombinációjához rendeltek. Az atomi relaxációs idők mérésére egy egyszerű, lézerimpulzusos pumpa-próba elrendezést fejlesztettek tovább, mely a spektrumvonalak szilárdtest-környezet okozta inhomogén kiszélesedése ellenére alkalmas az atomi átmenet homogén vonalszélességének mérésére. $LiNbO_3$:Yb kristályban Yb^{3+} esetében meghatározták a dipólus és populációs relaxációs időt.

Különböző összetételű és adalékolású $LiNbO_3$ mintákban ns-os lézerimpulzusokkal indukált optikai abszorpciós tranzienseket vizsgáltak, ami lehetővé tette a kristályok belső hibaszerkezetének nagyérzékenységű minősítését. A β-bárium metaborátban (BBO) végzett hasonló vizsgálatokban viszont a felületi effektusok domináltak.

Megmutatták, hogy a $Li_2B_4O_7$:Cu szövet-ekvivalens termolumineszcens dozimeter és neutron-detektor anyag lumineszcencia hozamát az Ag adalékolás jelentősen megnöveli. Míg alacsony hőmérsékleteken a röntgen- és katód-lumineszcencia spektrumok excitonokkal kapcsolatosak, a dozimeterek kiolvasásánál alkalmazott magasabb hőmérsékleteken a Cu^+ és/vagy Ag^+ emissziója játszik szerepet.

Csatorna- és sík-hullámvezetőket készítettek erbiummal adalékolt volfrám–telluroxid üveg- és szillenit tipusú BGO kristálymintákban két, 2,5 és 3,5 MeV közötti energián történő N^+ ion-besugárzással, hogy kiküszöböljék a csak 3,5 MeV-en besugárzott hullámvezetők szivárgó módusait. Az ellipszometriai és m-vonalas spektroszkópia mérések szerint a két energián besugárzott hullámvezetők a technikailag releváns $\lambda = 1{,}5$ μm hullámhosszon is működtek.

Kvantumoptika és kvantuminformatika

Optikai rezonátorba helyezett és lézerrel megvilágított Bose-Einstein kondenzátum dinamikáját leíró effektív Dicke-modellben megjelenő kvantum-fázisátalakulás nemegyensúlyi kiterjesztését végezték el. Megmutatták, hogy a rezonátor vesztesége miatt kialakuló nyílt rendszerben az átlagtér megoldás folytonosan változik a fotonok kicsatolási rátájának függvényében, ugyanakkor a kritikus pontban szinguláris korrelációs függvényeket jellemző exponens lényegesen eltér a zárt rendszerbeli értékétől.

Spinsokaságra felírt Jaynes-Cumming-modell dinamikájában a sokaság inhomogén kiszélesedésének szerepét vizsgálták, és kimutatták, hogy a kollektív gerjesztési állapotok vonalkeskenyedése az inhomogén kiszélesedés alakjától is függ. Összefonódottság kollektív méréssel való detektálásának céljából kiterjesztették az összefonódottsági kritériumok teljes rendszerét feles spinnél nagyobb spinű részecskék esetére. Tipikus összefonódás tisztítási protokollnak, vagyis ismételt kvantummérésnek és feltételes állapotfejlődésnek alávetett qubit sokaság nagyon érzékeny lehet a kezdeti feltételekre, és valódi káosz jelenhet meg az összefonódás mértékében.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az intézetben folyó kutatások nagy része hosszabb, vagy rövidebb távon szolgálja olyan globális társadalmi problémák megoldását, mint az egészség megőrzése, a környezeti ártalmak csökkentése, a kulturális örökség megőrzése, energetika, stb. Az intézet adottságai révén rövidtávon újfajta vizsgálati módszerek és berendezések fejlesztésével, újfajta technológiák kidolgozásával, hosszabb távon különleges anyagok fejlesztésével járulhat hozzá a problémák megoldásához. Fontos misszió a tudomány népszerűsítése, az eredmények megismertetése, különösen a fiatalok körében.

Új anyagok és vizsgálati módszerek fejlesztése. Az intézet több osztályán folynak olyan fejlesztések, melyek eredményeinek felhasználása csak hosszabb távon várható. A Kísérleti Szilárdtest-fizikai osztályon szén alapú rendszerek kutatása és itt elért eredményeik hozzájárulnak olyan anyagok kifejlesztéséhez, amelyek felhasználhatók lesznek a biotechnológiában, gyógyszer- és félvezető-iparban, ezzel hozzájárulva környezetvédelmi (pl. tisztítás), egészségügyi (gyógyszertovábbítás) és információs technológiai problémák megoldásához. A fázisátmenetek, kristályosodás menetének vizsgálatában elért eredményeik lehetővé teszik olyan új, a technológiai folyamatok szempontjából jobb tulajdonságokkal rendelkező anyagok előállítását, amelyek az energiaipar és más anyag-intenzív területek fejlődését elősegíthetik. Az egyedi biomolekulák atomi szerkezetének meghatározásában folytatott kutatásaik pedig az élő szervezetek jobb megismerésén keresztül nagyobb hatású gyógyszerek, pontosabb diagnosztikai eljárások kidolgozását segítik elő, ezzel javítva az egészségügyi ellátást, ezen keresztül az életminőséget.

A Kristályfizikai Osztály kristálynövesztő laborjában növesztett szcintillátor kristályokat (pl. az LYB és LYSO) új sugárzásdetektorok kifejlesztése céljából növesztik, hatásfokuk javítása az orvosi diagnosztikai és a sugárzás-biztonságtechnikai alkalmazások számára fontos. A nemlineáris optikai kristályok, mint a YAB és a Bi_2TeO_5, az orvosi és műszaki alkalmazásokban használható újfajta lézerek (UV és látható) létrehozását teszik lehetővé.

A Lézerfizikai Osztály keretében működő vékonyréteg laboratórium termékei napjainkban is felhasználásra kerülnek, – egy spin-off cég bevonásával – az ultrarövid lézer impulzusok előállítására szolgáló berendezésekben. A hELIos program keretében speciális optikai vékonyrétegek fejlesztése folyik a Szegeden épülő szuperlézer számára.

A Lézeralkalmazási Osztály femtoszekundumos kutatócsoportja biológiai minták speciális vizsgálatára alkalmas 3D nemlineáris mikroszkópokat fejlesztett ki. A módszer alkalmazási lehetőségeinek felderítésére együttműködést alakítottak ki a berendezés fejlesztésével és gyártásával foglalkozó R&D Ultrafast Lasers Kutatási és Fejlesztési Kft.-vel, a gyógyszeripari kutatásokkal foglalkozó Genetic Immunity Kft.-vel, a Semmelweis Egyetem Bőrklinikájával, továbbá az SZTE Összehasonlító Élettani Tanszékével.

Környezetvédelem. A Lézeralkalmazási Osztály munkatársai nanorészecskék mérésére alkalmas méreteloszlás és sebességmérő berendezést fejlesztettek ki. Környezetvédelmi méréseket végeztek az általuk kifejlesztett mobil laboratóriummal és laboratóriumi műszerekkel a vörösiszap katasztrófa helyszínén. Megállapították a levegőszennyezés mértékét és annak összetételét. Az erről szóló jelentést megküldték az illetékes szerveknek.

A Kristályfizikai Osztály egyik munkatársa bekapcsolódott a belga Antwerpeni Egyetem által különböző helyszíneken végzett környezetvédelmi mérésekbe és speciális analitikai módszerek kidolgozásába.

A kulturális örökség megőrzése. A Neutrospektroszkópiai Osztály részt vesz az EU-FP7 CHARISMA elnevezésű projektben, mely Európa legjelentősebb múzeumait (British Museum, Louvre, National Galery London, Louvre, Prado stb.), valamint természettudományi kutatóközpontjait, nevezetes analitikai kutatási infrastruktúrákat egyesít. A Budapesti Kutatóreaktornál üzemelő neutronspektrométerek segítségével, kutatói felhasználói szolgáltatás formájában, nemzetközi csoportokkal közösen, a kulturális örökség különböző tárgyain végeztek roncsolásmentes vizsgálatokat. A kutatásokat igen szerteágazó területekről és különböző korszakokból származó leleteken végezték, pl. a Kárpát-medencei kőkori leleteken (horvát, szerb, romániai múzeumokból), különböző európai reneszánsz üvegeken (belga, lengyel, német múzeumokból), középkori fegyvereken (angol, olasz, magyar gyűjteményekből). A vizsgálatokból következtetni lehetett a vizsgált tárgyak eredetére és a korabeli előállítási technológiákra.

A kutatási eredmények megismertetése. Az ELTE Kárpát-medencei Nyári Egyetem „Modellek a Természettudományban” c. szekciójának résztvevői (mintegy 25 határon túli magyar ajkú egyetemista) július 14-én látogatást tett a KFKI telephelyen. Az intézet munkatársai négy bemutatót tartottak számukra. A Novofer Alapítvány szept. 22. – okt. 13. között „A holográfia hajnala és horizontja” címmel ankétot és kiállítást szervezett. A nagy média visszhangot kiváltott rendezvény sikeréhez ugyancsak négy munkatársuk járult hozzá. A Kulturális Örökség Napjai keretében a Neutronfizikai és a Neutronspektroszkópiai Osztály munkatársai több száz látogatónak mutatták be a Budapesti Kutatóreaktornál végzett munkájukat. A Magyar Tudomány Ünnepe alkalmával szervezett laborlátogatásokon 4 középiskola 50 tanulója vett részt.

A Kvantumoptikai és Kvantuminformatikai Osztály munkatársai előadások keretében ismertették meg a nem könnyen kommunikálható kutatásaik eredményeit középiskolás diákokkal és fizikatanárokkal.

A Lézerfizikai Osztály munkatársai 32 orvos számára továbbképző tanfolyamot szerveztek a lézeres gyógyászati kezelések elterjedése és alkalmazásuk szakszerűségének javítása érdekében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Hazai kapcsolatok

Az intézet kutatásai során széleskörű hazai és nemzetközi együttműködésekre 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 könyvtárat. Az intézet koordinálja a Budapesti Lézer-technológiai Kutatóközpont tevékenységét, melyben a telephely három akadémiai intézete (AEKI, RMKI, SZFKI), egy spin-off cég (OPTILAB Kft.) és a BME két tanszéke vesz részt. Évek óta eredményes együttműködés folyik a KFKI Atomenergia Kutatóintézettel (AEKI) a Budapesti Neutron Központ keretében a kísérleti atomreaktor hasznosítása céljából.

Felsőoktatás

Az intézet munkatársai több egyetemen vesznek részt a graduális és posztgraduális képzésben a szilárdtestfizika és az optika tárgykörében. Különösen szoros a kapcsolat az ELTE TTK-n folyó fizikus- és a BME TTK-n folyó mérnök-fizikusképzéssel, továbbá a PTE Fizikai Intézetében folyó oktatással. 2011-ben az intézet 38 kutatója vett részt az egyetemi oktatásban rendes és speciális előadások tartása, továbbá kurzusok és laborgyakorlatok vezetése formájában. Az intézetben 30 hallgató dolgozott diplomamunkája, 35 pedig PhD-dolgozata összeállításán. Egy munkatárs lett az MTA doktora, kilencen szereztek PhD-fokozatot és 12 hallgató fejezte be diplomamunkáját. Angol és magyar nyelven megjelent a szilárdtestfizika elméleti alapjait tárgyaló monográfia harmadik kötete, amely a graduális és posztgraduális képzésben egyaránt alapvető mű.

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 tíz EU-s projekt megvalósításán dolgozik, közülük három indult 2011-ben.

Különösen intenzív nemzetközi együttműködésben folynak a neutron spektroszkópiai kutatások a Budapesti Neutron Központ (BNC) keretében. A BNC rendszeresen szervez elméleti és gyakorlati továbbképzést fiatal kutatók számára. A 2011-es képzés témája a fémes szerkezeti elemekben előforduló maradék feszültség vizsgálata volt. Magyarország EU-s elnökségének rendezvényei sorában három nagy nemzetközi rendezvényen elemezték az együttműködések eddigi eredményeit és vizsgálták a nagyberendezések közös használatának további lehetőségeit.

Kétoldalú akadémiai megállapodások alapján 12 ország kutatóival 23 témában folytak közös tematikus kutatások, közülük négy kezdődött 2011-ben. Ezek egyike az az együttműködés, mely a Szegedi Biológiai Kutatóközpont koordinálásában folyik a Koreai Kutatási Tanács (KRCF) egyik intézetével a fehérjék szerkezetének kutatása témájában.

A kormányközi tudományos és technológiai megállapodások (TéT) keretében hat ország kutatóival hat témában folytak közös kutatások, közülük egy kezdődött 2011-ben.

A fenti együttműködéseket egészíti ki több bilaterális egyezmény alapján folytatott kutatás. Különösen eredményes együttműködés folyik svéd kutatókkal a fémek elektronszerkezetének kutatásában, mely 2011-ben 34 közös publikációt eredményezett nemzetközi folyóiratokban. Úgyszintén nagy jelentőségű a német Max-Planck-Institut für Quantenoptik (München-Garching) intézettel folytatott együttműködés az ultragyors fény-anyag kölcsönhatások kísérleti és elméleti vizsgálata terén.

A fentieken kívül az intézetnek a kutatás minden területén informális kapcsolatai vannak európai és tengerentúli egyetemekkel és kutatóintézetekkel. A 2011-ben megjelent idegen nyelvű publikációk 70%-ában legalább az egyik társszerző külföldi. Az intézet munkatársai nemzetközi rendezvényeken 112 tudományos előadást tartottak és 109 posztert mutattak be.

A hosszabb idejű külföldi munkavállalások és ösztöndíjak különösen az intézet fiatal kutatóinak szakmai fejlődése és nemzetközi kapcsolataik építése szempontjából fontosak. A kutatók külföldi munkavállalásában néhány hónapos, illetve hosszabb szerződések egyaránt előfordultak. 2011-ben 18 kutató töltött összesen 165 hónapot külföldön, közülük nyolcan az egész évet. Két munkatárs nyerte el a Deutsche Akademische Austausdienst (DAAD), illetve a Humboldt Alapítvány nemzetközi ösztöndíját.

Öt USA-beli fizikushallgató két professzor vezetésével az intézetben végezte másfél hónapos nyári gyakorlatát. Rajtuk kívül öt külföldi kutató dolgozott legalább egy hónap időtartamig, összesen 34 hónapot az intézetben.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A 2011-ben elnyert hazai pályázatok közül a LENDÜLET program két projektje érdemel különös figyelmet, mivel ezek támogatottsága két új kutatócsoport létrehozását és tartós működését alapozza meg. Mindkét projekt személyi állományát zömében fiatal kutatók alkotják, akik több nemzetközi pályázaton is eredményesen szerepeltek.

Az első LENDÜLET projekt 2010-ben kezdődött és félvezető nanoszerkezetek tervezésére, minősítésére és alkalmazások keresésére irányul a biomarker, magnetométer és napelem

alkalmazásokban. Kezdetben modell anyagként a szilíciumkarbid nanorészecskéket választották a biomarker alkalmazásokban. A 2011-ben elnyert két nemzetközi projekt lehetővé tette a téma kiterjesztését a nanogyémánt családra is (EU FP7: Diamond based atomic nanotechnologies, 2011–2014; továbbá a PRACE DECI-7 Distributed European Computing Initiative projekt).

2011-ben az intézet egy másik kutatócsoportja volt eredményes a LENDÜLET program pályázatán (Quantum measurement theory in hybrid mesoscopic couplers and networks, 2011–2015). A projekt keretében a mikroszkópikus és a makroszkópikus testek közötti, úgynevezett mezoszkópikus mérettartományban lévő objektumokból felépülő – de még a kvantummechanika törvényeinek engedelmeskedő – hibrid rendszereket kutatják. Eredményeik előrelépést jelenthetnek a jövő mikro- és nanotechnológiájában. A projekten dolgozó fiatal kutatók szakmai fejlődését segíti egy-egy 2011-ben elnyert EU FP 7 Initial Training Network project (Circuit and cavity quantum electro-dynamics, 2011–2015) és egy OTKA-projekt is.

Ugyancsak nagy jelentőségű és hosszú távra kihat az NFÜ által finanszírozott, a Budapesti ELI Lézertechnológiai Kutatóközpont megalapozását célzó projekt (hELIos, ELI_09-1-2010-0010 2011-2012), amely több kísérleti fejlesztést tartalmaz a Szegeden megépülő ELI ALPS (Extreme Light Infrastructure Attosecond Pulse Source) „szuperlézer”-hez. A hELIos projektet az intézet koordinálja.

2011-ben, sajnos, tovább csökkent a sikeres OTKA-pályázatok száma és a támogatás összege is. Míg 2009-ben hat új OTKA-projekt 122 M Ft, 2010-ben öt új projekt 123 M Ft összegű támogatást kapott, addig 2011-ben négy pályázat volt eredményes, összesen 72 M Ft támogatással. Mindegyik projekt időtartama négy év. Az új OTKA-projektek közül kettő elméleti (K 83858: Quantum optical and quantum information processing networks and their nonclassical properties, illetve K 84078: Magnetic, mechanical and thermal properties of alloys and their surfaces), kettő pedig kísérleti jellegű (K 83390: Resonant optical processes in solids, illetve K 83529: Komplex folyadékok szerkezetvizsgálata). Az év végén az intézet további négy OTKA-pályázata volt eredményes, de a szerződés megkötésére csak 2012 elején kerül sor.

Az elmúlt években tartós kapcsolat alakult ki az European Space Agency (ESA) és az intézet egyik kutatócsoportja között az olvadékok megszilárdulásának kutatása témájában. 2011-ben két újabb témában nyertek el támogatást (Phase field modelling of columnar to equiaxed transition with fluid flow, 2011–2013, továbbá Modelling of growth and transformation kinetics, 2011–2013).

Egyik fiatal munkatársuk által elnyert Marie Curie nemzetközi reintegrációs pályázat keretében változatos rendszerek sztatikus és dinamikus tulajdonságainak numerikus tanulmányozására nyílik lehetőség (Numerical study of dynamics and magnetic properties of strongly correlated electron systems, 2011–2015). A pályázat biztosítja a kutatáshoz szükséges számítógépes háttér létrehozását is.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Tóth TA, Läuchli A, Mila F, Penc K: Three-sublattice ordering of the SU(3) Heisenberg model of three-flavor fermions on the square and cubic lattices. Phys. Rev. Lett. 105: 265301/1-4 (2011)
2. Barcza G, Legeza Ö, Marti KH, Reiher M: Quantum information analysis of electronic states at different molecular structures. Phys. Rev. A 83: 012508/1-15 (2011)

3. Punkkinen MPJ, Kwon SK, Kollár J, Johansson B, Vitos L: Compressive surface stress in magnetic transition metals. Phys. Rev. Lett. 106: 057202/1-4 (2011)
4. Waldherr G, Beck J, Steiner M, Neumann P, Gali Á, Frauenheim Th, Jelezko F, Wrachtrup J: Dark states of single nitrogen-vacancy centers in diamond unraveled by single shot NMR. Phys. Rev. Lett. 106: 157601 (2011)
5. Ivády V, Gällström A, Son NT, Janzén E, Gali Á: Asymmetric split-vacancy defects in SiC polytypes: a combined theoretical and electron spin resonance study. Phys. Rev. Lett. 107: 195501 (2011)
6. Beke D, Szekrényes Zs, Balogh I, Veres M, Fazakas É, Varga LK, Kamarás K, Czigány Zs, Gali Á: Characterization of luminescent silicon carbide nanocrystals prepared by reactive bonding and subsequent wet chemical etching. Appl. Phys. Lett. 99: 213108/1-3 (2011)
7. Tegze G, Tóth GI, Gránásy L: Faceting and branching in 2D crystal growth. Phys. Rev. Lett. 106: 195502/1-4 (2011)
8. Tóth GI, Pusztai T, Tegze G, Tóth G, Gránásy L: Amorphous nucleation precursor in highly nonequilibrium fluids. Phys. Rev. Lett. 107: 175702/1-4 (2011)
9. Börzsönyi T, Unger T, Szabó B, Wegner S, Angenstein F, Stannarius R: Reflection and exclusion of shear zones in inhomogeneous granular materials. Soft Matter 7: 8330-8336 (2011)
10. Jánossy I, Fodor-Csorba K, Vajda A, Palomares LO: Light-induced spontaneous pattern formation in nematic liquid crystal cells. Appl. Phys. Lett. 99: 111103/1-3 (2011)
11. Házy E, Bokor M, Kalmár L, Gelencsér A, Kamasa P, Han KH, Tompa K, Tompa P: Distinct hydration properties of wild-type and familial point mutant A53T of α-synuclein associated with Parkinson's disease. Biophysical Journal 101: 2260-2266 (2011)
12. Pothoczki Sz, Temleitner L, Pusztai L: Detailed intermolecular structure of molecular liquids containing slightly distorted tetrahedral molecules with C3v symmetry: chloroform, bromoform and methyl-iodide. J Chem Phys 134: 044521/1-8 (2011)
13. Rácz P, Irvine SE, Lenner M, Mitrofanov A, Baltuska A, Elezzabi AY, Dombi P: Strong-field plasmonic electron acceleration with few-cycle phase-stabilized laser pulses. Appl. Phys. Lett. 98: 111116 (2011)
14. Lenner M, Rácz P, Dombi P, Farkas G, Kroó N: Field enhancement and rectification of surface plasmons detected by scanning tunneling microscopy. Phys. Rev. B 83: 205428 (2011)
15. Hartmann P, Sándor MCs, Kovács A, Donkó Z: Static and dynamic shear viscosity of a single-layer complex plasma. Phys. Rev. E 84: 016404/1-6 (2011)
16. György K, Ajtony Zs, Van Meel K, Van Grieken R, Citrovszky A, Bencs L: Fast heating induced impulse halogenation of refractory sample components in electrothermal atomic absorption spectrometry by different injection of a liquid halogenating agent. Talanta 85: 1253-1259 (2011)
17. Mazzera M, Baraldi A, Buffagni E, Capelletti R, Beregi E, Földvári I, Magnani N: Spectroscopic analysis of Pr^{3+} crystal-field transitions in $YAl_3(BO_3)_4$. Appl. Phys. B 104: 603-617 (2011)
18. Kovács L, Lengyel K, Szalay V: Combination transitions due to stretching and librations of OH^- ions in $LiNbO_3$. Optics Letters 36: 3714-3716 (2011)

19. Bortel G, Tegze M: Common arc method for diffraction pattern orientation. Acta Cryst. A67: 533–543 (2011)

20. Oszlányi G, Sütő A: A charge-flipping algorithm to handle incomplete data. Acta Cryst. A67: 284-291 (2011)

21. Maggini L, De Leo F, Marega R, Tóháti HM, Kamarás K, Bonifazi D: Carbon nanotube-based metal-ion catchers as supramolecular depolluting materials. ChemSusChem 4: 1464-1469 (2011)

22. Nagy G, Posselt D, Kovács L, Holm JK, Szabó M, Ughy B, Rosta L, Peters J, Timmins P, Garab Gy: Reversible membrane reorganizations during photosynthesis in vivo: revealed by small-angle neutron scattering. Biochem. J. 436: 225-30 (2011)

23. Gelencsér A, Kováts N, Turóczi B, Rostási Á, Hoffer A, Imre K, Nyírő-Kósa I, Csákberényi-Malasics D, Tóth Á, Czitrovszky A, Nagy A, Nagy Sz, Ács A, Kovács A, Ferincz Á, Hartyán Zs, Pósfai M: The red mud accident in Ajka (Hungary): characterization and potential health effects of fugitive dust. Environmental Science and Technology 45: 1608-1615 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	166			Ebből kutató[2]:	118
PhD, kandidátus:	58	MTA doktora:	26	Rendes tag és levelező tag:	5
Az intézethez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					54

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				271
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				261
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	223
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	210
Könyv[8]	magyarul:	1	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	7

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	689,733	Összes független hivatkozás száma:	4469
Összes hivatkozás száma[11]:	5380		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	9	MTA doktora: 1

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			112
		poszterek száma:	109
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	43	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	45		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			38
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	21	PhD:	35

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	813 865	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 16 Teljes saját bevétel:	641 713	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	28	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	92 419	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	14	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	325 964	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	6	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	111 866	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	11	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	89 754	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	4	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	28 457	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	76 602	EFt

MATEMATIKAI ÉS TERMÉSZETTUDOMÁNYI TÁMOGATOTT KUTATÓCSOPORTOK

BME ALKALOIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Huszthy Péter, az MTA doktora
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.
telefon: 1-463 1071; fax: 1-463 3297
e-mail: huszthy@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Gyógyszeripari együttműködésben különböző indolvázas természetes anyagokat és azok biológiailag hatásos származékait állítják elő. Vizsgálják az új, daganatellenes hatású vegyületek szintézisét, amelynek során a vinblasztint az eddigiektől eltérően D-triptofán-metilészterrel kapcsolják. A vinblasztin egyik monomer alkaloidjának, a vindolinnak a 10-es helyén helyettesítetlen, valamint a 14,15-ös helyzetben kettős kötés helyett ciklopropángyűrűt tartalmazó származékait tervezik előállítani. Célul tűzték ki a korábban általuk leírt, új típusú, pirroloizokinolinokat eredményező kaszkád rendszerű mechanizmussal történő átrendeződés további felderítését. Vizsgálják a galanthamin és a hozzávezető szintézisút tetraciklus szerkezetű kulcsintermedierjeinek reakcióit metilező szerekkel.
Források: OTKA 0,675 M Ft, Richter Gedeon Nyrt. megbízás: 13 M Ft
A korábbiakban sikeresen alkalmazott konvergens és biomimetikus aszpidoszpermán- és *pszeudo*-aszpidoszpermánváz felépítési stratégiával racém alkaloidok nyerhetők. További cél a természetben előforduló, királis molekulák (alkaloidok) szintézisének a megvalósítása. A szintézisstratégia során a választás a királis segédpartner beépítésével történő megvalósításra esett. Királis segédpartnerként a könnyen hozzáférhető D-glükózból több lépésben kialakított molekulát választották, melyet a szubsztrátként alkalmazott triptamin-származékba építettek be. A monoszacharid egységet tartalmazó új szubsztrátot ezt követően alkalmasan kiépített aldehidekkel kívánják reakcióba vinni.
Forrás: Richter Gedeon Nyrt. megbízás: 13 M Ft
Tervezik új átrendeződési reakciók vizsgálatát. Célul tűzték ki új fényvédő hatású vegyületek előállítását.
Forrás: Bayer CropScience (Németország), Bábolna Környezetbiológiai Központ
Folytatják a szerves szintézisekhez felhasználható szelektív biotranszformációk fejlesztését, főként fontos királis intermedierek tiszta enantiomerként történő szintézisére és bioüzemanyagok előállítására. A hagyományos szakaszos reaktorokban történő kivitelezés mellett fejleszteni kívánják a hatékony, környezetbarát biotranszformációk alkalmazását folyamatos reaktor-rendszerekben és integrált kemoenzimatikus technológiákkal is. Megfelelő molekuláris genetikai és mikrobiológiai háttér felhasználásával a kereskedelmi biokatalizátorok alkalmazása mellett új biokatalizátorokat fejlesztenek. Mind a kémiai reakciókat, mind az enzimműködés mechanizmusait modern számítási módszerek segítségével (átmeneti állapot számítások, protein modellezés, QM/MM számítások aktív centrumon/receptor-kötőhelyen belül) is tanulmányozni kívánják.
Piridin, illetve akridin egységet tartalmazó új enantiomertiszta koronaéter származékokat terveznek előállítani, ezeket kovalens kötéssel szférikus HPLC minőségű szilikagélhez kívánják rögzíteni, és az így kapott királis állófázisok segítségével élettani szempontból fontos racém protonált primer aminok, aminosavak és származékaik, valamint egyéb racemátok rezolválását megvalósítani oszlopkromatográfiás úton. Fentiazin gyűrűvel rendelkező akirális és enantiomertiszta királis új lipofil makrociklusokat terveznek szintetizálni. Ezek fentiazin gyűrűjébe elektronszívó csoportokat terveznek bevinni, és az így kapott könnyen deprotonálható (savanyú hidrogént tartalmazó) koronaétereket élettani szempontból fontos fémionok elválasztására, illetve racém protonált primer aminok, aminosavak és származékaik, valamint egyéb racemátok rezolválására alkalmazni víz-

diklórmetán-víz folyadékmembrán rendszerben végzett fémion-szelektív, illetve enantiomer szelektív transzport segítségével. Az enantiomertiszta koronaéterek sztereoszelektív szintézisek katalizátoraiként történő alkalmazását szintén tervezik megvizsgálni. Várhatóan fontos farmakológiai hatással rendelkező, új 5,7-diazaindol-2-on származékok előállítása is terveik között szerepel.
Források: OTKA: 7,9 M Ft, EGIS: 3 M Ft

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport által kidolgozott és a Richter Gedeon Nyrt. által ipari méretekre nagyított szintézissel gyártott és forgalmazott két készítmény forgalmi értéke a Cavinton esetében 2010-ben elérte az évi 18,4 Mrd Ft-ot, az ugyancsak általuk kidolgozott eljárással gyártott Fluconazol forgalma pedig 2010-ben a 4,1 Mrd Ft-ot. Mindkét eljárás számos szabadalommal védett, amelyekben a kutatócsoport tagjai nevesítve találhatók. A prosztanoid értékesítés a Chinoin-Sanofi gyár részéről elérte a kb. 6 Mrd Ft-ot, gyártása mintegy 120 főt köt le. A rákellenes terápiában alkalmazott vinblasztin vindolin komponensének előállították a 14,15-ciklopropano-származékát, melyet a 16-os észtercsoporton keresztül triptofán-metilészterrel kapcsoltak össze. A ciklopropanovindolinból catharanthinnal történő reakcióval sikerült egy új vinblasztin-származékot szintetizálni, mely több sejtvonalon kiemelkedő daganatellenes hatást mutatott. Az *Amaryllidaceae* alkaloidok közé tartozó és az Alzheimer-kór kezelésében alkalmazott galanthamin kutatása során a galanthamin diazometánnal réz(I)bromid katalizátor jelenlétében történő reakciójával az aromás gyűrű helyett cikloheptatrién gyűrűt tartalmazó származékot állítottak elő. Ebben az esetben a diazometán segítségével metilén-beékelődés történt a reakcióban.
Források: OTKA 0,675 M Ft, Richter Gedeon Nyrt. 13 M Ft
A 8-hidroxikinolin geranil éterének termikus átrendezésével kapott vegyület savkatalizált gyűrűzárása új spiro-furanokinolint adott. Megállapították, hogy a 8-hidroxikinolin 7-es helyzetben helyettesített származékainak savkatalizált gyűrűzárása kedvezményezetten gyűrűszűküléssel játszódik le és spiro vegyületeket ad. Előállítottak több, várhatóan kedvező fényvédő hatású helyettesitett hetazafenalen származékot és vizsgálták fotokémiai stabilitásukat. Előállították a fizosztigmin és fenszerin karba analogonjait és felderítették a reakció (aza-Claisen átrendeződés és azt követő Alder-én reakció) mechanizmusát.
Új biokatalizátorok előállítását valósították meg. Vizsgálták a saját és kereskedelmi lipázok, proteázok és ammónia liázok rögztítését újszerű adszorpciós és szol-gél rögzítési módszerek felhasználásával. Ezeket kinetikus reszolválások és aszimmetrikus reakciók segítségével nagy enantiomer tisztaságú termékek előállítására használták fel. Vizsgálták racém szekunder alkoholok és aminok folyamatos reaktorokban végzett kinetikus rezolválását. Új, folyamatos üzemben is elvégezhető eljárást dolgoztak ki aminok ketonokból reduktív aminálással történő előállítására. QM/MM számítások felhasználásával tisztázták a hisztidin és tirozin ammónia liáz és a velük rokon más MIO-enzimek működésének mechanizmusát. Hőstabil rekombináns bakteriális PAL előállítását valósították meg.
Piridin egységet tartalmazó enantiomertiszta új koronaéter származékokat állítottak elő, ezeket szférikus HPLC minőségű szilikagélhez rögzítették, az így kapott királis állófázisok segítségével élettani szempontból fontos racém protonált primer aminok, aminosavak és származékaik rezolválását valósították meg. Enantiomertiszta akridino-18-korona-6-étereket állítottak elő és sikeresen alkalmazták azokat királis protonált primer aminok enantiomer-felismerésére. Fentiazin gyűrűvel rendelkező akirális makrociklusokat szintetizáltak. Ezek fentiazin gyűrűjébe elektronszívó csoportokat visznek be, és az így kapott koronaétereket fémionok elválasztására alkalmazzák fémion-szelektív transzport segítségével. Akridin

egységet tartalmazó monoaza-18-korona-6-étert kovalens kötéssel szférikus szilikagélhez kötöttek, mely állófázis szelektív módon köt meg rézionokat még nagy feleslegben jelenlévő cinkionok mellett is. Várhatóan fontos farmakológiai hatással rendelkező, új 5,7-diazaindol-2-on származékokat állítottak elő.
Források: OTKA: 8,6 M Ft, EGIS: 3 M Ft

b) Párbeszéd a tudomány és társadalom között

A daganatellenes hatású vegyületek kutatása során kapott eredmények jelentősek az egészségügy területén. A piridin egységet tartalmazó enantiomertiszta 18-korona-6-éter alapú állófázisok alkalmasak biológiai szempontból fontos vegyületek rezolválására, ami a gyógyszer-, növényvédőszer-, élelmiszer- és illatszeriparban nyerhet alkalmazást.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Együttműködő partnerek: Richter Gedeon Nyrt., MTA Kémiai Kutatóközpont, MTA-ELTE Peptidkémiai-, MTA-SE Pathobiokémiai Kutató Csoport, NIH (USA), ELTE Kémiai Intézete, Pécsi Tudományegyetem, Szegedi Egyetem, Fermentia Kft., SynBiocat Kft., BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, MTA SZBK Enzimológiai Intézet, Corvinus Egyetem Mikrobiológiai és Biotechnológia Tanszék, Babes-Bólyai Univ., Dept. of Biochemistry and Biochemical Engineering, Cluj/Kolozsvár, Dept. of Org. Chem., „Politehnica" Univ. of Timisoara (Románia), ELTE Szerves Kémia Tanszék.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Folytatták az OTKA K68734, K81127, PD71910 és a TÁMOP (4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002) pályázatok által támogatott kutatást, és részvételüket a COST Action CM0701 [Cascade Chemoenzymatic Processes-New Synergies Between Chemistry and Biochemistry (CASCAT)] WG2 [Multi-step deracemization of multifunctional compounds] és a Committee of COST Action CM0701 munkájában.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Herke K, Hazai L, Dubrovay Zs, Háda V, Sánta Z., Szántay Cs, Jr. et al. (2): Synthesis of demethoxy-lycoraminone. *Heterocycles, 83*: 581-589 (2011)
2. Kupai J, Huszthy P, Székely K, Tóth T, Párkányi L: Synthesis of new enantiopure dimethyl- and diisobutyl-substituted pyridino-18-crown-6 ethers containing a halogen atom or a methoxy group at position 4 of the pyridine ring for enantiomeric recognition studies. *ARKIVOC, ix*: 77-93 (2011)
3. Kertész J, Móczár I, Kormos A, Baranyai P, Kubinyi M, Tóth K et al. (1): Synthesis and enantiomeric recognition studies of dialkyl-substituted 18-crown-6 ethers containing an acridine fluorophore unit. *Tetrahedron: Asymmetry, 22*: 684-689 (2011)
4. Kertész J, Huszthy P, Kormos A, Bezúr L: Synthesis of silica gel-bound acridino-18-crown-6 ether and preliminary studies on its metal ion selectivity. *Tetrahedron, 67:* 5206-5212 (2011).
5. Brem J, Pilbak S, Paizs C, Banoczi G, Irimie F D, Tosa M I et al.(1): Lipase-catalyzed kinetic resolutions of racemic 1-(10-ethyl-10*H*-phenothiazin-1,2, and 4-yl)ethanols and their acetates. *Tetrahedron: Asymmetry, 22*: 916-923 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]: 6,6 Ebből kutató[2]: 5,6
PhD, kandidátus: 5 MTA doktora: 0 Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhezkötődő akadémikusok száma[3]: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]: 2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]: 36
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]: 16

Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	15
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	15
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]: 36,15 Összes független hivatkozás száma: 147
Összes hivatkozás száma[11]: 189

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]: PhD: 2 MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 1 külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]: 6
poszterek száma: 3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1 Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 13

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]: 11
Témavezetések száma: TDK munka: 8 Diplomamunka (BSc): 19
Diplomamunka (MSc): 10 PhD: 6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]: 31 400 EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel: 25 400 EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel: 0 EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma: 3
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 8600 EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel: 16 800 EFt

BME ANYAGSZERKEZETI ÉS MODELLEZÉSI KUTATÓCSOPORT

Nyulászi László, az MTA doktora
1111 Budapest, Gellért tér 4.
telefon: 1-463 1286; fax: 1-463 4052
e-mail: nyulaszi@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Az elméleti kémiai módszerekkel kombinált kísérleti (elektrondiffrakciós és spektroszkópiai) vizsgálatok segítségével molekulák szerkezetének felderítése, pontos szerkezeti információk meghatározására. Fém-halogenidek szerkezete. Ionos folyadékok és bennük N-heterociklusos karbének jelenlétének valamint katalitikus aktivitásának tanulmányozása. Aktinidák vegyületeinek szerkezete és elektronállapotának vizsgálata, fizikai jellemzőik meghatározása. Szokatlan szerkezetű – általában hipovalens főcsoportbeli elemeket tartalmazó – rendszerek elektronszerkezetének és stabilitásának vizsgálata, reaktivitásuk előrejelzése. Volframoxid nanoszemcsék kutatása. Enzimek vizsgálata QM/MM módszerekkel.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A trifenilszilán molekulaszerkezetét kvantumkémiai vizsgálatokkal kombinált gáz elektron-diffrakciós vizsgálatokkal tanulmányozták. A szabad molekula királis, C_3 szimmetriájú propellerszerű konformációt vesz fel. A kisfrekvenciájú rezgési módusok azt jelzik, hogy a három fenilcsoport nagy amplitúdójú torziós, valamint hajlítási mozgásokat végez a megfelelő Si-C kötések körül.

DFT valamint ab initio számításokkal vizsgálták az imidazol-2-ilidén hidrolízisének mechanizmusát. Megállapították, hogy a reakció lefutása függ a résztvevő vízmolekulák számától. Amíg egy vízmolekula esetén egy igen lassú, irreverzibilis gyűrűnyílás játszódik le, addig nagyobb számú vízmolekula jelenléte esetén az öttagú gyűrű protonálódik a kétszeresen koordinált szénatomon. A fenti viselkedés alapvetően a vízklaszterek savasságával függ össze, amely a klasztert alkotó vízmolekulák számával nő. Az imidazol-ilidén nagy vízfeleslegben való hidrolízisét imidazólium sóvá (hidroxid) molekuladinamikai számítások is alátámasztották. A számításokból levont következtetéseket imidazol-ilidén-víz különböző arányú elegyeinek vizsgálata során NMR mérések teljes mértékben igazolták. Az imidazol-ilidén vízzel alkotott komplexének az imidazólium sókkal alkotott egyensúlyát első ízben kimutatták ki. Az eredmények alapján megállapítást nyert, hogy az általános vélekedés, mely szerint a karbének levegő nedvességére extrém módon érzékenyek lennének, túlzott.

DFT számításokkal vizsgálták, hogy a különböző ionos folyadékokban milyen körülmények között fordulhatnak elő semleges részecskék. Megállapították, hogy az acetát ionok bázikussága nem csak az imidazólium kation 2-es helyzetű szénatomjának deprotonálásra képes a gázfázisban, hanem a 2-metil imidazólium sók, továbbá piridínium sók deprotonálására is számítani kell ilyen bázisos tulajdonságú anionok esetén. A piridínium sók esetében az anion nukleofil támadása során alkotott kovalens kötésű szerkezetek kialakulása kedvezményezett. A fenti eredmények alapján megállapítható, hogy szerves savakból levezethető anionok alkalmazása esetén ionos folyadékokban lehetőség van semleges szerkezetek kialakulására.

Az etil-metilimidazólium-acetát (EMIM-Ac) gőzeiben a kutatócsoport által korábban kimutatott karbén jelenlétét a folyadékfázisban is feltételezve vizsgálták, hogy kimutatható-e katalitikus hatás. A benzaldehidet EMIM-Ac jelenlétében argon atmoszférában 60 ^{o}C hőmérsékleten melegítve jó termeléssel sikerült a benzoin-kondenzáció – egy ismert karbén-katalizált reakció – termékét előállítani. Levegő jelenlétében további karbén katalizálta reakciókat sikerült egy organokatalitikus kaszkádreakcióban végbevinni, s hasonló eredményre sikerült jutni szén-dioxid atmoszférában is. Ez utóbbi reakcióban a szén-dioxid oxidálószerként viselkedik, ami a környezeti aggályokat okozó szén-dioxid kezelése szempontjából fontos reakcióvá teheti a fentebb észlelteket. Kvantumkémiai számításokkal igazolták, hogy a benzoin-kondenzáció reverzibilis, mindez összhangban van a kísérleti tapasztalatokkal.

Megvizsgálták a dextromethorphan, egy gyakran használt köhögéscsillapító szer, lehetséges metabolizmusát QM és QM/MM módszerekkel, arra keresve a választ, hogy miért csak a molekula demetilezését katalizálja P450 2D6 enzim, amikor más anizol származékok esetében az aromás szén oxidációja is megtörténik. Az eredmények azt mutatták, hogy az aromás szén oxidációjához, valamint a demetilezéshez vezető reakcióút gátja hasonló, ha nem vesszük figyelembe az enzim környezetet (QM számítások). Az enzimkörnyezet figyelembe vétele a számításokban alapvetően módosítja a megjósolt metabolitokat, s csak O-demetilezett termék képződését valószínűsíti, összhangban a kísérleti eredményekkel.

Vizsgálták a P450 enzimek aktív formájának oxidáló képességét az enzim környezet függvényében, illetve hogy az egyes P450 enzimek különböző régiószelektivitása mennyire tulajdoníthatók az aktív forma eltérő tulajdonságainak. Ehhez QM/MM számításokat végeztek a bakteriális $P450_{cam}$, és a humán P450 2D6, P450 2C9 és P450 3A4 enzimeken. Az enzim aktív formájának oxidáló képessége nem függ jelentősen attól, hogy melyik enzimet vizsgáljuk, s ezért metabolizmus modellező programok esetén hasznos feltételezés lehet, ha egyforma reaktivitásúnak tekintjük azt minden P450 enzim esetében.

Elméleti kémiai módszerekkel vizsgálták stabil szililének és P_4 reakcióját, és több új, a korábbiakban nem tanulmányozott reakcióutat fedeztek fel, melyek között a korábbiakban vizsgáltaknál alacsonyabb energiájú is volt. A reakció során a nagyméretű csoportok katalitikus aktivitást növelő hatását tapasztalták.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tevékenysége során mindig is fontos szerepet játszott a tudományos teljesítmény értéke, ezen értékeknek a tudósok személyiségével együtt történő bemutatása, és mindennek a társadalom széles rétegeivel történő megismertetése és elismertetése. Fontos aspektusként szerepel a kutatónők szerepe. Ebben a témában a Kémiai Osztálynak a Tudomány Napja alkalmából tartott rendezvényén hangzott el előadás. Hasonló fontossággal – bár egészen más aspektusból – bír jelentőséggel a kvázikristályok felfedezésének jelentőségét méltató és elemző munka, mely az év elején jelent meg, kiemelve, a felfedezés Nobel díjra is érdemes voltát. A munka értékét növeli, hogy valóban ezen felfedezésért adták a 2011 évi kémiai Nobel díjat. A fentieken túl a kutatócsoport témaválasztásában keresi az olyan problémák megoldását, amelyek kapcsolódhatnak az emberiség globális problémáinak megoldásához, így például egyes eredményeink a szén-dioxid megkötéséhez és konverziójához köthetők. Ezen kutatásokkal tovább foglalkozunk. Ide tartozik BASF SE-vel történő együttműködés.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Együttműködő egyetemek: JRC, Institute for Transuranium Elements (Karlsruhe, Németország), Helsinki University Institute of Inorganic Chemistry (Finnország), Massey University, Auckland, New Zealand; University of Michigan, Ann Arbor, MI, U.S.A.; University of Rome; University of L'Aquila (Olaszország); Urenco Netherland, B.V.; Bristol University; University of Torino.

Együttműködő ipari partnerekkel való együttműködésben kiemelendő a BASF SE-vel (Ludwigshafen/Rhein, Németország) ionos folyadékok szerkezetének vizsgálatával kapcsolatos munka, amely 2011 folyamán zárult le.

A BME-n folyó oktatásban a kutatócsoport tagjai alapkurzusok megtartásától (Általános Kémia, Szervetlen Kémia, Kémia) kiscsoportos laborgyakorlatokon és szemináriumokon keresztül választható tárgyakig (Nagy kémiai felfedezések, Szeszkultúra) vesznek részt. A kutatócsoport négy tagja az Oláh György Doktori Iskola törzstagja és a kutatócsoport korábbi vezetője volt az Iskola korábbi vezetője, mig a kutatócsoport jelenlegi vezetője az Iskola jelenlegi vezetője.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A korábban megkezdett FP7 211690, OTKA K-60365 és OTKA K-75972 kutatások mellett egy fő Marie Curie (MC) ösztöndíjat nyert (23 M Ft) Helsinki Egyetemen való tartózkodására. A 2010 óta szünetelet MC Reintegration Grant projekt 2011-ben újraindult.
A BASF SE-vel 2010-ben 120 000 EUR (32 M Ft) értékben kötött kutatási szerződés 2011-ben lezárult.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Hollóczki O, Terleczky P, Szieberth D, Mourgas G, Gudat D, Nyulászi L: The Hydrolysis of Imidazole-2-ylidenes. J. Am. Chem. Soc. *133* ,780-789 (2011)
2. Hollóczki O, Nyulászi L: Neutral species from "non-protic" N-heterocyclic ionic liquids. Org. Biomol. Chem. *9*, 2634-2640 (2011) DOI: 10.1039/C1OB00007A
3. Kelemen Zs, Hollóczki O, Nagy J, Nyulászi L: An organocatalytic ionic liquid Org. Biomol. Chem., 9, 5362-5364 (2011) DOI: 10.1039/c1ob05639e
4. Oláh J, Mulholland AJ, Harvey JN: Proc. Nat. Acad. Sci, 108, 6050-60555./ (2011)
5. Lonsdale R, Oláh J, Mulholland AJ, Harvey J.-N: J. Am. Chem. Soc, 133, 15464-15474 (2011) DOI: 10.1021/ja203157u)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:	5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhezkötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				24
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	23
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	70,543	Összes független hivatkozás száma:	360
Összes hivatkozás száma[11]:	480		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	2	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			7
		poszterek száma:	8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	6		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			6
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	33 900	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	33 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	32 000	EFt

BME FÉMTECHNOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

Ginsztler János, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Bertalan Lajos utca 7.
telefon: 1-463-2954; fax: 1-463-3250
e-mail: matsci@eik.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

- Az endovaszkuláris terápiában alkalmazott implantátumok anyagainak és bevonatainak kutatása.
- A növelt hőmérsékleten üzemelő szerkezeti anyagok szemcsehatárain lezajló folyamatok kutatása.
- A szintaktikus fémhabok infiltrációs folyamatainak kutatása.
- A pébégáztartályok maradék élettartamának meghatározására alkalmas szakértői rendszer kiterjesztése, a rendszer alkalmazása a Pébé-Coop Kft.-vel együttműködve.
- Részvétel az anyagtudományi, anyagtechnológiai és orvostechnikai tantárgyak oktatásában, a károsodásanalízis szakterületére eső ipari K+F+I feladatok végzésében és bekapcsolódás a BME Nanoprojekt kutatási programjába.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az értágítóbetétek anyagainak fejlesztése terén kifejlesztettek egy Nitinol alapanyagú, tágított állapotában is csak 1,0 mm átmérőjű, öntáguló sztentet. Ennek lézersugaras vágási technológiáját és elektrokémiai felületkezelését is kifejlesztve, kutatási partnereikkel együtt megkezdték az új sztentek állatkísérletekben – patkányok carotis-ába implantálva – való klinikai tesztelését.
Az eredményt 12 fős kutatócsoport érte el, akik közül 4 fő dolgozott a kutatócsoportban. Együttműködő partnerek: Semmelweis Egyetem Humán Élettani Intézet Szövetépítő Laboratórium, Labor der Experimentellen Herzchirurgie, Universitätsklinikum Heidelberg.

Az ausztenites acélok szemcsehatár-tulajdonságainak tanulmányozásával igazolták, hogy termomechanikus kezelésekkel a szemcsehatárok korróziós ellenállása jelentősen fokozható. Új összefüggéseket tártak fel a forrasztás közben jelentkező, fémolvadékok okozta szemcsehatár-erózió kristályorientációval való kapcsolatáról.
Az eredményt 4 fős kutatócsoport érte el, akik közül 2 fő dolgozott a kutatócsoportban. Együttműködő partnerek: Miskolci Egyetem Mechanikai Technológiai Tanszék, Linde Gáz Magyarország Kft.

Meghatározták az Al mátrixú szintaktikus fémhabok határfelületi stabilitását befolyásoló gyártási és anyagszerkezeti tényezőket. Olyan dupla kompozit szerkezeti anyagot fejlesztettek ki – elsőként a világon –, amelynek mátrixa maga is alumínium mátrixú szintaktikus fémhab, erősítőanyaga pedig alumínium mátrixú, kerámiaszál erősítésű kompozithuzal. A kutatási témában megvédett PhD-értekezés témavezetője a kutatócsoport tagja.
Az eredményt 5 fős kutatócsoport érte el, akik közül 2 fő dolgozott a kutatócsoportban. Együttműködő partnerek: MTA KK, Bay-Nano Intézet.

A pébégáztartályok károsodási folyamatainak elemzése alapján, a Pébé-Coop Kft.-vel együttműködve új szakértői rendszert fejlesztettek ki a tartályok maradék élettartamának meghatározására; ennek eredményei a tartályok időszakos ellenőrzésére vonatkozó hatósági

szabályozásba is beépültek. Ipari K+F+I feladat keretében a rendszer működését sikeresen leellenőrizték.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tevékenysége nagyszámú gépészmérnök egyetemi hallgató oktatásával azonos színtéren folyik. A kutatócsoport a tanszékkel közösen megnyitotta a laboratóriumait a diákok előtt, bevonta őket a kutatási feladatok anyagvizsgálati és technológiafejlesztési részfeladataiba, és szakmai diákkörök (pl. Hegesztési Szakosztály, Alakítástechnikai Szakosztály) tevékenységét támogatta. Mindennek köszönhetően számos diák került közvetlen kapcsolatban azokkal a kutatási feladatokkal, amelyeken a kutatócsoport 2011-ben dolgozott.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A vállalati együttműködések keretében elért eredmények alapján szabadalmi bejelentés történt az FCI Connectors Hungary Kft.-vel együttműködve. A Pébé-Coop Kft.-vel közösen elért eredmények alapján folytatódott a pébégáztartályokra vonatkozó hatósági szabályozások korszerűsítése.
A kutatócsoport tagjai 10 egyetemi tantárgy előadásait tartották, témavezetésükkel 1 PhD-értekezés sikeres védése történt meg.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A beszámolási évben a kutatócsoport nem nyújtott be és nem nyert el új pályázatot.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. P J Szabó; J. Ginsztler: Production of very fine grained AISI 304 steel with high special grain boundary density by grain boundary engineering. Materials at High Temperatures (ISSN: 0960-3409) 28: (3) 254-260 (2011)
2. Mészáros I; Ginsztler J: Magnetic testing of creep deterioration. Materials Science Forum (ISSN: 0255-5476) 659: pp. 325-330. (2011)
3. Romola Laczkó; Tibor Balázs; Eszter Bognár; János Ginsztler: Damages to stent stabilized left ventricular pacemaker electrodes during simulated lead extraction. Frattura E Integrita Strutturale (ISSN: 1971-8993) 16: 28-33 (2011)
4. Balázs T; Merkely B; Bognár E; Gellér L; Szilágyi S; Dobránszky J; Zima E: Methods for Examination an Explanted Coronary Sinus Lead Stabilized with a Coronary Stent. Pace-Pacing and Clinical Electrophysiology (ISSN: 0147-8389) 1-4 (2011)
5. Balázs J; Dobránszky J: A tényleges hőbevitel meghatározása volfrámelektródás hegesztésnél. Hegesztéstechnika (ISSN: 1215-8372) 21: (3) 47-50 (2011)
6. Imre Norbert Orbulov; Árpád Németh: Global, depth sensing and dynamic hardness of metal matrix syntactic foams. Periodica Polytechnica-Mechanical Engineering (ISSN: 0324-6051) 53: (2) 93-99 Paper PP2. (2011)
7. Kun Péter; Orbulov Imre Norbert: AlCu5 és AlMgSi1 mátrixú szintaktikus fémhabok előállítása és vizsgálata. Bányászati Kohászati Lapok - Kohászat (ISSN: 0005-5670) 144: (3) 51-55. Paper BKL-3. p. 5 (2011)
8. Weszl M; Skaliczki G; Cselenyák A; Kiss L; Major T; Schandl K; Bognár E; Stadler G; Peterbauer A; Csönge L: Freeze-dried human serum albumin improves the adherence and proliferation of mesenchymal stem cells on mineralized human bone allografts. Journal of Orthopaedic Research (ISSN: 0736-0266) 29: (11) (2011)
9. Kristóf D; Németh L; Dobránszky J: Nagyító alatt a hegesztőhuzal. Hegesztéstechnika (ISSN: 1215-8372) 21: (4) 22-26 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Fémtechnológiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:	4,5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhezkötődő akadémikusok száma[3]:					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				20
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				11
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven:	4
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	6
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	0	Összes független hivatkozás száma:	24
Összes hivatkozás száma[11]:	33		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			4
		poszterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			5
Témavezetések száma: TDK munka:	15	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		21 700	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	0	Teljes saját bevétel:	24 200	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		24 200	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

BME FIZIKAI GEODÉZIA ÉS GEODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT

Ádám József, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
telefon: 1-463 3222; fax: 1-463 3192
e-mail: jadam@sci.fgt.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

- A Föld nehézségi erőterével kapcsolatos kutatások:műholdas gravimetria, gradiometria, gravimetriai és Eötvös-ingamérések
- Kutatások a GNSS és a GNSS meteorológia területén
- A VLBI technika alkalmazása, a nemzetközi égi vonatkoztatási rendszerrel kapcsolatos kutatások
- Kozmikus geodéziai és égi mechanikai kutatások
- A felszínmozgás monitorozása és az abból eredő veszélyeztetettség vizsgálata GPS- és radaros (SAR) földmegfigyelő műholdak segítségével

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az ELGI Gravitációs és Geodinamikai Obszervatórium üregeinek és az azok felett elhelyezkedő tömegek hatását vizsgálták az ott folyó észlelésekre. Ebből a célból egy komplex modellt építettek fel, és Holstein összefüggései alapján számították e komplex modell tömegvonzási potenciálban, térerősségben, valamint Eötvös-tenzor elemeiben észlelhető hatását. A modellszámításhoz kapcsolódóan hibavizsgálatot is végeztek.

Egy új magyarországi kvázigeoid modellt határoztak meg nehézségi rendellenességi, GPS/szintezési és függővonal-elhajlási adatok kombinálásával, a legújabb EGM2008-as geopotenciális modell, valamint az SRTM magassági adatbázis segítségével. A kombinált kvázigeoid modell ± 4.9 cm-es szórással illeszkedik a GPS/szintezési adatokhoz, viszont néhány GPS/szintezési ponton nagy eltérések jelentkeztek.

A beszámoló évben az EOMA újramérés vonatkozásában megbecsülték a normáljavítás várható értékét egy korábbi EOMA kiegyenlítés eredményei alapján, majd kísérletet tettek a gravimetriai adatok pontossági igényének a becslésére különböző terepviszonyok mellett. A nehézségi erőtérnek főként a hosszúhullámú komponenseit figyelembe véve azt tapasztalták, hogy a gravimetriai információ számbavétele egy-egy hegyvidéki területen alapvető fontosságú, azonban az ország legnagyobb részén elhanyagolható.

Prizmamodelleken alapuló tömegmodellezéssel meghatározták a budapesti 4-es metró építésének a földi nehézségi erőtér potenciálfelületeire gyakorolt hatását. Tapasztalataik szerint, ha a valódi süllyedéstől eltekintenek, a hatás nem jelentős, azonban a süllyedések is megváltoztatják a nehézségi erőtér szerkezetét, amely már a mérések pontossági követelményével megegyező nagyságrendű hatást jelent.

Integrálták a rádiószondás mérések feldolgozását a közel valósidejű feldolgozó rendszerbe, ezáltal összevethetővé váltak a GPS mérésekből becsült kihullható csapadékmennyiség értékek a rádiószondázással nyert értékekkel. Az eredmények korrekt értékelése érdekében levezették a rádiószondás mérésekből nyert kihullható csapadékmennyiségek középhibáinak meghatározására szolgáló összefüggéseket. Az eredmények azt mutatják, hogy ezzel a

technikával mintegy +/- 0,3 mm-es középhibával határozható meg a kihullható csapadékmennyiség. Ugyan a GPS mérésekből levezetett érték ennél nagyobb középhibát eredményez, nagy előnye, hogy hazánkban 35 pontban óránkénti becslést tesz lehetővé, szemben a napi kettő rádiószondás észleléssel.

A kihullható csapadékmennyiség becslésekre felhasznált modelleket is górcső alá vették. Kimutatták, hogy az 'a priori' hidrosztatikus késleltetések nagyon jól modellezhetőek (mintegy +/- 3 mm-es középhibával adják vissza a rádiószondás adatokat, amennyiben figyelembe veszik a sztratoszféra okozta késleltetés hatását is). A troposzféra okozta jelkésleltetés és a kihullható csapadékmennyiség összefüggésére új modellt vezettek le több mint 250000 közép-európai rádiószondás észlelést felhasználva.

A különösen nagy felbontású rádió-interferometria (VLBI) technikáját alkalmazták az égi vonatkoztatási rendszert kijelölő, valamint más kompakt rádiósugárzó égitestek szerkezetének vizsgálatára. Publikálták a jelenleg ismert legtávolabbi rádiókvazárról (J1429+5447, z=6,21) az Európai VLBI Hálózattal (EVN) készült kétfrekvenciás rádiótérképeket. Globális VLBI hálózattal vizsgáltak egy keskeny vonalas Seyfert-galaxist (J0948+0022), amelynek magja aktívnak bizonyult rádiótartományban. Megkezdték egy olyan minta VLBI vizsgálatát, amelyben optikai spektroszkópiai mérések alapján kettős aktív galaxismagok gyaníthatók. A rádiótávcső-hálózat nagy felbontása lehetővé teszi ezek azonosítását, amennyiben valóban kettősökről van szó. A nagyenergiájú gamma-tartományban felfedezett, aktív galaxismagként azonosított HESS J1943+213 forrásról EVN mérésekkel megállapították, hogy inkább galaktikus forrásról, egy ritka pulzárszélködről van szó. Megvizsgálták a rádió és optikai tartományban definiált legpontosabb égi vonatkoztatási rendszerek közvetlen összekapcsolásának lehetőségét, s számos szignifikánsan eltérő pozíciójú kvazárt találtak.

A mesterséges holdak (pl. VLBI vagy GPS rendszerek műholdjai) pályájának minél pontosabb modellezésére kidolgozták a Picard-iteráció megfelelő alakját. Az általuk kidolgozott numerikus módszer alkalmas a földi nehézségi tér gömbszimmetrikustól eltérő voltának, illetve a közegellenállásnak a figyelembe vételére. A Picard-iteráció előnye, hogy a mozgás pályájának időbeli Taylor-sorát állítja elő. Ez lehetővé teszi, hogy a mesterséges hold két integrációs lépés közötti helyzetét újabb integrációs lépés nélkül határozzák meg.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A Magyar Mérnökkamara pécsi kulturális főváros programjainak keretében rendezett tudományos „Az Eötvös-ingától a GOCE-ig" ismeretterjesztő kiállításának szakmai irányítását végezték, amelynek keretében kiállítási tárgyakat, számtalan magyarázó posztert, és egy 3D-s film összeállítását végeztek.
A Kutatók Éjszakája 2011. évi rendezvénysorozathoz kapcsolódó csillagászati tárgyú előadásokat szerveztek az ELTE-n.
Rendszeresen tartanak ismeretterjesztő előadásokat a Magyar Csillagászati Alapítvány által szervezett csillagászati tanfolyamokon. Tartottak ismeretterjesztő előadást a Magyar Csillagászati Egyesület előadássorozatának keretében is.
Rendszeresen publikálnak hazai ismeretterjesztő kiadványokban, főként VLBI-vel kapcsolatos eredményeink jelennek meg, de GPS meteorológia témakörből is született írás az Élet és Tudomány folyóirat számára.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Kölcsönös kutatócsere a Sanghaji Csillagászati Obszervatóriummal

Vendégkutatói látogatások: Max Planck Rádiócsillagászati Intézet (Bonn, Németország), Európai VLBI Intézet (Dwingeloo, Hollandia)

Vendégoktatás az Eötvös Loránd Tudományegyetemen („RadioAstronomy I-II." és „Műholdas geodézia" speciális előadások keretében)

Az International Association of Geodesy (IAG) Communication and OutreachBranch (COB) folyamatos működtetése 2003-tól kezdve.

CEGRN Consortium titkári pozíció és GMES Terrafirma Magyarország képviselőség betöltése.

Érdemi együttműködésben vannak a Zrínyi Miklós Nemzetvédelmi Egyetemmel, a Müncheni Műszaki Egyetemmel, a Stuttgarti Egyetemmel, a Karlsruhei Egyetemmel és az Ohio Állami Egyetemmel.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Kínai-magyar kutatócsere megállapodás a Sanghaji Csillagászati Obszervatóriummal, Kínai Tudományos Akadémia (36 000 kínai jüan, kb. 1,2 millió Ft)

OTKA – Élet és Tudomány cikkpályázat (II. díj)

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Földváry L: Mass-change acceleration in Antarctica from GRACE monthly gravity field solutions, In: Geodesy for Planet Earth, Proceedings of IAG Symposiumin Buenos Aires, IAG Symposia, Vol. 131., Chapter 72, p. 591-596 (2011)
2. Frey S, Paragi Z, Gurvits LI, Gabányi KÉ, Cseh D: Into the central 10 pc of the most distant known radio quasar. VLBI imaging observations of J1429+5447 at z=6.21. Astronomy and Astrophysics, Vol. 531, id. L5 (4 pp.) (2011):
3. Gabányi K.É, Dubner G., Giacani E, Paragi Z, Pidopryhora Y, Frey S: Radio observations of the TeV source HESS J1943+213: a new case of a pulsar wind nebula? Astronomy and Astrophysics, elfogadva (6 pp.) (2011)
4. Giroletti M, Paragi Z, Bignall H, Doi A, Foschini L, Gabányi KÉ Reynolds C, Blanchard J, Campbell RM, Colomer F, Hong X, Kadler M, Kino M, van Langevelde HJ, Nagai H, Phillips C, Sekido M, Szomoru A, Tzioumis A.K: Global e-VLBI observations of the gamma-ray narrow line Seyfert 1 PMN J0948+0022, Astronomy and Astrophysics, Vol. 528, id. L11 (4 pp.) (2011)
5. Molnár B, Laky S, Tóth C: Using Full Waveform Data in Urban Areas. International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences; XXXVIII-3/W22 (2011)
6. Nagy I, Pál A: Stability of exomoons, Publications of the Astronomy Department of the Eötvös University, Vol, 20 p. 113-116 (2011)
7. Rózsa Sz: Estimation of integrated watervapour from GPS observations using local models in Hungary, In: Geodesy for Planet Earth, Proceedings of IAG Symposium in Buenos Aires, IAG Symposia, Vol. 131., Chapter 103, p. 817-824 (2011)
8. Völgyesi L, Ultmann Z: Reconstruction of a Torsion Balance and the Results of the Test Measurements, In: Geodesy for Planet Earth, Proceedings of IAG Symposium in Buenos Aires, IAG Symposia, Vol. 131., Chapter 34, p. 281-290 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Fizikai Geodézia és Geodinamikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	7,5	Ebből kutató[2]:	6,5
PhD, kandidátus:	0 MTA doktora: 2	Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatóhelyhezkötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				40
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				40
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	11	idegen nyelven:	6
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	18
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	24
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	5

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	30,222	Összes független hivatkozás száma:	24
Összes hivatkozás száma[11]:	24		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			7
	poszterek száma:		9
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		4
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 21			

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			9
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	20 900	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	20 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:		3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	13 000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:		0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:		1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

BME GÉPEK ÉS JÁRMŰVEK DINAMIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Stépán Gábor, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 5.
telefon: 1-463 1369; fax: 1-463 3471
e-mail: stepan@mm.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A gépek és járművek stabilitási- és rezgésvizsgálata témakörben a marási folyamat frekvenciatartományon alkalmazható stabilitásvizsgálati módszereinek továbbfejlesztése volt a fő cél. A kidolgozott módszer a hagyományos eljárásoknál jelentősen gyorsabb és megbízhatóbb eredményeket garantál. A kutatócsoport által korábban kifejlesztett dinamikus gumikerék modell gyakorlati alkalmazásainak kibővítése is fontos feladat volt. Ezzel kapcsolatban a legértékesebb eredmény egy teljes személygépjármű modell stabilitási térképének megszerkesztése volt.
A számítógéppel szabályozott rendszerek témakörében továbbra is kiemelt kutatási terület volt az ún. alulaktuált robotikai rendszerek szabályozásának tanulmányozása, ugyanis ezekkel gyorsabb és energiatakarékosabb működést lehet biztosítani. A vizsgálatokhoz moduláris kísérleti eszköz készítése kezdődött el, mely gyorsan és rugalmasan konfigurálható át különböző struktúrákba.
A *járműalkatrészek tönkremenetelével* kapcsolatos kutatómunka a kontinuum mechanika ún. „rate dependent" anyagmodelljeinek az anyagi instabilitási problémák numerikus analízisére gyakorolt hatásával foglalkozott. Fontos eredmény, hogy a kapott matematikai struktúrák hasonlóak a számítógéppel szabályozott rendszerek kapcsán vizsgáltakhoz.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A gépek és járművek stabilitási- és rezgésvizsgálata témakörben elsősorban a marási folyamat frekvenciatartományon alkalmazható stabilitásvizsgálata kapcsán születtek új eredmények. A frekvenciatartományon használt módszerek által vizsgált paramétertér mindig eggyel nagyobb, mint az időtartományon használt módszereké, ezért a stabilitási határok detektálása is hosszabb időt vesz igénybe. Az ún. Hill-módszer vagy az ún. multi-frequency-solution algoritmus sebessége drasztikusan növelhető a kidolgozott új keresési eljárás bevezetésével. A probléma megoldását a felező módszer magasabb dimenziókra történő általánosítása jelentette, amivel a számítás időigénye összemérhető lett az időtartományon végzett számításokéval. A módszer számos más gyökkeresési problémánál is alkalmazható. Nemlineáris egyenletrendszerek esetén is automatikusan megtalálja a többszörös megoldásokat, a módszer konvergenciája is garantált, és nem csak adott pontokat lehet megkeresni vele többdimenziós terekben, de vonalakat, felületeket, vagy más objektumokat is. Ez a módszer a Nyquist kritériummal kiegészítve a stabilitásváltozás irányáról is ad információt, amire a hagyományos módszerek nem képesek.
A forgácsoló szerszám reális paraméterek mellett gyakran elválhat a munkadarabtól, ami a felületi minőség romlásához, illetve a szerszám tönkremeneteléhez vezethet. A kutatócsoport tagjai feltérképezték a szerszámmerevség és a forgácsolási sebesség paramétersíkján, hogy hol alakulhat ki megszakított forgácsolás. Egy másik jelenség, az élsisak kialakulása is károsan hat a forgácsképződésre. Az időkésleltetett modell szerint ez a jelenség gyakran aperiodikus forgácsleválasztáshoz vezet. Mivel a rendszer fázistere végtelen dimenziós, a

kaotikus rezgések kimutatásához nem elég megbízható az idősor-analízis. Ezért egy olyan programkód készült, mely közelítőleg kiszámítja a Ljapunov-spektrumot, segítségével becslést ad az attraktor fraktáldimenziójára – amely végesnek bizonyult.
A késleltetett differenciálegyenletekkel kapcsolatos stabilitásvizsgálatok részét képezte a kutatócsoport által korábban kifejlesztett gumikerék modell beépítése a szakirodalomban általánosan használt személygépjármű modellbe is. Ez az ún. bicikli modell – elhanyagolva a jármű oldalirányú kiterjedését és függőleges dinamikáját – mindössze öt paraméter segítségével alkalmas a gépjármű állandó sebességű, egyenes vonalú mozgása során megjelenő öngerjesztett rezgések vizsgálatára. A jármű lineáris stabilitási térképe a haladási sebesség és a súlypont elhelyezkedését leíró paraméter síkjában került megrajzolásra különböző egyéb paraméterek mellett. Bebizonyosodott, hogy egyes sebességtartományokban az egyenes vonalú mozgás elveszíti lineáris stabilitását és a jármű öngerjesztett rezgéseket végez hol az első hol pedig a második sajátfrekvenciájához tartozó módussal. A gumikerék deformációi szintén megjeleníthetők, numerikus szimuláció segítségével.
2011-ben folytatódott az egyszabadságfokú, száraz súrlódásos oszcillátor vizsgálata. Két független numerikus módszerrel is sikerült kimutatni kaotikus rezgéseket. Az első módszer meghatározza két, egymáshoz közeli kezdeti feltétellel indított megoldás távolodási ütemét, azaz a legnagyobb Ljapunov-exponenst. A másik módszer az ún. káosz-szinkronizáción alapul: az eredeti egyenletrendszert új változók bevezetésével megkettőzve és az új egyenleteket csatoló tagokkal kiegészítve, az eredeti és az új egyenletrendszer kaotikus megoldásai a csatolási tényező bizonyos pozitív értékeinél szinkronizálódnak. A legnagyobb ilyen érték a maximális Ljapunov-exponens. Az eredmények egy nagyon szűk tartományban tranziens káosz jelenlétére utaltak. A kaotikus viselkedés várható idejének becslésére numerikus és szemi-analitikus módszerek alkalmazásával került sor. Az előzetes kísérleti vizsgálatok szerint lehetséges az elméleti eredmények paramétertartományát megközelítő súrlódási tényezőkkel jellemezhető anyagpár kiválasztása a későbbi dinamikai kísérletekhez.
A számítógéppel szabályozott rendszerek témakörében továbbra is kiemelt kutatási irány az alulaktuált, azaz nem minden szabadsági fokukban szabályozható robotikai rendszerek szabályozásának tanulmányozása, melyek a hagyományos robotoknál fürgébb és energiatakarékosabb működést biztosítanak. A szabályozási algoritmusok tesztelésére eddig is rendelkezésre állt kísérleti berendezés, aminek a komplexitása miatt a kísérleti eredményekből nehezen lehetett levonni pontos következtetéseket. 2011-ben sor került egy olyan moduláris kísérleti berendezés megtervezésére és részben kivitelezésére is, ami gyorsan és rugalmasan konfigurálható át különböző struktúrákba, például soros és párhuzamos kinematikájú, illetve alulaktuált vagy redundáns robotok egyaránt megépíthetőek. Egy további eredmény annak megmutatása volt, hogy az alulaktuált rendszerek szabályozására korábban kifejlesztett algoritmus sikeresen alkalmazható teljesen aktuált robotok (pl.: ipari robotok) motorjainak telítődésekor fellépő problémák feloldására.
A szabályozott rendszerekkel kapcsolatos elméleti vizsgálatok a digitális hatások – mintavételezés, késés és kerekítési hiba – kaotikus viselkedést okozó hatására koncentráltak. A beszámolási időszakban sikerült áthidalni a korábbi nehézségeket, melyek egy PD szabályozás kaotikus megoldásai létezésének bizonyítása során jelentkeztek. A reális paraméterek mellett kialakuló rezgéseket egy kétdimenziós diszkrét leképezéssel lehet leírni, ezért ún. Smale-patkót lehetett szerkeszteni, ami a kaotikus viselkedés egyértelmű bizonyítéka. Az eredmények rávilágítottak, hogy a gyakorlatban nem a digitális hatások miatt bekövetkező kis amplitúdójú rezgések okozhatnak problémát, hanem az, hogy több attraktor is megjelenhet, távol a megkívánt véghelyzettől. Felmerült az a kérdés, hogy nem a digitális rendszer szimulációjához használt számítógép – szintén digitális – működése okozza-e a megfigyelt jelenségeket. Sikerült megmutatni, hogy ez a hatás elhanyagolható. További vizsgálatok történtek a dinamikai rendszerekben mutatkozó anticipáció stabilitásra gyakorolt

hatásaival kapcsolatban is. Egy véges szabadságfokú rendszer esetében az analitikus vizsgálatok szerint az anticipatív rendszer kedvezőbb stabilitási szempontból.
A *járműalkatrészek tönkremenetelével* kapcsolatos kutatómunka a kontinuum mechanika ún. „rate dependent" anyagmodelljeinek az anyagi instabilitási problémák numerikus analízisére gyakorolt hatásával foglalkozott. Ebben az esetben is egy diszkrét dinamikai rendszer vizsgálatáról van szó, de az algebrai operátorok helyett differenciáloperátorok spektrumainak a meghatározására van szükség. Az eredmények szerint a „rate independent" anyagmodellek anticipatív jellegű diszkrét dinamikai rendszerekre vezetnek, amelyek a *számítógéppel szabályozott rendszerek* témakörében alkalmazott matematikai eljárásokkal vizsgálhatók.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között.

A kutatócsoport tagjai érdekes mechanikai kísérletek bemutatásával és ismeretterjesztő előadás tartásával vettek részt a BME egyetemi nyílt napon, ahol számos középiskolás diák érdeklődését sikerült felkelteni a műszaki tudományok iránt. A BME-n tartott Kármán-napon is ismeretterjesztő előadással és mechanika témájú vetélkedő feladatok kidolgozásával vettek részt a kollégák.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Új felsőoktatási kapcsolat: Egy kolléga külföldön (Centre for Intelligent Machines, Department of Mechanical Engineering, McGill University) végzett kutatómunkát. A kutatócsoport minden tagja aktívan oktat a BME-n.
Nemzetközi konferenciák szervezése: 1) CASYS 2011 (Liege, Belgium): Member of Scientific Committee, 2) Thermal Stresses 2011 Congress: General Chair.
Új tudományos tagságok: Observer Member of IFToMM Technical Committee on Robotics and Mechatronics, Member of the Honorary Editorial Board of the Journal of Advances in Vibration Engineering, Australian Mathematical Society, American Mathematical Society
Új ipari kapcsolatok: Bugaboo, Grundfos.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Egy 2011-ben benyújtott és elnyert, 2012-ben induló, „Gépszerkezetek érintkezési paramétereinek azonosítása nemlineáris dinamikai kísérletekkel" című, 4 évre 16183 E Ft költségvetésű OTKA-pályázatban a kutatócsoport vezetője és három tagja vesz részt.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bachrathy D, Stépán G, Turi J: State dependent regenerative effect in milling processes. Journal of Computational and Nonlinear Dynamics 6:(4) 1-9 (2011)
2. Zelei A, Kovács LL, Stépán G: Computed torque control of an under-actuated service robot platform modeled by natural coordinates, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 16:(5) 2205-2217 (2011)
3. Dombovari Z, Barton D.A.W, Wilson R.E, Stepan G: On the Global Dynamics of Chatter in the Orthogonal Cutting Model, International Journal of Non-linear Mechanics 46:(1) 330-338 (2011)
4. Bachrathy D, Stépán G: Bisection method in higher dimensions and the efficiency number, Periodica Polytechnica, vol. 2, (2011). (2012-ben megjelenő, 2011-es szám.)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Gépek és Járművek Dinamikája Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	6			Ebből kutató[2]:	6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	1	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhezkötődő akadémikusok száma[3]:					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				37
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				7
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	4,642	Összes független hivatkozás száma:	27
Összes hivatkozás száma[11]:	32		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			16
	poszterek száma:		0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	3		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			6
Témavezetések száma: TDK munka:	9	Diplomamunka (BSc):	13
Diplomamunka (MSc):	6	PhD:	4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	23 500	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 — Teljes saját bevétel:	7400	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	4	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4400	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	1000	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

BME IRÁNYÍTÁSTECHNIKAI KUTATÓCSOPORT

Keviczky László, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2. Q/B
telefon: 1-463 2870; fax: 1-463 2871
e-mail: keviczky@sztaki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A rendszeridentifikáció területén végzett folyamatos kutatás során válasz keresése arra, hogy hogyan lehet adatvezérelt megfontolások alapján zajos mérési pontokból strukturális információkat kinyerni, amikor nemcsak a kimenőjel, hanem a bemenőjel is zajos.

A predikciós irányítási algoritmusok alkalmazást nyernek az ipari gyakorlatban. A témában nyert ismereteknek és az utóbbi években elért eredményeknek összefoglalása.

A kutatást folytatva annak megvizsgálása, hogy hogyan lehet modell referenciás és predikciós irányítási algoritmusokat megadni, ha a dinamikus folyamatról a strukturális ismeretek hiányosak és a folyamatot az ortogonális Laguerre felbontáson alapuló modelljével közelítik.

Robot kutatások folytatása: robotok irányítása etológiai indíttatású modellek alapján.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Sok esetben zajos mérési adatokból kell megadni a nem ismert struktúrájú rendszer statikus vagy dinamikus modelljét. Sokszor egy egyszerű parametrikus összefüggés nem írja le megfelelően a bonyolultabb strukturális összefüggéseket. Iteratív identifikációs optimalizációs módszert dolgoztak ki, amely a zajos adatokhoz illeszt görbéket vagy felületeket, először a görbe vagy felület jellegét, majd paramétereit meghatározva. A módszer jó eredményeket ad bonyolultabb, pl. egymást metsző geometriai alakzatok esetén is.

A predikciós irányítások területén nyert ismereteket és kutatási eredményeket összefoglaló könyv elkészült, amely 2011 szeptemberében jelent meg (lásd a kiemelt publikációk jegyzékét).

A bonyolult nemlineáris rendszerek kezelésének egy lehetséges korszerű módszere a lineáris, változó paraméterűfolyamatok (LPV rendszerek) megközelítési technikája, ahol az utóbbi években sikeres kutatásokat folytattak. Az LPV rendszerekre kidolgozott hibadetektáló mintavételezett szűrők diszkretizációjának problémakörében egy a geometriai struktúrát megőrző sémaként az Euler diszkretizációt vizsgálták. A javasolt eljárás a szűrő statikus részére ezt a módszert alkalmazza, míg a zéró dinamika tetszőleges pontosságú más sémával is diszkretizálható.

A LPV paradigmát használva olyan járművek integrált irányítására adtak javaslatot, amikor is különböző alrendszerek irányítástervezésekor az egymásra való hatásokat is figyelembe lehet venni. Haszonjárművek integrált adaptív irányítására megoldást javasoltak, a módszer magában foglal egy hibatűrő rekonfigurációt is. Robusztus szabályozótervezést vizsgáltak tehergépkocsik vészhelyzeti kormányzására az első kerekek aszimetrikus fékezésével. Iteratív modell hiba modellezés és szabályozótervezés került alkalmazásra.

Bonyolultabb járműveket megcélozva egy komplex pilóta nélküli repülőgép rendszer hardver felépítésére, a rendszeren végzett fejlesztésekre és tesztekre is sor került, kezdve a

számítógépes szimulációktól a valós repülési eredményekig. A teszt rendszereken számos új elméleti eredmény gyakorlati felhaszálására került sor:

- Repülőgép orientációjának becslésére kifejlesztett kibővített Kalman szűrő alkalmazása. Elvégezték az algoritmus hangolását és szimulációban, off-line számításokkal való tesztelését.
- Újfajta pályakövető algoritmus kifejlesztésére került sor, amelyet más módszerekkel is összehasonlítottak. A tesztelések a szimulációkon túl valós repülési tesztekre is kiterjedtek.
- Új referenciajel követő LQ optimális szabályozás elméleti levezetését és gyakorlati tesztelését végezték el. Valós repülési teszt eredményeket is bemutattak.

A hiperbolikus Blaschke csoport által generált reprezentáció és az abból származtatható wavelet-konstrukciót, annak Laguerre rendszer alapján számítható formáját, valamint ezek rendszeridentifikációban való alkalmazási lehetőségeit vizsgálták. A kidolgozott új eljárás megalapozza a jelek és rendszerek pólusainak Laguerre bázis alapján hiperbolikus távolságmérték alkalmazásával történő identifikációját, és módszert ad az eljárás megvalósítására. Az eljárás fontos lehet jelek és rendszerek Laguerre bázis alapján történő identifikációjakor, és módszert ad a pólusok hiperbolikus távolság alapján történő meghatározására.

A nemlineáris folyamatrendszerek modellezése és irányítása területén egy speciális pozitív rendszerosztály, a polinomiális jobboldalú differenciálegyenletekkel leírható úgynevezett reakciókinetikai hálózatok osztályának realizációs problémáit vizsgálták. Optimalizációs módszereket dolgoztak ki ezen rendszerek adott tulajdonságú, például maximális, minimális és komplex egyensúlyi realizációinak előállítására, amelyek segítségével belátható ezen rendszerek struktúrális (azaz paramétereik értékétől független) stabilitása.

A komplex, nagyméretű folyamatrendszerek veszély-elemzési HAZOP és FMEA analízis módszertanát kiterjesztették az időben változó esetre, így megnyílt az út diszkrét dinamikus rendszerek veszély-elemzésére is. Ezen információkat felhasználva módszert javasoltak operátori eljárásokkal vezérelt komplex folyamatrendszerek on-line diagnosztikájára. A kidolgozott eszközöket és módszereket folyamatos és félfolyamatos vegyipari technológiákra tervezik alkalmazni egy nemzetközi, ausztrál–magyar kutatási együttműködés keretében.

Új eljárást dolgoztak ki robotok adaptív szabályozására ismeretlen teher és surlódási paraméterek esetén, amely garantált követési konvergenciát biztosít. Az elmélet helyességét SCARA roboton valós időben kisérletileg is demonstrálták.

Az irodalomban széles körben elterjedt nézettel szemben kimutatták és bizonyították, hogy bizonyos körülmény esetén egyenáramú komponens is fellép térvektor modulációs eljárásban.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

2011-ben megjelent a Szabályozástechnika jegyzet angol nyelvű fordítása. Az angol nyelvű jegyzetet használják a BME Villamosmérnöki és Informatika Karának Informatikai szakán az angol nyelvű képzésben a Control Engineering tárgy oktatásában valamint a Digital Control Course tárgy oktatásában a Delfti Egyetemen, Hollandiában. A jegyzet alapján történik az oktatás a SZE-n és Debreceni TE-n is. A Youla parametrizálás oktatásba történő bevezetésének néhány tapasztalatáról rövid „keynote speech”-ben számoltak be az IFAC Világkongresszuson Milánóban.
A BME Villamosmérnöki és Informatikai Karon 2011-ben Robotok és irányítások elmélete, Járműirányítási rendszerek elmélete (villamosmérnöki és informatikus szakok, MSc),

Irányításelmélet (gépészmérnöki mechatronika szak, MSc), Modern irányításelmélet I. (PhD-tárgy) címmel tartottak előadásokat. Több doktori hallgató témavezetését végzik.

A tudományos kutatás civilizációnkban betöltött meghatározó szerepének bemutatása 400-500 fős létszámú hallgatóság számára előadásokon, laboratóriumi gyakorlatokon történt a BME-n.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A Kölni Műszaki Főiskolával való hosszútávú közös kutatás keretében közös PhD-munkát irányítunk a predikciós irányítások témakörében. 2011 őszén a Pozsonyi Műszaki Egyetemről egy PhD-hallgató 3 hónapot töltött a kutatóhelyen az ortogonális rendszermodelleken alapuló model referenciás és predikciós irányítások kutatásával.

A kutatócsoport vezetője az EUCA (European Union Control Association) elnöke. A csoport egyik akadémikus tagja a European Power Electronics and Motion Control Council elnöke. A csoport minden tagja számos nemzetközi szervezet bizottságaiban, tudományos folyóiratok szerkesztőségi bizottságaiban dolgozik.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

EU-pályázat: SustEner: Az energia oktatása a fenntartható világ számára, 2011–2013. CZ/11/LPP-LdV/T01/134002.

OTKA-pályázat: Bifurkációk kutatása a teljesítményelektronikában és mozgás szabályozásban, 2012–2015, K 100275.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Haber R, Bars R, Schmitz U: Predictive Control in Process Engineering: From the Basics to the Applications, Wiley-VCH, 600 p. (2011)
2. Keviczky L, Bars R, Hetthéssy J, Barta A, Bányász Cs. Control Engineering, Széchenyi University Press, 449. (2011).
3. Hunyadi L, Vajk I: Identifying unstructured systems in the errors-in-variables context. 18th IFAC World Congress. Milánó, I, 13104-13109. (2011)
4. Szederkényi G, Hangos K.M: Finding complex balanced and detailed balanced realizations of chemical reaction networks, Journal of Mathematical Chemistry, 49, 1163-1179. (2011)
5. Gáspár P, Szabó Z, Bokor J: LPV design of reconfigurable and integrated control for road vehicles. 50th IEEE Conference on Decision and Control and European Control Conference (CDC-ECC), Orlando, FL, USA 2505-2510. (2011)
6. Jardan R.K, Stumpf P, Bartal P, Varga Z, Nagy I: A novel approach in studying the effects of subharmonics on ultrahigh-speed AC motor drives, IEEE Transactions on Industrial Electronics, 58(4), 1274-1281. (2011)
7. Márton L, Lantos B: Control of robotic systems with unknown friction and payload, IEEE Trans. Control Systems Technology, 19(6), 1534-1539. (2011)
8. Pallos T, Sziebig G, Korondi P, Solvang B: Multiple-camera optical glyph tracking, Advanced Materials Research, Vol. 222, 367-371, Trans Tech Publications, Switzerland (DOI: 10. 4028/www.scientific.net/AMR.222.367) (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Irányítástechnikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	1,5	Ebből kutató[2]:	0,5
PhD, kandidátus:	0 MTA doktora: 0	Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				52
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				19
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	7
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	6
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	9

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	10,292	Összes független hivatkozás száma:	231
Összes hivatkozás száma[11]:	240		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			0
	poszterek száma:		0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	30	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	8		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			1
Témavezetések száma: TDK munka:	5	Diplomamunka (BSc):	11
Diplomamunka (MSc):	9	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		14 500	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	1 Teljes saját bevétel:	0	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

BME KONDENZÁLT ANYAGOK FIZIKÁJA KUTATÓCSOPORT

Jánossy András, az MTA rendes tagja
1111 Budapest Budafoki út 8. I. lh. 1. em.
telefon: 1- 463 1391; fax: 1- 463 3819
e-mail: atj@szfki.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

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, és az EU F7 keretprogram *Információ KommunikációsTechnológiák (ICT)* témacsoporthoz tartozik. Továbbá kapcsolódik az „ICT-alapú kollektív szociális viselkedés hasznosítása" projekthez.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A beszámolási időszakban kifejlesztettek egy molekulák kontrollált adagolására alkalmas mérőrendszert, mely egyedi molekulák kontaktálását teszi lehetővé folyékony hélium hőmérsékleten.

Szupravezető subgap módszerrel karakterizáltak különböző anyagból készült atomi méretű kontaktusokat, és elméleti csoportokkal együttműködve részt vettek egy vezetőképesség hisztogramok szimulálására alkalmas módszer fejlesztésében, melynek megbízhatóságát a subgap módszer segítségével egyedi vezetési csatornák szintjén ellenőrizték.

Kifejlesztettek egy új statisztikai módszert, melynek segítségével atomi és molekuláris kontaktusokban kialakuló konfigurációk közötti korrelációk vizsgálhatók. Ezen módszer segítségével számos atomi és molekuláris nanovezeték viselkedését sikerült a szokásos vezetőképesség hisztogram technikánál részletesebben feltérképezni.

Megmutatták, hogy egy szupravezető tű és egy fémes minta közötti nanométeres skálájú pontkontaktuson végzett Andreev spektroszkópia segítségével a spin-diffúziós hossz pontosan mérhető ferromágnessel érintkező nem mágneses vékonyrétegekben. A spin-diffúziós hossz hőmérsékletfüggéséből következtettek a domináns spin-relaxációs folyamatokra.

Megmutatták, hogy ezüst szulfid alapú ionos vezető vékonyrétegben az elektronsugár litográfia felbontásánál lényegesen kisebb, pár nm-es méretskálán létrehozható két jól elkülönülő ellenállású ON/OFF állapottal rendelkező rezisztív kapcsoló memória elem.

Az úgynevezett multiferroikus (egyszerre mágneses és ferroelektromos) anyagok körében kutatták az irányfüggő abszorpció megjelenésének lehetőségét, melynek feltétele a relativisztikus eredetű, ún. magnetoelektromos effektus. A $Ba_2CoGe_2O_7$ és $Ca_2CoSi_2O_7$ könnyű síkú antiferromágnesek esetén erős optikai magnetoelektromos effektus megjelenését

tapasztalták a spingerjesztések tartományában, ami óriási irányfüggő abszorpciót eredményez a teraHertz frekvencia tartományban.

Tanulmányozták az elektron spin diffúziót a kappa-(BEDT-TTF)(2)Cu[N(CN)(2)]X (X = Cl, Br) réteges szerves elektromos vezetők családjában. A több éves elektron spin rezonancia módszeren alapuló kísérleti munkát egy hosszabb tanulmányban foglalták össze.

Az MTA SzFKI Budapest és az EPFL Lausanne kutatóival együttműködésben egy új kutatási témát indítottak, amely egy mágneses rezonancia képalkotó kontrasztanyag, a C_{80} fullerén gömb alakú molekulába zárt Gd_3N molekula ($Gd_3N@C_{80}$) mágneses tulajdonságainak felderítésére irányul.

Összefoglaló tanulmányt jelentettek meg a BME Mágneses Laboratóriumában felállított nagyfrekvenciás elektron spin rezonancia berendezés működési elveiről.

A malária magneto-optikai diagnosztikájának terén végzett kísérleteik megmutatták, hogy a máriapigmentet alkotó kristályok specifikus alakjának és mágneses anizotrópiájának köszönhetően a mágnesesen indukált lineáris kettöstőrés/dikroizmus mérése igen érzékeny diagnosztikai módszerré válhat máriafertőzés kimutatására. Ezen túlmenően mérési eredményeik részletes analízisével számos alapvető tulajdonságát tárták föl a máriapigmentnek, mely tudás komolyan előremozdíthatja a máriakutatás orvosi-biológiai vonalát is. Az eredmények publikálásán túl a cél egy klinikai diagnosztikában használható, kompakt és a lehetőségekhez mérten olcsó máriafertőzést vizsgáló készülék prototípusának kifejlesztése.

A fázisvesztés leírására kidolgozott fenomenológikus modellt az 1D Anderson modellre alkalmazva megvizsgálták a fajlagos ellenállás létének feltételét, valamint egzaktul kiszámították a páros Generalized Lyapunov exponenseket (GLE). A dimenziótlan vezetőképességre log-normális határeloszlást feltételezve megadták a lokalizációs hosszal (inverz Lyapunov exponens) való kapcsolatukat, melyet gyenge rendezetlenség esetén összevetettek az irodalmi értékekkel.

A mágneses nanoszerkezetek kutatása terén a technológiai szempontból igen jelentős FePt ötvözetek mágneses anizotrópiájának (MA) függését vizsgálták a rácsszerkezettől és kémiai rendezetlenségtől: ab initio számításaik megállapították az utóbbi tulajdonság meghatározó szerepét. Hasonló módszerekkel rámutattak, hogy Fe/W-Re/Fe multirétegekben a W/Re arány drasztikusan befolyásolja a mágneses anizotrópia mértékét, melyet a Fermi energia ötvözés általi finomhangolásának tulajdonítottak. A nemrég kifejlesztett spin-klaszter kifejtés módszerét használták Ir felületre helyezett Fe vékonyrétegekben spin-kölcsönhatások számítására, és meghatározták az így nyert spin-model alapállapotát. A számítások azt mutatják, hogy egy és két monoréteg vastagságú filmek bonyolult spin-spirál alapállapottal rendelkeznek, míg négy monoréteges vastagságnál megjelenik egy ferromágneses komponens, ami összhangban van a magnetoopitkai kísérletekkel.

A kvantumos összefonódottság geometriájának vizsgálata alapvető fontosságú a kvantum információelmélet szempontjából. Az elmúlt években kiderült, hogy gyakran egzotikus, a téma müvelői számára szokatlan kutatási területek új módszereket adhatnak a kezünkbe. Ilyenek a véges geometria, és a húrelmélet matematikai eszköztára. Érdekes módon a kvantum információelmélet eszköztára is képes új eredményeket adni a véges geometria és a húrelmélet területén. Ezt a megfigyelést alapul véve a két látszólag elszigetelt kutatási terület között számos analógiát tártak fel. Megmutatták hogy a húrelméletből ismert ún. Attractor Mechanizmus a kvantumos összefonódottság nyelvén egy olyan desztillációs folyamatként interpretálható, melynek során az összefonás maximalizálódik.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Közvetetten az oktatásban való részvétel a társadalommal való párbeszéd része. Kutatóik részt vettek a BME ilyen irányú munkájában, például „Nyílt Nap”, utánpótlás nevelés. A kutatócsoport szolgálja a társadalmi mobilitást: fiatal kutatók külföldi munkájuk után a kutató csoporthoz csatlakoztak illetve mások a végzett tudományos munkát befejezve a gazdaság egyéb területein vállaltak munkát.

Az MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport vezetője a Mindentudás Egyetemén 2011. 03. 11-én „Enciklopédia egy tű hegyén” címmel előadást tartott.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A molekuláris elektronika területén gyümölcsöző együttműködés alakult ki a Lancasteri Egyetem elméleti ab initio számításokat végző csoportjával, melyből közös publikáció is született.

<u>Együttműködések a magnetopotikai kutatások területén:</u>
Semmelweis Egyetem, Orálbiológiai Tanszék, MTA Enzimológiai Intézet, MTA KKI.
National Institute of Chemical Physics and Biophysics, Estonia
University of Tokyo, Department of Applied Physics
University of Tokyo, Institute for Solid State Physics
Univ. Duisburg-Essen (Németország), Univ. Kostanz (Németország), Univ. York (Anglia), Uppsala Univ. (Svédország);
École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Svájc)

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben a már előző években is indított pályázatokon túlmenően új pályázatokat nem nyertek, a 2010-ben benyújtott pályázatok egy részét 2012-ben ítélték oda.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Makk P, Visontai D, Oroszlany L, Manrique DZ, Csonka S, Cserti J, Lambert C, Halbritter A: Advanced Simulation of Conductance Histograms Validated through Channel-Sensitive Experiments on Indium Nanojunctions. Physical Review Letters 107: 276801 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	10			Ebből kutató[2]:	6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				9
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	8
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	35,911	Összes független hivatkozás száma:	271
Összes hivatkozás száma[11]:	298		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			15
		poszterek száma:	14
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	3		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			6
Témavezetések száma: TDK munka:	13	Diplomamunka (BSc):	7
Diplomamunka (MSc):	11	PhD:	11

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	33 400	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	197 800	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	6	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	26 700	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	48 100	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	3	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	123 300	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

BME MŰSZAKI ANALITIKAI KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Horvai György, az MTA levelező tagja
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.
telefon: 1-463 4056; fax: 1-463 3408
e-mail: http://aak.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése. Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások. Határfelületi jelenségek számítógépes modellezése.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Szelektív felismerésre alkalmas anyagok tervezése, előállítása és jellemzése

Gazda-vendég rendszerek szenzorok előállításához: Királis koronaéter alapú fluoreszcens szenzormolekulák enantiomer felismerő képességét vizsgálták oldat kísérletekben kémiai szenzorok kialakítása céljából. Meghatározták az új típusú szenzormolekulák optikailag aktív sók (protonált primer aminok és aminosav származékok) enantiomerjeire vonatkozó komplex stabilitási adatait és a komplexképzés szelektivitását. Megállapították, hogy a szenzormolekulák enantiomer felismerő képessége nagymértékben függ a szubsztituenseknek a jeladó akridin molekularésztől való távolságától.

Molekuláris lenyomatú polimerek (MIP-ek) előállítása, jellemzése: Szisztematikusan vizsgálták a nagy viszkozitású oldószerekben még nagy monomerkoncentrációk használatánál is létrejövő homodiszperz polimerszemcsék kialakulásának mechanizmusát. Tanulmányozták a különböző funkcionális monomerek, keresztkötők, a különböző polaritású, nagy viszkozitású oldószerek és ko-oldószerek, valamint az iniciátor mennyiségének és a keresztkötöttség mértékének hatását a polimer szemcsék morfológiájára, méreteloszlására. A polimerizáció előrehaladásával kimérték a részecskeméret és polidiszperzitás változását. Bázikus funkcionális monomer és egy viszonylag hidrofób oldószerelegy (paraffinolaj és kloroform) felhasználásával sikeresen állítottak elő MIP szemcséket a vény nélkül kapható naproxen gyulladáscsökkentő szerre. Az imprintelésre használt nagy viszkozitású oldószerek körét kiterjesztették erősen poláris közegekre is a glicerin, mint viszkózus komponens alkalmazásával. Így egy savas jellegű herbicidre, a 2,4-diklórfenoxiecetsavra készítettek szelektív MIP-et. Az új polimerizációs eljárás nemcsak a MIP-ek, hanem általában, szabályos polimer szemcsék előállítására is gazdaságos és környezetbarát utat nyithat, a kis oldószer felhasználás miatt.

Új, nanostruktúrált felületi molekuláris lenyomatú poli(3,4-etiléndioxitiofén) poli(sztirol szulfonát) (PEDOT/PSS) réteg előállítására dolgoztak ki módszert, amely alkalmas az avidin fehérje szelektív megkötésére. Az eljárás lényege, hogy egy aranyrétegre monorétegben felvittek avidinnal módosított homodiszperz polisztirol nanorészecskéket, a szemcsék közé kontrollált módon elektropolimerizáltak PEDOT/PSS-t, majd a latex részecskéket kioldották. Az így kialakított nanostruktúrált polimer rétegen avidint felismerni képes felületi kötőhelyek alakultak ki, ahol is a fehérjekötődést kvarckristály-mikromérleg segítségével lehetett vizsgálni.

Aptamerek előállítása, jellemzése: Korábban előállítottak a szívinfarktust jelző troponin fehérjére szelektív aptamert. Jelenleg a vázizomból és szívizomból származó troponin megkülönböztetésére alkalmas aptamer előállításán dolgoznak.

Szelektív mérőeszközök és mérési eljárások

Új diagnosztikai mérési módszerek fehérjékre aptamerekkel: A papír alapú mikrofluidikai assay-ek fejlesztése új irányzat az egyszerű és olcsó orvosi diagnosztikai eszközök kialakítására. Az egyszerű és olcsó potenciometriás detektálási elv papír alapú assay-ekben való alkalmazhatóságának bizonyítására kidolgoztak egy dot-blot assay-t IgE fehérje kvantitatív meghatározására. A nitrocellulóz papírcsíkra felcseppentett IgE-t blokkolás után arany nanorészecskével konjugált IgE-re szelektív aptamerrel reagáltatták. Az arany nanorészecske ezüst leválását katalizálta, amelyet oxidatív visszaoldás után ezüst ion-szelektív elektróddal mértek. A potenciometriás dot-blot assay analitikai teljesítőképessége megegyezett az optikai detektáláson alapuló módszerével.

Távolság modulált homogén lumineszcens assay fejlesztése aptamerek gyors screen-elésére: Az aptamerek előállításában a szűk keresztmetszet a szelekciós lépések folyamán kapott aptamerek kötési tulajdonságainak vizsgálata és az adott célnak legmegfelelőbb aptamer kiválasztása. Ezt korábban felületi plazmon rezonancia (SPR) mérésekkel végezték, ami azonban időigényes és költséges eljárás.

Az AlphaScreen eljárás alapján kidolgoztak egy új nagyáteresztőképességű screenelési módszert az aptamer-fehérje kölcsönhatások vizsgálatára. A módszer azon alapul, hogy az aptamert és a fehérjét külön-külön mikrogyöngyre kötik. 680 nm hullámhosszúságú lézer fénnyel megvilágítva a ftalocianin tartalmú donor mikrogyöngy a környezeti oxigént gerjesztett állapotú, reaktív, szingulett állapotú oxigénné alakítja, ami az akceptor gyöngyben levő kemilumineszcens molekulát fénykibocsájtásra készteti. Mivel a szingulett állapotú oxigén molekulák élettartama rendkívül rövid, a fénykibocsájtás csak akkor jön létre, ha az aptamer és a fehérje összekapcsolódik és megfelelő térközelségbe hozza a gyöngyöket. A mérés rendkívül érzékenynek bizonyult és alkalmas volt a korábban elállított, vírusfehérjére szelektív aptamer affinitási állandójának meghatározására, jó egyezést mutatva a korábbi SPR mérésekkel.

Ionofórral módosított szilícium alapú egyedi nanopórus potenciometriás érzékelésre: Az MTA-MFA-ban közös együttműködés keretében legyártott szilícium alapú egyedi arany nanopórus falát hidrofóbicitást biztosító perfluorotiollal, permszelektivitást biztosító negatív töltésű tiollal és Ag^+-ion szelektivitást biztosító tiokalixarén típusú ionofórral módosították. A kb. 40-60 nm átmérőjű 350 nm hosszú módosított nanopórust, ami a méreteinél fogva a világ legkisebb ionszelektív elektródja, potenciometriás mérőcellában tesztelték. Az érzékelő szelektivitása 3-4 nagyságrenddel jobb volt, mint az ionofórt nem tartalmazó nanopórusé, alsó kimutatási határa pedig 10^{-6} M volt, ami megegyezik a hagyományos potenciometriás érzékelőkével. A kifejlesztett szenzor kémiai hatásokkal szemben sokkal robusztusabb, mint a hagyományos elektródok, mivel a kovalensen kötött membrán komponensek nem oldódnak ki, és elvileg nem vizes közegben is alkalmazható. A korábbi multipórusos érzékelővel szemben előnye, hogy tömeggyártásra is alkalmas lehet megfelelő nano- és mikrofabrikációs eljárások alkalmazásával.

Határfelületi jelenségek számítógépes modellezése

Másodlagos kölcsönhatások vizsgálata fluid határfelületeken és polimer adszorpciója során: 2011-ben vizsgálták az amfifil polimer és tenzid együttes, kompetitív adszorpcióját szabad

vízfelszínen, és magyarázatot adtak a polimernek tenzid jelenlétében a felületről való leszorulásának mechanizmusára. Azt tapasztalták, hogy kis tenzid mennyiség esetén a polimer adszorpciója nő és csak nagy tenzid mennyiség esetén következik be a várt kiszorítási jelenség. Kiszámították a SCN^- ion oldódási szabadenergia profilját víz-1,2-diklóretán határfelületen. Megállapították egyfelől, hogy ez a profil lokális minimumot mutat a határfelület közelében a vizes fázis felőli oldalon, azaz a rodanid valamelyest feldúsul ebben a tartományban, másfelől, hogy a szerves fázis felőli oldalon, határfelület közvetlen közelében a rodanid ion kén atomja preferáltan a víz felé áll, míg a nitrogén atom egy hidrát burokkal a szerves fázis felé orientálódik.

Másodlagos kölcsönhatások vizsgálata szilárd határfelületeken: Vizsgálták víz adszorpcióját különböző szerves aeroszolok (oxálsav, részlegesen oxidált alkilláncok önszerveződő rétege) felületén. A magas légköri aeroszolokban előforduló oxálsav aggregátumok és a vízgőz által létrehozott rendszerek fázisviszonyait tárták fel, ami kísérletileg nem vagy csak nagyon nehezen tanulmányozható. Kiszámították a CO_2 acetonnal ill. etanollal alkotott elegyeinek termodinamikai tulajdonságait a CO_2 kritikus pontja fölött.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Egy kutató részt vett a Mindentudás Egyeteme „Nanotechnológia a mindennapokban” című kerekasztal beszélgetésén. A kutatócsoport intenzíven foglalkozik a magyar társadalmat aktuálisan foglalkoztató problémával, az orvosdiagnosztikai eljárások olcsóbbá tételével.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Kutatási együttműködések: A Tallinn University of Technology (Észtország) a felületi lenyomatú nanostruktúrált polimerek vizsgálatába, az Abo Akademi University (Finnország) a szilárd belső elvezetésű ionszelektív elektródok grafénnal való módosíthatóságát vizsgálatába kapcsolódott be.

Vállalati kutatás-fejlesztési kapcsolatok: A TEVA Magyarország Zrt.-vel kutatási együttműködés a gyógyszerszennyezők felderítésére.

Oktatás egyetemeken: A csoport minden tagja részt vesz egyetemi és/vagy doktori oktatásban.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

„Invention of mobile poliovirus diagnostic platform” (Melinda & Bill Gates Alapítvány). A pályázat a fejlődő országokban a gyermekbénulás vírusának detektálására szolgáló, olcsó és egyszerű, aptamerrel módosított nanopóruson alapuló szenzor készítését célozza. Az elnyert támogatási összeg 100.000 USD 18 hónapra.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Jagerszki G, Takacs A, Bitter I, Gyurcsanyi RE: Solid-State Ion Channels for Potentiometric Sensing. *Angewandte Chemie International Edition* 50**:**(7) *1656-1659* (2011)
2. Darvas M, Gilanyi T, Jedlovszky P: Competitive Adsorption of Surfactants and Polymers at the Free Water Surface. A Computer Simulation Study of the Sodium Dodecylsulfate - Poly(ethylene oxide) System. *Journal of Physical Chemistry B* - Condensed Matter Materials Surfaces Interfaces and Biophysical 115:(31) 933-944 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	5			Ebből kutató[2]:	5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	1	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				20
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	18
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	14
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	65,894	Összes független hivatkozás száma:	238
Összes hivatkozás száma[11]:	303		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			10
		poszterek száma:	14
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	4	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	4		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			5
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	11

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	18 600	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 Teljes saját bevétel:	16 200	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	5	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	9700	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	5000	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	1500	EFt

BME SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

Faigl Ferenc, az MTA doktora
1111 Budapest, Budafoki út 8.
telefon: 1-463 3652; fax: 1-463 3648
e-mail: ffaigl@mail.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A kutatócsoport tagjai 2011-ben az alábbi főbb területeken dolgoztak:
- Optikai izomerek elválasztási lehetőségeinek kutatása.
- Poláris fémorganikus vegyületek regio- és sztereoszelektív reakcióinak kutatása.
- Új optikailag aktív vegyületek előállítása és tesztelése enantioszelektív reakciókban.
- Foszforkémiai kutatásokhoz kapcsolódóan mikrohullámú technika alkalmazási lehetőségeinek vizsgálata.
- Szelektív funkcionalizálási módszerek kutatása gyógyszeripari fontosságú vegyületek körében.

A csoport és a befogadó tanszék közötti megállapodással összhangban a kutatók részt vettek a tanszék oktatási munkájában előadások, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével, BSc- és MSc-diplomamunkák, TDK-dolgozatok készítőinek témavezetésével. A csoport tagjai által irányított témákban 12 szakdolgozat és diplomamunka készült el.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A gyógyszerhatóanyagok és királis ligandumok előállítása szempontjából is fontos *N*-Boc-3-fenil-4-hidroxipirrolidin kinetikus rezolválását az irodalomból eddig nem ismert, hatékony új módszerrel, a CAL-B lipáz enzim segítségével valósították meg.

Az 1-fenilpirrol alapvázú, atropizomériát mutató vegyületek kutatásához kapcsolódóan optimálták az 1-[2-karboxi-6-(trifluormetil)fenil]pirrol-2-karbonsav 2-fenilglicin-metil-észterrel végzett rezolválását és kidolgozták e vegyületpár fordított rezolválását és másodrendű aszimmetrikus transzformációját, új lehetőséget teremtve ezzel a félszintetikus antibiotikumok előállításában használt optikailag aktív 2-fenilglicin előállításához.

A rokon molekulaszerkezetű racém vegyületek és enantiomerek közötti királis felismerés kutatásához kapcsolódóan vizsgálták az *N*-acil-aminosavak rezolválását és fordított rezolválását rokon molekulaszerkezetű bázisokkal. A diasztereomerek kristályosításakor megfigyelték a kinetikus és a termodinamikus kontroll érvényesülését is.

A poláris fémorganikus vegyületek benzilaminometil helyettesítőt tartalmazó oxiránokon kiváltott, új átrendeződési reakcióját felhasználva megvalósították a korábban kidolgozott azetidin szintézis optikailag aktív oxirán származékból kiinduló változatát. Az olasz CNR firenzei intézetével kooperációban vizsgálták néhány helyettesítőnek az átrendeződési reakció szelektivitására kifejtett hatását és az azetidinek metallálási reakcióit.

1-Fenilpirrol származékokból fémorganikus úton optikailag aktív karbonsavakat állítottak elő, majd vizsgálták ezen vegyületek további átalakítási lehetőségeit. Megállapították, hogy az optikailag aktív 1-[(6-etil-2-karboximetil)fenil]pirrol-2-karbonsav benzil helyzetű metilezése során az axiális kiralitású szubsztrátum egyértelműen meghatározza a keletkező új kiralitáscentrum konfigurációját.

Új módszereket dolgoztak ki az 1-[2-(trifluormetil)fenil]-1*H*-pirrol di- és tribrómozására, valamint a többszörösen halogénezett termékek részleges halogén/fém kicseréléseken alapuló átalakítására. Vizsgálták a halogénszármazékokból foszfán származékok előállítását is, így többek között új vízoldható katalizátor ligandum szintézisét valósították meg.

A korábban már előállított *N*-izopropil-(*S*)-2-aminometil-1-[2-difenilhidroximetil-6-(trifluorometil)fenil]-1*H*-pirrol katalitikus hatását dietil-cink benzaldehidre történő addíciójában tanulmányozták. A kísérletekben 86 %-os enentioszelektivitással kapták meg a terméket, vagyis sikerült egy új, az irodalomból eddig nem ismert ligandumcsalád első, hatékonyan működő tagját előállítaniuk.

Folytatták új, TADDOL egységet tartalmazó organokatalizátorok kifejlesztését. A bázikus, és a savas részt is változtatva előállítottak több új katalizátort. Ezek tesztelését CH-savas vegyületek (foszfonoacetátok, acetilaceton) és különböző Michael akceptorok reakciójában végzik. Az egyik új katalizátorral trietil-foszfonoacetát és nitrosztirol Michael-addiciójában kiváló szelektivitást (ee>90%) sikerült elérni.

A csoport munkájában irányadó környezetkímélő kémiai folyamatok fejlesztéséhez és a foszforkémiai kutatásokhoz is kapcsolódóan foszfortartalmú CH-savas vegyületek C-alkilezését tanulmányozták mikrohullámú besugárzás és fázistranszfer katalízis alkalmazása mellett. Emellett helyettesített fenilecetsav és szubsztituált feniletilamin származékok reakcióját is vizsgálták mikrohullámú körülmények között, optimálták a reakciókörülményeket és számos új vegyületet állítottak elő.

Új, királis négy- és öttagú heterociklusok enantioszelektív szintéziséhez védett amino- és hidroxioxetánok heterogén katalitikus gyűrűnyitását, valamint *N*-debenzilezését és *O*-detritilezését oldották meg. A foszforkémiai kutatások kiindulási anyagául szolgáló gyűrűs foszfinsavak (pl. 1-hidroxi-3-metilfoszfolán-oxid) előállítását az eddig alkalmazott eljárásnál sokkal környezetbarátabb módon katalitikus hidrogénezéssel valósították meg.

Az alapkutatási eredmények gyakorlati hasznosítása érdekében vizsgálták a foszfortartalmú, gyógyszer hatóanyagként használt zoledronsav és risendronsav előállításának környezetbarátabbá tételét. Megállapították, hogy a reakcióhoz nincs szükség az általában alkalmazott foszforossav reagensre, így jelentősen csökkenthető a környezetre káros hulladék képződése. Az eljárásból az ipari partnerrel találmányi bejelentés készült.

Ugyancsak a gyógyszeripar számára hasznos új rezolválási eljárást fejlesztettek egy királis amin enantiomerjeinek elválasztására. Az eljárást egy új hatóanyag klinikai vizsgálataihoz szükséges mennyiségének nagylabor méretű gyártásában használták fel.

Új, sztereoszelektív fémorganikus reakciókon alapuló eljárást dolgoztak ki egy ismert gyógyszerhatóanyag egyik intermedierjének újszerű előállítására és az ipari partnerrel közösen találmányi bejelentést tettek ugyanezen hatóanyag egy másik, optikailag aktív intermedierjének rezolválással történő előállításáról.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai 2011-ben is részt vettek a befogadó intézményben középiskolásoknak, illetve külön a szakirányválasztó BSc-hallgatóknak szervezett nyílt nap programjában a kutatólaboratóriumok bemutatásával.

A kutatócsoport vezetőjének irányításával ötödik éve nagysikerű előadás sorozatot tartottak az élvezeti szerek kémiájának és biológiai hatásainak ismertetésére. A szabadon választható tárgyat a BME karairól (építész, közgazdász, gépész stb.) ismét több mint 300 diák teljesítette.

Az érintett betegcsoportok életminőségének javítását szolgálja a 2011-ben kidolgozott három új eljárás gyógyszer hatóanyagok és intermedierjeik előállítására. Az eljárások ipari alkalmazása a gyógyítás mellett jelentős árbevételt hozhat a gyógyszergyáraknak.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A csoport tagjai szoros együttműködésben dolgoznak a befogadó tanszék oktatóival. A szekezetmeghatározásokhoz szükséges spektroszkópiai hátteret a BME Szervetlen és Analitikai Tanszékével és az MTA KK Szerkezeti Kémia Intézetével kialakított együttműködés biztosítja. 2011-ben a Chinoin (Sanofi-Aventis) ZRt-vel, az EGIS ZR-vel és a Richter Gedeon NyRt-vel kötött szerződéses kutatómunkákban vettek részt.

A tárgyévben a CNR-MTA kutatási együttműködés keretében egy fiatal magyar kutató 1 hónapot töltött a CNR firenzei intézetében, egy olasz kutató egy hónapon át Budapesten dolgozott és további két olasz kutató rövid (2 és 3 hét) budapesti tanulmányútja valósult meg.
A kutatócsoport vezetője a 2011 őszén lezárt EU COST D40 akció Management Committee magyar tagja volt. A liszaboni székhelyű Hovione gyógyszergyár és a BME VBK közötti együttműködés magyar koordinátora.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid értékelése

A kutatócsoport tagjai 2011-ben négy OTKA-pályázat teljesítésében vettek részt. Emellett sikeresen oldottak meg 8 ipari K+F szerződéshez kapcsolódó feladatot (két szabadalmi bejelentés). A CNR firenzei intézetével (Dr. Mordini, A) a fémorganikus területen fennálló CNR-MTA tudományos együttműködés keretében a III. pontban felsorolt tanulmányutak valósultak meg.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Faigl F, Mátravölgyi B, Holczbauer T, Czugler M, Madarász J: Resolution of 1-[2-carboxy-6-(trifluoromethyl)phenyl]-1H-pyrrole-2-carboxylic acid with methyl (*R*)-2-phenylglycinate, reciprocal resolution and second order asymmetric transformation. *Tetrahedron-Asymmetry 22*: 1879-1884 (2011)
2. Kovács E, Thurner A, Farkas F, Faigl F, Hegedűs L: Hydrogenolysis of N-protected aminooxetanes over palladium.: An efficient method for a one-step ring opening and debenzylation reaction. *Journal of Molecular Catalysis A-chemical 339:(1-2)* 32-36 (2011)
3. Molnár A, Mucsi Z, Vlad G, Simon K, Holczbauer T, Podanyi B, et al. (2): Ring Transformation of Unsaturated N-Bridgehead Fused Pyrimidin-4(3H)-ones.: Role of Repulsive Electrostatic Nonbonded Interaction. *Journal of Organic Chemistry* 76: 696-699 (2011)
4. Keglevich G, Balint E, Kiss NZ, Jablonkai E, Hegedus L, Grun A, Greiner I: Microwave-Assisted Esterification of Phosphinic Acids. *Current Organic Chemistry* 15:(11) 1802-1810 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Szerves Kémiai Technológiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	5			Ebből kutató[2]:	5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				18
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				18
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	3	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven:	14
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	14
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	25,429	Összes független hivatkozás száma:	158
Összes hivatkozás száma[11]:	215		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			2
		poszterek száma:	2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			5
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	15
Diplomamunka (MSc):	12	PhD:	5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	18 200	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	30 500	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	4	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	6500	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	20 000	EFt

BME SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Tóth Bálint, az MTA doktora
1111 Budapest, Egry József u. 1.
telefon: 1-463 1101; fax: 1-463 1677
e-mail: balint@math.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A beszámolási időszak a kutatócsoport tevékenységének tizenharmadik éve, egyben a 3. pályázati ciklus utolsó éve. A kutatócsoportban PhD-vel rendelkező, illetve PhD-védés előtt álló, a tudományos pályán komoly eredményeket elért, nemzetközileg is ismert kutatók dolgoznak, akik eredményeiket rangos nemzetközi fórumokon publikálják és adják elő.

2011-ben a csoport kutatásainak súlypontja a fizikai és pénzügyi alkalmazások szempontjából érdekes sztochasztikus folyamatok vizsgálatán, valamint az információelmélet és matematikai statisztika problémáin volt. A beszámolóban – az elmúlt évek gyakorlatának megfelelően – kizárólag a kutatócsoport alkalmazottainak a témához közvetlenül kapcsolódó munkáiról adnak számot.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Ezen fejezet végén található egy közleménylista, ami egy közlésre már elfogadott, de 2011-ben még meg nem jelent közleményből és egy kéziratból áll. A szöveg (a 2011-ben megjelent, V. fejezetben felsorolt munkák mellett) ezekre is hivatkozik.

Fizikában és pénzügyi alkalmazásokban releváns sztochasztikus folyamatok vizsgálata

A fontossági mintavétel alkalmazásainak lehetőségét vizsgálták egy struktúrált hitelderivatíva, az ún. „Collateralized Debt Obligation (CDO)" Monte Carlo árazásában. Egy CDO szerződés modellezése azért kihívás, mert igen sok (~100) eszköztől függ, így az árazás egyetlen járható útja sokszor a Monte Carlo szimuláció. A kutatás során a CDO-nak egy könnyen kezelhető modelljére, az összetett Poisson modellre találtak egzakt analitikus megoldást, és vizsgálták a Monte Carlo fontossági mintavételt. A számítási sebességben komoly előrelépést sikerült elérni, de már ebben az egyszerű megközelítésben is megjelenik egy fázisátmenet, ami bizonyos paraméter-tartományokat elérhetetlenné tesz. [M1]

Felállítottak egy új elégséges feltételt, ami biztosítja a Kipnis-Varadhan típusú martingál-közelítés és centrális határeloszlás tétel érvényességét Markov folyamatok additív funkcionáljaira. Ez az új feltétel, ami a „relaxált szektor feltétel" nevet kapta, több jól ismert szektor-feltételnek is általánosítása – mint pl. az erős, vagy a gradált szektor feltételnek, ám saját jogán is érdekes és alkalmazható. [M2]

Információelmélet és matematikai statisztika

Stacionárius sztochasztikus folyamatok statisztikai vizsgálatakor alapvető a függetlenség kérdése, vagyis hogy a folyamat független azonos eloszlású valószínűségi változók sorozata-e, vagy sem. Fontos tehát megkülönböztetni a független valószínűségi változó-sorozatok osztályát, az összes többi ergodikus stacionárius folyamat osztályától. Ha az állapottér a valós számok halmaza, akkor ezen osztályok egyike sem megszámlálhatóan

feszes. Az ezáltal okozott technikai nehézségeket leküzdve mégis sikerült olyan szekvenciális próbát konstruálni a megkülönböztetésükre, ami erősen konzisztens, vagyis egy folyamatot megfigyelve véges idő eltelte után mindig helyes választ ad a függetlenség kérdésére, 1 valószínűséggel. [5]

Egyéb: A csoport egy tagja 2011-ben védte meg PhD-értekezését.

[M1] Bihary Zs, Rácz É, Stippinger M, Vető B: Analytic results and weighted Monte Carlo simulations for CDO pricing. Eur. Phys. J. B, to appear (2011)
[M2] Horváth I, Tóth B, Vető B: Relaxed sector condition. preprint, arXiv:1202.5915 (2012)

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

2011-ben nem volt a csoportnak kifejezetten ilyen célú rendezvénye.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A csoport egy tagja 2011 szeptemberétől post-doc a Bonni Egyetem Hausdorff Matematikai Központjában. A korábbi évek beszámolóiban említett szakmai együttműködések tovább élnek. A kutatócsoport tagjai rendszeresen részt vesznek a BME-n az oktatásban, beleértve TDK és diploma témavezetést is. A kutatócsoport vezetője egy rangos nemzetközi tudományos folyóirat főszerkesztője, egynek pedig szerkesztője, így cikkek tömegéről dönt, vagy készít elő döntést. Ez indokolja a beszámoló VI.6 fejezetében az „egyéb szakértői vélemény" rovatban lévő hatalmas számot (260).

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport egy tagja post-doc álláspályázatot nyert el a Bonni Egyetem Hausdorff Matematikai Központjában. 2012-ben lezárul a K60708 jelű OTKA-pályázat, amiben a csoport több tagja is részt vett. A rendkívül élessé vált verseny ellenére nyert az ennek kiváltására beadott új OTKA-pályázat (K100473), így továbbra is minden tag számára biztosított az utazás és vendégek hívásának lehetősége.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Horváth I, Katona Gy: Extremal P4-stable graphs. Discrete Applied Math 159, 1786–1792 (2011)
2. Horváth I, Tóth B, Vető B: Diffusive limits for "true" (or myopic) self-avoiding random walks and self-repellent Brownian polymers in d ≥ 3. Probability Theory and Related Fields, DOI: 10.1007/s00440-011-0358-3 (2011)
3. Kolossváry I, Ráth B: Multigraph limits and exchangeability. Acta Math. Hun. 130: 1-2, 1-34 (2011)
4. Morvai G, Weiss B: Nonparametric Sequential Prediction for Stationary Processes. The Annals of Probability, 39: (3) 1137-1160 (2011)
5. Morvai G, Weiss B: Testing stationary processes for independence. Ann. Inst. H. Poincaré Probab. Statist. 47:(4) 1219-1225 (2011)
6. Tóth B, Vető B: Continuous time `true' self-avoiding random walk on Z. Alea, Lat. Am. J. Probab. Math. Stat. 8: 59-75 (2011)

7. Vető B: Asymptotic behaviour of random walks with long memory. (PhD thesis, supervisor: Bálint Tóth) (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Sztochasztika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	4,1	Ebből kutató[2]:	4
PhD, kandidátus:	1 MTA doktora: 0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				9
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				6
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	5
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	5,162	Összes független hivatkozás száma:	16
Összes hivatkozás száma[11]:	31		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			20
	poszterek száma:		0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 0			

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			4
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	13 500	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	0	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

BME VÍZGAZDÁLKODÁSI KUTATÓCSOPORT

Somlyódy László, az MTA rendes tagja
1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.
telefon: 1-463 1530; fax: 1-463 3753
e-mail: somlyody@vkkt.bme.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A fenntartható vízgazdálkodás területén a kutatócsoport 2011-ben a következő témakörökkel foglalkozott: (a) a hazai vízgazdálkodás stratégiai feladatai, (b) vízgazdálkodási kockázatok, (c) felszíni vizek eutrofizálódása, (d) az éghajlatváltozás hatása az ivóvízkészletekre.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az MTA Elnöksége által kezdeményezett Köztestületi Stratégiai Programok keretében elkészült *A hazai vízgazdálkodás: helyzetelemzés és stratégiai feladatok* című kötet. A munka jelentőségét növeli, hogy a hazai vízgazdálkodás hosszú ideje nem rendelkezik átfogó stratégiával. Ennek elkészítését segíti a tanulmánykötet, amely a rövid, közép- és hosszú távú stratégiai feladatokat összegző fejezet mellett a következő bontásban tárgyalja a vízgazdálkodás stratégiai kérdéseit: az éghajlatváltozás hatásai, az EU Vízkeretirányelv, vízkészletek és vízigények, vízminőség-szabályozás (az ökológiai és a kémiai állapot javítása), árvízvédelem, területi vízgazdálkodás (a belvíz, az öntözés, az aszály és a területfejlesztés kapcsolatai), települési vízgazdálkodás (ivóvízellátás, szennyvízkezelés, csapadékvíz gazdálkodás). A műszaki jellegű kérdések mellett kiemelt hangsúlyt kaptak az intézményi problémák. A munka saját forrásból valósult meg, a kutatócsoport vezetőjének koordinálásában. A könyv 2011 májusában jelent meg, az MTA színvonalas kiadásában.
A kutatócsoport szorosan együttműködik a BME Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszékével, amelynek keretében működik.

A *WateRisk projekt* (NKTH, TECH-08-02) célja olyan döntéstámogató szoftver kifejlesztése, amely alkalmas az éghajlatban, a meteorológiai szélsőségekben, a földhasználatban, a társadalmi preferenciákban bekövetkező változások és a tervezett intézkedések vízkészletekre gyakorolt hatásainak elemezésére. A fizikai alapú közelítés összekapcsolja a vízháztartás, a mederbeli lefolyás, a felszíni szétterülés és a talajvízmozgás modelljeit. A 2011. évi munka eredményeként a szoftver kiegészült egy gazdasági előnyöket/károkat számító modullal. A döntéstámogató rendszer működését három mintaterületre mutatták be: vízgazdálkodási forgatókönyvek alapján vizsgálták a vizek állapotával kapcsolatos kockázatokat. A 2011. évi költségvetés alvállalkozók nélkül 19 millió Ft volt. A projekt irányítója a kutatócsoport támogató tagja, a kidolgozásban a kutatócsoport 1 tagja vett részt.

A Balaton Keszthelyi-medencéjében automatikus *fitoplankton mérőállomás* működik, a globális limnológiai mérőhálózat (GLEON) részeként. Az idei kutatás fő kérdése az volt, hogy az 1 percenként regisztrált oldott oxigén koncentrációk alapján hogyan becsülhető a bruttó és nettó elsődleges termelés, valamint a közösségi légzés. A sekély Balatonban, ahol a közösségi légzés zöme az üledékben zajlik, és ahol a tó nagy felülete miatt jelentős a horizontális irányú transzport, az irodalomban javasolt módszerek egyike sem bizonyult megfelelőnek az oxigén görbék értékeléséhez, ezért módszertani fejlesztésre volt szükség. A munka saját és tanszéki forrásokból (mintegy 1.5 millió Ft értékben) valósult meg. A kutatócsoport 1 tagja foglalkozott ezzel a kutatással, egy külső kutató segítségével.

A Fertő-tó vízpótlásának ökológiai-hidrológiai hatásával foglalkozó kutatás egyik fontos eredménye, hogy a Rábából történő vízátvezetés (mintegy 30 millió m^3 évente) jelentősen képes csökkenteni a Fertő-tóban előforduló kisvizes állapotok gyakoriságát. A vízpótlás vízminőségi kockázatai közül a hígulás veszélye egyértelműen kizárható (a tó ökológiai szempontból kívánatos magas sótartalmát a növekvő párolgás hosszú távon képes fenntartani), és a pótlóvízzel érkező növényi tápanyagok sem okoznak káros többletterhelést a tó egészére nézve. A részletes áramlási modellezés és anyagforgalmi elemzések azonban rámutattak a várható lokális hatásokra, melyek a tó északi részétől elzárt Madárvárta öbölben jelentősek lehetnek: növekvő eutrofizáció, sóösszetétel megváltozása, karbonát csapadékok kiválásának csökkenése. Ezért a déli oldalon történő vízpótlás kerülendő. A projekt a Bécsi Műszaki Egyetemmel, nemzetközi együttműködésben valósult meg és a BME 2011. évi költségvetése 4,3 millió Ft volt. A kutatásban egy támogató tag vett részt.

A Dél-kelet Európai Együttműködés (SEE) keretében megvalósuló *CC-WaterS projektben* 9 ország 20 mintaterületen vizsgálja az IPCC A1B éghajlati forgatókönyvének hatását az ivóvízellátásra felhasználható vízkészletek mennyiségére és minőségére. A Nyírségben, mint az egyik mintaterületen 2010-ben elkezdett munkák tovább folytatódtak, elsősorban az ökológiai vízigények becslésére kidolgozott módszertan és a párolgásszámítás finomítása, valamint a vízháztartási és hidrodinamikai modell pontosítása területén. A 2021–2050 és a 2071–2100 közötti időszakokra elvégzett számítások alapján, a klímamodellek bizonytalanságát is figyelembe véve, a megújuló készletek mintegy 40–55, illetve 60–70%-os csökkenése várható. A szárazodás miatt ugyan jelentősen csökken az ökológiai vízigény is, de csak takarékos megoldásokkal és a területi vízvisszatartás növelésével lehet az emberi és az ökológiai vízigényeket egyaránt kielégíteni. A kutatásban a kutatócsoport egy tagja vett részt. A megbízás összege 1 millió Ft volt.

A Vízgazdálkodási Kutatócsoport 2011 végén befejezi 14 éves működését. Ebből az alkalomból egy *kötet* jelenik meg (2012 tavaszán), amely hat tanulmányban mutatja be a kutatócsoport jelentős eredményeit.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A víz iránt növekvő társadalmi érdeklődés miatt a stratégiai feladatok elemzése során fontos szempont volt a társadalmi elvárások és hatások értékelése. 2011-ben a kutatócsoport tagjai és támogatói 7 ismeretterjesztő előadást tartottak és jelentős szerepet vállaltak a Mindentudás Egyeteme vízzel foglalkozó blokkjának elkészítésében. Az interneten keresztül szabadon hozzáférhető fitoplankton mérések folyamatos tájékoztatást adnak a Balaton Keszthelyi-medencéjének legfontosabb vízminőségi jellemzőiről.

A vízgazdálkodás kiemelt problémáival foglalkozó projektekben (WateRisk, CC-WaterS) a cél olyan döntéstámogató szoftverek kidolgozása, amelyek alkalmasak az éghajlatra és a társadalmi-gazdasági változásokra vonatkozó forgatókönyvek összehasonlító értékelésére.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A soros EU elnökséghez kapcsolódóan az MTA 2011. március 24. és 25. között Budapesten rendezett konferenciát *Futures of European Waters* címmel, azzal a céllal, hogy a víz kérdés globális és európai dimenzióinak (éghajlatváltozás és szélsőségek, mezőgazdaság, árvizek, ökológiai szolgáltatások, integrált vízgazdálkodás, kormányzás, nemzetközi együttműködés, a tudomány és a szakpolitika kölcsönhatása stb.) elemzése alapján ajánlásokat dolgozzon ki a különböző szintű döntéshozók részére. A konferencia szakmai igazgatója a kutatócsoport vezetője volt, egy tagja és egy támogató tagja pedig részt vett a tudományos előkészítő bizottság munkájában, illetve a konferencia végén elfogadott, az európai vízgazdálkodás legfontosabb kérdéseivel foglakozó dokumentum kidolgozásában.

A *COST Action 869* c. projekt a vizekbe jutó tápanyagok csökkentésének lehetőségeivel foglalkozott. Zárókonferenciáját 2011. október 12–14. között Keszthelyen rendezték. A kutatócsoport egyik tagja a szervezőbizottság munkájában vett részt, továbbá moderátorként szerepelt a tápanyagokra vonatkozó szabványokról és indikátorokról szóló kerekasztal megbeszéléseken, amelyen a kutatócsoportot egy támogató tag is képviselte. A beszélgetés hasznos tapasztalatcserére adott alkalmat az egyes országok vízgyűjtő-gazdálkodási terveiben alkalmazott megközelítésekről.

Oktatási és kutatási kapcsolataik 14 külföldi és 6 hazai egyetemre, valamint a IIASA-ra és a Kínai Tudományos Akadémia Wuhani Hidrobiológiai Intézetére terjednek ki. A kutatócsoport egyik tagja részt vett és előadást tartott a környezetmérnöki oktatásról szóló kecskeméti konferencián. A hazai szakmai kapcsolatok túlnyomóan a projektek végrehajtásához kötődnek. Szoros együttműködés alakult ki az MTA kutatóhelyeivel (TAKI, Földrajztudományi Kutatóintézet, BLKI, ÖBKI, Duna Kutató Állomás), a VITUKI-val, valamint a vízgazdálkodás és a környezetvédelem állami intézményeivel.

A kutatócsoport vezetője tagja a következő testületeknek: External Advisory Panel of Public Utility Board of Singapore, UN World Water Assessment Technical Advisory Committee, Editrorial Board of Ecohydrology and Hydrobiology, továbbá két kuratóriumnak. Egy-egy kutató tagja a következő szervezeteknek: Magyar Szennyvíztechnikai Szövetség (elnökségi tag), IPCC Víz Munkacsoport, EU COST Action 869 2. Munkacsoport, Global Lake Ecological Observatory Network (GLEON) (végrehajtó bizottsági tag, ennek a hálózatnak a kutatócsoport intézményi tagja is).
A Dél-kelet Európai Együttműködés keretében 9 ország 15 intézményének részvételével valósul meg a CC-WaterS projekt, amelynek kidolgozásában a kutatócsoport 1 tagja vesz részt. A Fertő-tó vízpótlásának lehetőségeit és hatásait vizsgáló projektben a kutatócsoport egyik támogató tagja vett részt, a Bécsi Műszaki Egyetemmel, a BME Vízgazdálkodási és Vízépítési Tanszékével és az Észak-Dunántúli KÖVIZIG-gel együttműködve.

IV. 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben a kutatócsoport a Tanszék révén 1 NKTH támogatású hazai projekt (WateRisk), 1 Dél-kelet Európai Együttműködés (SEE) keretében megvalósuló (CC-waterS) és egy magyar-osztrák kétoldalú projekt (Fertő-tó vízpótlása) kidolgozásában vett részt. A projektek 2011-re jutó, alvállalkozók nélküli költségkerete 24,3 millió Ft volt. Részletek a II. fejezetben és a pályázatok adatbázisában találhatók.

V. 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Istvánovics V, Honti M: Phytoplankton growth in three rivers – the role of meroplankton and the benthic retention hypothesis. Limnology and Oceanography 56:(4) 1439-1452 (2011)

2. Honti M, Istvánovics V: On-line monitoring of phytoplankton light response curves using a novel delayed fluorescence device. Lakes & Reservoirs - Research and Management 16:(2) 153-158 (2011)

3. Somlyódy L: A világ vízdilemmája. Magyar Tudomány 12. 1411-1424 (2011)

4. Somlyódy L.(szerk.), Simonffy Z, Nováky B, Koncsos L, Buzás K, Clement A. et al (2): Magyarország vízgazdálkodása: helyzetkép és stratégiai feladatok. Köztestületi Stratégiai Programok sorozat. MTA, Budapest, 335 old. (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: BME Vízgazdálkodási Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	5			Ebből kutató[2]:	3
PhD, kandidátus:	0	MTA doktora:	1	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				10
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				10
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven:	1
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	2
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	6	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	0	Összes független hivatkozás száma:	0
Összes hivatkozás száma[11]:	0		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			4
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	2		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			3
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	0

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		24 500	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0	Teljes saját bevétel:	24 500	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		19 000	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		5000	EFt

DE HOMOGÉN KATALÍZIS KUTATÓCSOPORT

Joó Ferenc, az MTA rendes tagja
4010 Debrecen, Pf.: 7.
telefon: 52-512 900; fax: 52-512 915
e-mail: joo.ferenc@science.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai a beszámolási évben

A kutatócsoport általános feladata a vizes közegű homogén katalitikus folyamatok és a vizes-szerves kétfázisú katalízis kutatása. A víz, mint oldószer használatának minél szélesebb körű elterjesztése a szerves és fémorganikus szintézisekben – más előnyök mellett – nagymértékben csökkenti a környezetszennyezés veszélyét. Ez a kutatás magában foglalja új ligandumok és katalizátorok szintézisét és jellemzését, valamint egyes fontos katalitikus folyamatok részletes vizsgálatát. A beszámolási évben ezek közé tartozott két környezeti szempontból önmagában is kiemelkedő fontosságú terület: a szén-dioxid hidrogénezése és formiátok katalitikus bontása továbbá egyes halogénezett szénhidrogének katalitikus hidrodehalogénezése. Fontos feladat volt az allil-alkoholok redox izomerizációjának vizsgálata vizes közegben, minthogy ez a szintetikusan értékes folyamat 100% atomhatékonyságú. Ugyancsak a kémiai folyamatok hatékonyabbá tételére irányultak a kutatócsoport fotokémiai vizsgálatai, elsősorban katalitikusan aktív Ru(II)-komplexek fotokémiai átalakulásainak tanulmányozása. A biológiai membránok módosítása katalitikus hidrogénezéssel hozzájárulhat az ún. membrán lipid-terápia kifejlesztéséhez. Erre a célra feladatul tűzték ki fluoreszkáló hidrogénező katalizátorok kifejlesztését. A számításos kémia egyre nagyobb mértékű alkalmazása hozzájárulhat a vizsgált folyamatok mechanizmusának jobb megismeréséhez olyan esetekben is, amikor kísérletes vizsgálatokra nincs lehetőség.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Új vízoldható N-heterociklusos karbének (NHC) prekurzorait állították elő a katalízisben jelentős szerepet játszó ismert imidazólium sók (IMes, SIMes) közvetlen szulfonálásával. Előállították és részletesen jellemezték ezen új ligandumok Au(I) komplexeit, melyek kiváló katalizátornak bizonyultak alkinek hidratálásában, mind aktivitásukat, mind regioszelektivitásukat tekintve. Az eredmények részét képezték egy PhD-dolgozatnak, továbbá megjelentek a *J. Molecular Catalysis* c. folyóiratban.

Együttműködés keretében az Almeríai Egyetemmel közösen befejezték a $[RuCl_2(dmso)_4]$ komplex és különféle vízoldható tercier foszfinok reakciójának vizsgálatát. A képződő komplexek szerkezetét elsősorban multinukleáris NMR-spektroszkópia segítségével azonosították, három esetben pedig egykristály röntgendiffrakciós módszerrel is meghatározták. Az eredmények közlése folyamatban van.

Biológiai membránok hidrogénezéséhez fluoreszkáló ligandumokat állítottak elő $[\{RuCl_2(p\text{-cimol})\}_2]$ és danzilezett dietilén-triamin (Dz-dta) reakciójában. A következőkben a kialakuló félszendvics-komplexek katalitikus hidrogénező aktivitását membránalkotó poláris lipidek hidrogénezésében vizsgálják meg.

A hangyasav a hidrogén tárolásának megfelelő anyaga lehet, viszont a bontás során képződő szén-dioxid közvetlenül nem hidrogénezhető vissza hangyasavvá, csak aminok jelenlétében, vagy karbonát ill. hidrogénkarbonát sók formájában. A kutatócsoportban megállapították,

hogy egyes vízoldható Ru(II)-foszfinkomplexek jó aktivitást mutatnak vizes oldatban a HCO_2^- katalitikus bontásában hidrogénre és hidrogénkarbonátra és hogy ez a reakció ciklusba kapcsolható a képződő HCO_3^- ugyanazzal a katalizátorral történő visszahidrogénezésével. Az eredményeket az egyik legnagyobb presztízsű kémiai lapban (*Angewandte Chemie International Edition*) közölték.

A szalén ligandum közvetlen szulfonálásával majd azt követő hidrogénezéssel előállították a hidrolitikusan stabilis dihidro-szulfoszalén (HSS) ligandumot, majd ennek segítségével a megfelelő Pd(HSS) és Ni(HSS) komplexeket. A Pd(HSS) komplex hidrogén atmoszférában nagy aktivitással katalizálja allil-alkoholok redox izomerizációját ketonokká vizes-szerves kétfázisú közegben. Megállapították, hogy a hidrogén nyomásától függően az allil-alkoholok hidrogénezése is lejátszódik telített alkoholokká és nagyobb nyomáson ez a folyamat válik uralkodóvá. A folyamatban a vizes közeg pH-ja is fontos, mert savas oldatokban fémkiválás történik és a katalizátor inaktiválódik.

Elméleti kémiai (DFT) számításokkal vizsgálták a H_2-molekula aktiválásának mechanizmusát a szulfonált szalén nikkel(II), ródium(III) illetve palládium(II) komplexei esetében. Megállapították, hogy a folyamathoz szükséges a szalén ligandum egyik O-donor atomja és a központi fémion közötti kötés átmeneti felszakadása. A számítások gázfázisra történtek, az oldószer hatását a polarizálható kontinuum módszerrel vették figyelembe. Eredményeik alapján, hogy érdemi katalitikus aktivitás a síknégyzetes Pd(II)-szulfoszalén komplextől várható.

TÁMOP 4.2.1 (IKUT) pályázat keretében vizsgálták a halogénezett alifás vegyületek degradálását redukciós úton. Megállapították, hogy a szól-gél eljárással heterogenizált nanoméretű palládium-részecskék aktív és stabilis katalizátorai a hidrodehalogénezési folyamatoknak.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport kutatásainak túlnyomó része fontos társadalmi problémák (mint pl. a környezetszennyező szerves klórvegyületek lebontása) megoldási lehetőségeinek kereséséhez kapcsolódott. A szén-dioxid hidrogénezés/formiát bontás ciklusa a hidrogén tárolás és fejlesztés terén vezethet új megoldáshoz. A vizes közegű és kétfázisú katalitikus eljárások alkalmazása csökkenti a környezetszennyezés veszélyét.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A biológiai membránok katalitikus módosításának vizsgálatát az MTA SZBK Biokémiai Intézete munkatársaival végezték, a fluoreszcens anyagok jellemzése az SZBK-ban történt.

Nemzetközi együttműködésben végeztek kutatásokat a kétfázisú katalízis terén az Almeríai Egyetem (Spanyolország) kutatóival. Különösen jelentős volt az együttműködés a fotokémiai vizsgálatok terén, melyet az Almeriai Egyetem fotokémiai laboratóriumában közösen végeztek a magyar és spanyol résztvevők.

A formiátok katalitikus bontása terén az EPFL (Lausanne, Svájc) kutatóival folytattak együttműködést, elsősorban nagynyomású NMR mérések ottani elvégzése céljából. Ezek a mérések döntő fontosságúak voltak a reverzibilis hidrogén tárolásra/fejlesztésre alkalmas kémiai rendszer kifejlesztésében.

A kutatócsoport munkatársai 2011-ben is részt vettek a Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék oktatómunkájában, laboratóriumi gyakorlatok vezetésével (átlagosan 4 óra/fő/hét).

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A 2011. évben a kutatócsoport, teljes alapkutatási témakörével, részt vett egy sikeres NFÜ TÁMOP pályázatban (TÁMOP-4.2.1B-09/1/KONV; A felsőoktatás minőségének javítása a kutatás-fejlesztés-innováció-oktatás fejlesztésén keresztül a Debreceni Egyetemen). Ennek keretében 14,2 M Ft műszerbeszerzési támogatás került felhasználásra, továbbá a működési költségekre a tárgyévben 16 M Ft-ot fordíthattak. A kutatócsoport vezetője a 2011-ben benyújtott pályázatával OTKA-támogatást nyert (29,983 M Ft/4 év), a kutatás kezdési időpontja 2012. március 1. Egy másik sikeres OTKA-pályázatban is résztt a kutatócsoport, fluoreszkáló katalizátorok szintézisével és vizsgálatával (támogatás 90,648 M Ft/4 év). Ugyancsak sikerrel szerepelt a kutatócsoport az MTA kutatócsoporti pályázatán és 2012. január 1-től kibővített feladatkörrel MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport néven folytatja kutatásait.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Papp G, Csorba J, Laurenczy G, Joó F: A Charge/Discharge Device for Chemical Hydrogen Storage and Generation. *Angewanndte Chemie International Edition* 123:(44) 10617-10619 (2011)

2. Czégéni C.E, Papp G, Kathó Á, Joó F: Water-soluble gold(I)-NHC complexes of sulfonated IMes and SIMes and their catalytic activity in hydration of alkynes. *Journal of Molecular Catalysis A-chemical* 340:(1-2) 1-8 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: DE Homogén Katalízis Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	3	Ebből kutató[2]:	3
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora: 0	Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			1
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				4
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				4
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	18,429	Összes független hivatkozás száma:	181
Összes hivatkozás száma[11]:	222		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			3
		poszterek száma:	8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	1		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			3
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	0

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		13 500	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0	Teljes saját bevétel:	34 300	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		4300	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		30 000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

DE SZÁMELMÉLETI KUTATÓCSOPORT

Pethő Attila, az MTA levelező tagja
4010 Debecen, Pf.: 12.
telefon: 52-512 900/75111; fax: 52-512 996
e-mail: petho.attila@inf.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

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, valamint a Debreceni Egyetem alkalmazásában álló kutatócsoport-vezetőnek és társpályázónak a tevékenységére vonatkozik.

A kutatócsoport kutatási témája: „Diofantikus számelmélet és alkalmazásai”. Kutatásaikat elsősorban a következő területek vizsgálatára koncentrálták: algoritmus kidolgozása végesen generált tartományok feletti egységegyenletek megoldására, hatékony módszerek kidolgozása különféle fontos egyenlettípusok összes megoldásának megkeresésére, valamint számtani sorozatokban található teljes hatványok meghatározására, hatványegészbázisok és monogén rendek vizsgálata, Schur-típusú és Pólya-típusú irreducibilitási problémák, rögzített számú zérushellyel és pólussal rendelkező racionális törtfüggvények, Recaman egy régi számelméleti problémája.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport tagjai szinte valamennyi vizsgált területen fontos új eredményeket értek el. Kiemelkedőbb eredményeik a következők:

Teljes általánosságban, végesen generált tartományok felett algoritmust adtak egységegyenletek összes megoldásának megkeresésére. Ezzel effektívizálták Lang egy 50 éves nevezetes ineffektív végességi tételét, és utat nyitottak számos új alkalmazás előtt. Új segédeszközök kidolgozásával megmutatták, hogy $3<k<54$ esetén nem lehet egy számtani sorozat k darab egymást követő tagjának szorzata teljes hatvány. Messzemenően általánosítottak több fontos eredményt diofantikus szám-n-esekre vonatkozóan. Hatékony módszereket dolgoztak ki különböző fontos egyenletosztályok összes megoldásának meghatározására. Megmutatták, hogy adott algebrai számtestben legfeljebb véges sok olyan monogén rend van, mely kettőnél több inekvivalens algebrai egésszel is generálható. Jellemezték azokat a negyedfokú számtesteket, melyeknek van egység alapú hatványegészbázisa. Több klasszikus Schur-típusú, valamint Pólya-típusú irreducibilitási tétel jelentős kiterjesztését, élesítését adták. Zannier egy polinomokra vonatkozó nevezetes tételének analógjaként megmutatták, hogy effektíve meghatározhatók mindazok a racionális törtfüggvények, amelyeknek rögzített számú zérushelye és pólusa van, és nemtriviális módon felbonthatók. Megoldották Recaman egy 30 éves problémáját. A kutatócsoport elméleti kutatásainak közvetlen gazdasági-társadalmi hasznosíthatóságát is alátámasztva, jelentős eredményeket értek el a digitális képfeldolgozás területén.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai mindannyian egyetemi oktatók, így közvetlenül részt vesznek a szakmai utánpótlás nevelésében. Oktatói tevékenységük során a fiatal generációnak közvetítik a nemzetközi tudomány legújabb eredményeit és problémáit. Munkájuk sikerességét mutatja, hogy vezetésük mellett folyamatosan készülnek diplomamunkák, szak- és TDK-dolgozatok és számos PhD-hallgató kutatásait segítik. Aktívan vesznek részt a tehetséggondozó programokban is.

A kutatócsoport döntően alapkutatásokat folytat. Törekszik azonban arra, hogy eredményeit az alkalmazott kutatásokban és fejlesztésekben is kamatoztassa. A kutatócsoport vezetője kezdeményezte a Debreceni Infopark megalapítását, és kezdeményezően vesz részt a Debrecen és az egész Észak-Alföldi régió fejlődése szempontjából is igen fontos informatikai projektek generálásában és végrehajtásában. Kriptográfiai kutatásaik eredményeit ezekben közvetlenül is hasznosíthatják.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport kutatóhelyi támogatásban részesült tagjai szoros együttműködésben dolgoznak egymással, valamint más debreceni és budapesti számelméletes kollégákkal. Széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Közös kutatásokat folytattak lengyel, holland, horvát, mexikói, osztrák és indiai matematikusokkal. A nemzetközi együttműködésből *tizenegy* közlemény született az V. részben felsorolt *tizenöt* publikáció közül.

A csoport tagjai (részben TéT-pályázatok keretében) rövidebb-hosszabb tanulmányúton vettek részt és előadásokat tartottak a Grazi Műszaki Egyetemen, a Los Angeles-i, a San Franciscó-i, a Leobeni, a Leideni és a Zágrábi Egyetemen.

Közös kutatások végzése céljából egy-egy hétre Debrecenbe látogattak külföldi kollégák, valamint két hónapot töltött Debrecenben két külföldi kolléga. A kutatócsoport vezetőjének vendégeként Berlinből volt vendégprofesszor egyetemükön.

Az év során a csoport tagjai számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon Vilniusban, Budapesten, Stará Lesnában (Szlovákia), Zágrábban és Debrecenben.

11th Central European Conference on Cryptography címmel konferenciát szerveztek Debrecenben közel 30 külföldi szakember részvételével.

A kutatócsoport tagjai tevékenyen részt vesznek a Debreceni Egyetemen folyó oktató, kutató és egyéb munkákban.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport tagjai témavezetőként, illetve közreműködőként a következő hazai és nemzetközi pályázatokban vettek részt:

OTKA T67580, OTKA K75566,
Magyar–osztrák TéT.

A TÁMOP 4.2.1./B-09/1/KONV-2010–0007 pályázat keretén belül kutatójuk projektvezető (Kriptográfiai algoritmusok és protokollok), és kutatócsoport-vezető (Diofantikus egyenletek és alkalmazásaik) a Debreceni Egyetemen.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Batenburg KJ, Fortes W, Hajdu L, Tijdeman R: Bounds on the difference between reconstructions in binary tomography. In: Debled-Rennesson I, Domenjoud E, Kerautret B, Even P (szerk.) Lecture Notes in Computer Sciences 6607: Discrete Geometry and Computer Imaginary, Springer Verlag, 369-380 (2011)
2. Bérczes A, Dujella A, Hajdu L, Luca F: On the size of sets whose elements have perfect power n-shifted products. Publicationes Mathematicae-Debrecen 79 (megjelenés alatt).
3. Bérczes A, Evertse J-H, Győry K: Multiply monogenic orders. Annali Della Scuola Normale Superiore di Pisa-Classe di Scienze (megjelenés alatt).
4. Dujella A, Győry K, Pintér Á: On power values of pyramidal numbers. Acta Arithmetica (megjelenés alatt).
5. Evertse J-H, Győry K: Effective results for unit equations over finitely generated domains. Journal Für die Reine und Angewandte Mathematik (megjelenés alatt).
6. Ferenczik J, Pintér Á, Porvázsnyik B: On Equal Values of Stirling Numbers of the Second Kind. Applied Mathematics and Computation 218: 980-984 (2011)
7. Fuchs C, Pethő A: On composite rational functions having a bounded number of zeros and poles. Proceedings of the American Mathematical Society 139: 31-38 (2011)
8. Győry K, Hajdu L, Tijdeman R: Irreducibility criteria of Schur-type and Pólya-type. Monatshefte für Mathematik 163: 415-443 (2011)
9. Hajdu L, Kovács T: Almost fifth powers in arithmetic progressions. Journal of Number Theory 131: 1912-1923 (2011)
10. Hajdu L, Saradha N: On a problem of Recaman and its generalization. Journal of Number Theory 131: 18-24 (2011)
11. Madritsch MG, Pethő A: Asymptotic normality of additive functions on polynomial sequences in canonical number systems. Journal of Number Theory 131: 1553-1574 (2011)
12. Pethő A, Ziegler V: On biquadratic fields that admit unit power integral basis. Acta Mathematica Hungarica 133: 221-241 (2011)
13. Péter Gy, Pintér Á, Schinzel A: On equal values of trinomials. Monatshefte für Mathematik 162: 313-320 (2011)
14. Pintér Á, Varga N: Resolution of a nontrivial diophantine equation without reduction methods. Publicationes Mathematicae-Debrecen 79 (megjelenés alatt).
15. Rakaczki Cs: On the simple zeros of shifted Euler polynomials. Publicationes Mathematicae-Debrecen 79 (megjelenés alatt).

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: DE Számelméleti Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	8			Ebből kutató[2]:	6,5
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				34
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				14
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	4
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	10
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	9,704	Összes független hivatkozás száma:	87
Összes hivatkozás száma[11]:	101		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	1

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			22
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	4
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	3		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			8
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	14
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		12 800	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	0	Teljes saját bevétel:	7 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		5100	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		700	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		1200	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

DE SZÉNHIDRÁT-KÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Antus Sándor, az MTA rendes tagja
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
telefon: 52-512 900/22471; fax: 52-453 436
e-mail: antus.sandor@science.unideb.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A kutatócsoport egyik fontos kutatási területe a biológiai szabályozási és felismerési folyamatokban fontos szerepet játszó, szulfátészter-, uronsav- vagy sziálsav-tartalmú, negatív töltésű szénhidrátok különböző mimetikumainak, elsősorban szulfonsav-analogonjainak előállítása, és az így nyert vegyületek biológiai hatásának vizsgálata. A kutatócsoport másik célkitűzése a biológiailag aktív O-heterociklusok szintézise, e munka során gyógyszerek fejlesztését elősegítő hatás-szerkezet összefüggések felismerése.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Előállították a transzmembrán glikoproteinek (szelektinek) legjobb természetes ligandumainak, a szialil Lewis X és szialil Lewis A tetraszacharidoknak különböző szulfonsav analóg vegyületeit; a szintézis során szisztematikus vizsgálatokat végeztek a glikozilezési reakciók tanulmányozására. A vegyületek potenciálisan gyulladásgátló és antimetasztatikus hatásúak, és tumor-markerként is felhasználhatók. (1. publikáció)

Az állati forrásból izolált heparin poliszacharid és szintetikus pentaszacharid analógja a leggyakrabban használt véralvadásgátló szer. Előállították a heparin aktív részéből levezethető diszacharid egységeket és bioizoszter szulfonsav analógjaikat. A szintézis során felmerülő anomális reakciókat molekuladinamikai számításokkal vizsgálták és értelmezték. Elsőként állítottak elő véralvadásgátló hatású pentaszacharid-szulfonsavakat; az egyik új pentaszacharid in vitro vizsgálatokban jobb antikoaguláns hatást mutatott minden jelenleg forgalomban lévő antitrombotikumnál. (2.-4. közlemény)

Előállították a baktériumok sejtfal-bioszintézisében kulcsszerepet játszó lipid-II bioizoszter foszfonát-analogonjait. A feltételezett antibakteriális hatást Gram-pozitív baktériumokon tesztelték, az eddig vizsgált törzsek ellen a vegyületek nem mutattak aktivitást. Glikopeptid-antibiotikumok módosításával új típusú, antibakteriális és antivirális hatást is mutató vegyületeket állítottak elő. (5.-6. közlemény)

A Dispersin B enzim egy β-N-acetilglükózaminidáz, amely képes hasítani S. epidermidis baktériumok úgynevezett biofilmjét, amelynek főkomponense poli-béta-N-acetil-D-glükózamin, ezért ez az enzim antibiofilm ágensként alkalmas lehet a S. epidermidis-szel fertőzött orvosi eszközök sterilizálására. Az enzim további tanulmányozásához tiofenil aglikonnal rendelkező, N-acetil-glükózamin-béta-(1→6) oligomer szubsztrát sorozatot állítottak elő. Vizsgálták a Dispersin B szubsztrát-specificitását és enzimkinetikai paramétereit. (7. közlemény)

Új, az aporfin váz 2-es helyzetében változatosan szubsztituált apomorfin származékokat állítottak elő, és meghatározták a vegyületek dopaminerg profilját. Két származék az apomorfinnal összemérhető D2 agonista hatást mutatott. (8. közlemény)

Kvantumkémiai és kinetikai vizsgálatokat végeztek szénhidrátok ciklikus-acetál származékain végrehajtott reduktív gyűrűnyitási reakciók mechanizmusának felderítésére. A vizsgált reakciótípus az oligoszacharidkémiában a leggyakoribb védőcsoport-manipulációk közé tartozik. (9.-11. közlemény)

Kínában honos fásszárú növényekből és ezekben élő endofita gombákból izolált új palmarumicin, preusszomerin és szteroid származékok abszolút konfigurációját határozták meg cirkuláris dikroizmus számításokkal. (12.-13. közlemény)

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A csoport munkatársai nagy számban vettek részt a Kémia Nemzetközi Éve alkalmából szervezett, a kémia szélesebb körű elfogadását segítő rendezvényeken (1. Nemzeti Vegyészkonferencia, Kutatók Éjszakája).
A Magyar Kémikusok Lapjának borról szóló tematikus számában a kutatócsoport vezetője a bor kedvező élettani hatásának kémiai hátteréről írt ismeretterjesztő közleményt. A francia paradoxon molekuláris magyarázata során a szerző pozitív kontextusban említi a „kémiai molekulákat", és a laikus közönség által is megérthetővé teszi, hogy milyen vegyületeknek köszönhetően csökkenti a vörösbor a szív- és érrendszeri betegségek kockázatát.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport eredményesen együttműködött az alábbi intézetekkel:
- DE TTK NMR Laboratórium
- DE TTK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
- DE TTK Szerves Kémiai Tanszék
- DE OEC Gyógyszerészi Kémia Tanszék
- MTA-DE Thrombosis és Haemostasis Kutatócsoport
- DE Fizikai Kémiai Tanszék Röntgendiffrakciós Laboratóriuma
- DE OEC Klinikai Biokémiai és Molekuláris Pathológiai Intézet
- DE OEC Orvosi Vegytan
- Országos Onkológiai Intézet, Kísérleti Farmakológiai Tanszék
- Department of Chemistry, University of Paderborn
- Institut für Mikrobiologie, TU Braunschweig
- Institute of Organic Chemistry, University of Hannover
- Department of Oral Biology, University of Medicine and Dentistry of New Jersey
- State Key Laboratory of Drug Research Institute of Materia Medica Chinese Academy of Sciences
- Rega Institute for Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA támogatás: K 81701 *(5 859 000 Ft)*
A pályázat témája: Potenciálisan farmakológiailag aktív heterociklusok szintézise és szerkezetvizsgálata.

Az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében elnyert Európai Uniós támogatás:

- TÁMOP 4.2.1./B-09/1/KONV-2010-0007 *(9 500 000 Ft)*
- A pályázat témája: Potenciálisan antivirális, antibakteriális és véralvadásgátló hatású szénhidrát-szulfonsavak szintézise.

– TÁMOP 4.2.1./B-09/1/KONV-2010-0007 *(14 250 000 Ft).*
– A pályázat témája: Természetes eredetű O-heterociklusok és rokon vegyületeik kutatása.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Csávás M, Májer G, Herczeg M, Remenyik J, Lázár L, Mándi A, et al. (2): Investigation of glycosylating properties of 1-deoxy-1-ethoxysulfonyl-hept-2-ulopyranosyl derivatives. Synthesis of a new sulfonic acid mimetic of the sialyl Lewis X tetrasaccharide. Carbohydr. Res., 346, 1527-1553 (2011)
2. Herczeg M, Lázár L, Mándi A, Borbás A, Komáromi I, Lipták A, et. al.: Synthesis of disaccharide fragments of the AT-III binding domain of heparin and their sulfonatomethyl analogues. Carbohydr. Res., 346, 1827-1836 (2011)
3. Herczegh M: Az antitrombotikus hatású idraparinux pentaszacharid új szintézise és szulfonsav-tartalmú analogonjainak előállítása, PhD-értekezés, 2011, DE, Kémiai Doktori Iskola
4. Sándor A: Szénhidrátkémiai kutatások a Debreceni Egyetemen. Magy. Kém. Foly., 117, 142-146 (2011)
5. Borbás A, Herczegh, P: Synthesis of lipid II phosphonate analogues. Carbohydr. Res., 346, 1628-1632 (2011)
6. Pintér G, Bereczki I, Ötvös R, Batta Gy, Kéki S, Mándi A, et. al.(1): Új, antibakteriális és influenzavírus-ellenes lipofil teikoplanin- és risztocetin-aglikonszármazékok szintézise, Magy. Kém. Foly., 117, 51-55 (2011)
7. Fekete A, Borbás A, Gyémánt Gy, Kandra L, Fazekas E, Ramasubbu N, et. al(1): Synthesis of β-(1,6)-linked *N*-acetyl-D-glucosamine oligosaccharide substrates and their hydrolysis by Dispersin B. Carbohydr. Res., 346, 1445-1453 (2011)
8. Reinart R, Gyulai Zs, Berényi S, Antus S, Vonk A, Rinken A, et. al.: New 2-thioether-substituted apomorphines as potent and selective dopamine D2 receptor agonists. Eur. J. Med. Chem., 46, 2992-2999 (2011)
9. Szikra D, Mándi A, Borbás A, P. Nagy I, Komáromi I, Kiss-Szikszai A, et. al (2): A kinetic study on the reductive opening of the diphenylmethylene acetal in methyl 2,3-*O*-diphenylmethylene-α-L-rhamnopyranoside. Carbohydr. Res., 346, 2004-2006 (2011.
10. Mándi A, Komáromi I, Borbás A, Szikra D, P. Nagy I, Lipták A, et. al. (1): Quantum chemical studies on the partial hydrogenolysis of methyl 2,3-*O*-diphenylmethylene-α-L-rhamnopyranoside. Tetrahedron Lett., 52, 1256-1259 (2011)
11. MándiA: Szénhidrátok acetál származékainak, valamint antibiotikum-származékok cikloaddíciós reakcióinak kvantumkémiai és dinamikai vizsgálata, 2011, PhD értekezés, DE, Kémiai Doktori Iskola
12. Cai YS, Kurtán T, Miao ZH, Mándi A, Komáromi A, Liu HL, et. al. (2): Palmarumycins BG1-BG7 and Preussomerin BG1, and Establishment of Their Absolute Configurations Using Theoretical Calculations of Electronic Circular Dichroism Spectra, J. Org. Chem., 76, 1821-1830 (2011.
13. Wang JR, Liu HL, Kurtán T, Mándi A, Antus S, Li J, et. al. (2): Protolimonoids and norlimonoids from the stem bark of Toona ciliata var. pubescens, Org. Biomol. Chem., 9, 7685-7696 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: DE Szénhidrát-kémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]: 8 Ebből kutató[2]: 8
PhD, kandidátus: 7 MTA doktora: 0 Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]: 2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]: 4

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]: 18
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]: 18

Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven:	9
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	18
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]: 22,754 Összes független hivatkozás száma: 64
Összes hivatkozás száma[11]: 86

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]: PhD: 1 MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0 külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]: 0
poszterek száma: 0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 1 Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 4

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]: 4
Témavezetések száma: TDK munka: 4 Diplomamunka (BSc): 0
Diplomamunka (MSc): 4 PhD: 3

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	24 400	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 Teljes saját bevétel:	29 700	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	5900	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	23 800	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

ELTE EGERVÁRY JENŐ KOMBINATORIKUS OPTIMALIZÁLÁSI KUTATÓCSOPORT

Frank András, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C
telefon: 1-372 2500/8132; fax: 1-381 2158
e-mail: frank@cs.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A tágabb értelemben vett Egerváry Jenő Kutatócsoport (http://www.cs.elte.hu/egres/) egy közösség, amelynek három fő feladata van: A) strukturális és algoritmikus vizsgálatok a kombinatorikus optimalizálás területén, B) számítógépes implementációk, különös tekintettel az általuk kezdeményezett LEMON diszkrét optimalizálási és modellezési C++ program-könyvtárra (http://lemon.cs.elte.hu/), C) ipari partnerek megrendelésére végzett konkrét fejlesztések. A 3 fő irányzat egymással szoros együttműködésben dolgozik. A formális MTA-ELTE Egerváry Jenő Kutatócsoport főleg az (A) pont megvalósításában vesz részt.

A kutatócsoport szűkebb szakterülete a kombinatorikus optimalizálás és a gráfelmélet. E témakörök eredményei jól alkalmazhatók a hálózatok (pl. számítógépes, telekommunikációs, közlekedési hálózatok) területén, ahol valamilyen kombinatorikus struktúrával modellezhető a vizsgált objektum. A csoport kutatási érdeklődését jól tükrözi az EGRES Open nevű online kutatási fórum (http://www.cs.elte.hu/egres/open), amely elősegíti a kérdésfelvetések és részeredmények megosztását a nemzetközi kutatóközösséggel.

A csoport által a kutatási eredmények publikálására létrehozott ISSN 1577-4451 számú EGRES Technical Report sorozatban 2011-ben 12 új publikáció jelent meg. Sikerült a 2011-re vállalt kutatási célkitűzéseikben előrelépni a leemelések, a merevség, matroidok közös bázisainak lefogása, illetve pakolási és partícionálási feladatok területén. A csoport eredményei 2011-ben olyan rangos konferenciákon szerepeltek, mint az IPCO, SODA, Oberwolfach Combinatorial Optimization Workshop, Shonan Graph Algorithms and Combinatorial Optimization Workshop, Japán–Magyar Diszkrét Matematikai Konferencia. A csoport egy tagja meghívott előadó volt a Magyar Operációkutatási Konferencián, illetve elfogadásra kerültek a 2011-ben megrendezendő STOC és IPCO konferenciákra.

A csoport kiemelt feladatának tekinti a felsőoktatási képzésben való részvételt, tagjai 2010-ben is oktattak az ELTE matematikus és informatikus képzésében. A hetente megtartott Egerváry Szemináriumon, melynek fő célja a kombinatorikus optimalizálás legújabb eredményeinek feldolgozása, több egyetemi hallgató és doktorandusz adott elő.

A 2011-es évben több együttműködési projekt is folytatódott a kutatócsoport és ipari partnerek, konkrétan a Lufthansa, az IBM és a Nokia Siemens Networks részvételével. Az IBM egy kutatólabort is létesített az ELTE Operációkutatási Tanszékén. Az alkalmazott projektek megvalósításában a LEMON könyvtár jelenti a kiindulópontot.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport vezetője által írt „Connections in Combinatorial Optimization” című 640 oldalas könyv 2011 februárjában jelent meg az Oxford University Press kiadó gondozásában.

Az alábbiakban a csoport beszámolási évben elért kutatási eredményei szerepelnek területekre lebontva, a szerzők és a publikációk számával.
Merevség: A csoport 4 tagja 6 dolgozatot írt ebben a témakörben. Bebizonyították, hogy egy sokszorosan összefüggő merevségi matroid meghatározza a szerkezet gráfját, illetve jellemezték a 2-dimenziós generikus merevségét olyan rúdszerkezeteknek, melyekben két pont egybeesik. A témában egy további, magyar nyelvű dolgozat III. Díjat nyert az Országos TDK Konferencián.

Minimális költségű fenyők lefogása: Egy japán kutató által felvetett nyitott kérdéssel foglalkozott a csoport több tagja is, melyben a kérdés egy élsúlyozott irányított gráfban a minimális költségű fenyők lefogásához szükséges élek minimális számának meghatározása volt. A nyitott kérdés megoldásából egy dolgozat született. Ennek kapcsán megvizsgálták egy gráf minimális költségű feszítőfáinak lefedését, illetve általában egy matroid minimális bázisainak lefedését egy további rövid dolgozatban.

Stabil házasság és hozzárendelés témakörében két új dolgozat született, melyekben a klasszikus megközelítés kiterjesztéseit vizsgálják. Az egyikben a preferenciasorrend helyett részbenrendezést vesznek alapul, a másikban pedig alsó kapacitásokkal megadott feladatra alkalmaznak egy matroidelméleti megközelítést. A témában egy dolgozatot a 2012-es SODA-ra fogadtak el.

NP-nehézségi eredmények: A csoport két tagja módszeresen sorra vette egy gráf két részre való partícionálására illetve két résszel való lefedésére vonatkozó feladatokat, melyekben mindkét részre megadják, hogy legyen fa, út, kör, feszítőfa, s-t-út, vagy erdő. A kapott feladatok többségéről belátták, hogy NP-nehéz, míg a maradékot ismert eredmények alapján besorolták a polinomiális és NP-nehéz feladatok osztályába. A csoport két másik tagja megcáfolt három olasz szerző tollából kipattant sejtést, mely erősen diszjunkt fenyők pakolására vonatkozik. A csoport két másik tagja belátta, hogy a molekuláris kémiában használt Clar-szám meghatározása NP-nehéz még síkgráfokban is.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az ELTE Természettudományi Kara és a kar Hallgatói Alapítványa a 2009-es évben indította el az ELTE TTK Országos Diákkutatói Programot, amelynek célja az ország kiemelkedően tehetséges középiskolás diákjainak felkutatása, folyamatos gondozása, a természettudományi pálya iránti érdeklődésük felkeltése, erősítése.

A csoportvezető középiskolákban tartott kombinatorikus optimalizálást népszerűsítő előadásokat. A csoport egy tagja részt vesz a Kürschák József Matematikai Tanulóverseny szervezésében. A csoport egy tagja a Nemzetközi Matematikai Diákolimpia feladatkitűző és pontozó bizottságában szerepelt.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Az ELTE Operációkutatási Tanszékén a csoport tagjai több tárgy oktatásában vettek részt (Egészértékű Programozás, Operációkutatás, Diszkrét Optimalizálás, Algoritmikus Játékelmélet). Ezen túl a kutatócsoport szoros kapcsolatokat ápol az ELTE Számítógép-tudományi Tanszékével és a BME Számítástudományi és Információelméleti Tanszékével, mely tanszékek kutatói rendszeresen részt vesznek a csoport szemináriumán.

A csoport a 2011-es évben vendégül látott 1 francia, 1 indiai, 1 cseh és 3 japán vendéget, és a csoport tagjai is elfogadtak vendégkutatói meghívásokat többek között kiotói, prágai, berlini kutatóintézetektől.

A csoport tagjai a 2011-es évben több alkalmazott projektben is részt vettek olyan vállalatokkal való együttműködésben, mint a Lufthansa, az IBM vagy a Nokia Siemens Networks.

A csoport tagjai az év során számos előadást tartottak jelentős nemzetközi konferenciákon: IPCO (New York), Combinatorial Optimization Workshop (Oberwolfach), Shonan Workshop (Japán), Japán–Magyar Diszkrét Matematikai Konferencia, illetve elfogadást nyertek a 2012 januári STOC konferenciára. A csoport két tagja a 2012-es ISMP konferenciára meghívott szekciót szervez.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport 2011-ben sikeresen pályázott az MTA Támogatott Kutatóhelyek Irodájának támogatására a következő 5 évre. Ebben az évben indult továbbá a Japán–Magyar TÉT pályázat, melynek keretében kibővülhet az együttműködés japán egyetemekkel.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Pap J: Recognizing Conic TDI Systems is Hard, Mathematical Programming. 128, 1-2: 43–48 (2011)
2. Bérczi K, Kobayashi Y: An Algorithm for (n-3)-Connectivity Augmentation Problem: Jump System Approach; Journal of Combinatorial Theory Series B doi:10.1016/j.jctb.2011.08.007 (2011)
3. Király T, Lau LC: Degree bounded forest covering, Proceedings of 15th International Conference IPCO 2011, LNCS 6655: 315-323 (2011)
4. Fleiner T, Irving R W, Manlove D F: An algorithm for a super-stable roommates problem. Theoretical Computer Science 412:(50) 7059-7065 (2011)
5. Cechlárová K, Fleiner T: Optimization of an SMD placement machine and flows in parametric networks. Kybernetika 47:(5) 722-731 (2011)
6. Kovács E R, Végh L A: The constructive characterization of (k,l)-edge-connected digraphs. Combinatorica, 2(31) (2011)
7. Király Z: Monochromatic components in edge-colored complete uniform hypergraphs, Electronic Notes in Discrete Mathematics. 38C: 517-521 (2011)
8. Harvey N J A, Király T, Lau L C: On disjoint common bases in two matroids, SIAM Journal on Discrete Mathematics 25: 1792-1803 (2011)
9. Balázs D, Jüttner A, Kovács P: LEMON - an open source C++ graph template library. Electronic Notes in Theoretical Computer Science, 264 (5): 23 - 45 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ELTE Egerváry Jenő Kombinatorikus Optimalizálási Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]: 3 Ebből kutató[2]: 3
PhD, kandidátus: 3 MTA doktora: 0 Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]: 1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]: 27
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]: 9

Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	8
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	8
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]: 5,63 Összes független hivatkozás száma: 27
Összes hivatkozás száma[11]: 43

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]: PhD: 1 MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0 külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]: 26
poszterek száma: 0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0 Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 0

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]: 3
Témavezetések száma: TDK munka: 2 Diplomamunka (BSc): 5
Diplomamunka (MSc): 3 PhD: 4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	11 900	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 Teljes saját bevétel:	16 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	16 000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

ELTE ELMÉLETI FIZIKAI KUTATÓCSOPORT

Tél Tamás, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1.A.
telefon: 1-372 2546; fax: 1-372 2509
e-mail: tel@general.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A csoport kutatásai a korábbi hagyományokra támaszkodva a térelmélet, a részecskefizika, valamint a statisztikus fizika területén folytak. A feladat egyrészt a megkezdett kutatási témák eredményes folytatása, másrészt pedig új területek bevonása volt.

A kutatócsoport tagjai aktívan vesznek részt az egyetemi oktatásban, diplomamunkások és doktoranduszok vezetésében. Számos eredmény született az Elméleti Fizikai Tanszék oktatóival, valamint más intézmények kutatóival való együttműködés alapján. A csoport tagjai alapkutatással foglalkoznak, melyek társadalmi hasznossága a világ, ezen belül a fizikai rendszerek viselkedésének jobb megértése révén jelenik meg, gazdasági hasznossága részben csak közvetetten, részben pedig csak viszonylag hosszú idő múlva nyilvánul meg.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Részecskefizikai kutatások

A részecskefizika Standard Modellje rendkívül sikeresen írja le az eddigi nagyenergiás kísérleteket. A nagy nemzetközi együttműködésben, magyar részvétellel folyó LHC (Large Hadron Collider), CERN, Genf kísérlet egyik fő feladata a Standard Modell szimmetriasértő szektorának kísérleti feltérképezése. A bozon lehetséges tömegét jelentősen korlátozta az LHC és felfedezésére is utalnak a (2011 decemberében közzétett) kísérleti jelek. A Standard Modellben a szimmetriasértést leíró Higgs-skalár bozon a modell elméleti problémáinak többségéért is felelős. Ezért még mindig aktuális az alternatív modellek vizsgálata is, és azok kísérleti jóslatainak összevetése az eddigi és a tervezett kísérletekkel.

A csoport tagjai erősen kölcsönható fermionokra épülő dinamikai szimmetriasértő modellt javasoltak a szimmetriasértő szektor alternatívájaként. Az effektív elméletben az elemi Higgs-részecske helyett az új fermionok kötött állapotaként összetett skalár részecske jelenik meg. A modell újdonsága, hogy nem királis fermionok sértik az elektrogyenge szimmetriát, ezáltal elkerülve a dinamikai szimmetriasértő modellek főbb problémáit. Meghatározták az új részecskék keltésének rátáját (hatáskeresztmetszetét) az LHC jelenlegi energiaszintjén. A modellt és következményeit egy megjelenés alatt álló könyvfejezetben mutatják be.

A javasolt modellben az 1-hurok elektrogyenge precíziós mennyiségek meghatározásához 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. A módszerrel a háromszög anomáliát is egyértelműen sikerült kiszámolniuk impulzustérbeli levágással, és további alkalmazását tervezik effektív elméletekben. Eredményeiket két cikkben publikálták.

Az integrálható térelméletek témakörben a csoport tagjai tovább vizsgálták a véges térfogatú form faktorokat. Sikeresen összevetették a sine-Gordon bulk és peremes lélegző form faktorait a numerikus TCSA adatokkal, a peremes esetben igazolva ezzel a csoport egy tagjának egy 2008-as eredményét a sinh-Gordon modell form faktorairól. Ezen felül a mátrixelemek vizsgálatával olyan, anomálisan nagy véges-méret korrekciókat azonosítottak, melyeknek jelentősége lehet például a rács QCD számításokban.

Az erősen kölcsönható mértékelméletek dinamikája sikeresen megérthető a mértékelmélet és a gravitáció dualitása által. Eszerint az ötdimenziós anti de Sitter tér és az ötdimenziós gömb szorzatán mozgó szuperhúr ekvivalens a négydimenziós maximálisan szuperszimmetrikus mértékelmélettel. Kihasználva a modellek planáris határesetben fennálló integrálhatóságát, a csoport egy tagja számos meggyőző bizonyítékot szolgáltatott a sejtés alátámasztására. Ezek alapján felkérték egy könyvfejezet megírására a spektrális probléma termodinamikai Bethe-ansatz-on alapuló megoldásáról.

A modellek integrálhatóságának kihasználásával kétdimenziós számításokkal juthatunk egzakt eredményekhez a négydimenziós mértékelméletekben. A csoport egy tagjának konkrétan sikerült a legegyszerűbb nemtriviális operátorok anomális dimenzióját az effektív csatolásban ötöd- és hatodrendben kiszámítania. Meghatározta továbbá a peremes rendszerek gerjesztett állapotainak végesméret-korrekcióit, és alkalmazta ezeket a technikákat a legegyszerűbb determináns típusú operátorok anomális dimenzióinak kiszámolásában.

A részecskefizikában szereplő kvantumszíndinamika nem szuperszimmetrikus elmélet. Ennek jobb megértéséhez vizsgálták a maximálisan szuperszimmetrikus elmélet olyan deformációit, melyek csak egy szuperszimmetriával rendelkeztek, vagy egyáltalán nem voltak szuperszimmetrikusak. Meghatározták ezen elméletek egzakt szórásmátrixát, majd ezek segítségével egzaktul leírták a véges-térfogati spektrumot.

Statisztikus fizikai kutatások

Egy volt Marie Curie-ösztöndíjas angol vendégkutatóval együttműködve a, csoport egy tagja korrelált idősorok extrém tulajdonságaival foglalkozott. A hangsúly az $1/f^{\alpha}$ teljesítmény-spektrummal rendelkező jelenségek sorrend-statisztikájának meghatározásán volt, mivel ilyen típusú folyamatok gyakran előfordulnak a sokakat érdeklő klimatikus jelenségekben. Az extrém értékeken túl jelentőséggel bírnak a közel extrém események, azok gyakorisága és statisztikus tulajdonságaik is. A kapott sorrend-statisztikák összehasonlítása természeti idősorokkal (szélsebesség extrémumok) jelenleg folyik. A kutatás egy érdekes melléktermékeként, hogy a sorrend-statisztikák spektruma megegyezik az egydimenziós hatvány alakú potenciálokban megjelenő kvantummechanikai energiaspektrumokkal.

A csoport másik tagja folytatta a rövidhatótávolságú, véges dimenziós Ising-spinüveget reprezentáló köbös replika-térelmélet vizsgálatát. A már létező perturbatív eredményeket egy két-paraméteres (mágneses tér jelenlétében három-paraméteres) Wilson-típusú renormálási csoport számolással ötvözték. Két olyan mennyiséget tanulmányoztak, amelyek a Parisi-féle replikaszimmetria-sértő (RSB) spinüvegfázist jellemzik: a rendparaméter-függvény törés-pontját, illetve az Almeida−Thouless-kritikus teret. A nemtriviális fixpont tartományában, hat dimenzió alatt, minőségileg új jelenségeket fedeztek fel. Ilyen például, hogy a töréspont nem tűnik el a kritikus állapotban, hanem egy univerzális értéket vesz fel: ezt az epszilon-sorfejtés első rendjében ki is számolták. Általános következtetésként levonható, hogy az RSB fázis a

dimenzió csökkenésével kiterjedtebbé válik: mind a töréspont, mind pedig a kritikus tér növekszik.

A csoport vezetője a szennyezések terjedése témakörében dolgozott, mely a környezetfizika alapvető problémája. A szennyező részecskék általában véges (de kis) méretűek és ezért sebességük nem egyezik meg pontosan a közeg sebességével. Dinamikájuk ezért eltér a környező közeg viselkedésétől, melynek egyik fontos megnyilvánulása az, hogy a véges részecskék mozgása függ a teljes eltelt időtől, vagyis jelentős memóriával rendelkezik. Erősen tehetetlen részecskék esetén a káoszt jellemző Lyapunov-exponens és szökési ráta jelentősen eltér a memória elhanyagolásával kapott értéktől. Ezért számos korábban vizsgált problémában szükségessé válik az eddigi eredmények alapvető átértékelése.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom közt

A csoport tagjai évek óta előadásokat tartanak az ELTE Fizikai Intézetének „Az atomoktól a csillagokig" című tudományt népszerűsítő sorozatában. A csoport egy tagja több ismeret-terjesztő előadást is tartott a társadalmat erősen foglalkoztató klímakutatással kapcsolatban.

A csoport vezetője a Fizika tanítása doktori programot is vezeti az ELTE Fizika Doktori Iskolájában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A csoport tagjai együttműködnek egy sor hazai kutatóhellyel (BME Fizika Tsz, MFA és KFKI RMKI). Az ELTE-n folyó oktatásban is mindenki részt vesz különböző elméleti fizikai tantárgyak oktatásával. A csoport tagjai széleskörű nemzetközi kapcsolatokkal rendelkeznek. Ezek közül kiemelendőek azok, ahová a kutatók hosszabb tanulmányutakat tettek, illetve ahonnan kutatók érkeztek látogatóba: a CERN Svájcban, a Drezdai Max Planck Intézet Németországban, a Paris-Sud Egyetemek Franciaországban, a Jagelló Egyetem Lengyelországban, az EWHA Egyetem Koreában, a London King's College Angliában, valamint a Miami Egyetem Floridában.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A csoport három tagja és a csoport vezetője témavezetőként részt vesz OTKA pályázatokban, ezen túl résztvevőként többnyire mindenki szerepel különböző OTKA pályázatokban.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Ahn C, Bajnok Z, Bombardelli D, Nepomechie R I: Twisted Bethe equations from a twisted S-matrix, JHEP 1102: 027 (2011)

2. Moloney N R, Ozogány K, Rácz Z: Order statistics of $1/f^{\alpha}$ signals. Phys. Rev. E 84: 061101 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	6			Ebből kutató[2]:	6
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora:	1	Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				15
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				15
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	15
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	14
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	58,085	Összes független hivatkozás száma:	262
Összes hivatkozás száma[11]:	304		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	1

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			10
	poszterek száma:		0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 6			

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			6
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	3	PhD:	13

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	34 000	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 Teljes saját bevétel:	19 900	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	4	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	19 900	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

ELTE FEHÉRJEMODELLEZŐ KUTATÓCSOPORT

Perczel András, az MTA levelező tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.
telefon: 1-372 2500; fax: 1-372 2592
e-mail: perczel@chem.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Nagyműszeres kísérleti módszerekkel, és kvantumkémiai számításokkal jellemezték gyakorlati szempontból is érdekes fehérjék és peptidek (pl. cukorbetegség, dajkafehérjék, gombaellenes peptidek), valamint fehérje építőkövek szerkezetét, dinamikáját és kölcsönhatásait. Új, várhatóan biológiailag aktív kismolekulákat szintetizáltak, a szerkezeteket komplex nagyműszeres vizsgálatokkal derítették fel, a vegyületek stabilitási viszonyait esetenként elméleti számításokkal támasztották alá.

A kutatócsoport tagjai kötelező és speciális kollégiumok, valamint gyakorlatok tartásával részt vesznek az ELTE vegyész, biológia és kémia BSc- és MS-, ill. PhD-képzésben. A kutatócsoport vezetése alatt dolgozik16 diákkörös és 5 PhD-hallgató.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Biopolimerek építőelemeinek szerkezete és kölcsönhatásai. Az NMR módszerekkel való fehérje szerkezet meghatározás során nagy jelentőséggel bír a főlánc konformációjának jóslása pusztán a kémiai eltolódások alapján. Kvantumkémiai számításokkal vizsgálták a kémiai eltolódás függését a lokális konformációtól összehasonlításban a fehérje adatbázisokban található adatokkal. A királis aminosavak H^{α}, C^{α} és C^{β} kémiai eltolódásai jól használhatók az egyes felépítő aminosavak másodlagos szerkezetének meghatározásában. Kidolgozták a poliprolin II és az inverz γ-kanyar azonosítását [cit: *J Comp Chem* 32:3362].
Vizsgálták az aminosavak pár preferenciáját természetes fehérjékben található β-redőzött rétegekben 3D szerkezeti adatbázisok felhasználásával. A pár preferencia mértéke a leggyakoribb aminosav párok esetében megbízható, de a kevésbé gyakori pároknál a széles körben alkalmazott χ^2 teszt túlbecsüli a korrelációt. A homológia szűrés hatásának számszerűsítéséhez három különböző módszert teszteltek: CD-HIT, PDBselect és a PISCES programokat. Kimutatták, hogy nemcsak a szűrési határértékek, hanem a bemenő molekulák is befolyásolják a kapott pár preferencia adatbázist. Létrehoztak egy új NMR méréseken alapuló aminosav pár preferencia adatbázist. Kifejlesztettek egy, a β-kanyarok és β-rétegek kialakulásának „hajtóerejét” az aminosav sorrend függvényében meghatározó szoftvert, amelyet a β-kanyarok tervezésének és szintézisének és szerkezetvizsgálatának támogatására alkalmaztak.
A nem klasszikus hidrogénhíd kölcsönhatásokra kevés bizonyíték található szerkezeti adatbázisokban. Együttműködésben végzett kutatásaik során igazolták alifás (sp3-hibridizált) C−H...S 3 centrumú 4 elektronos kölcsönhatások meglétét egy rubredoxin fehérje esetén NMR és kvantumkémiai módszerekkel [cit: J Am Chem Soc 133:1310].

Potenciálisan biológiailag aktív molekulák szintézise és vizsgálata. Polihidroxialkil oldalláncot tartalmazó aminosavak (cukor-aminosavak) szintézise - azok várhatóan kedvező biológiai hatása, vagy hatékony molekulákká történő továbbalakítása miatt - újabban egyre nagyobb érdeklődésre tart számot. A kutatócsoportban olyan alfa-amino-aldonsav-

származékok (pl. 2-acetamido-pentono-laktonok) sztereoszelektív szintézisét valósították meg a lényegesen olcsóbb alap-cukrokból (a megfelelő pentózokból) kiindulva, amelyek hatékony enzim-inhibitor hatással rendelkeznek. Az aminocsoport regiospecifikus és sztereoszelektív bevitelét a cukorlánc C-2 atomjára fenilazo-fenilhidrazono-aktiválással oldották meg. A szintézissor új vegyületeinek szerkezetét nagyfelbontású NMR spektroszkópiás vizsgálatokkal igazolták. Oldatban *E-Z* izomer-egyensúly jelenlétét észlelték, az izomerek stabilitási viszonyait elméleti számításokkal támasztották alá. [cit: *Carbohydr Res* 346:1534]

Mono- és diacetil-ferrocén-oximok glikozilezési és glikoziltiokarbamoilezési reakcióit vizsgálták. Az acetilferrocén-oxim glikozil-tiokarbamoilezési reakcióiból új, kristályos ferrocenil-oxim-glikozidokat izoláltak és egy további, a többségi komponenst közel 80 %-ban tartalmazó izomer párt. A szerkezetvizsgálatok szerint e vegyületeknél az oxim-izomeria mellett a tioamid-kötés gátolt rotációja következtében további cisz-transz izomériára nyílik lehetőség, Az izomer termékek gyors kromatográfiás eljárásokkal elkülöníthetők, kristályos formában stabilak. Az acilferrocén-oximok antioxidáns, szabad gyökfogó hatása miatt új, cukortartalmú származékaik biológiai vizsgálatok szempontjából is érdekesek lehetnek.

Számos új heterociklusos vegyület szerkezetfelderítését végezték el IR- és komplex NMR vizsgálatokkal. Így pl. 1,3-benzotiazin-származékok váratlan gyűrűátrendeződési reakciójában keletkező indolo-1,4-benzotiazepinek szerkezetét határozták meg. [cit: *Tetrahedron Lett* 52:224] Egy másik vizsgálatsorozatban 1,3-benzotiazin-származékok gyűrűtágulási reakciójában képződő új regiomer gyűrűrendszerek, az 5,6-dihidro-2H-1,5-benzotiazocinek, ill. az 5,6-dihidro-4H-1,5-benzotiazocinek szerkezetét derítették fel. [cit: *Tetrahedron Lett* 52:592] További új, biológiai szempontból érdekes vegyületcsaládok szerkezetfelderítését is elvégezték, melyek közül a legfontosabbak a 4,5-dihidro-1,3-tiazino[5,4-b]indolok [cit: *J Heterocycl Chem* 48:1079], ill. a rákellenes hatás szempontjából ígéretes tiaprotoberberin- és indén-izokinolin származékok [cit: *Letters Org Chem* 8:450].

Részt vettek foszfinsavat tartalmazó, jobb enantioszelektivitású királis koronaéterek kifejlesztésében: a komplexképződést ECD-spektroszkópiával vizsgálták. A méréseket kiterjesztették az 1-NEA mellett a 2-NEA-ra [1-(2-naftil)-etilamin] is, és a két amin komplexének spektruma közötti különbséget sztérikus okokkal magyarázták.

A fehérjefunkció szerkezeti és dinamikai vonatkozásai. Részt vettek új, a penetratinnal rokon, de annál erősebb gombaellenes hatással rendelkező oligopeptidek kifejlesztésében és vizsgálatában. A funkcionális vizsgálatokat kórokozó Candida albicans és Cryptococcus neoformans törzseken végezték. A peptidek kísérleti és számításos konformációs vizsgálata során azonosítottak egy, a peptidek továbbfejlesztésében felhasználható topografikus templátot. A peptidek méretét jelentősen csökkentették a gombaellenes hatás fokozása mellett [cit: *Eur J Med Chem* 46:370, Lett Drug Des Disc 8:562].

A Trp-kalitka minifehérjét használtak fel arra, hogy tanulmányozzák egy sóhíd (Asp^{9}-Arg^{16}) szerepét a fehérje feltekeredésében: mindkét aminosav szisztematikus cseréjével feltérképezték az oldalláncok interakciós-hálózatát. Az ECD és NMR módszerrel kapott eredmények szerint mindkét aminosav többféle fehérjestabilizáló kölcsönhatásban vesz részt, egy komplex interakciós hálózat része. Kimutatták, hogy a Trp-kalitka minifehérje feltekeredése nem két-állapotú folyamat, hanem intermedier képződésen keresztül történik [*J Pept Sci* 17:610].

Az ERD14 a dehidrinek családjába tartozó növényi stresszfehérje, korábbi vizsgálatok szerint szerkezet nélküli fehérje (intrinstically disordered protein, IUP). A kutatócsoportban elvégezték NMR asszignációját, és kimutatták, hogy a teljes fehérje rendezetlen, de néhány rövid szakaszon a konformációs mozgás korlátozott, 5-25% hélix kialakítási hajlammal. Ezek

valószínűleg a funkcionális kölcsönhatásokhoz részlegesen előre formált elemek a fehérjén belül [cit: *Biomol NMR* Ass 5:189].

Az LC8 dinein könnyűlánc (DLC) csomóponti fehérje, amely számos, különböző funkcióval rendelkező fehérjéhez képes kötődni, és ezáltal szabályozni a működésüket. Röntgen-diffrakcióval meghatározták egy in vitro evolúcióval kifejlesztett, minden eddiginél erősebben kötődő peptiddel alkotott komplexének szerkezetét, és vizsgálták a fehérje által kialakított specifikus kölcsönhatásokat [cit: PLOS ONE 6:e18818]. Az acilpeptid-hidroláz (APH) két doménből álló szerin-proteáz, az oligopeptidázok családjába tartozik. Krisztallográfiai vizsgálataik során az enzim két különböző globális konformációját figyelték meg, amiknek segítségével megállapították, hogy kettős funkciójukat (méretszelektivitás és katalízis) „konformációs szelekciós mechanizmussal" valósítják meg [cit: J Biol Chem 286:1987]. A *Staphylococcus aureus* kórokozó baktérium Φ11 segítő fágja dUTPáz enzimének szerkezetvizsgálata az első lépés abban, hogy ennek az esszenciális enzimnek a Φ11-ben speciálisan jelen levő kiterjesztésének a szerkezeti-funkcionális szerepét megértsék, ami hozzásegíthet szelektíven ható gátló molekulák kifejlesztéséhez.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport vezetője 2011-ben elnyerte a Bolyai díjat, ennek kapcsán több mint egy tucat tudományt népszerűsítő előadást tartott (TV, rádió, internet), és 7-8 ismeretterjesztő cikket írt. Az „Open Laboratory of Protein Science" több színvonalas tudományos előadást szervezett a Szent-Györgyi előadás sorozat keretében.

Konferenciaszervezés: „4th European Conference on Chemistry for Life Sciences" és két szatelit esemény.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Belföldi kapcsolatok: ELTE Biokémiai Tanszék; SZTE Gyógyszerkémiai Intézete, Gyulai Megyei Kórház; SZTE Orvosi Vegytani Intézete; MTA Kémiai Kutatóközpont, MTA Alkaloid Kémiai Kutatócsoport; MTA Enzimológiai Intézet Genom Metabolizmus, Funkcionálisan Rendezetlen Fehérjék, Proteáz és Sejt Architektúra kutatócsoportjai.

Külföldi kapcsolatok: argentin San Luis-i Nemzeti Egyetem Kémiai, Biokémiai és Gyógyszerészeti Kara, Wisconsini Egyetem.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA-pályázatok, amelyekben a kutatócsoport tagjai vezetők: fehérje feltekeredés (K72973), oligopeptidázok (NK67800), ferrocénszármazékok és heterociklusok (K68887), királis koronaéterek (PD71817). Nemzetköz pályázatok: az EU EAST-NMR (228461), COST CM0803 és a CPR-ICGEB ICGEB09-03, valamint az EU és az Európai Szociális Alap TÁMOP-4.2.1.B-09/1/KMR pályázatai.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Rovo P, Farkas V, Hegyi O, Szolomajer-Csikos O, Toth GK, Perczel A: Cooperativity network of Trp-cage miniproteins: probing salt-bridges. J. Pept. Sci. 17: 610-619 (2011)
2. Harmat V, Domokos K, Menyhard DK, Pallo A, Szeltner Z, Szamosi I, *et al.* (3): Structure and Catalysis of Acylaminoacyl Peptidase: Closed and Open Subunits of a Dimer Oligopeptidase. J. Biol. Chem. 286: 1987-1998 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	3			Ebből kutató[2]:	3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				16
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	15
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	15
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	47,155	Összes független hivatkozás száma:	268
Összes hivatkozás száma[11]:	309		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			10
	poszterek száma:		3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	5	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	1
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	6		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			3
Témavezetések száma: TDK munka:	2	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	13 900	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	69 600	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	3	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	9200	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	57 000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	3400	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

ELTE GEOLÓGIAI, GEOFIZIKAI ÉS ŰRTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Haas János, az MTA doktora
1117 Budapest, Pázmány sétány 1/c
telefon: 1-3812127; fax 1-3812128
e-mail: haas@caesar.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A kutatócsoport a Pannon-medence és a környező régiók geológiai felépítésének és szerkezetének megismerése céljából rétegtani, szedimentológiai és tektonikai kutatásokat végzett. A földköpenykonvekció numerikus modellezésével vizsgálták az alsó- és felső-köpeny határán található ásványfázis-átalakulás, továbbá a köpeny és a mag határán lévő „D" zóna hatását a konvekció szerkezetére. Frissítették Magyarország geotermikus adatbázisát. A Pannon-medence nyugati részére vonatkozóan geotermikus modellezést végeztek a kitermelhető geotermikus energia mennyiségének becslése és a kitermelés módjának meghatározása érdekében. Új adatokat gyűjtöttek a földkéreg recens feszültségviszonyainak meghatározásához Magyarországon. Műholdas adatsorokon a geokockázatot meghatározó tényezők nyomon követése céljából módszerfejlesztést folyattak.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Az év folyamán a kutatócsoport munkatársainak közreműködésével elkészült a Magyarország földtanát angol nyelven összefoglaló „Geology of Hungary" c. kézikönyv új, korszerűsített, és bővített kiadásának kézirata, amelynek megjelenését a Spinger Kiadó 2012-ben tervezi. Az Osztrák Földtani Intézet kiadásában megjelentek a Pannon-medence aljzatában és azt körülölelő alpi–kárpáti–dinári hegységvonulatokban ismert triász és jura képződményeket átfogóan bemutató tanulmányok, amelyek elkészítését a kutatócsoport tagjai koordinálták, és amelyek elkészítésében 9 ország kutatói vettek részt.

Az észak-magyarországi triász és jura képződmények rétegtani, szedimentológiai, tektonikai kutatásával kapcsolatos, a közelmúltban lezárult OTKA-program, valamint az e témával kapcsolatban végzett nemzetközi összehasonlító vizsgálatok legfontosabb eredményeit cikkekben foglalták össze. A Rudabányai-hegységben, valamint a Szlovák Karszt területén kapott új szerkezeti, metamorf kőzettani és radiometrikus koradatok alapján elkészítettek egy, a Belső-Nyugati-Kárpátok mezozoos fejlődéstörténetét bemutató rekonstrukciót, melyet a területtel foglalkozó rangos nemzetközi konferencián sikerrel mutattak be. Összefoglaló cikk jelent meg a Pilis-hegység triász karbonátos képződményeinek OTKA-program keretében folytatott vizsgálatának eredményeiről. A dunántúli-középhegységi dolomit kőzetfajták kutatását célzó OTKA-program terepi munkálatai jórészt lezárultak, és megkezdődtek a laboratóriumi vizsgálatok.

A Radiometriai Laboratóriumban folytatódtak az urán-soros kormeghatározások. Az év során folytatták a budai termálkarszt és a Pilis barlangi képződményeinek kormeghatározását e hegységek pleisztocénbeli kiemelkedési ütemének meghatározása céljából. Méréseket végeztek a budai termálkarszt barlangi képződményein a beszivárgó vizek vizsgálata érdekében (ELTE Általános és Alkalmazott Földtan Tanszékkel közösen), valamint folytatódott a gerecsei travertino minták mérése (MTA Geokémiai Kutatóintézettel közösen).

Üregkutatási és tektonikai célú geoelektromos méréseket végeztek a Pilis-hegységben.

Megkezdődött a MTA RMKI-vel történő együttműködés keretében kifejlesztett kozmikus sugárzás detektor (müontomográf) geofizikai alkalmazásainak vizsgálata, a műszer terepi körülmények közötti tesztelése. A műszer képes a felette lévő néhány tíz méter vastagságú kőzet- és talajrétegek „átvilágítására", így alkalmas az ebben a térrészben lévő sűrűség-inhomogenitások detektálására.

A Pannon-medence nyugati részének geotermikus modellezése során közös, egyesített geotermikus adatbázist hoztak létre a szlovák, szlovén és osztrák geológiai szolgálatnál dolgozó kollégákkal. A modellben figyelembe vették a köpenyből a kéregbe lépő hőáramsűrűséget, a kéregben radioaktív bomlással keletkező hőt, és a karsztos aljzatban, valamint az üledékekben zajló vízáramlás hőtér módosító hatását. Kiszámították a kőzetekben 5 km mélységig tárolt hő mennyiségét. Becslést adtak arra, hogy mennyi a középső kéregben a hőáram és annak milyen az eloszlása a területen. Ezt a hőáramot módosítja a felső kéreg kőzeteiben zajló vízáramlás. Az áramlási modell segítségével lehet majd megmondani, hogy a határokkal osztott felszín alatti víztestekből mennyi termálvizet vehetnek ki az egyes országok anélkül, hogy a vízáramlási viszonyokat jelentősen befolyásolnák a szomszédos országban.

A kéregben uralkodó maximális és minimális horizontális főfeszültség irányait fúrólyukfal deformációkból állapították meg. A fúrólyuk falát akusztikus és FMI mélyfúrásgeofizikai mérésekkel lehet leképezni. A fúrólyukfal deformációk (boreholebreak-out és indukált repedések) ezekről a képekről leolvashatók, és a főfeszültség irányok meghatározhatók. 56 mélyfúrás adatainak feldolgozásával kapott irányok összhangban vannak a korábbi, más módszerrel kapott irányokkal. A feszültségviszonyok pontos ismerete hozzájárul a recens tektonikai folyamatok jobb megismeréséhez és a geodinamikai modellek validálásához.

Részt vettek a földi plazmakörnyezet geokockázati folyamatait komplex modellben vizsgáló, 2011-ben indult PLASMON EU-FP7-es projekt (koordinátor: ELTE) tudományos alapkutatás munkapontjai feladatteljesítésében. Aktív naptevékenység idején a sugárzási övek energikus részecskéi légkörbe szóródását monitorozó automata jelfeldolgozó eljárásukat pontosították, a nemzetközi együttműködés keretében működtetett ú.n. AARDDVARK globális hálózat VLF regisztrátumain elsőként alkalmazták. A 2010-ben megkezdett fejlesztés folytatásaként kialakították az orosz (IKI) Chibismikro-műhold − pályára állítás 2012 február, fedélzetén magyar SAS3 adatgyűjtő és DSP jelfeldolgozó egységgel − tudományos adatai földi vételének technikai feltételeit az ELTE műholdvevő állomáson.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Részt vettek a 2011 tavaszán a geológiai oktatással és ismeretterjesztéssel kapcsolatos nemzetközi rendezvény szervezésében. Előadást tartottak az ősszel Miskolcon megrendezett Középiskolai Földtudományi Konferencián, továbbá a Magyar Geofizikusok Egyesülete által szervezett „Új Utak" c. ismeretterjesztő előadássorozat keretében. A jelentős szerepet vállaltak a „Magyar Tudomány Ünnepe 2011" rendezvénysorozathoz kapcsolódó „Földtudományi Forgatag" című interaktív bemutató és az ahhoz kapcsolódó konferenciák szervezésében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatás, az oktatás és a továbbképzés területén aktív együttműködés folyt a MOL Nyrt-vel. 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, valamint az MTA-RMKI gázdetektor-fejlesztő csoportjával. Konzorciális együttműködés keretében dolgoztak az MTA Geodéziai és Geofizikai Kutatóintézettel, elsősorban a hullámterjedési, ELF-VLF vizsgálatok, az űr-időjárás kutatásában.
Osztrák, horvát, szlovák és lengyel partnerekkel működtek együtt geológiai és geofizikai kutatási témákban; együttműködtek az Osztrák-, a Szlovák-, a Szlovén Geológiai Szolgálattal, a potsdami GFZ-vel, valamint Romániában a Maros Megyei Múzeummal. A hullámterjedés és ELF-VLF vizsgálatok terén szoros együttműködésben voltak a következő kutatóhelyekkel: IKI, Izmiran (Oroszország); British Antarctic Survey, Cambridge (UK); Univ. of Otago, Dunedin (Új-Zéland); Univ. of Whashington, Seattle (USA); Univ. of Natal, Durban (Dél-Afrika)

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az év folyamán a kutatócsoport egy tagja a Sr izotópos kormeghatározás alkalmazásával kapcsolatos sikeres OTKA-pályázat (K 100538) kidolgozásában vett részt. A témavezető a Miskolci Egyetem professzora, a széleskörű nemzetközi együttműködéssel tervezett kutatás 2012-ben indul. A TÉT pályázat keretében magyar–lengyel együttműködéssel évek óta folyó paleomágneses kutatások újabb projektjét annak 2010-ben történt elfogadása után 2011-ben újraértékelték és ennek eredményeként a tényleges munka a harmadik negyedévben elkezdődhetett.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Haas J, Kovács S, Gawlick H-J, Grădinaru E, Karamata S, Sudar M, PéróCs, Mello J, Polák M, Ogorelec B, Buser S: Jurassic evolution of the tectonostratigraphic units in the Circum-Pannonian region. Jahrbuch der Geologischen Bundesanstalt, 151/ 3-4, 281–354 (2011)
2. Hips K, Haas J, Vidó M, Barna Zs, Jovanović D, Sudar M, Siklósy Z: Selective blackening of bioclasts via mixing-zone aragonite neomorphism in Late Triassic limestone, Zlatibor Mountains, Serbia. Sedimentology. 58, 854-877 (2011)
3. Collie, A B, Lichtenberger J, Clilverd M A, Steinbach P, Rodger C J: Source region for whistlers detected at Rothera, Antarctica. Journal of Geophysical Research, 116, A03219, doi:10.1029/2010JA016197 (2011)
4. Poros Zs, Mindszenty A, Molnár F, Pironon J, Győri O Ronchi P, Szekeres Z: Imprints of hydrocarbon-bearing basinal fluids on a karstsystem: Mineralogical and fluid inclusion studies from the Buda Hills, Hungary. International Journal of Earth Sciences, published online DOI 10.1007/s00531-011-0677-8 (2012)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ELTE Geológiai, Geofizikai és Űrtudományi Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	7			Ebből kutató[2]:	7
PhD, kandidátus:	6	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				19
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				19
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven:	4
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	11
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	7
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	12,355	Összes független hivatkozás száma:	89
Összes hivatkozás száma[11]:	115		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			2
		poszterek száma:	3
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	6		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			6
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	4	PhD:	1

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:			25 500	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]:	1	Teljes saját bevétel:	8000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:			0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:				4
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			6000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:				3
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			2000	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:				0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:				0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:				0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:			0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:			0	EFt

ELTE PEPTIDKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Hudecz Ferenc, az MTA levelező tagja
1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/A.; 1518 Budapest, Pf.: 32.
telefon: 1-372 2828; fax: 1-372 2620
e-mail: fhudecz@ludens.elte.hu; honlap: http://peptid.chem.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Biológiailag aktív peptidek és peptid konjugátumok tervezése és szintézise, szerkezet-hatás vizsgálatok, terápiás alkalmazás és diagnosztikumok kifejlesztésének céljából. Nagy specifitású peptid-antigének illetve gyógyszerhatóanyagok kifejlesztése sokakat érintő betegségek (pl. tumor, TBC, Alzheimer-kór, reumatoid arthritis) korai diagnózisa és/vagy gyógyítása céljából.

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 *M. 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 fenti betegségekhez kapcsolódó fehérjékből (pl. mucin, glikoproteinek, filaggrin, béta-amiloid), származó és módosított mesterséges peptid alapú "szuperantigének" szintézise diagnosztika, és/vagy szintetikus vakcina kifejlesztése céljából.

Részvétel a felsőoktatásban (BSc-, MSc- és PhD-) előadóként, gyakorlatvezetőként és témavezetőként, a tehetséggondozásban (TDK-témavezetés), a temészettudományos ismeretterjesztésben.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Új, Erb2 receptor ligandum oligopeptidet és daunomicint (Dau) tartalmazó konjugátumot állítottak elő és tanulmányozták hatását olyan tumorsejteken, amelyek eltérő mértékben tartalmaznak Erb2 receptort. A HL-60 humán leukémia sejteken végzett proteomikai vizsgálatok alapján megállapították, hogy a konjugátum vagy szabad Dau kezelt sejtek protein expressziós profilja nemcsak a kezeletlen sejtekétől, de egymástól is jelentős mértékben eltér.

Szintetizálták új, az oxim-kötést tartalmazó GnRH-III hormon Dau konjugátum származékokat. Összehasonlító vizsgálatokban észrevették, hogy a 4-es pozicióban *N*-Me-Ser vagy Lys(Ac) aminosavszármazékot tartalmazó konjugátumok enzimatikus stabilitása kiemelkedő izolált enzimekkel (tripszin, pepszin) szemben illetve humán szérumban és patkány lizoszoma preparátumban. A ^{4}Lys(Ac)-konjugátum jelentős *in vivo* tumorellenes hatást mutatott C26 tumoros egereken.

Előállítottak olyan új antimetabolit típusú tumorellenes szer (pemetrexed) peptid konjugátumokat, amelyekben egyidejűleg van jelen – tandem topográfia szerint - sejtpenetráló sajátságú oktaarginin és bizonyos metasztázisok kialakulásban szerepet játszó E/P-selectin specifikus oligopeptid. Megállapították, hogy a „hibrid" peptidhordozó *in vitro* körülmények között jelentős citotoxikus hatást mutat NCI-H358 humán tüdőkarcinóma sejteken.

Oligopeptid palmitinsavval módosított származékával konjugált izoniazid,(INH) valamint PLGA nanokapszulába zárt változatát állították elő. E vegyületek polaritását, foszfolipid membrán monoréteggel való kölcsönhatást és *in vitro* aktivitását ***M. tuberculosis*** $H_{37}Rv$, baktériumtenyészeteken vizsgálva megállapították, hogy olyan magas hatóanyag tartalmú nanorészecskéket lehet létrehozni, amelyben az INH megőrzi antituberkulotikus hatását.

A reumatoid arthritis kialakulásban fontos szerepet játszó, esetenként Arg helyett Cit-t tartalmazó, fibrin feérje (alfa- és béta lánc) antigénszerkezetét tanulmányozva három immundomináns fehérje epitóprégiót azonosítottak. A megfelelő szintetikus peptid epitópok elleanyagkötődése alapján lehetővé vált a betegcsoportok közötti különbségtétel.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

2011-ben a „Magyar tudomány napja" rendezvényhez, valamint a kémia nemzetközi évéhez kapcsolódóan egy-egy előadás hangzott el a „Kémiai Biztonság Napja" Konferencián (Országos Kémiai Biztonsági Intézet), középiskolákban (Veres Pálné Gimnázium, Szent István Gimnázium) és az ELTE nyilvános tudományos ismeretterjesztő „Alkimia ma" sorozatban. Ünnepi nyilvános tudományos ülésen emlékeztek meg az MTA - ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport megalakulásának 50. évfordulójáról és emléktáblát avattak Bruckner Győző lakóházán. Az ELTE fordított TDK-rendezvényen három előadásra került sor. Cikk jelent meg a Természet Világa folyóiratban, valamint az OTKA Magazinban. Ezenkívül rádió-, ill. TV megkereséseknek tettek eleget. (pl. Klub Rádió – „Többet ésszel"). Elkészült a csoport kutatásait bemutató ELTE interjúfilm is (*http://peptid.chem.elte.hu/interju.html*). A csoport magyar/angol nyelvű honlapja folyamatosan kiegészülve segíti a párbeszédet.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált, élő hazai kapcsolatok: ELTE Szerves Kémiai Tanszék, Szervetlen Kémiai Tanszék, Fizikai Kémiai Tanszék, Immunológiai Tanszék, Számítógéptudományi Tanszék; BME, Szerves Kémiai Tanszék; SE Biofizikai és Sugár-egészségügyi Intézet, Bőr-, Nemikórtani és Bőronkológiai Klinika, Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézet, III.sz. Belgyógyászati Klinika; Országos Epidemiológiai Intézet; Országos Onkológiai Intézet; Országos Korányi TBC és Pulmonológiai Intézet; MTA Kémiai Kutatóközpont, MTA KOKI, MTA SZBK Biokémiai Intézet, Enzimológiai Intézet; ORFI; Fővárosi Önkormányzat Uzsoki utcai Kórház, Metrimed Kft, Soft Flow Hungary Kft, Richter G. Vegyészeti Gyár Rt;
Közös publikációval, kutatási projekttel dokumentált, élő nemzetközi kapcsolatok: Department of Experimental and Health Sciences, Pompeu Fabra University, Barcelona, Spain; Cell Biology, Purpan Medical School, Toulouse III University, France; Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Konstanz University, Germany; Department of Inorganic and Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, Prague, The Czech Republic; Institute of Biochemistry, CNR, Napoli, Italy; University of Ioannina, Ioannina, Greece; Faculty of Health Sciences, University of Cape Town, South Africa.

Vendégkutatóként a csoportban hét látogatót (Institute of Protein Research, CNR, Napoli, Italy; CNRS-Toulouse III, University, France; University of Konstanz, Konstanz, Germany) fogadtak 1–2 hét időtartamra. A csoport nyolc tagja mutatta be eredményeit hét nemzetközi konferencián.

Oktatás: PhD-témavezetés (8 fő, ebből 1 fő védett), diploma-témavezetés (13 fő), tudományos diákköri (TDK) témavezetés dolgozattal (1 fő). Fő- és speciális kollégiumok, gyakorlatvezetés (biológia BSc, kémia BSc, vegyész MSc, környezettudomány BSc), PhD-előadás sorozatok, TDK/szakdolgozat/PhD-dolgozat bírálata, vizsgáztatás. Előadások tanár továbbképzés. ERASMUS Oktatói/Hallgatói Mobilitás (Konstanz University, Helsinki University).

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport további (2012–2016) munkáját segíti az elnyert MTA projekt. Felkérést kaptak egy új EU COST „Chemical approaches to targeting drug resistance in cancer stem cells" kutatásban való részvételre (2012–2015) (MC tag). Két OTKA-program (közreműködő) indult, posztszintetikus fehérje- és lipidmódosulások immunológiai szerepének tisztázására, illetve új típusú ferrocén származékok szintézisére és biológiai vizsgálatára. Egy új OTKA-program indul 2012-ben, amely a komplementrendszer aktiválódási mechanizmusával és élettani szerepe foglalkozik (közreműködő). A csoport 2011-ben is részt vett az ELTE TÁMOP kutatóegyetemi program megvalósításában (peptidkémiai kutatások). Egy ANR-NKTH, valamint három OTKA-programban és egy ETT-programban (mind témavezető) folytatódott a kutatás (tumorellenes hatóanyagok célbajuttatása, *M. tuberculosis* ellenes szerek témakörökben). További három OTKA-programban (neuropeptidek, reumatoid arthritis, LH-RH ligandok) folyt az együtműködés (közreműködő). Ugyancsak folytatódott a munka két NKTH-TéT (magyar–dél-afrikai, magyar–spanyol) és egy MTA–CNR program keretében (mindkettőben témavezető).

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Iobagiu C, Magyar A, Nogueira L, Cornillet M, Sebbag M, Arnaud J, et al. (2): The antigen specificity of the rheumatoid arthritis-associated ACPA directed to citrullinated fibrin is very closely restricted. J. Autoimmun., 37: 263-272. (2011)
2. Kiss É, Schnöller D, Pribranská K, Hill K, Pénzes Cs B, Horváti K, et al. (1): Nanoencapsulation of antitubercular drug isoniazid and its lipopeptide conjugate. J. Dispers. Sci., 32: 1728-1734. (2011)
3. Manea M, Leurs U, Orbán E, Baranyai Zs, Ohlschlager P, Marquardt A, et al. (5): Enhanced enzymatic stability and antitumor activity of daunorubicin-GnRH-III bioconjugates modified in position 4. Bioconjugate Chem., 22: 1320-1329 (2011)
4. Mező G, Herényi L, Habdas J, Majer Zs, Myśliwa-Kurdziel B, Tóth K, Csík G. Syntheses and DNA binding of new cationic porphyrin–tetrapeptide conjugates. Biophys. Chem., 155: 36–44 (2011)
5. Miklán Zs, Orbán E, Bánóczi Z, Hudecz F. New pemetrexed-peptide conjugates: synthesis, characterization and cytostatic effect on non-small cell lung carcinoma (NCI-H358) and human leukemia (HL-60) cells. J. Pept. Sci., 17: 805-811 (2011)
6. Orbán E, Manea M, Marquadt A, Bánóczi Z, Csík G, Fellinger E, et al. (2): A new daunomycin-peptide conjugate: Synthesis, characterization and the effect on protein expression profile of HL-60 cells in vitro. Bioconjugate Chem., 22: 2154-2165 (2011)
7. Pocsfalvi G, Schlosser G: Detection of bacterial protein toxins by solid phase magnetic immunocapture and mass spectrometry. Methods Mol Biol., 739: 3-12 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	9	Ebből kutató[2]:	8
PhD, kandidátus:	7	MTA doktora: 1	Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhezkötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				34
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				25
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	23
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	23
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	65,153	Összes független hivatkozás száma:	168
Összes hivatkozás száma[11]:	239		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD: 1	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			9
		poszterek száma:	27
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	2	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	2
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	12		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			8
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	4
Diplomamunka (MSc):	9	PhD:	8

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	31 400	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 Teljes saját bevétel:	84 100	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	9	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	27 300	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	6	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	45 000	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	11 800	EFt

ELTE STATISZTIKUS ÉS BIOLÓGIAI FIZIKA KUTATÓCSOPORT

Vicsek Tamás, az MTA rendes tagja
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1 A
telefon: 1-372 2795; fax: 1-372 2757
e-mail: vicsek@hal.elte.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A 2011-es év egyszerre volt a az adott pályázati ciklus befejező időszaka, és a következő ciklusra való felkészülés, az építkezés éve is. Ennek jegyében két jelentős kísérleti projekt beindításában is részt vett a csoport. Ezen kívül, a 2011. évi feladatok a korábban megkezdett kutatások eredményeinek fontos nemzetközi folyóiratokban való publikálása, és az esetenként hozzájuk társuló programcsomagok fejlesztése voltak. A kutatócsoport tagjai aktívan részt kívántak vállalni az ELTE Fizika szakoktatási tevékenységében, amelyet sikerrel teljesítettek. 2010-ben több új projekt indult be, és cél volt, hogy ezek eredményeiből már 2011-ben cikkek szülessenek.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Jelentős lépések történtek a kutatócsoport által, Lovász László professzor együttműködésével 2010-ben bevezetett multifraktál alapú hálózatgeneráló továbbfejlesztésében. Ezen megközelítés lényege, hogy a legyártandó véletlen gráf struktúrája egy hierarchikus, önhasonló mérték (multifraktál) segítségével kerüljön kódolásra. A modell nagy előnye, hogy a generáló mérték paramétereinek módosításával a kapott véletlen hálózat tulajdonságai rendkívül széles skálán változtathatók. A korábbi eredmények viszont azt is megmutatták, hogy a végtelen rendszerméret határesetében az izolált csúcsok aránya a generált hálózatban 1-hez tart az esetek túlnyomó többségében. Bár ez az effektus elhanyagolható realisztikus méretskálán és gyakorlati szempontból nem okoz problémát valós hálózatok modellezésénél, a jelenség elméleti háttere számos érdekes kérdést vetett fel. A kutatócsoport 2011-es kutatásai megmutatták, hogy az effektus bekövetkezése a generáló mérték egy kitüntetett, 1 dimenziós projekciójának tulajdonságaitól függ. Ennek alapján megadtak egy egyszerű módszert, mely a generáló mérték elforgatásán alapszik és lehetővé teszi a csúcsizolációs effektus kiküszöbölését.

A kutatócsoport által korábban kidolgozott, és évek óta folyamatosan karban tartott Cfinder szoftverhez kapcsolódóan további fejlesztéseket végeztek. A felhasználói visszajelzések alapján egyre növekvő az igény igen nagy hálózatok klaszterezésére. Ezek a hálózatok méretüknél fogva már nem kezelhetőek egyetlen számítógép memóriájában, ezért a klaszterezési feladatot kisebb részenként kell elvégezni. A csoport kidolgozott egy eljárást, mely a hálózat feldarabolásával lehetővé teszi a klaszterezési feladat szétosztását több számítógépre.

A külső együttműködők és a kutatócsoport által létrehozott SignaLink jelátviteli adatbázis segítségével sejten belüli jelátviteli útvonalak résztvevő fehérjéire tettek előrejelzést három szervezetben (*C. elegans, D. melanogaster, H. sapiens*). Az eredmények elérhetőek a http://signalink.org/signalog web címen található kereső segítségével. Szekvencia adatbázisokból ismert szekvencia hasonlóság segítségével *C. elegans* esetében 88, *D.*

melanogaster esetében 92 és ember esetében 73 ismert fehérje került felsorolásra, mint valószínű jelátviteli útvonal tag. A kapott eredmények kísérletes ellenőrzéseként a kutatócsoport együttműködői (az ELTE Genetika tanszékén) megvizsgáltak 6 olyan fehérjét, amely az előrejelzések szerint a *C.elegans* Notch jelátviteli útvonalának tagja. A kísérletes eredmények igazolták mind a 6 fehérje működését a Notch útvonalban.

A részecskefizikához kapcsolódó három témakörben értek el eredményeket. Ezek a neutrínó-müon pár kvantumos összefonódás időbeli fejlődésének tárgyalása, az U(n)xU(n) szimmetriájú mezon modell alapállapotának meghatározása a nagy-n kifejtésben, ill. az egykomponensű valós skalártér nulla hőmérsékletű propagátor és a vákuum-várhatóértékre vonatkozó renormált egyenletrendszer nagy pontosságú numerikus euklideszi megoldása. Egy kutatójuk a kutatócsoporthoz kapcsolódó munkák alapján sikeresen megvédte a PhD-fokozat elnyerésére céljával az ELTE Doktori Tanácsának benyújtott értekezését. A főbb eredmények tömören:

1. Kvantummechanikai hullámcsomag konstrukcióban tárgyalták a szupernóva robbanásokban keletkező töltött pionok leptonos bomlásából származó neutrínók terjedése és detektálása során fellépő kvantumos összefonódási hatásokat.

2. Az U(n)_L x U(n)_R szimmetriájú mezonmodellben megmutatták, hogy nagy-n komponensszám esetén az U(n)_L x U(n)_R –> U(n)_V szimmetriasértő alapállapot mellett létezik egy további U(n)_V–> U(n-1)_V sértést mutató metastabil állapot, amely megfelelő explicit szimmetriasértés alkalmazásakor a rendszer abszolút energiaminimumát valósítja meg, és újszerű értelmezést kínál a pion-kaon tömegfelhasadás kialakulására.

3. Az egykomponensű valós skalártérre alkalmazott 2PI formalizmus impulzusfüggő sajátenergiához vezető közelítésében numerikusan ellenőrizték az ellentagokkal, illetve a renormálási feltételekkel végesített, a propagátor- és a vákuum-várhatóértékre vonatkozó, csatolt egyenletrendszer nulla hőmérsékletű euklideszi megoldásának ekvivalenciáját. Megmutatták, hogy az iteratív megoldás konvergenciájának gyorsasága növelhető az ellentagok iteráció során történő fejlesztésével.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai aktív részt vállaltak a tudományos ismeretterjesztés területén. Rádió- és TV-interjúkat adtak legújabb eredményeikről. Ismeretterjesztő konferenciákon tartottak előadásokat. A kutatási eredmények felhasználását segítendő, a korábban kifejlesztett CFinder szoftverhez folyamatos szoftver-támogatást ad a csoport. A tavalyi évtől egy publikus, online felületen is kipróbálható a CFinder. Az e-mailes megkeresések alapján a szoftvert a legkülönbözőbb területeken használják, úgy, mint diákprojekteket, biológiai és társadalomtudományi elemzéseket, vagy akár terrortámadások elemzését is.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport szoros együttműködésben van több hazai és külföldi kutatóhellyel.

Hazai együttműködések:
Különböző kutatócsoportokkal, az alábbi intézményekből: MTA KOKI, MTA RMKI, TEXTREND kutatói konzorcium tagjaival, továbbá, közös kutatások kezdődtek: szóasszociációs hálózatok – Nyugat-magyarországi Egyetem, pszichológiai jellemzők hálózata – Károli Gáspár Református Egyetem részvételével.

Nemzetközi együttműködések:
- Northeastern Univ. USA csoportjával.
- Háromoldalú kutatási együttműködést folytattak a Graz-i Karl Franzens Egyetem és a zágrábi Rudjer Boskovic Intézet, valamint a Zágrábi Egyetem kutatóival.
- Los Alamos National Laboratory.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben nem nyertek el új pályázati támogatást. Ez nem jelentett problémát több jelentős futó pályázatuk tükrében.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Palla G, Pollner P, Vicsek T: Rotated multifractal network generator. J. Stat. Mech. P02003 (2011)

2. Tarcai N, Virágh Cs, Ábel D, Nagy M, Várkonyi P L, Vásárhelyi G, Vicsek T: Patterns, transitions and the role of leaders in the collective dynamics of a simple robotic flock. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 5: 04010 (2011)

3. Fejős G, Patkós A: Spontaneously broken ground states of the U(n)_L x U(n)_R linear sigma model at large n. Phys. Rev. D84: 036001 (2011)

4. Fejős G, Szép Zs: Broken symmetry phase solution of the phi^4 model at two-loop of the Phi-derivable approximation. Phys. Rev. D84: 056001 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ELTE Statisztikus és Biológiai Fizika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	5			Ebből kutató[2]:	5
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					3
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				11
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				9
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	85	Összes független hivatkozás száma:	1514
Összes hivatkozás száma[11]:	1581		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	1	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			12
		poszterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	3		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			5
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	5	PhD:	7

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		28 000	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0	Teljes saját bevétel:	84 400	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			4
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		5300	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		4100	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		75 000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

ME ANYAGTUDOMÁNYI KUTATÓCSOPORT

Roósz András, az MTA rendes tagja
3515 Miskolc-Egyetemváros, Anyagtudományi Intézet
telefon: 46-565 111/1543; fax: 46-565 201
e-mail: femroosz@gold.uni-miskolc.hu; honlap: http://www.matsci.uni-miskolc.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A pályázatban szereplő feladat:
– Tömbi rézalapú amorf fémek (finanszírozó: MTA)
– Anyagtudományi szimuláció (fiatal kutató feladata, finanszírozó: MTA)
A pályázaton kívüli munkák:
– Mágneses keverés hatása a kristályosodó szerkezetre (finanszírozó: MÜI, ESA)

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Réz alapú tömbi amorf ötvözetek létrehozása és fejlesztése
A Cu-Zr-Ag-Al ötvözetcsaládhoz új ötvözőket adagoltak, például a szkandiumot és vizsgálták az elérhető amorf rész vastagságát, valamint az amorf/nanokristályos kompozitok keménységét. Az amorf/nanokristályos anyagoknál fontos az amorf térfogathányad meghatározása, a kutatócsoporton belül fejlesztettek Java nyelven egy programot, mellyel a röntgendiffrakciós felvételek kiértékelésével meghatározható gyorsan az amorf hányad. A Cu-Zr-Ag ötvözetcsaládban megjelenő olvadékszétválásról megállapították, hogy stabil, és a likvidusz felületen méréssel és számítással meghatározták a határait. A Cu-Zr-Ag ternér ötvözet likvidusz felületének pontosabb meghatározása, a diagramban szereplő „m” fázis azonosításához szükséges vizsgálatokat elvégezték.

A csoport a $Cu_{60}Hf_{30}Ti_{10}$ összetételű ötvözet leöntött ékpróbáinak vizsgálatát végezte. Már pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálattal megállapítható volt, hogy az ékek inhomogén szerkezetűek, Hf-ban dús részek láthatók. Új, különböző összetételű mester ötvözetek ívfényes olvasztására került sor. A cél az volt, hogy megállapítsák, milyen közel egyensúlyi fázisok kristályosodnak az ötvözetben, amelyeknek csíraképződését meg kell akadályozni gyors hűtés során, hogy amorf állapotú darabot kapjanak. A mester ötvözetből mintákat munkáltattak ki a különböző vizsgálótechnikákhoz: SEM-EDX, XRD, DSC és TEM. A DSC mérésekkel megállapították az új összetételek likvidusz és szolidusz hőmérsékleteit (T_L, T_S). Ezeken a próbadarabokon is végeztek szövetszerkezet vizsgálatot, amelyet összevetettek a mester ötvözetek szerkezetével. A vizsgálatok során új ternér fázisok kristályosodását figyelhették meg, amelyekről az irodalomban nem találhatók adatok. A fázisok azonosítása, rácsszerkezetének, tércsoportjának megállapítása TEM vizsgálatokkal folyamatban van.

A pormetallurgiai úton történő amorf/kristályos próbadarabok előállításánál a Cu-Zr alapanyagú préselt darabok optimális szinterelési körülményeit meghatározták, amellyel az amorf mennyiség nem vagy csak kis mértékben változott. A színterelt próbák mechanikai tulajdonságait vizsgálták. Új alapanyag, a Cu36Zr48Ag8Al8 őrlését kezdték meg. A 9 órás őrlést követően 98%-ban volt amorf szerkezetű a por a röntgendiffrakció alapján. A pásztázó elektronmikroszkópos felvételek néhány mikronos nagyságú kristályokat mutattak. Az 1 GPa hidegsajtolást követően a darabokat különböző hőmérsékleten színterelték.

Az elért tudományos eredményeket nemzetközi konferenciákon mutatták be, és nemzetközi folyóiratokban publikálták.

Mágneses keverés hatása a kristályosodott szerkezetre (finanszírozó ESA)
Anyagtudományi szimuláció

Az ESTPHAD módszer fejlesztését végezték annak érdekében, hogy három- és négyalkotós fémes rendszerek esetén is jó közelítéssel számíthatóak legyenek a likvidusz és szolidusz felületek, valamint a megoszlási hányados. Elsőként a kétalkotós rendszereknél működő egyenletekből kiindulva a többalkotós rendszerek számításaihoz használt egyenleteket definiálták. A konkrét számítások során az Al-Si-Fe ötvözetrendszer egyensúlyi fázisdiagramjának alumíniumban gazdag sarkának feldolgozását végezték. A likvidusz és szolidusz felületek nagy pontossággal számíthatóak. Az ESTPHAD módszer a többalkotós rendszerek megoszlási hányadosának számítására is alkalmas, de a pontosságon javítani kell még.

Az ESPHAD módszer eredményeit 2 konferencián mutatták be, és 3 alkalommal jelent meg publikáció (folyóiratban, konferencia kiadványban és a Miskolci Egyetem kiadványában)

Új módszereket dolgoztak ki, melyekkel pontosabb modellszerkezeteket tudtak létrehozni. A kiinduló szerkezetek finomítása fontos feladat, mert az a csíraképződésre (befolyásolja a különféle csíraképződési helyek számát) és a csíranövekedésre (a töredezett lemezek miatt könnyebben, több irányba is képes növekedni az ausztenit) is hatással van, ezáltal a teljes folyamat szimulációiból pontosabb eredményeket kaptak.

Az űrkísérleteknél is használatos Al7Si1Fe ötvözeteken (átmérő 8 mm, hossz 120 mm) előkísérleteket végeztek földi körülmények között a forgó, nagy mágneses térrel ellátott irányított kristályosító berendezésükben. Ennek során a forgó mágneses tér egy próbán belüli többszöri be- és kikapcsolása közben lejátszódó tranziens folyamatokat vizsgálták, különböző kristályosítási paraméterek mellett (próba-mozgatási sebesség, hőmérséklet gradiens, mágneses indukció). A próbák hosszcsiszolati szövetszerkezetének kiértékelése során megállapították a be- és kikapcsolási tranziens jelenségeket a mágneses tér függvényében. Javaslatot tettek a MICAST csoport tagjai felé az űrkísérletekre vonatkozóan az egy próbán belül, többféle paraméterrel maximálisan elvégezhető kísérletek darabszámára.

A nemzetközi űrállomáson az öt darab próbával (Al7Si1Fe), különféle paraméterekkel végrehajtott kristályosítási kísérletek próbái közül a 4 jelű próba (v = 0,02 mm/s, G= 2 K/mm) 30 mm hosszú, a mágneses tér bekapcsolási helyét is magába foglaló metszetét kapták meg szerkezetvizsgálat céljából. A kristályosított darab hosszcsiszolatán hossz- és keresztirányban a szekunder dendritág távolság, valamint az eutektikum térfogat-százalékos mennyiségének mérését végezték el képelemző berendezéssel, illetve hossz- és keresztirányban mikroszondás (EDS) elemzéseket hajtottak végre a Si és Fe ötvözőelemek koncentrációjának meghatározására.

A kétalkotós ötvözetekre kidolgozott fél-analitikus mikroszerkezeti modell és szoftver továbbfejlesztését kezdték el háromalkotós ötvözetek kristályosodásának számítására.

A mikromodellt jelenleg a Prof. Foutrelle csoport áramlási számításával kapcsolják össze. A Kristályosító Csoport (SGMU) foglakozik az olvadékáramlás számításával a „FLUENT" szoftver felhasználásával (ezt a programcsomagot használja a Prof. Foutrelle csoport is). Első eredmények az olvadt galliummal végzett kísérletekhez kapcsolódnak, amely kísérletekben a fal hatását vizsgálták az áramlás sebességére.

Elkezdődtek egy új, haladó mágneses teret (TMF) előállító kristályosító berendezés tervezési munkálatai.

b) Párbeszéd a tudomány és társadalom között

A „Kutatók éjszakája” rendezvénysorozat kiemelkedő lehetőséget biztosít a kutatócsoport számára, hogy bemutassa tevékenységét és közelebb hozza a hétköznapi embereket az elméleti kutatás szférájához. A Miskolci Egyetem fő szervezésében zajló rendezvényen az amorf vagy amorf/nanokristályos fémek általános bemutatása mellett, az amorf anyagok készítését is kipróbálják az érdeklődők. Másik kitűnő lehetőség a kapcsolatteremtésre az egyetem nyílt napja, ahol a jórészt a középiskolásokkal és szüleikkel tudnak kommunikálni. A kutatócsoport tagja a Miskolci Egyetemet segítve ellátogatnak középiskolákba az egyetem bemutatása céljából. A kutatócsoport részt vesz a középiskolásoknak rendezett tanulmányi versenyen, amelynek fő szervezője a Műszaki Anyagtudományi Kar, ahol a kutatócsoport székhelye is megtalálható. A kutatócsoport vezetője több rádió- és televízióadásban ismertette a csoport munkáját.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport tagjai részt vesznek a Miskolci Egyetem teljes körű tevékenységében, az oktatás, a beiskolázás, a tudományos programok szervezése. A Kerpely Antal doktori iskolával szorosan együttműködve meghirdették az amorf fémek tudományterületet, amelyre várják a fokozatot szerezni kívánó hallgatók jelentkezését. A MICAST kutatási projektben együtt dolgoznak több egyetemmel és kutatóhellyel, úgymint az ACCESS eV, Aachen, Germany, a Cirimat, Toulouse, France, a SIMAP/EPM, Grenoble, France, a Institute of Materials Physics in Space, DLR, Germany, a Crystal Growth Laboratory, és a University of Victoria, BC, Canada. A BAY-NANO kutatóintézettel együttműködésben nagyfelbontású, átvilágításos elektronmikroszkóppal végeztek vizsgálatotokat az amorfizált ötvözeteken.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Pályázatok: Europea Space Agency: 240.000 EURO (80.000 EURO/év) „Microstructure Formation in Casting of Technical Alloys under diffusive and Magnetically Controlled Convective Conditions”.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Janovszky D, Tomolya K, Sveda M, Roosz A: Survey of BGFA criteria for the Cu based bulk amorphous alloys., Journal of Metallurgy 2011: Paper 895146 (2011)
2. Roósz A, Karacs G: Simulation of Austenitization Processes in Fe-C Steels by Coupled Cellular Automaton and Finite Difference Methods, Journal of ASTM International, Vol. 8, No. 3 (2011)
3. Karacs G, Roósz A: Az ausztenitesedés részfolyamatainak szimulációja sejtautomatával és Véges Differencia módszerrel ötvözetlen acélokban, XXIV. Hőkezelő és Anyagtudomány a gépgyártásban országos konferencia, Balatonfüred (2010. október 6-8.) 38-45 (2011)
4. Mende T, Roósz A: Egyensúlyi fázisdiagramok nonvariáns pontjainak nagy pontosságú számítása ESTPHAD módszerrel, Bányászati és Kohászati Lapok Kohászat, 144. évf. 3. sz 47-50. (2011),
5. Mende T, Roósz A: A mérési adatok szerepe az ESTPHAD fázisdiagram számítási módszerben, Gyergyószentmiklós, Bányászati, Kohászati és Földtani Konferencia, konferencia kiadvány, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, 100-104 (2011)
6. Mende T, Roósz A: A mérési adatok szerepe az ESTPHAD fázisdiagram számítási módszerben, Anyagmérnöki Tudományok, Miskolc, 36/1: 123-130 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ME Anyagtudományi Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	8	Ebből kutató[2]:	7
PhD, kandidátus:	5 MTA doktora: 0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			5

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				7
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				4
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	2	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	2
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	0	Összes független hivatkozás száma:	44
Összes hivatkozás száma[11]:	47		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			8
		poszterek száma:	12
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			7
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	6

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	24 300	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	24 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	24 000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

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 2011-ben

Az MTA-ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport elsődleges feladata változatlanul olyan termelési, geotechnikai és környezetvédelmi technológiák megalapozása, amelyek lehetővé teszik a természeti erőforrások megkutatását és az azokkal történő nagyfokú, gazdaságos gazdálkodást, az importfüggőség csökkentését és az ellátottság nemzetgazdasági szintű javítását. Módszertani szempontyból a tervezett kutatási feladatok megtartják interdiszciplináris jellegüket és egységet képeznek a különböző tudományágak között. A kutatócsoport K+F tevékenységének súlypontját 2011-ben az alábbiak képezték:

A konvencionális és nem konvencionális szénhidrogének hatékony kitermelését biztosító eljárások fejlesztése, valamint a bányászai és kémiai tudományok szintézisét megalapozó kutatások keretében olaj- és gáztermelő kutak környezetében az áramlási profilok javítását és a szelektív fluidumkizárást biztosító, nanotechnológiai alapú, új kémiai eljárások kidolgozása, továbbá a térfogati elárasztási és a mikroszkopikus kiszorítási hatásfokot egyidejűleg növelő kémiai módszerek mezőbeli kísérletének előkészítése.

A természeti erőforrások feltárását, rezervoárgeológiai adatok pontosítását és általános geotechnikai módszerek támogatását célzó geofizikai kutatások területén a transzformációs módszerek továbbfejlesztése, különös tekintettel a közvetlen, mezőbeli adatbázisok feldolgozására, a megbízhatóság növelésére. Új eljárások kidolgozása a sekély mélységű geológiai formációk és mesterséges szerkezetek megismerésére és az új létesítmények létrehozásához szükséges terület előkészítési tevékenységének támogatására.

A geotechnikai módszerek és integrált technológiák fejlesztése és környezeti hatásainak komplex értékelése területén a szén és lignit bázisú energiatermelés hatékonyságát növelő technológiák kritikai elemzése, a felszíni bányászati tevékenység környezetkárosító hatásait korlátozó megoldások elméleti megalapozása, a vízszintsüllyesztéssel és a kiemelt víz likvidálásával kapcsolatos lehetőségek sokoldalú elemzése és a rekultivációs variánsok rögzítése.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kőolaj és földgáz hazai felhasználásának szerkezetét áttekintve megállapítható, hogy Magyarország az Európai Unió legimportigényesebb országa. Az import aránya mind a kőolaj, mind a földgáz esetében meghaladja a 80%-ot és ez az arány a jövőben tovább fog növekedni. Így alapvető érdek fűződik a megkutatott olajpalák energetikai célú hasznosításához. A K+F program keretében ezért kiterjedt laboratóriumi vizsgálatok folytak a különböző helyről származó (nagyvázsonyi, gércei és egy észtországi) olajpala energetikai célra történő hasznosíthatóságának meghatározására. A vizsgálatok során megállapítást nyert, hogy a szerves kötésben lévő széntartalommal korrelálható módon az olajpalák kalorikus fűtőértéke három olajpala esetében 5000−5800 kJ/kg közötti, míg a Nagyvázsony 1 és a Gérce olajpalák fűtőértéke nem haladta meg az 1000 kJ/kg értéket. Kimutatásra került, hogy bár az olajpalák hamutartalma 60−80 % közötti, szoros korreláció a hamutartalom és a fűtőérték között nincs. Tekintettel arra, hogy a nagy szervesanyag-tartalmú olajpalák

érdemleges fűtőértékkel rendelkeznek és energetikai célú (adalékként való) felhasználásuk perspektivikusnak tekinthető, az olajpalák előzetes vizsgálati eredményeit további, részletekbe menő mérésekkel kell megerősíteni, illetve a vizsgálat körét további, hazai olajpala előfordulásokra is ki kell terjeszteni.

Az elmúlt években számos nem konvencionális szénhidrogén tárolóból származó kőzetminta kőzetfizikai vizsgálatára került sor. A Hg- és He-porozimetriás és áramlási vizsgálatok eredményeként nyilvánvalóvá vált, hogy a vizsgált kőzetek elfogadható mértékű porozitás mellett rendkívül kicsi mikro-, illetve nano-Darcy nagyságú áteresztőképességgel rendelkeznek. A rendkívül kis áteresztőképesség oka a kőzetek pórusszerkezetében a nm átmérőjű póruscsatornák nagy számában keresendő. A nanoméretű póruscsatornákban lejátszódó gázáramlás vizsgálatára alapozva megállapítást nyert, hogy a hagyományosan figyelembe vett Darcy jellegű áramlás mellett a transzport folyamatokban számos más tényező, elsősorban a diffúzió is jelentős szerepet játszik. Az elmondottakat figyelembe véve, és a mérési eredmények alapján egy új áramlási modell megalkotására került sor, amely alkalmas a nem konvencionális tároló rétegekben lejátszódó áramlási folyamatok elméleti értelmezésére. A tömött gáztárolókban lejátszódó nem Darcy jellegű áramlás bizonyítása meghatározó jelentőségű a gáztermelő kutak produktivitásának alakulásában és ez a tény behatárolja a hazai előfordulások (Makói árok) igen jelentős készletének ipari hasznosítását.

A tárgyévben folytatódott a geofizikai mérési adatokban foglalt földtani információ „kiolvasására" szolgáló inverziós módszerek fejlesztése. A korábban publikált inverziós filozófiát folytatva, a módszer alkalmazási területének kiterjesztésével és sorfejtéssel olyan diszkreditált (globális) inverziós módszer megalapozására került sor, amely lehetővé teszi az indukált polarizációs adatok megbízható feldolgozását. Az új eljárás teljesítőképessége valós terepi adatok felhasználásával messzemenően bizonyított. A mélyfúrási geofizikai adatok értelmezésére kidolgozott, ún. intervallum inverziós eljárás a texturális paraméterek (cementációs kitevő, tekervényesség, szaturációs kitevő) in-situ meghatározására is alkalmasnak bizonyult. Az eljárás újdonsága nyilvánvaló, annak tükrében, hogy az iparban jelenleg elterjedten használt módszerekkel az említett texturális jellemzők nem, vagy csak közvetetten határozhatók meg.

Az általános vízpolitika területén a közösségi fellépés kereteit az EU Víz Keretirány Elv, a Duna-vízgyüjtő terület magyarországi részére vonatkozóan a Vízgyűjtő Gazdálkodási Terv határozza meg. Ez utóbbi keretében került sor a visontai és bükkábrányi külfejtések határterületén (Tarna, Bükk és Borsodi Mezőség, valamint a Hevesi Sík Alegység) a sekély víztestek állapotának vizsgálata. Enne indoka, hogy az említett víztestekből évente 58–60 Mm^3 víz kitermelésére kerül sor, amelyen belül 60% a bányászat víztermelés. A projekt keretében meghatározásra került a kitermelt víz ivóvízként, ásványvízként, ipari vízként és mezőgazdasági vízként (öntözés, haltenyésztés) való hasznosításának lehetősége. A kapott adatok (vízminőség, -hozam) alapján megállapítást nyert, hogy a bányavizek vas- és mangán mentesítés után széleskörűen alkalmasak kommunális és ipari hasznosításra.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai számos átfogó jellegű előadást tartottak, illetve összefoglaló anyagokat készítettek az ország energiastratégiájával foglalkozó szakmai és ismeretterjesztő fórumokon (MTA Energia Stratégiai Bizottság, Energia Klub, MOL Szabadegyetem, MTA-MAB rendezvények, stb.). Az előadások középpontjában az ország középtávú energiaellátásának általános kérdései, a várható energiamix előrejelzése és az általános társadalmi elvárások elemzése állt. Számos ismeretterjesztő előadás hangzott el a CO_2 befogás és geológiai formációkban történő elhelyezésének, általában az alternatív, megújuló energiaforrások hasznosításának műszaki-gazdasági és társadalmi kérdéseivel.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

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.

Oktatási és kutatási együttműködés a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kar tanszékeivel a földtudomány és a bányászati tudományok területén valamennyi kutatott témakörben.

Együttműködés a MOL Nyrt. Upstream divízióval a kihozatali hatásfok növelését célzó elárasztási és rétegkezelési technológiák kidolgozása, és a hazai szénerőművek hatékony üzemeltetésével és környezetvédelmi kérdéseivel kapcsolatos témakörben.

Universita degli Studi „La Sapienza" Roma, Olaszország és Aalto University Helsinki, Finnország, felsőoktatási intézményekkel a korszerű inverziós geofizikai módszerek fejlesztése a nagy- és sekély mélységű geológiai szerkezetek feltárása céljából.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Turai E, Dobróka M: Data Processing Method Developments Using TAU-Transformation of Time Domain IP Data, Acta Geodaetica et Geophysica Hungarica, 46(3): 283-29 (2011) DOI: 10.1556/AGeod.462011.3.1
2. Dobróka M, Szabó N: Interval Inversion of Well-Logging Data for Objective Determination of Textural Parameters, Acta Geophysica, 59(5): 907-934 (2011) DOI: 10.2478/s11600-011-0027z
3. Lakatos I, Bódi T, Lakatos-Szabó J: Detrimental Effect of Wettability and Capillary Forces in Tight Sand and BCGA Reservoirs, Conference Proceedings of 16th European Symposiumon Improved Oil Recovery, Resources to Reserves: From Promise to Reality, pp. 12., Cambridge, UK, A 21, 12-14 April 2011., EAGE, European Association of Geoscientists and Engineers
4. Lakatos I, Lakatos-Szabó J, Kosztin B, Al-Sharji HH, ALI E, A. A. R. Al-Mujaini A A R. Alalawi N: Application of Silicate/Polymer Water Shut-Off Treatment in Faulted Reservoirs with Extreme High Permeability, SPE Paper 144112, Proceedings of 9th SPE European Formation Damage Conference, Formation Damage Technologies: Road to the Future, pp.12, Noordwijk, The Netherlands, 7-10 June 2011, www.spe.org/events/efdc
5. Lakatos I, Bódi T, Lakatos-Szabó J, Szentes G: PVT Properties, Wettability and Capillary Forces in Unconventional Gas Reservoirs: Topics Rarely Visited, SPE Paper 148157, Conference Proceedings of SPE Reservoir Characterisation and Simulation Conference and Exhibition (RCSC), (Modelling Advances to Optimise Production and Recovery), pp. 12., Abu Dhabi, UAE, 9-11 October 2011, www.spe.org/events/rcsc
6. Kovács F: Víztermelő kutak hozamváltozása lignit külfejtésekben, A Miskolci Egyetem Közleményei, A sorozat, Bányászat, 80: 197-203 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: ME Műszaki Földtudományi Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]: 8 Ebből kutató[2]: 6
PhD, kandidátus: 5 MTA doktora: 0 Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]: 0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]: 5

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]: 5
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]: 5

Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	2
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	1
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	1	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]: 1,866 Összes független hivatkozás száma: 4
Összes hivatkozás száma[11]: 4

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]: PhD: 0 MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0 külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]: 2
poszterek száma: 1
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 4 Nemzetközi folyóirat szerk. tagság: 2
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 6

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]: 7
Témavezetések száma: TDK munka: 2 Diplomamunka (BSc): 12
Diplomamunka (MSc): 5 PhD: 5

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]: 11 600 EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel: 0 EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel: 0 EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma: 0
A tárgyévre vonatkozó bevétel: 0 EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel: 0 EFt

MTM ELTE PALEONTOLÓGIAI KUTATÓCSOPORT

Vörös Attila, az MTA rendes tagja
Budapest VIII., Ludovika tér 2.; 1431 Budapest, Pf.: 137.
telefon: 1-210 1075, 1-338 3905; fax: 1-338 2728
e-mail: voros@nhmus.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A kutatócsoport hosszú távú feladata alapkutatások végzése a bioszféra nagy változásainak elemzése céljából. A beszámolási év fő feladatai voltak:

- Mezozoós kihalási események szinoptikus őslénytani és stabil izotópos vizsgálata.
- Középső-triász Ammonoidea és Ostracoda faunák taxonómiai feldolgozása.
- A mezozoós Radiolaria evolúció a paleooceanográfiai változások tükrében.
- Az iharkúti késő-kréta fauna összehasonlítása más, európai kréta kontinentális faunákkal.
- A Kárpát-medence kvarter emlősfauna közösségeinek paleoökológiai vizsgálata.
- Magashegységi tavak késő-negyedidőszaki üledékszelvényeinek komplex őskörnyezeti és paleoklimatológiai vizsgálata.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Kimutatták, hogy az ammonoideák körében a perm-végi bioszféra katasztrófát követő kora-triász diverzifikációt egy még jelentősebb középső-triász felvirágzás követte. Ennek pontosabb (szubzóna szintű) vizsgálathoz nagy adatbázist hoztak létre, észak-amerikai és tethysi lelőhelyek alapján. A diverzitási maximum a késő-anisusiban volt.

Kimutatták, hogy a triász-végi kihalás kiváltó oka, a Közép-Atlanti Magmás Provincia vulkáni tevékenysége, tengeri triász/jura határszelvényből is igazolható. Agyagásványok segítségével sikerült jellemezni a kapcsolódó környezetváltozást és felmelegedést is.

A Dinári Ofiolitöv triász radiolaritjainak vizsgálatával megerősítették azt a feltételezést, hogy a Neotethysben a riftesedési folyamat már az anisusi végén megkezdődött. A Neotethys nyugati övén belül ez a legidősebb koradat. A Darnó és Szarvaskő komplexum vizsgálatával újraértelmezték az észak-magyarországi radiolaritok képződési körüményeit, és a korai riftesedési folyamatok dátumát.

A Dunántúli-középhegység több ezer példányból álló Lytoceratina (ammonoidea) faunájának vizsgálata során új fajokat és 5 genuszt sikerült elkülöníteni, melyek közül a Perilytoceras a Mediterrán Faunaprovinciára nézve új. A jura Lytoceratinák diverzitási maximuma a Bakonyban a bajoci, a Gerecsében a toarci és aaleni emeletekre esik.

Elvégezték az iharkúti ásatások során előkerült újabb Theropoda leletek revízióját. Igazolták azt a hipotézist, hogy a késő-kréta Európa szigetvilágában a gondwanai eredetű Abelisauridae Theropodák igen fontos szerepet játszottak.

Egy újonnan gyűjtött Pteroszaurusz koponyaelem fontos információt adott az iharkúti faunában élt Bakonydracogalaczi koponyájáról.

Az iharkúti Rhabdodontidae dinoszaurusz anatómiai és hisztológiai vizsgálatával tisztázták ennek az endemikus családnak az eredetét és leszármazási kapcsolatait.

Az iharkúti albanerpetontid leletek részletes leírása mellett átfogó képet adtak az európai késő-kréta kétéltű faunákról. Az Iharkúton gyűjtött korongnyelvű (Discoglossidae) béka leletek közül új taxonokat mutattak ki.

Kimutatták, hogy a Foraminifera vázak anyagán végzett mérések alapján a markáns $\delta^{18}O$ pozitív anomália az összes szelvényben megjelenik az eocén/oligocén határ közelében. Szárazföldi gerincesek fogzománcán mért oxigén izotóp adatok markáns szárazföldi lehűlést és/vagy csapadékos időszakot jeleznek az eocén/oligocén határon. A kainozoikum egyik legjelentősebb klímaváltozását a Paratethys régióban is igazolták.

A süttői 16, 17 és 19 lelőhelyek vizsgálatával megállapították, hogy a kora-pleisztocénben a mainál melegebb, száraz klíma, a középső-pleisztocénben sztyepp, illetve erdős sztyepp vegetáció, a késő-pleisztocénben hűvös, csapadékos, illetve meleg és szárazabb klíma váltakozása volt jellemző.

A Déli-Kárpátokban végzett őskörnyezeti és paleoklíma kutatás során kimutatták, hogy 14500 és 11600 évvel ezelőtt, a késő glaciális és holocén felmelegedések kezdetén a vizsgált gleccsertavakban jelentős produktivitás növekedés következett be, mely a gröndlandi jég által jelzett felmelegedéshez képest 100-300 éves késést mutat. A Driász lehűlés (12800-11600 évek közt) minimális hatással volt a helyi kumulatív hőösszegre. A fahatár rekonstrukciója alapján a koraholocénben erős nyári középhőmérséklet növekedés mutatható ki.

Az említett iharkúti dinoszaurusz kutatások eredményei pótolhatatlan értékekkel gazdagítják a *nemzeti kulturális örökséget*, a negyedidőszaki paleoklimatológiai eredményeknek pedig a *természetvédelmi* döntéshozók számára lehet nagy jelentősége.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai nyilvános eseményeken és 15 ismeretterjesztő előadáson számoltak be kutatásaikról. Az iharkúti dinoszaurusz kutatások számos megjelenése a médiában nagyban erősítette a paleontológia társadalom iránti nyitottságát.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport tagjai jelentős szerepet játszanak a hazai őslénytani tudományos közéletben, mint a Magyarhoni Földtani Társulat Őslénytani-Rétegtani Szakosztályának vezetőségi tagjai. A kutatócsoport vezetője az MTA Földtudományok Osztályának elnöke, a Magyarhoni Földtani Társulat társelnöke, hazai szakfolyóiratok szerkesztőbizottságának tagja, valamint a Nemzetközi Triász Rétegtani Albizottság szavazati jogú tagja. A kutatócsoport egy tagja 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 kanadai, angol, francia, belga, spanyol, svájci, német, svéd, romániai, és lengyel kutatókkal.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

OTKA K81298: „A mezozoós tengeri forradalom kezdeti szakasza és a középső triász radiatív evolúció összefüggéseinek vizsgálata”
OTKA K72633: „A mezozoós geológiai időskála egyes részeinek pontosabb kalibrálása és alkalmazása bioszféra-történeti kutatásokban”
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”
OTKA PD84193: „Újabb nem madárszerű Theropoda és madár leletek a Bakonyból”

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Korponai J, Magyari EK, Buczkó K, Iepure S, Namiotko T, Czakó D, Kövér C, Braun M: Cladocera response to Late Glacial to Early Holocene climate change in a South Carpathian mountain lake. Hydrobiologia 676:(1) 223-235 (2011) DOI 10.1007/s10750-011-0881
2. Ozsvárt P, Dosztály L, Migiros G, Tselepidis V, Kovács S: New radiolarian biostratigraphic age constraints on Middle Triassic basalts and radiolarites from the inner Hellenides (Northern Pindos and Othrys Mountains, Northern Greece). International Journal of Earth Sciences DOI 10.1007/s00531-010-0628-9 (2011)
3. Ősi A, Buffetaut E: Additional non-aviantheropod and bird remains from the early Late Cretaceous (Santonian) of Hungary and a review of the European abelisauroid record. Annales de Paleontologie 97: 35-49 (2011)
4. Ősi A, Buffetaut E, Prondvai E: New pterosaurian remains from the Late Cretaceous (Santonian) of Hungary (Iharkút, Csehbánya Formation). Cretaceous Research 32: 456-463 (2011)
5. Prondvai E, Ősi A: Potential for intracranial movement sinpterosaurs. The Anatomical Record 294: 813–830 (2011)
6. Pazonyi P: Palaeoecology of Late Pliocene and Quaternary mammalian communities in the Carpathian Basin. Acta Zoologica Cracoviensia 54A(1-2): 1-29 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: MTM ELTE Paleontológiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	5	Ebből kutató[2]:	5
PhD, kandidátus:	4	MTA doktora: 0	Rendes tag és levelező tag: 0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				28
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				23
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	1	idegen nyelven:	3
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	18
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	15
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	24	Összes független hivatkozás száma:	226
Összes hivatkozás száma[11]:	301		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD: 0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			15
		poszterek száma:	4
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	3
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	20		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			4
Témavezetések száma: TDK munka:	1	Diplomamunka (BSc):	9
Diplomamunka (MSc):	8	PhD:	4

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	20 300	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 Teljes saját bevétel:	7000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	5	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	7000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

PE LEVEGŐKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Gelencsér András, az MTA doktora
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.
telefon: 88-624368; fax: 88-624454
e-mail: gelencs@almos.uni-pannon.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A légköri szerves aeroszol képződésének, összetételének és átalakulásának vizsgálata, különös tekintettel a másodlagos aeroszolképződésre; a gombák által termelt elővegyületek vizsgálata; a részecskék higroszkópos növekedésének tanulmányozása; adatszolgáltatás nemzetközi adatbázisba a légköri aeroszol méreteloszlásáról, optikai és kémiai jellemzőiről; az aeroszol-részecskék optikai tulajdonsága és a részecskék kémiai összetétele kapcsolatának tanulmányozása; a humuszszerű vegyületek méreteloszlásának és toxicitásának vizsgálata

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

A kutatócsoport tagjai tanulmányozták a háttérlevegőben végbemenő aeroszol-keletkezés folyamatát. Kimutatták, hogy az új aeroszol részecskék leginkább ún. új részecske-keletkezési epizódokban jönnek létre. Háttérlevegőben ezek az epizódok gyakoriak, átlagosan minden harmadik-negyedik napon előfordulnak. Természetesen az év során ez a gyakoriság változik, a legtöbb epizód tavasszal és ősszel, a legkevesebb télen figyelhető meg. Az új részecskék légköri gázok/gőzök kondenzációjával keletkeznek. A képződő részecskék néhány nanométer nagyságúak, és további gőzkondenzációval és ütközéssel növekednek. Növekedési sebességük az adatok szerint átlagosan 6nm/óra.

Városi levegőben vizsgálták az aeroszol részecskék fénygyengítését a relatív nedvesség függvényében. A részecskék fényextinkcióját a látótávolság adatok alapján becsülték. A vizsgálat célja az volt, hogy meghatározzák az aeroszol ún. higroszkópos növekedését, amely a részecskék nedvszívó, vízben oldódó összetételének köszönhető. Kimutatták, hogy a higroszkópos növekedés mértéke változik az év során, télen a legjelentősebb, nyáron a legkisebb. Például Budapesten az OMSZ Marczell György Főobszervatóriumában megfigyelt adatok szerint, a száraz részecskék tömege 80%-os relatív nedvességen, télen 6-7-szeresére, nyáron 2-szeresére növekszik. A növekedés évszakos változását a kémiai összetétel változása okozhatja, amelyet további vizsgálatok igazolhatnak.

Kutatásaik során általánosan elterjedt 8 mikroszkopikus gombafaj szeszkviterpén emissziós fluxusát is vizsgálták. A tenyészeteket a mérések során 26°C-on termosztálták, a keletkező szeszkviterpéneket SPME módszerrel mintavételezték és gázkromatográfia-tömegspektrometria módszerével mérték. A szeszkviterpénekre jellemző fragmens ionok (m/z=161-es és m/z=204-es) együttes előfordulása alapján a *Penicillium, Aspergillus, Trichoderma* és *Fusarium* nemzetségbe tartozó fajok vizsgálata során összesen több mint 100 szeszkviterpént mutattak ki az anyagcsere termékek között. A vizsgált fajok közül a *Trichodermaharzianum* bizonyult legproduktívabbnak a megfigyelt 49 szeszkviterpén alapján, amelyek főként az 1460–1530 retenciós index tartományban fordultak elő, közülük 6 vegyület csak ennek a fajnak az anyagcsere termékei között fordult elő. A szeszkviterpének mintavételezése mellett mérték a gombák életfolyamatai során keletkező CO_2 koncentrációját

is. A legtöbb faj esetében a gombák által kibocsátott szeszkviterpének mennyisége követte a kibocsátott szén-dioxid mennyiségét.
Tanulmányozták a légköri aeroszol vízben oldható szerves alkotóinak jelentős hányadát kitevő humuszszerű vegyületek méreteloszlását különböző környezetben (városi, regionális háttér, tengerparti) gyűjtött mintákban. Ehhez 8 fokozatú Berner impaktorral gyűjtöttek aeroszol részecskéket a 0,0625-16 μm-es tartományban, majd vizsgálták a vizes extraktumok UV, fluoreszcenciás tulajdonságait és az alkotók tömegspektrumát. Ezt követően, az egyes fokozatok vizes extraktumaiból izolálták a humuszszerű vegyületeket és vizsgálták ezek széntartalmát, illetve az említett jellemzőket. Megállapították, hogy a fluoreszkáló vegyületek (235nm/410nm) mintegy 90%-a a 0,0625-1 μm-es tartományban található, ami arra utal, hogy a humuszszerű vegyületek a finom frakcióban fordulnak elő. Ezt a szénmennyiségre vonatkozó elemzések eredményei és a tömegspektrometriás vizsgálatok is alátámasztották.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport vezetője előadást tartott a Mindentudás Egyeteme 2.0 sorozat keretében Veszprémben 2011. március 1-én „Megszívjuk? A levegőszennyezés és következményei" címmel.

A kutatócsoport vizsgálta, és kimutatta, hogy a PM10 koncentrációját miként befolyásolja a légkör vízgőztartalma, azaz a relatív nedvesség hatására milyen mértékű tömegkoncentráció-növekedésre kell számítani. A (nagy)városokban a PM10 légköri mennyisége időről-időre meghaladja az egészségügyi határértéket, amelyet akár jelentős mértékben az aeroszol részecskék vízfelvétele is okozhat. A víz önmagában nem jelent veszélyt az emberi egészségre, ezért a tömegnövekedésnek ez a formája torzíthatja a PM10 emelkedés miatt fellépő egészségügyi kockázat megítélését.

A kutatócsoport tagjai beszámoltak a vörösiszap-katasztrófa során végzett vizsgálataikról a 2011. március 1-jén, a Polgári Védelem világnapja alkalmából a BM Országos Katasztrófa-védelmi Főigazgatóság és a Magyar Tudományos Akadémia közös szervezésben megrendezett a „Vörösiszap-katasztrófa: következmények és tapasztalatok" című szakmai konferencián az MTA székházában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport tagjai a Pannon Egyetemen részt vettek a Légkörtan, Környezeti modellek, Fizikai meteorológia, Bevezetés a környezettanba, Kémiai környezetvizsgáló módszerek, Levegőkémia, Globális éghajlatváltozás és következményei c. tárgyak oktatásában és a „Kémiai és Környezettudományok Doktori Iskola" munkájában. A Pécsi Tudományegyetemen és a Szent István Egyetemen PhD-értekezések opponenseként működtek közre.

Kétoldalú kormányközi kutatási szerződés keretében folytatták a közös kutatást a zágrábi Ruder Boskovic Intézettel. 2011-ben 2 horvát kutató végzett vizsgálatokat Veszprémben, illetve a kutatócsoport két tagja Horvátországban vett részt mintavételi kampányban. 2011-ben megkezdődött a 2010-ben elnyert, EB által támogatott Aerosols, Clouds, and Trace Gases Research Infrastructure Network elnevezésű 4 éves futamidejű FP7-es projekt, amelyben a kutatócsoport tagjai is aktívan részt vesznek.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport vezetője 2011-ben elnyert a „Reszuszpendált belélegezhető por tulajdonságai és hozzájárulása a városi PM10 („szállópor") koncentrációjához" című OTKA-pályázatot (azonosító száma: K101484; 23 M Ft)

A kutatócsoport vezetője a 2011-ben elnyert TÁMOP-4.2.2.-B-10/1-2010-0025 „Tudományos képzés műhelyeinek támogatása a Pannon Egyetemen" című projekt (2011–2013; 667 M Ft) szakmai vezetője, a kutatócsoport a Környezeti hatásvizsgálatok című alprojektben vesz részt, támogatási összeg a teljes futamidőre 22 M Ft.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. AsmiA, Wiedensohler A, Laj P, Fjaeraa AM, Sellegri K, Birmili W, et. al.,(31, Kiss G): Number size distributions and seasonality of submicron particles in Europe 2008-2009 RID B-6793-2009 RID A-1539-2009 RID A-2256-2008. Atmospheric Chemistry and Physics 11:(11) 5505-5538 (2011)

2. Frosch M, Prisle N L, Bilde M, Varga Z, Kiss G: Joint effect of organic acids and inorganic salts on clouddrop let activation. Atmospheric Chemistry and Physics 11: 3895-3911. (2011) Atmos. Chem. Phys. Discuss., 10, 17981–18023 (2010)

3. GelencsérA, Kováts N, Turóczi B, Rostási A, Hoffer A, Imre K, et. al., (11): The redmud accident in Ajka (Hungary): characterization and potential health effects of fugitive dust. Environmental Science & Technology 45:(4) 1608-1615 (2011)

4. Horváth E, Hoffer A, Sebők F, Dobolyi C, Szoboszlay S, Kriszt B, et.al.,(1, Gelencsér A): Microscopic fungias significant sesquiterpene emission sources. Journal of Geophysical Research 116:(D16) 2-7. Paper D16301. (2011)

5. Minguillon MC, Perron N, Querol X, Szidat S, Fahrni SM, AlastueyA, et.al.,(24, Kiss G, Hoffer A,): Fossil versus contemporary sources of fineelemental and organic carbonaceous particulate matter during the DAURE campaign in Northeast Spain. Atmospheric Chemistry and Physics 11:(23) 12067-12084 (2011)

6. Muller T, Henzing JS, de Leeuw G, Wiedensohler A, Alastuey A, Angelov H (33, Hoffer A: Characterization and intercomparison of aerosolabsorption photometers: result of two intercomparison workshops RID B-6793-2009. Atmospheric Measurement Techniques 4:(2) 245-268 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: PE Levegőkémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	5			Ebből kutató[2]:	3
PhD, kandidátus:	2	MTA doktora:	1	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					1

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				24
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				18
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	38,424	Összes független hivatkozás száma:	355
Összes hivatkozás száma[11]:	442		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			1
		poszterek száma:	5
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	7		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			3
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	1	PhD:	7

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		20 800	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0	Teljes saját bevétel:	44 900	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		44 900	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

PPKE INFOBIONIKAI ÉS NEUROBIOLÓGIAI PLASZTICITÁS KUTATÓCSOPORT

Vidnyánszky Zoltán, az MTA doktora
1083 Budapest, Práter u. 50/a.
telefon: 1-886 4789; fax: 1-886 4724
e-mail: vidnyanszky@digitus.itk.ppke.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Infra szenzortömbön alapuló 3D tapintásérzékelő fejlesztése. Céljuk egy olyan optikai elven működő, robusztus felépítésű, elasztikus nyomásérzékelő kifejlesztése volt, ami képes a három erőkomponens független mérésére és az érintés helyének lokalizációjára

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.

Szenzoros kérgi funkciók szerveződése. A kutatás célja az érzékelés alapjául szolgáló strukturális jellegzetességek vizsgálata főemlősök agykérgében. Továbbá cél a kérgi hálózat működésének vizsgálata az áreák interakcióinak kísérletes adatokon alapuló modellezése segítségével.

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. A zajos vizuális ingerek feldolgozásának perceptuális és neurális mechanizmusainak vizsgálata. Kutatásaikat egészséges, amblyop és diszlexiás önkénteseken folytatják.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Infra szenzortömbön alapuló 3D tapintásérzékelő fejlesztése

Egy olyan újfajta nyomásérzékelő szenzor kidolgozását valósították meg, amely segítségével lehetséges a szenzorra ható erő három komponensének független mérése. Továbbá, nagy mérési (min 2000:1) és dinamika (KHz) tartománnyal rendelkezik, a mechanikai struktúra pedig lehetővé teszi a szenzor teljes felületén a nagypontosságú nyomásmérést és a nyomás helyének meghatározását. A szenzor méretei jól állíthatóak a kívánt alkalmazásokhoz, illetve szenzormező (akár mesterséges bőr) kialakításához. Nyugalmi állapotban a szenzor zaja ±3 LSB (Least Significant Bit) ami a teljes elméleti tartományon (65536 LSB) 1/10000-os hibát jelent.

A hippokampusz funkcionális modellje

Folytatódott az együttműködés a kutatócsoport és az MTA KOKI két munkacsoportja között, melynek keretében in vitro élettani kísérletek és számítógépes szimulációk segítségével vizsgálják a hippokampuszra jellemző populációs aktivitás-mintázatok kialakulásáért felelős sejt- és hálózati szintű folyamatokat. A részletes hálózati modell segítségével tovább vizsgálták az éles hullámok leállításában szerepet játszó mechanizmusokat. A modell azt jósolja, hogy a CA3 régióra jellemző szinaptikus paraméterek mellett a sejtszintű adaptáció nem ad megfelelő magyarázatot az éles hullámok leállítására. A szimulációs eredmények

szerint az éles hullámokat vagy a piramissejtek közötti rekurrens kapcsolatok rövid távú depressziója, vagy egy késleltetve aktiválódó, hosszan tartó gátlást közvetítő interneuron-típus bekapcsolódása állíthatja le, és mindkét esetre sikerült kvantitatív predikciókat megfogalmazni a megfelelő szinaptikus paraméterek szükséges értékeire vonatkozóan. Az éles hullámok véletlenszerű elindulására vonatkozó hipotézis alátámasztására változtatták a hálózat méretét a modellben, illetve a kísérletekben, és mindkét esetben azt tapasztalták, hogy míg az éles hullámok gyakorisága a hálózat méretének csökkentésével párhuzamosan csökkent (majd az éles hullámok eltűntek), a kolinerg moduláció hatására létrejövő gamma oszcilláció frekvenciája ezzel ellentétesen változott (és az oszcilláció még jóval kisebb hálózatban is fennmaradt). Ezek az eredmények azt mutatják, hogy az éles hullámok és a gamma oszcilláció frekvenciáját alapvetően különböző mechanizmusok határozzák meg.

Szenzoros kérgi funkciók szerveződése. Elemi tapintási funkciójú kérgi modulok összeköttetései a szomatoszenzoros kéregben:

- Bidirekcionális pályajelöléssel főemlősökben feltérképezték a primer szomatoszenzoros kérgi área 3b d2-es ujjbegy reprezentációjának intrinsic, és szomszédos szomatoszenzoros kérgi áreákkal (3a, 1 és 2) létesített neuronális összeköttetéseit. Funkcionális kérgi térképek segítségével meghatározták a be- és kimenetek specificitását. A témában írott kéziratot benyújtották.
- Az área 3b beadásokhoz hasonlóan 3 újabb kísérletben pályajelölő anyagokat injektáltak 1-1 distalis ujjbegy reprezentáció területére mókusmajmokban az área 1-ben. A retrográd és anterográd jel feltérképezése megtörtént. Az eredmények kézirat formájában történő szerkesztése folyamatban van.

Éber majom agykérgi aktivitásának statisztikai jellemezése:

- Elemzéseiket az egysejt aktivitásra jellemző „interspike interval" (ISI) eloszlások statisztikai meghatározását illetően további matematikai eszközök alkalmazásával kiterjesztik (ld. konferencia kiadvány).
- Folytatódik az egysejt aktivitással korrelált lokális mezőpotenciál (LFP) változások statisztikai kiértékelése.

A látás és vizuális figyelem idegrendszeri folyamatai és plaszticitása:

Zajos vizuális ingerek feldolgozása. Az evolúció során az emberi látás alkalmazkodott ahhoz, hogy rossz látási körülmények esetén is hatékonyan legyen képes feldolgozni a zajos vizuális ingereket. A látás ezen figyelemreméltó képességének hátterét képező feldolgozási folyamatok azonban kevéssé ismertek. Kutatásaik célja az volt, hogy azonosítsák a zajos vizuális ingerek feldolgozásának perceptuális és neurális mechanizmusait. Eredményeik:

- Kidolgoztak egy új vizsgálati módszert, mely lehetővé teszi a zaj kiszűréséért felelős perceptuális és neurális mechanizmusok izolálását és specifikus jellemzését különböző típusú zajok esetén.
- Új módszerük alkalmazásával azonosították azokat a specifikus ingerfeldolgozási folyamatokat, melyek az elmosódott kontúrokkal rendelkező vizuális tárgyak – melyeket fázis zaj hozzáadásával, i.e. a képek fáziskoherenciájának csökkentésével hoztak létre – feldolgozásáért felelősek. Kimutatták, hogy a fáziszaj kiszűrésért felelős feldolgozási mechanizmusok jól elkülöníthetőek a zaj hatására megnövekedő feladatnehézséggel kapcsolatos általános figyelmi folyamatoktól.
- Kimutatták, hogy amblyopoknál specifikusan sérül a zajos ingerek feldolgozása: alacsonyabb a zajküszöbük, vagyis az amblyop szemük esetében jóval kevesebb fáziszaj hozzáadása elegendő a kép felismerhetőségének jelentős lerontására a normál szemükhöz képest.

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.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai számos tudománynépszerűsítő előadást tartottak és rádió- valamint tévéinterjút adtak. A Pázmány Péter Katolikus Egyetem Információs Technológiai Karán tartott nyílt napokon a csoport tagjai gimnazistáknak tartottak számos sikeres ismetető előadást és gyakorlati bemutatót a robotikai és funkcionális MRI kutatásaikról.

A tanulási nehézségek a legutóbbi felmérések szerint a populáció akár 10-12 %-át is érinthetik, melyek közül a leggyakoribb az olvasási nehézség, a diszlexia. Ebből adódóan, a diszlexia kutatása nem csak az érintettek, hanem az egész társadalom szempontjából kiemelt jelentőséggel bír. Diszlexiával kapcsolatos kutatásaikat szoros együttműködésben végezik tanulási nehézségekkel küzdő fiatalok képzésében résztvevő pedagógusokkal és gyógypedagógusokkal (többek között az Öveges József Szakképző Iskola tanáraival). A BME Kognitív Központjával közösen kifejlesztett felnőtt számítógépes tesztprogramuknak különösen nagy jelentőségét az adja, hogy ez az első felnőtt diszlexia szűrésére alkalmas magyar nyelvű tesztrendszer.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

Hazai kapcsolatok: PPKE Információs Technológiai Karának, a Semmelweis Egyetemnek és az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézetének több csoportjával is együttműködnek. *Vállalati kapcsolatok:* Richter Gedeon Zrt., Tateyama és NVIDIA; Varinex Kft.

Nemzetközi kapcsolatok: *1. Téma:* European Research Network for Investigating Human Sensorimotor Function in Health and Disease (ERNI-HSF). 2007–11;

2. Téma: A szomatoszenzoros kérgi funkciók szerveződése, Vanderbilt Univ, USA
A csoport tagjai aktívan részt vesznek a PPKE Információs Technológiai Karán folytatott alap- és doktori képzésben. A csoport munkájához 11 PhD- és 13 egyetemi hallgató kapcsolódik.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

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. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Bankó EM, Gál V, Körtvélyes J, Kovács G, Vidnyánszky Z. Dissociating the effect of noise on sensory processing and overall decision difficulty. Journal of Neuroscience 31: 2663-2674 (2011)
2. Bányai M, Négyessy L, Bazsó F. Organisation of signal flow in directed networks. Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment, P06001. doi: 10.1088/1742-5468. (2011)
3. Lendvai D, Morawski M, Brückner G, Négyessy L, Baksa G, Glasz T, Patonay L, Matthews RT, Arendt T, Alpár A: γ Perisynaptic aggrecan-based extracellular matrix coats in the human lateral geniculate body devoid of perineuronal nets. J Neurosci Res. doi: 10.1002/jnr.22761. (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: PPKE Infobionikai és Neurobiológiai Plaszticitás Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	9,2	Ebből kutató[2]:	7,2
PhD, kandidátus:	2 MTA doktora: 1	Rendes tag és levelező tag:	1
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			0

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				6
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	6
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	12,051	Összes független hivatkozás száma:	243
Összes hivatkozás száma[11]:	243		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			2
		poszterek száma:	8
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	3	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	3		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			5
Témavezetések száma: TDK munka:	6	Diplomamunka (BSc):	6
Diplomamunka (MSc):	11	PhD:	12

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	34 400	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	19 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	19 000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

SZTE ANALÍZIS ÉS SZTOCHASZTIKA KUTATÓCSOPORT

Totik Vilmos, az MTA rendes tagja
6725 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.
telefon: 62-544 089; fax: 62-544 548
e-mail: totik@math.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

Kutatások végzése és az elért eredmények közzététele az alábbi területeken:

Klasszikus analízis: Ortogonális polinomok vizsgálata tartományok unióján ill. a számegyenes részhalmazain lokálisan duplázó súlyokra (aszimptotikák, zérushelyek, eloszlásuk). Christoffel-függvények pontos lokális és globális viselkedésének magadása potenciálelmélet ill. az ún. gyorsan csökkenő polinomok segítségével. Bourgain és Gamburd eredményeinek kiterjesztése általános modulusra, illetve perfekt algebrai csoportokra.

*Differenciálegyenletek***:** Nem-autonóm Lotka-Volterra-modellek stabilitási tulajdonságainak vizsgálata, ha a zsákmányhalak táplálékául szolgáló növényzet a Malthus-törvény szerint szaporodik. Új, elemi bizonyítás kidolgozása a sajátértékek eloszlását leíró Ljapunov-tételre. Korspecifikus influenza vakcinálási stratégiák. Mesterséges neuronhálózatokat modellező funkcionál-differenciálegyenletek vizsgálata pozitív, illetve negatív visszacsatolás esetén, Krisztin, Walther és Wu eredményeinek továbbfejlesztése. Nagy amplitúdójú periodikus pályák létezésének igazolása, az összekötő pályák, és ezáltal és a globális attraktor leírása. Annak bizonyítása, hogy megfelelő visszacsatolási függvény választásával az egyenletnek tetszőleges számú ún. lassan oszcilláló periodikus pályája lehet.

*Valószínűségszámítás***:** A konvergenciasebesség élesítése a szentpétervári portfolió játékokban. A klasszikus Bernstein-egyenlőtlenség maximumokra vonatkozó változatának igazolása nem független véletlen változók sorozatára. Véletlen séták konvergencia-sebességének, illetve a kapcsolódó Hecke-operátorok spektrumának vizsgálata.

Az SZTE Bolyai Intézetében folyó oktatás segítése előadások és szemináriumok tartásán, ill. tehetséggondozó szeminárium szervezésén, nemzetközi matematikaversenyeken keresztül.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Klasszikus analízis:

- Az MTMT 1816525 cikk a rendkívül hatékony polinomiális inverz kép módszert és annak különböző alkalmazásait tárgyalja (ezek polinom-egyenlőtlenségektől az ún. kvantum modellek univerzális hipotézisig terjednek). A cikk képezte a *XIIIth International Conference on Approximation* konferencia egyik plenáris előadásának tárgyát.
- Az MTMT 1816518 publikáció azt vizsgálja, hogy mennyire közel kerülhet egy 1 főegyütthatós polinom szuprémum normája az elméleti alsó határhoz egy véges sok intervallumból álló halmazon. Meghatározza a pontos hibát, amely szorosan összefügg az egyes intervallumok harmonikus mértékeinek szimultán diofantikus approximációjával.
- Az MTMT 1439090 cikk leírja azon norma jellegű függvényeket az egészeken, amelyek segítségével végrehajtható az Euklideszi algoritmus.

Valószínűségszámítás:

- Az MTMT 1816511 cikk olyan inhomogén Galton-Watson folyamatokkal foglalkozik, ahol az utódeloszlás várható értéke < 1, és konvergál 1-hez. Kiderül, hogy megfelelően

megválasztott bevándorlás mellett a folyamat nemtriviális határeloszláshoz konvergál.
- Az MTMT 1702517 dolgozat olyan rendszereket vizsgál, melyben az egyedek véletlen ideig élnek, véletlen bolyongást végeznek, majd életük végén véletlen számú utódot hagynak, esetleg utód nélkül meghalnak. A téma nehézségét mutatja, hogy a klasszikus markovi esettől eltérően a legmobilisabb és legszaporább egyedek paraméterei az élettartamok farokeloszlásának exponenseivel együtt határozzák meg a folyamat aszimptotikáját.

_ Az MTMT 1670365 publikáció azt mutatja meg, hogy ha véletlen változók összegére teljesül a Bernstein egyenlőtlenség, akkor egy ugyanilyen típusú egyenlőtlenség teljesül az összegek maximumára is. Az eredmény amiatt igen meglepő, mert a szerzők semmiféle függőségi feltételt nem róttak ki a véletlen változókra.

_ Az MTMT 1593405 dolgozat olyan portfoliójátékokat vizsgál, melynél a befektető (játékos) minden kör elején eldöntheti, hogy vagyonát hogy osztja el különböző befektetések (játékok) között. A szerzők éles aszimptotikát adnak a növekedési rátára abban az esetben, amikor a befektetések független szentpétervári játékok. Továbbá határeloszlás-tételeket bizonyítanak független szentpétervári véletlen változók összegére.

Differenciálegyenletek:

- Az MTMT 1765346 dolgozat funkcionál-differenciálegyenleteket vizsgál monoton pozitív visszacsatolás esetén. Megmutatja, hogy a globális attraktor szerkezete bonyolultabb lehet a pontonkénti rendezésben szomszédos stabil egyensúlyi helyzetek között található orsó-szerű alakzatok uniójánál. A periodikus pályák instabil halmazainak leírásával teljes képet ad a globális attraktor orsó-szerű alakzatokon kívüli szerkezetéről.
- Az MTMT 1765343 cikk becslést ad a fundamentális megoldás integráljára késleltetett lineáris autonóm differenciálegyenletek esetén, majd alkalmazza az eredményt perturbált egyenletek stabilitási tulajdonságainak vizsgálatában.
- Az MTMT 1765340 publikáció igazolja, hogy bizonyos negatív visszacsatolású késleltetett differenciálegyenletek esetén választható olyan folytonos visszacsatolási függvény, hogy az egyenletnek végtelen sok különböző, lassan oszcilláló periodikus megoldása legyen.
- Az MTMT 1384561 dolgozat a népesség korstruktúráját és vakcináltsági státuszát figyelembe vevő modellt állít fel a H1N1 influenza terjedésének vizsgálatára abban az esetben, amikor az oltási kampány a járvány terjedésével párhuzamosan fut. Megmutatja, hogy járvány esetén a jelenleg alkalmazott stratégiától eltérő, korspecikifikus oltási stratégiával csökkenthető lenne a fertőzöttek száma.
- Az MTMT 1417057 cikk a késleltetett logisztikus egyenlet megoldásainak aszimptotikus tulajdonságaival foglalkozik; cáfolja Khan-nak és szerzőtársainak 2009-ben publikált téves állításait, ezáltal rávilágít az általuk használt matematikai módszer gyengeségeire.
- Az MTMT 1461534 publikáció olyan járványtani SEI modellt állít fel, amelyben a fertőzési, illetve a halálozási ráta annak függvénye, hogy az egyed mióta fertőzött. A cikk meghatározza az ún. reprodukciós számot és a járvány kimenetelét (eltűnését vagy perzisztenciáját) a reprodukciós szám függvényében.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

A kutatócsoport tagjai hozzájárultak a matematikai ismeretek népszerűsítéséhez, illetve a laikusok tudományos ismeretekhez való jutásához:
- *Középérték-tulajdonságú függvények* című előadással a Fazekas Mihály Gimnáziumban, *Newton és amit a tudomány kapott tőle* című előadással az Őszi Kulturális Fesztiválon;
- ismeretterjesztő cikkel a Polygon folyóiratban (Totik Vilmos: *Unalmas Analízis?*);
- ingyenesen letölthető könyvrészlettel a járványok modellezéséről (MTMT 1670580 rekord);
- matematikai érdekességekről vezetett bloggal (http://nemlinearis.blog.hu/);

- az SZTE volt matematika szakos hallgatói szakmai előmenetelét vizsgáló felméréssel. A felmérés alapján készült a http://www.math.u-szeged.hu/~vasg/tajekoztato/ honlap, amely a matematikus szakmával kapcsolatos tévhiteket oszlatja el és a matematika diplomával elérhető munkalehetőségeket mutatja be.
- YouTube demonstráció a különböző influenza elleni oltási stratégiák összehasonlításáról: http://www.youtube.com/watch?v=UpFTumj1pzw

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport tagjai 2011-ben 21 előadást tartottak konferenciákon és egyetemi szemináriumokon, köztük az alábbiakon (a teljes lista megtalálható a www.math.u-szeged.hu/MTA/eloadasok.html honlapon):

- Complex Analysis, Operator Theory, and Approximation, Linz (plenáris előadás)
- Orthogonal Polynomials and Special Functions, Madrid (plenáris előadás)
- Harmonic Analysis and Approximations, V., Tsaghadzor, Örményo. (plenáris előadás)
- Recent developments in Functional Analysis and Approximation Theory, Lecce, Olaszország (plenáris előadás)
- ICREA Conference on Approximation Theory and Fourier Analysis, Barcelona (plenáris előadás)
- Stochastic Processes and its Applications, Oaxaca, Mexikó
- High Dimensional Probability, Banff, Kanada
- University of Wyoming, Laramie, USA (meghívott előadás)
- SIAM Conf. Applications of Dynamical Systems, Snowbird, USA (meghívott előadás)
- Equadiff 2011, Loughborough, Nagy-Britannia

A kutatócsoport két tagja szervezője volt a rangos *SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems* konferenciának, illetve a *Colloquium on the Qualitative Theory of Differential Equations* konferenciasorozat 9. rendezvényének.

A SZTE Bolyai Intézetében a tagok kurzusokat tartanak, BSc-s és MSc-s szakdolgozóik vannak, illetve doktorandusz hallgatók témavezetői.

A csoportvezetőt a Szegedi Tudományegyetem Klebelsberg Kunó-díjjal tüntette ki, egy kutató Fulbright Ösztöndíjjal töltött 5 hónapot az Arizona State University-n. Egy másik summa cum laude minősítéssel PhD-fokozatot nyert el.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport nem pályázott más támogatásra. A csoport két tagja a Bolyai Intézet több munkatársával és román kollégákkal együtt összesen 42 000 eurót nyert *Cross-Border Research on Functional Analysis and Differential Equations* című pályamunkájával a Magyarország-Románia Határon Átnyúló Együttműködési Program keretében.

Kutatócsoporti tagok vesznek részt ERC Advanced Grant pályázatban a 2010–2015-ös időszakban, egy a Magyarország–Szerbia IPA Határon Átnyúló Együttműködési Program keretében elnyert pályázatban a 2010–2011-es időszakban, és futó OTKA-pályázatokban.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Krisztin T, Vas G: Large-Amplitude Periodic Solutions for Differential Equations with Delayed Monotone Positive Feedback. JDDE 23: (4) 727-790 (2011)
2. Knipl HD, Röst G: Modelling the Strategies for Age Specific Vaccination Scheduling During Influenza Pandemic Outbreaks. Math. Biosci. Eng. 8: (1) 127-145 (2011)

3. Kevei P, Mimbela L, Alfredo J: Critical Multitype Branching Systems: Extinction Results. Electronic Journal of Probability 16: 1356-1380. p. 25 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: SZTE Analízis és Sztochasztika Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	3			Ebből kutató[2]:	3
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				16
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				13
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	9
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	10
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	1

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	8,666	Összes független hivatkozás száma:	79
Összes hivatkozás száma[11]:	92		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			19
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	6
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	12		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			3
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	1
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:		10 800	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0	Teljes saját bevétel:	28 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:			1
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		4000	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:			2
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		24 000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:			0
A tárgyévre vonatkozó bevétel:		0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:		0	EFt

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 2011-ben

Nemzetközi szintű kutatómunka végzése az ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése és a lézerek spektroszkópiai és anyagtudományi alkalmazásai területén.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Lézerek anyagtudományi alkalmazásai

A csoport kutatói kifejlesztettek egy jövőbeli bioszenzor alapjául szolgáló érzékelő vékonyréteget. Változó összetételű Teflon és ezüst céltárgyakból KrF excimer lézerrel választottak le keverék vékonyrétegeket. A két alapanyag jelenlétének következményeképpen egy szivacsos struktúrájú, az ezüsttartalomtól függően változó vezetőképességű filmet kaptak. Megállapították, hogy a Teflon mennyiségének növekedésével a rétegekben megjelenő szigetek száma nő, míg 3:1-es Teflon:ezüst arány esetén egy összefüggő szivacsos réteget kaptak. Meghatározták a rétegekre vonatkozó nedvesítési szögek értékét desztillált víz esetén, mely jelentős csökkenést mutatott az ezüst tartalom növekedésével. Hasonló tendencia volt megfigyelhető a rétegek ellenállásának mérése során is. A kísérletek távlati célja ezüst-teflon vékonyréteg felhasználásával ellenállás-változás mérésen alapuló bioszenzor megvalósítása.

A korábban légköri aeroszolok hullámhosszfüggő optikai abszorpciós együtthatójának mérésére kifejlesztett négy-hullámhosszú fotoakusztikus aeroszol-mérő elrendezést alkalmazták pepszin ablációja során keletkező részecske felhő abszorpciós hatásának meghatározására is. Ez azért fontos információ, mert az ablációs plume már a keltő nanoszekundumos lézerimpulzus időtartama alatt kialakulhat, s így „leárnyékolhatja” a céltárgyat az impulzus későbbi részének szempontjából, lerontva ezzel az anyageltávolítás hatékonyságát.

Az SZTE Fogászati és Szájsebészeti Klinika munkatársaival együttműködésben azt vizsgálták, hogyan lehetne titán implantátumok szervezetbe való megtapadását, beépülését hatékonyabbá tenni, meggyorsítani. A kísérletek során KrF (λ=248 nm) excimer lézert és Nd:YAG lézer második felharmonikusát (λ=532 nm) használták titán korongok felületi morfológiájának módosítására annak érdekében, hogy a releváns sejtek nagyobb hatékonysággal tapadjanak meg rajta. A pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatok bebizonyították, hogy a lézeres kezelés hatására a felületen eredetileg lévő struktúra durvasága lecsökkent, az éles szélek lekerekedtek, elsimultak. A sejttenyésztési kísérletek azt bizonyították, hogy az ily módon előállított titán felszínen jobban megtapadtak a sejtek, mint a kezeletlen területeken.
A témán 5 fő dolgozott, ebből 1 fő a kutatócsoport munkatársa.

Fotoakusztika

A halitosis, más néven a kellemetlen lehelet, gyakorlatilag, minden egyes embert érint átmenetileg. A nemzetközi irodalom alapján az emberek mintegy 30–50%-át, pedig tartósan

érinti ez a kellemetlen tünet. A halitosis kialakulásának hátterében elsőként a szájüreg eredetű megbetegedések, másodsorban, pedig szisztémás megbetegedések játszanak szerepet. A kutatást az SZTE Fogorvostudomány Karának (FOK) munkatársaival közösen indították, melynek célja az igazán csekély átfogó irodalommal rendelkező, mindazonáltal jelentős számú magyarországi populációt érintő betegség, állapot feltárása, illetve új, érzékenyebb, hatékonyabb és ugyanakkor könnyebben kivitelezhető diagnosztikai eljárás kifejlesztése, kipróbálása és bevezetése a mindennapi orvosi/fogorvosi gyakorlatban.

Az ezen kutatási szakaszban elvégzett mérések célja, az ammónia és az illékony kéntartalmú vegyületek – a kellemetlen lehelettel (halitosis) leginkább összefüggő gázok – közötti összefüggés meghatározása volt. További cél a vizsgált gázok mennyiségének meghatározása egészséges fiataloknál, amely alapul szolgál a további tervek között szereplő szájüregi daganatos betegek halitosis állapotának felméréséhez. Valamint ebben a szakaszban történt a kutatásban résztvevő asszisztensek, orvosok betanítása és a tapasztalatok elemzése, amely előreláthatóan segíti a további vizsgálatok gördülékeny, hatékony lebonyolítását.

A szájüregi mérésekre adaptált saját fejlesztésű fotoakusztikus ammóniamérő párhuzamosan végzett méréseket egy halitosis vizsgálathoz fejlesztett hordozható gázkromatográffal (SZTE FOK), amely a kellemetlen lehelettel leginkább összefüggő kén-hidrogén, metil-merkaptán és dimetil-szulfid mennyiségét határozza meg.

Az általuk kifejlesztett, világviszonylatban is újdonságnak számító négy-hullámhosszú fotoakusztikus aeroszol optikai abszorpció mérő rendszerrel méréseket végeztek a vörösiszap-katasztrófa helyszínén, melyek célja a katasztrófa után mért magas szálló por koncentráció forrásának meghatározása volt. Megállapították, hogy az előzetes várakozásokkal ellentétben a magas szálló por koncentráció döntően nem a talajon kiülepedett vörös iszap felporzásából, hanem a lakossági háztartási tüzelésből származik. Laboratóriumi mérések során ugyanezzel a rendszerrel elsőként határozták meg a vörös iszap aeroszolok optikai abszorpciós spektrumát a látható és az UV tartományban.

A fotoakusztikai témákon 6 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa. A fotoakusztikus eredmények hasznosításában részt vesz a HILASE Kft is.

Ultrarövid impulzusú lézerek kutatás-fejlesztése

A kutatócsoport tagjai kidolgoztak egy újfajta, attoszekundumos extrém ultraviola (XUV) impulzusok alakformálásához használható berendezés sémáját. A berendezés diffrakciós rácsokon való kónikus elhajlási jelenségen alapszik, s így olyan hullámhossz tartományokban is alkalmazható, ahol a jelenleg sztandard módszerek (pl. diszperzív XUV reflektorok, fém filmek) nem működnek. A séma az Extreme Light Infrastructure elnevezésű, Szegeden megépítendő „szuperlézer” központ attoszekundumos nyalábjaira is alkalmazható.

A kutatók szisztematikus mérésekkel meghatározták a közeli infravörös lézerimpulzusok alakformálására jelenleg legelterjedtebben használt, TeO_2 kristályon alapuló akusztooptikai diszperzív szűrők szögdiszperziós torzításait és programozható diszperziójának pontosságát. Ezek az eredmények nélkülözhetetlenek az extrém nagy csúcsteljesítményű fényforrások tervezéséhez.

A témán 3 fő dolgozott, ebből 2 fő a kutatócsoport munkatársa.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az év folyamán a kutatócsoport tagjai több olyan rendezvényt szerveztek, előadást tartottak, melyek aktuális tudományos kérdésekkel foglalkoztak ismeretterjesztő szinten. Ennek megfelelően „Lézerek a hétköznapi életben” címmel nagy sikerű előadássorozatot rendeztek.

Az ELI-hez kapcsolódóan „Light at Extreme Intensities” címmel nemzetközi konferencia szervezésében és lebonyolításában vettek részt 2011. november 14–18. között Szegeden. Egy kutatójuk „Lézeres felületstrukturizálás a fogászatban” címmel tartott előadást a Szent-Györgyi napok keretében.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport ebben az évben közös kutatásokat folytatott a következő hazai partnereivel: SZTE Szemészeti Klinika, SZTE Fogorvostudományi Kar, Országos Meteorológiai Szolgálat, Pannon Egyetem, Pécsi Tudományegyetem, az MTA SZBK, SZFKI, MFA, KFKI releváns kutatócsoportjai, a MOL Nyrt., a Semilab Zrt. és a Videoton Holding Zrt. vállalatokkal. A kutatók eredményes munkakapcsolatban álltak/állnak a garchingi Max-Planck-Institut für Quantenoptik, a Forschungszentrum Karlsruhe (Németország), a University of Padova (Olaszország), a Laboratoire d'Optique Appliquée, Groupe Étude des Lasers Femtosecondes (Palaiseau, Franciaország) az Uppsala University Angstrom Laboratory (Svédország), a National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics (Bucharest-Magurele, Romania), valamint a FORTH (Görögország) nemzetközi intézetek kutatóival. A korlátozott terjedelem miatt az elvégzett projektek ismertetése itt nem lehetséges.
A kutatócsoport tagjai az SZTE Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék oktatási feladatainak ellátásában éves szinten mintegy 9 féle tárgyból összesen 302 óra megtartásával vállaltak részt. Továbbá 7 PhD-hallgató, 12 diplomamunkát és szakdolgozatot író, valamint 4 tudományos diákköri munkát végző hallgató munkáját irányították.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

Nem volt a tavalyi évben elnyert pályázat.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Ajtai T, Filep Á, Kecskeméti G, Hopp B, Bozóki Z, Szabó G: Wavelength dependent mass-specific optical absorption coefficients of laser generated coal aerosols determined from multi-wavelength photoacoustic measurements. Appl Phys A 103:1165–1172 (2011)
2. Györgyey Á, Ungvári K, Forster A, Kecskeméti G, Szénási R, Hopp B, Oszkó A, Pelsőczi I, Rakonczay Z, Nagy K, Turzó K: Laser ablated titanium implants tested by MG63 cell culture. 45th Meeting of the Continental European Division of the International Association for Dental Research (CED-IADR), Aug 31-Sept 3, 2011, Budapest, Hungary
3. Fábián L, Heiner Z, Mero M, Kiss M, Wolff EK, Ormos P et al. (2): Protein-based ultrafast photonic switching. Opt. Express 19 (20): 18861-18870 (2011)
4. Mero M, Zheng J: Femtosecond optical parametric converter in the 168-182-nm range. Appl. Phys. B. Lasers and Optics, Online First, DOI: 10.1007/s00340-011-4657-2 (2011)
5. Mero M, Sipos A, Kurdi G, Osvay K: Generation of energetic femtosecond green pulses based on an OPCPA-SFG scheme. Opt. Express 19 (10): 9646-9655 (2011)
6. Mero M, Frassetto F, Villoresi P, Poletto L, Varjú K: Compression methods for XUV attosecond pulses. Opt. Express 19 (23), 23420-23428 (2011)
7. Osvay K, Mero M, Börzsönyi Á, Kovács AP, Kalashnikov MP: Spectral Phase Shift and Residual Angular Dispersion of an Acousto-Optic Programmable Dispersive Filter. Appl. Phys. B: Lasers and Optics, accepted for publication (2011)

8. Balogh E, Kovacs K, Dombi P, Fulop JA, Farkas G, Hebling J, Tosa V, Varju K: Single attosecond pulse from terahertz-assisted high-order harmonic generation. Physical Review A 84 (2): 023806 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: SZTE Lézerfizikai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	10			Ebből kutató[2]:	8
PhD, kandidátus:	1	MTA doktora:	1	Rendes tag és levelező tag:	2
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:					2
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					4

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				27
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				23
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	23
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	23
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	25,336	Összes független hivatkozás száma:	183
Összes hivatkozás száma[11]:	231		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]:	0	külföldi oltalmak száma[14]:	0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			0
		poszterek száma:	0
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			0
Témavezetések száma: TDK munka:	0	Diplomamunka (BSc):	0
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	0

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	34 200	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	35 900	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	19 200	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	5	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	13 800	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2900	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

SZTE MESTERSÉGES INTELLIGENCIA KUTATÓCSOPORT

Csirik János, az MTA doktora
6720 Szeged, Aradi vértanúk tere 1.
telefon: 62-544 126; fax: 62-546 737
e-mail: csirik@inf.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A csoport kutatási témakörei alapvetően nem változtak az előző évekhez képest. A fő irányt továbbra is a nyelvtechnológiai kutatás-fejlesztés jelentette, mely téren a kutatócsoport dolgozói hangsúlyos szerepet vállaltak két olyan nagy volumenű pályázat feladatainak megvalósításában, melyet a befogadó intézmény – az SZTE Informatikai Tanszékcsoportja – nyert el. A csoport az önszervező rendszerek terén is jelentős kutatási tevékenységet végzett, egy EU-s pályázatban való részvételnek köszönhetően. Folytatódtak a beszédfelismerés terén végzett kutatások, melyeket egy TÁMOP-projekt is támogatott. A gépi tanulás elmélete és alkalmazásai témakörében korábban megkezdett kutatások is új eredményekhez vezettek.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Természetes nyelvi feldolgozás. A nyelvtechnológiai csoport munkálatai 2011-ben is számos területre terjedtek ki. A magyar nyelvi előfeldolgozó eszköztár fejlesztéséhez kapcsolódóan a "magyarlanc" nevű programcsomag morfológiai elemző és szófaji egyértelműsítő moduljainak adaptációja történt meg az MSD és KR morfológiai kódrendszerek harmonizált változatára, valamint megkezdődtek a magyar nyelvű dependenciaelemző fejlesztési munkálatai is. A csoportban folyó tevékenységek egy része új szöveges adatbázisok létrehozására irányult. A csoport munkatársai a Szeged Korpusz teljes állományát áthangolták az új harmonizált morfológiai kódokra. Létrehozták az angol nyelvű Wiki50 korpuszt, melyben bejelölték a névelemeket és a többszavas kifejezéseket. A nyelvi bizonytalanság különféle típusait egységes rendszerbe foglalták, és az új irányelvek mentén kézzel annotálták a bizonytalanságot jelölő elemeket a Szeged Uncertainty Corpus állományaiban. A csoport munkatársai az automatikus kulcsszó-kinyerés és véleménykinyerés algoritmusait ötvözve létrehoztak egy olyan rendszert, amely az adott termékkel kapcsolatos véleményt tükröző kulcsszavakat azonosítja a felhasználói termékleírásokban. Kialakítottak továbbá egy doménfüggetlen módszert a bizonytalanságot jelölő nyelvi elemek azonosítására, melynek hatékonyságát doménadaptációs módszerek segítségével igazolták a Szeged Uncertainty Corpus-on. Emellett szabályalapú és gépi tanulási módszereket fejlesztettek ki angol és magyar nyelvre a többszavas kifejezések azonosítására, amelyek az NLP-alkalmazásokban speciális kezelést igényelnek. Foglalkoztak továbbá a nyelv szavai, illetve dokumentumok közötti szemantikus hasonlósági mértékek fejlesztésével és alkalmazásával szemantikus relációk osztályozása és információ-visszakeresés területén, valamint a nyelvi parafrázisok automatikus generálásával is. A támogatott projektek közül a MASZEKER kódnevű, modellalapú szemantikus keresőrendszer kifejlesztését célzó projekt harmadik évében a csoport tagjai elsődlegesen a szabadalmak szemantikus elemzésére koncentráltak: elkészült egy jelentés-egyértelműsítő modul, továbbá megkezdődtek egy szemantikus lexikon építési munkálatai. Megtörtént a magyar nyelvű néprajzi szövegek szófaji egyértelműsítése és az elírt vagy népies helyesírású szavak cseréje standard alakokra. A BELAMI projekt keretében 2011-ben a doménadaptációs gépi tanuló algoritmusok kutatásán volt a hangsúly. A módszereket több különböző

alkalmazás és feladat keretein belül tesztelték, és mind a többszavas kifejezések gépi azonosításában, mind a véleményeket kifejező kulcsszavak kinyerésében sikeresnek találták. Mindkét projekt ipari partnerekkel folyik, így gazdasági hasznosításuk garantált.
Beszédfelismerés. A 2011-ben végzett kutatásokat részben a „Szenzorhálózat alapú adatgyűjtés és információfeldolgozás" című TÁMOP-pályázat támogatta. A csoport kutatói folytatták a zajtűrő jellemzőkinyerési módszerek, valamint a kulcsszó-detektálási algoritmusok finomítását, tesztelését. A módszereket a korábbi, tiszta illetve mesterségesen zajosított adatok után szenzorokkal rögzített beszédjeleken is kiértékelték. Az eredmények alapján a kifejlesztett algoritmusok működőképesek valós környezetben is. Mivel minden beszédfelismerési alkalmazás alapja a minél pontosabb akusztikus modellezés, ezért az ezirányú kutatások is folytatódtak. A csoport munkatársai kifejlesztettek egy hierarchikus neuronhálót alkalmazó beszédhang-modellt, amely egy klasszikus tesztfeladaton a valaha publikált második legjobb eredményt érte el. A módszert az IEEE csúcskonferenciáján, az ICASSP-on mutatták be.

Mintafelismerés és gépi tanulás. A Ruhr-Universität Bochum kutatóival közös DAAD pályázat keretében azt vizsgálták a csoport kutatói, hogy mennyire eltérő teljesítmény várható egy tanulóalgoritmustól, ha a rendelkezésre álló minta ismert, illetve ismeretlen eloszlásból származik. Az aktív tanulásban alkalmazott co-training modell egy változata esetére elvi korlátokat bizonyítottak az eloszlásfüggetlen tanulóalgoritmusok teljesítményére, másrészt konstruáltak is olyan algoritmusokat, melyek elérik ezeket a korlátokat, azaz optimálisak. A csoport kutatói Horn formulák egy részosztályának minimalizálását is vizsgálták, becsléseket adva a minimális formula méretére a reprezentáló gráf függvényében. Emellett az ún. 'hétköznapi' intelligenciával rendelkező programok minőségének mérésére, összehasonlítására alkalmas metodológia létrehozásával is foglalkoztak. Vizsgálták továbbá a véletlen Horn-formulák, illetve véletlen irányított hipergráfok tulajdonságait. A multiple-instance tanulási modellben a félterek tanulásához szükséges mintamérettel és a hipotéziskeresési feladat bonyolultságával kapcsolatos eredményeket adtak meg. Új kutatási terület a csoportnál az on-line aláírás-felismerés speciális, szenzorokkal felszerelt toll felhasználásával. E téren egy tanuló adatbázis készült el, továbbá az első kiértékelési eredmények is megszülettek. Ugyancsak új terület a soros eljárással működő alakfelismerő rendszerek vizsgálata. Ezen elrendezésben korlátos élettartamú szenzorok szolgáltatnak adatokat, ezért fontos, hogy a döntéshez a lehető legkevesebb szenzort használjuk fel. A csoport dolgozói módszert javasoltak erre a problémára, és szimulációs eredményeket értek el a módszer jóságának becslésére. Kifejlesztettek továbbá egy ranking eljárást, amely többosztályos osztályozó algoritmusokat alkalmaz honlap-rangsorolásra, valamint egy Markov döntési folyamatokon alapuló módszert összetett osztályozók időhatékony kiértékelésére. A módszer számos esetben jobb osztályozási pontosságot ért el, mint a korszerű kaszkád algoritmusok, kisebb számítási igény mellett.

Önszervező rendszerek. 2011-ben a csoport kutatásai elsősorban az elosztott gépi tanuló algoritmusokra koncentráltak, ezen belül is a nagyméretű teljesen elosztott hálózatokra, mint amilyenek az okos készülékekből vagy PC-kből álló P2P-hálózatok. A csoport kutatói kifejlesztették a pletykatanulás keretrendszert, amely bármely olyan algoritmust támogat, amelynek van online megvalósítása. Itt az alapötlet az, hogy az algoritmus sok példánya független véletlen sétát végez a hálózaton, miközben tanul. Emellett az így megtanult modelleket folyamatosan kombináljuk, ezáltal a konvergencia jelentősen gyorsul. A résztvevő kutatók a lineáris tanulás speciális esetét elméleti és empirikus módszerekkel elemezték. Emellett magánszféra-tisztelő (privacy preserving) algoritmusokkal is foglalkoztak, mégpedig egy olyan iteratív algoritmust javasoltak sajátvektorok meghatározására, amely kaotikus és magánszféra-tisztelő. Az algoritmus a kaotikus hatványiterációt kombinálja kriptografikus primitívekkel. A QLectives FP7-es projekt részeként a csoport kutatói hozzájárultak a Tribler

P2P platform fejlesztéséhez, amelyben pletykaalapú rendszerüket megvalósították. A QScience web 2.0-ás platform fejlesztésében is részt vettek, ahol tudományos közösségek kialakulásának támogatására egy evolúciós megközelítést javasoltak és valósítottak meg.

Mesterséges intelligencia a szoftvermérnökségben: 2011-ben a csoport kutatói komplex rendszerekre adaptálták a „Static Execute After" relációra épülő hatásanalízis-szoftverüket. A WebKit projekt elemzésével olyan módszerfolyamat bevezetésén dolgoztak, amely előrejelzi a változtatás propagálásának potenciális helyeit, ezzel is csökkentve a megjelenő regressziós hibák számát. A harmadik generációs nyelvek visszatervezésében szerzett tapasztalataikat a negyedik generációs nyelvek terén felhasználva két téren értek el eredményeket: egyrészt komplexitás-metrikákat kutatva átültettek hagyományos metrikákat, illetve újakat definiáltak a Magic nyelv elemein. A metrikák használhatóságát egy fejlesztői felmérés során validálták. Másrészt megoldást adtak a Magic szoftver-architektúra automatikus feltérképezéséhez. A módszer erőssége, hogy a vizsgált rendszer időbeli változásait is nyomon követhetjük, így a negatív változások korai felismerése révén a fejlesztési folyamat hatékonyabbá tehető.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

2011-ben a „Mindentudás egyeteme" programsorozat egyik témaköre a nyelv- és beszédtechnológia volt: a terület neves szakértői egy-egy tudományos előadás, riportfilm és kerekasztal-beszélgetés keretében járták körül a terület aktuális kérdéseit. Az előadás Szegeden volt, ennek szervezésében és lebonyolításában a kutatócsoport munkatársai is közreműködtek. A témához kapcsolódó kerekasztal-beszélgetés és magazinműsor elkészítésében is részt vettek a csoport kutatói, illetve aktívan szerepeltek is. A televíziós közvetítéseknek köszönhetően a nyelv- és beszédtechnológia legújabb vívmányairól így több millió ember értesülhetett.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A csoport vezetője egy hónapot töltött az Universität Trier egyetemen Humboldt ösztöndíjasként. Onnan egy professzor látogatott el a kutatócsoporthoz, bemutatva tanszékének munkáját. Az önszervező rendszerek terén új tartalmú, kutatócserét is magában foglaló együttműködés folyt a csoport és a Technical University of Delft, az Universidad de Almería, továbbá a Swedish Institute of Computer Science között. A csoport kutatói szervezték a Magyar Számítógépes Nyelvészeti Konferenciát, illetve részt vettek a „European Software Engineering Conference and the ACM SIGSOFT Symposium on the Foundations of Software Engineering" (ESEC/FSE 2011) szervezésében. A csoport három kutatója vesz részt az SZTE TTIK Informatika Doktori Iskolájának tevékenységében témavezetőként, illetve előadóként.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2011-ben az egész csoportot érintő nagy volumenű pályázatot a kutatócsoport (illetve a befogadó informatikai tanszékcsoport) nem nyújtott be és nem nyert el. A csoport egyik kutatója három éves Bolyai-ösztöndíjat nyert, egy másik külföldi vendégkutatói munkáját pedig az „ANR-2010-COSI-002 Grant of the French National Research Agency"pályázat támogatta.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szappanos B, Kovács K, Szamecz B, Honti F, Constanzo M, Jelasity M, et al. (15): An integrated approach to characterize genetic interaction networks in yeast metabolism, Nature Genetics 43(7): 656-662 (2011)
2. Jelasity M, Bilicki V: Scalable stealth mode P2P overlays of very small constant degree, ACM Transactions on Autonomous and Adaptive Systems 6(4): 1-20 (2011)
3. Tóth L: A Hierarchical, Context-Dependent Neural Network Architecture for Improved Phone Recognition, Proceedings of ICASSP 2011, 5040-5043 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: SZTE Mesterséges Intelligencia Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	7,5	Ebből kutató[2]:	6,5
PhD, kandidátus:	5 MTA doktora: 0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			3

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				30
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				7
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	5
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	3
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	2

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	37	Összes független hivatkozás száma:	265
Összes hivatkozás száma[11]:	291		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	0	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			8
		poszterek száma:	13
Nemzetközi tud. bizottsági tagság:	1	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:	0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]:	0		

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			5
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	5
Diplomamunka (MSc):	7	PhD:	9

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	25 300	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	0	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

SZTE SZTEREOKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Fülöp Ferenc, az MTA levelező tagja
6720 Szeged, Eötvös u. 6.
telefon: 62-545 564; fax: 62-545 705
e-mail: fulop@pharm.u-szeged.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2011-ben

A kutatócsoport 2011-ben is folytatta a tervezett aszimmetrikus szintézisek újabb feladatainak kutatását, a reakciók sztereokémiájának és mechanizmusának vizsgálatát. A folyamatosan végzett kutatási eredményekből 2011-ben összesen 17 közlemény jelent meg nemzetközi elismertségű folyóiratokban. Ezek a közlemények főként a gyógyszerkémia, az enzimkatalízis, valamint az enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezés újabb eredményeit ismertetik.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

3,4-Dihidroizokinolin, valamint *N*-tartalmú 1-, illetve 2-naftol analógokból kiindulva 1-hidroxikinolil-, illetve 1-hidroxiizokinolil-1,2,3,4-tetrahidroizokinolin-származékokat állítottak elő. Azt találták, hogy a reakcióidő jelentős mértékben csökkenthető mikrohullámú hőközléssel.

Az 1-α-aminobenzil-2-naftol, 1-aminometil-2-naftol, *N*-benzil-1-α-aminobenzil-2-naftol és 6,7-dimetoxi-3,4-dihidroizokinolin reakciója során új gyűrűrendszert tartalmazó vegyületeket, a naft[1,2-*e*][1,3]oxazino[2,3-*a*]izokinolin-származékokat izolálták. A munka folytatásaként megvizsgálták a reakció kiterjeszthetőségét különböző aminonaftol-, illetve dihidroizokinolin-származékokból kiindulva. Az így előállított új naft[1,2-*e*][1,3]oxazino[2,3-*a*]izokinolin-származékok szintéziséhez optimalizált körülményként mikrohullámú besugárzást alkalmaztak.

A 2-, illetve 1-naftolból, glioxilsavból, valamint benzil-karbamátból kiindulva hatékony eljárást dolgoztak ki új hidroxinaftil-szubsztituált glicin-származékok szintézisére. Az előállított vegyületek enantiomerjeit királis HPLC-technika alkalmazásával, úgy analitikai, mint szemipreparatív oszlopon választották szét.

A módosított Mannich reakcióban 2-naftolból, o-nitrobenzaldehidből és védett ammóniából (tercbutoxi-karbamát vagy benzil-karbamát) kiindulva 1-(amino(2-aminofenil)metil)-2-naftolt állítottak elő. Az így nyert trifunkciós vegyületet paraformaldehiddel reagáltatva a naft[1,2-*e*][1,3]oxazino[3,4-*c*]kinazolint izoláltak. A diamin-származék benzaldehid és/vagy foszgénes gyűrűzárásával további új szubsztituált naft[1,2-*e*][1,3]oxazino[3,4-*c*]kinazolin-származékok szintetizáltak.

Vizsgálták a királis módosítóként használt cinkona alkaloidok szerkezetének hatását az (*E*)-2-(2-metoxifenil)-3-(4-metoxifenil)propénsav enantioszelektív hidrogénezésére Pd katalizátoron. Cinkonin és a metil étere ellentétes konfigurációjú terméket eredményezett feleslegben. Azonban a cinkonidin sorban nagyobb szubsztituensek szükségesek ahhoz, hogy az enantioszelektivitás iránya megforduljon. Az eredményeket a királis felületi centrum

alakjának fokozatos változásával magyarázták, amit a szubsztituens növelése idéz elő, mivel ennek hatására a módosító kölcsönhatása a savval illetve a felülettel gyengül. E hatások alapján magyarázható a cinkona éterekkel megfigyelt enantioszelektivitás-csökkenés, illetve az inverzió. Cinkona alkaloidok elegyeinek vizsgálata néhány esetben kisebb vagy nagyobb enantioszelektivitást eredményezett mint a két egyedi komponens, ami a két cinkona alkaloid származék kölcsönhatásának tulajdonítható.

Az aktivált prokirális ketonok cinchonidinnel módosított Pt-Al2O3 királis katalizátoron történő enantioszelektív hidrogénezésének tanulmányozása során elsőként vizsgálták a ketonok különböző összetételű elegyeinek hidrogénezését. Reaktánsok: piroszőlősav etilészter, fenilglioxilsav metilészter, ketopantolakton, 2,2-dimetoxiaceton, 2,2-dietoxiacetofenon, 2,2,2-trifluoro-acetophenone. A reaktánsok változatos szerkezetű elegyeinek hidrogénezését tank reaktorban, valamint állóágyas, átáramoltatásos rendszerű reaktorban vizsgálva fontos kísérleti eredményekre, köztük eddig nem ismert jelenségekre lehetett szert tenni. Nevezetesen bizonyos reaktánsok (R1, R2) kettős összetételű elegyeik racém hidrogénezésében $k_{R1} > k_{R2}$, míg ugyanezen elegy királis hidrogénezésében $k_{R2} > k_{R1}$. A jelenség különböző összetételű felületi komplexek adszorpciós tulajdonságainak és reaktivitásának különbözőségeire utalt (Pt-R1, Pt-R2, Pt-CD-R1, Pt-CD-R2, CD=cinchonidine). 2,2-Dietoxiacetofenon királis hidrogénezésekor az Orito reakcióra jellemző sebességnövekedés helyett sebességcsökkenés volt megfigyelhető a racem hidrogénezéshez képest.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Az előállított új vegyületek a szintetikus szerves vegyiparban és különösen a gyógyszeriparban fontos többfunkciós királis biofor építőelemek előállítását jelenthetik.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

A kutatócsoport továbbra is szoros kapcsolatot ápol a potsdami egyetem kémiai intézetével. Bilaterális együttműködés keretében 2010–2011 időszakra MÖB-DAAD közös kutatócsere pályázatot nyertek. Új együttműködés kezdődött a Turkui Svéd Egyetem (Abo Akademi University) Szerves Kémia Tanszékével. A kutatócsoport néhány tagja részt vesz a Gyógyszerkémiai és a Szerves Kémiai tanszékeken folyó oktató munkában: projektmunkák irányításában, valamint a doktori képzésben.

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

A kutatócsoport kutatásait az Országos Tudományos Kutatási Alap támogatta (K72065, K75433, NK81371).
Sikeres Baross Gábor pályázatot nyertek az MTA-SZTE Keringésfarmakológiai Kutatócsoporttal közösen: Aritmiák és szívelégtelenség kezelésére alkalmas Na+/Ca2+ kicserélő gátlószerek szintézise és gyógyszerjelöltté fejlesztése 2010 06. 01.–2012 05. 31.

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Szatmári I, Fülöp F: Solvent-free synthesis of 1-(hydroxyquinolyl)- and 1-(hydroxyisoquinolyl)-1,2,3,4-tetrahydroisoquinolines by modified Mannich reaction. Synthesis, 745-748 (2011)

2. Szatmári I, Fülöp F: Simple access to pentacyclic oxazinoisoquinolines via an unexpected transformation of aminomethylnaphthols. Tetrahedron Lett. 52: 4440-4442 (2011)

3. Csütörtöki R, Szatmári I, Mándi A, Kurtán T, Fülöp F: Synthesis of hydroxynaphthyl-substituted α-amino acid derivatives via a modified Mannich reaction. Synlett, 1940-1946 (2011)

4. Csütörtöki R, Szatmári I, Koch A, Heydenreich M, Kleinpeter E, Fülöp F: Synthesis and conformational analysis of new naphth[1,2-*e*][1,3]oxazino[3,4-*c*]quinazoline derivatives Tetrahedron 67: 8564-8571 (2011)

5. Nonn M, Kiss L, Forró E, Mucsi Z, Fülöp F: Synthesis of novel isoxazoline-fused cyclic β-amino esters by regio- and stereoselective 1,3-dipolar cycloaddition. Tetrahedron 67: 4079-4085 (2011)

6. Balázsik K, Szőri K, Szőllősi Gy, Bartók M: The first case of competitive heterogeneous catalyzed enantioselective hydrogenation of ketones. Chem. Commun. 47: 1551-1552 (2011)

7. Balázsik K, Szőri K, Szőllősi Gy, Bartók M: New phenomenon in competitive hydrogenation of binary mixtures of activated ketones over unmodified and cinchonidine-modified Pt/alumina catalyst. Catal. Commun. 12: 1410-1414 (2011)

8. Szőllősi Gy, Busygin I, Herman B, Leino R, Bucsi I, Murzin D Y, et al. (2): Inversion of the enantioselectivity in the hydrogenation of (E)-2,3-diphenylpropenoic acids over Pd modified by cinchonidine silyl ethers. ACS Catalysis 1: 316-1326 (2011)

9. Szőllősi Gy, Makra Zs, Fülöp F, Bartók M: The First Case of Competitive Heterogeneously Catalyzed Hydrogenation using Continuous-Flow Fixed-Bed Reactor System: Hydrogenation of Binary Mixtures of Activated Ketones on Pt-Alumina and on Pt-Alumina-Cinchonidine Catalysts. Catal. Letters 141: 1616-1620 (2011)

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	5	Ebből kutató[2]:	4
PhD, kandidátus:	3	MTA doktora: 0	Rendes tag és levelező tag: 1
A kutatóhelyhez kötődő akadémikusok száma[3]:			0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:			2

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				17
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				17
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	17
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	17
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	37,351	Összes független hivatkozás száma:	681
Összes hivatkozás száma[11]:	986		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora: 0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			2
	poszterek száma:		2
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 3			

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			2
Témavezetések száma: TDK munka:	4	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	2	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	23 600	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 0 Teljes saját bevétel:	34 000	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	3	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	31 500	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	2500	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	0	EFt

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 2011-ben

β-amiloid 1-42 ($A\beta_{42}$) monomer-oligomer keverék előállítása. A neurotoxikus konformáció és az aggregáció fok, valamint az Aβ toxicitás közötti összefüggések tisztázása. Az $A\beta_{42}$ konformáció változás időbeli lefutásának nyomonkövetése koncentráció, hőmérséklet és pH-függése. Kétértelmű kationok (Mg^{2+}, Ca^{2+} és Zn^{2+}) hatása az aggregációra (TEM-, AFM és DLS- mérések)

Plazmonikus tulajdonságú, szférikus és rúd alakú arany illetve ezüst nanorészecskék szabályozott szintézise. Az előállított nemesfém nanorészecskék felületi funkcionalizálása egyszerű aminosavakkal, kispeptidekkel illetve nagyobb fehérjékkel potenciális orvosdiagnosztikai felhasználásuk céljából. A kialakított nanométeres tartományba eső nano-biokonjugátumok fiziológiás körülmények közötti stabilitásának tanulmányozása, a funkcionalizálás hatására bekövetkező plazmonikus tulajdonságok megváltozásának numerikus (FEM) számolásokkal való értelmezése. Mag-héj szerkezetű fényporok előállítása. Felületi plazmon rezonancia (SPR) vizsgálatok. Optikai szenzorként alkalmazható ón-oxid ill. indium-ón-oxid (ITO) vékonyrétegek kifejlesztése.

II. A 2011-ben elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Megállapították (CD mérések, TEM és AFM vizsgálatok), hogy az $A\beta_{42}$ az aggregáció során egy komplex kémiai egyensúly alakul ki és a kezdeti oligomer egy oligomer-protofibrillum-fibrillum keverékké alakul át, amelyben csak részben vannak β-redőzött réteg szerkezetek. Az $A\beta_{42}$ egy belsőleg rendezetlen proteinnek (IDP) tekinthető. Toxicitásvizsgálatok alapján nem nevezhető meg kitüntetett toxikus aggregációs fok (dimer, hexamer, dodekamer, stb), hanem maga a komplex oligomer-protofibrillum keverék felelős a toxicitásért. A Mg^{2+} és Ca^{2+} ionok lassítják, a pH csökkenése, a koncentráció és a hőmérséklet növelése gyorsítja az aggregációt. Zn^{2+} ionok hatása az $A\beta_{42}$ aggregációt gyorsítja, a polipeptidlánc N-terminálisának hisztidinjeihez kapcsolódva.

Arany, ezüst illetve eltérő arányú arany/ezüst homogén illetve mag-héj szerkezetű ötvözet nanorészecskéket szintetizáltak, a részecskék felületét aminosavval, peptidekkel (*L*-cisztein, *L*-glutation) és nagyobb fehérjékkel (pl. lizozim) funkcionalizálták. Tanulmányozták, hogy állandó elektrolit koncentráció mellett hogyan változik széles pH tartományban az aggregáció mértéke illetve a részecskék felületi töltése. A kutatócsoport mindemellett sikeresen előállított fiziológiás körülmények között stabil, fehérjével stabilizált arany szolokat is. Ezeknek a szoloknak a fluoreszcenciás vizsgálatánál megfigyelték az arany és a lizozim plazmonikus kapcsolását, mivel mind az emissziós mind a gerjesztése színképek jellegzetes változásokat mutattak. Különböző Au nanorudak előállítását is elvégezték R=2-3 méretarány tartományban. Az Au nanorudakat bevonták polielektrolitokkal, amelyek lehetővé tették az arany rudak különböző fehérjékhez való kapcsolását. HRP-vel (horseradish peroxidase)

funkcionalizált arany nanorudakat is készítettek, amelyek felhasználása a sejtszintű terápiában mérvadó lehet. Az arany nanorészecskék funckionalizálása mellett arannyal bevont SPR chippeken is tanulmányozták a biológiailag aktív molekulák kötődését, meghatározták azok felületigényét is. Vizsgáltak továbbá olyan mag-héj szerkezetű, szilika réteggel bevont fényporokat (Y_2O_3:Eu^{3+}), amelyeknek lehetséges jövőbeli felhasználásuk a kontrollált hatóanyag leadás. Monodiszperz gömb alakú cink-oxid (ZnO) nanorészecskéket is előállítottak, melyekből Langmuir-Blodgett (LB) filmeket készítettek potenciális szenzorikai felhasználásuk céljából. Az előállított filmek karakterisztikus optikai tulajdonságainak vizsgálata során meghatározták az elkészített filmek effektív törésmutatóját is. Nanokristályos szerkezettel rendelkező, transzparens és vezető indium ón oxid (ITO) filmeket is előállítottak.

b) Párbeszéd a tudomány és a társadalom között

Előadásokat tartottak (SZAB székház, Szeged) a nanotechnológia gyakorlati alkalmazásáról, az új tulajdonságokkal rendelkező nanoszerkezetű anyagok ipari előállítási lehetőségeiről. Megismertették a hallgatósággal a bioszenzorok működését és azok alkalmazását a környezetvédelemben és az orvosi diagnosztikában. Nanomedicina címmel előadássorozatot tartottak egyetemi hallgatóknak. A legfontosabb kutatási eredményekről rendszeresen közöltek információkat a helyi és az országos médiával.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2011-ben

- SZTE, Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék – Nemesfémek plazmonikus tulajdonságainak numerikus értelmezése.
- SZTE ÁOK, Neurológiai Klinika – Kinurénsav nanokapszulázása, fehérjékkel való kölcsönhatásának tanulmányozása.
- SZTE ÁOK, Élettani Intézet – Rúd alakú arany nanorészecskék diagnosztikai alkalmazása.
- Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching, Németország – Plazmonikus számolások Au/Ag core-shell nanorészecskékre.
- SOTE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet – Az $A\beta_{42}$ aggregáció-fibrilláció vizsgálata.
- University of Kuopio-East Finland,– Az $A\beta_{42}$ aggregátumok neurotoxicitásának mérése
- University of Edinburgh– Az $A\beta_{42}$ in vivo hatásainak vizsgálata állatmodelleken

IV. A 2011-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

- Magyar–Francia TéT, Új (nem sebészi) eljárások a peri-implantáris gyulladások kezelésére TiO_2-Au-Ag maghéj kompozitokkal
- Nemzeti Technológiai Program-TECH-09-A2-2009.0129 NANOSTER, Egészségre ártalmatlan sterilizáló szerek kifejlesztése, 2009-2012, 82,98 M Ft

V. A 2011-ben megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Földi I, Datki ZL, Szabó Z, Bozsó Z, Penke B, Janáky T: Proteomic study of the toxic effect of oligomeric Aβ1-42 in situ prepared from 'iso-Aβ1-42', J Neurochem 117: (4) 691-702 (2011)
2. Janzsó G, Bogár F, Hudoba L, Penke B, Rákhely G, Leitgeb B: Exploring and characterizing the folding processes of Lys- and Arg-containing Ala-based peptides: A molecular dynamics study. Comput Biol Chem 35: (4) 240-250 (2011)

3. Juhasz G, Foldi I, Penke B: Systems biology of Alzheimer's disease: How diverse molecular changes result in memory impairment in AD, Neurochem Int 58: (7) *739-750* (2011)
4. Leitgeb B, Janzsó G, Hudoba L, Penke B, Rákhely G, Bogár F: Helix and H-bond formations of alanine-based peptides containing basic amino acids, Struct. Chem. 22: (6) 1287-1295 (2011)
5. Oláh J, Vincze O, Virók D, Simon D, Bozsó Z, Tőkési N et al. (14, Penke B): Interactions of pathological hallmark proteins: Tubulin polymerization promoting protein/p25, {beta}-amyloid and {alpha}-synuclein.. J. Biol. Chem. 286: (39) 34088-34100 (2011)
6. Virok DP, Simon D, Bozso Z, Rajko R, Datki Z, Balint E, (10 Penke B): Protein Array Based Interactome Analysis of Amyloid-beta Indicates an Inhibition of Protein Translation. J. Proteomre Res. 10: (4) 1538-1547 (2011)
7. Ábrahám N, Sebők D, Papp S, Kőrösi L, Dékány I: Two-dimensional arrangement of monodisperse ZnO particles with Langmuir-Blodgett technique, Colloids and Surfaces Physiochemical and Engineering Aspects, 384(1-3) 80-89 (2011)
8. Kőrösi L, Papp S, Dékány I: Preparation of transparent conductive indium tin oxide thin films from nanocrystalline indium tin hydroxide by dip-coating method, Thin Solid Films, 519 (10) 3113-3118 (2011)
9. Bujdosó T, Hornok V, Dékány I: Thin films of layered double hydroxide and silver-doped polystyrene particles, Applied Clay Science, 51(3) 241-249 (2011)
10. Beke S, Kőrösi L, Sugioka K, Midorikawa K, Dékány I: Three-dimensionally embedded indium tin oxide (ITO) films in photosensitive glass: a transparent and conductive platform for microdevices, Applied Physics A materials science & processing, 102(2) 265-269 (2011)
11. Szalai A, Sipos A, Csapó E, Hornok V, Tóth LT, Csete M, Dékány I: Numerical investigation of the plasmonic properties of bare and cysteine-functionalized silver nanoparticles, Plasmonics: Metallic Nanostructures and their optical properties IX Book, Proceedings of SPIE, 8096, Article Number: 80963B DOI: 10.1117/12.894015
12. Fatouros DG, Power K, Kadir O, Dekany I, Yannopoulos SN, Bouropoulos N, (10): Stabilisation of SWNTs by alkyl-sulfate chitosan derivatives of different molecular weight: towards the preparation of hybrids with anticoagulant properties, Nanoscale, 3(3) 1218-1224 (2011)
13. Yang YY, Csapó E, Zhang YL, Süßmann F, Stebbings SL, Duan XM, (9, Dékány I): Optimization of the Field Enhancement and Spectral Bandwidth of Single and Coupled Bimetal Core–Shell Nanoparticles for Few-Cycle Laser Applications, Plasmonics, online first: 2 September, 2011, DOI: 10.1007/s11468-011-9281-9

VI. A kutatóhely főbb mutatói 2011-ben

A kutatóhely neve: SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

1. LÉTSZÁMADATOK

Átlaglétszám[1]:	8			Ebből kutató[2]:	7
PhD, kandidátus:	5	MTA doktora:	0	Rendes tag és levelező tag:	0
A kutatóhelyhezkötődő akadémikusok száma[3]:					0
35 év alatti, intézeti állományban levő fiatal kutatók száma[4]:					4

2. PUBLIKÁCIÓK

Az év folyamán megjelent összes (tud. és ismeretterjesztő) publikáció száma[5]:				23
Az év folyamán megjelent összes tudományos publikáció száma[6]:				18
Tanulmány, cikk[7] *hazai* tud. folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
külföldi folyóiratban	magyarul:	0	idegen nyelven:	18
Ebből impaktfakt. publ, térkép	magyarul:	0	idegen nyelven:	18
Könyv[8]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0
Könyvrész, könyvfejezet[9]	magyarul:	0	idegen nyelven:	0

3. HATÁSTÉNYEZŐS ÉS IDÉZETTSÉGI MUTATÓK

Összesített impaktfaktor[10]:	55,003	Összes független hivatkozás száma:	658
Összes hivatkozás száma[11]:	733		

4. TUDOMÁNYOS FOKOZAT, ILL. CÍM MEGSZERZÉSE 2011-BEN

Tud. fokozat megszerzése[12]:	PhD:	1	MTA doktora:	0

5. SZELLEMI ALKOTÁSOK VÉDELME

Nemzeti úton megadott oltalmak száma[13]: 0	külföldi oltalmak száma[14]: 0

6. RÉSZVÉTEL A TUDOMÁNYOS KÖZÉLETBEN

Nemzetközi rendezvényen tartott tudományos előadások száma[15]:			5
	poszterek száma:		15
Nemzetközi tud. bizottsági tagság: 0	Nemzetközi folyóirat szerk. tagság:		0
Tanácsadói tevékenységek száma[16]: 3			

7. A HAZAI FELSŐOKTATÁSBAN VÉGZETT TEVÉKENYSÉG

Rendszeres hazai felsőfokú oktatási tevékenységet végzők száma[17]:			4
Témavezetések száma: TDK munka:	3	Diplomamunka (BSc):	2
Diplomamunka (MSc):	0	PhD:	2

8. PÉNZÜGYI ADATOK

Az időszak folyamán a teljes költségvetési támogatás összege[18]:	22 400	EFt
Fiatal kutatói álláshelyek száma[19]: 1 Teljes saját bevétel:	41 500	EFt
Saját szabadalmi és szerzői jogi bevétel:	0	EFt
Az év folyamán művelt OTKA pályázati témák száma:	2	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	4500	EFt
Az év folyamán az Innovációs Alapból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	9000	EFt
Az év folyamán művelt egyéb hazai pályázati témák száma:	0	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	0	EFt
Az év folyamán uniós forrásból támogatott témák száma:	1	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	15 000	EFt
Az év folyamán egyéb külföldi forrásból támogatott témák száma:	3	
A tárgyévre vonatkozó bevétel:	5000	EFt
A tárgyévre vonatkozó vállalkozási és nem kutatási bevétel:	8000	EFt