

A WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT

**RÉSZECSCKE- ÉS MAGFIZIKAI INTÉZETÉNEK
ÉS
SZILÁRDTESTFIZIKAI ÉS OPTIKAI INTÉZETÉNEK**

2022-2026. évi kutatási stratégiai koncepciói

Beküldve: 2021.04.19.

Elfogadva: 2021.06.22.

Alapvető kölcsönhatások elméleti vizsgálata

Felfedező célú kutatásaink célja elsősorban az **erős** és a **gravitációs kölcsönhatások tulajdonságainak meghatározása**, különös tekintettel azokra az objektumokra és jelenségekre, amelyek megértésénél ez a két kölcsönhatás dominál. Az elméleti fizika egyik meghatározó eredménye a 100 évvel ezelőtt kidolgozott általános relativitáselmélet, amely megalapozta a gravitációs kölcsönhatás klasszikus térelméleti leírását. Másik mérföldkő az 50 évvel ezelőtt felismert kvantumszíndinamika (QCD), amely az erős kölcsönhatás kvantumtérelmélete, s rajta keresztül megértettük sok elemi részecske viselkedését, jobban megismertük az atommagok ismertetőjegyeit, és meghatározhattuk az Univerzumot megszületésekor kitöltő korai anyagállapot, a kvark-gluon plazma egyes tulajdonságait. Ugyanakkor rengeteg kérdés maradt megválaszolatlanul. Így nem ismerjük a QCD-egyenletek egzakt megoldásait, a kvarkbezárás és a dinamikus tömeggenerálás pontos leírását, nem értjük a hadronok tömegspektrumának sajátosságait. Számos egzotikus hadron állapot felfedezése várat magára, ahogy sok a fehér folt az erősen kölcsönható forró, sűrű anyag fázisdiagrammján is. A gravitáció területén is hasonló a helyzet: ugyan ismerjük a relativitáselmélet néhány egzakt megoldását, de általános esetben numerikus megoldásokra vagyunk utalva, ahol már a 2-test probléma kezdeti értékének megadása is egy komoly feladat. Ezeken a kutatási területeken nagyon sok olyan jelenséget ismerünk, amelyek jobb megértése, esetleg pontos leírása továbbra is óriási intellektuális kihívást jelent, s ezért továbbra is nagyon vonzó a legokosabb és legfelkészültebb fiatalok számára. Mindez alátámasztja és megalapozza az erős és gravitációs kölcsönhatás együttes tanulmányozásának koncepcióját, a területen további felfedező kutatások folytatását.

Napjainkban új, forradalmi eredményeket várunk a gravitációs hullámok sikeres detektálásától. A nagy tömegű kettős objektumok (feketelyukak, neutroncsillagok) összeolvadásakor gigantikus energiakitörés történik és nagyon erős gravitációshullám-jel keletkezik, amit ma már akkor is látni tudunk modern detektorainkkal, ha sokmillió fényév távolságban történik. A jelek között sikerült olyat is találni, amelyek két neutroncsillag összeolvadására utaltak, s ez a folyamat csak a gravitációs és az erős kölcsönhatás törvényeinek együttes alkalmazásával írható le. Ugyanakkor lehetőséget is nyújt arra, hogy tovább fejlesszük a numerikus gravitációelméleti leírások módszereit, csakúgy, mint a hipersűrű, alacsony hőmérsékletű, de az ütközés során felforrósodó neutroncsillag-anyag tulajdonságainak elméleti, az erős kölcsönhatáson alapuló leírását. A kapott eredményeket a csillagászok az elektromágneses hullámokkal (infravörstől, a látható spektrumon keresztül egész a röntgen-tartományig) végzett megfigyeléseikkel erősíthetik meg. Ezzel elérkeztünk a „multi-messenger” csillagászat interdiszciplináris területéhez, amely az utóbbi években indult. Ha még azt is felismerjük, hogy a vasnál nehezebb elemek (pl. az arany vagy az urán) jelentős része nem szupernóva robbanásokban, hanem valószínűleg neutroncsillagok ütközése során keletkezett, akkor azt találjuk, hogy a neutroncsillagok belső szerkezete határozza meg a mai környezetünkben található nehéz elemek eloszlását. Ezen jelenségek megértésének a kulcsa a gravitációs és az erős kölcsönhatás jellemvonásainak részletes megismerése, a neutroncsillagok szerkezetének, összetételének, az ütközésekkel együtt járó dinamikai folyamatok megértése.

Az erős kölcsönhatás kvantumtérelméleti leírásának jobb megértéséhez járult hozzá az utóbbi évtized egyik fontos eredménye, a holografikus dualitás. Ennek alkalmazásával egyes speciális, erősen kölcsönható térelmélet négydimenzióra kiterjesztett változatát sikerült egzaktul leírni: egy négydimenziós, legszimmetrikusabb mértékelméletet képeztünk le integrálható, kétdimenziós húrelméletre – a kétdimenziós integrálható modellek pedig már egzaktul megoldhatók. Erre az eredményre alapozva, a megoldott négydimenziós mértékelméletet referenciapontként használva, a következő években a holografikus dualitást olyan, erősen kölcsönható modellekre tervezzük kiterjeszteni, melyek kisebb szimmetriával rendelkeznek és jobban hasonlítanak a QCD-re.

A QCD elmélete olyan egzotikus részecske állapotok létezését is felveti, amelyekben sok kvark és antikvark, vagy sok gluon, esetleg kvarkok és gluonok együtt jelennek meg. A 2021-ben megjelent hírek egy új részecskecsalád legkönnyebb tagjának felfedezéséről szóltak: a kvarknélküli, páratlan számú gluont tartalmazó Odderont találta meg a TOTEM együttműködés a CERN-ben. Az egzotikus részecske kimutatásában, az adatok értelmezésében az Osztály munkatársainak alapvető szerepe volt, amely megalapozza, hogy a következő években is fontos szerepet játszanak ezekben a kutatásokban. Tovább folytatják a rugalmas proton-proton szórás adatainak elemzését és azok összehasonlítását a proton-antiproton szórás adataival. Jóslatokat tesznek a közeljövőben

elvégzendő rugalmas proton-proton szórás kísérletek eredményeire. A cél egy megalapozott ERC Advanced Grant pályázat beadása az Odderon tulajdonságainak teljes feltárására.

Fontos stratégiai célunk az erősen kölcsönható, sűrű, forró anyag tulajdonságainak, fázisainak leírása. Ilyen forró anyag alkotta az Ősrobbanás (Big Bang) pillanata után az Univerzumot. Az ultra-relativisztikus energiájú atommagok (nehézionok) ütköztetésével ez az állapot újra előállítható laboratóriumi körülmények között (CERN LHC ALICE és a BNL RHIC PHENIX együttműködések kísérletei). Az elméleti kutatások és elemzések ezekre az adatokra támaszkodnak a következő években. A neutroncsillagok anyagának tanulmányozásához a befejezéshez közeledő GSI FAIR gyorsító CBM detektoránál szerezhetünk értékes adatokat a következő években. Fenomenologikus leírást adunk az erősen kölcsönható anyag forró, nagy sűrűségű állapotaira, hozzájárulva az erősen kölcsönható anyag tulajdonságainak, fázisdiagrammjának pontosabb leírásához.

Az elméleti gravitációs kutatások területén az egyik hosszú távú célunk az Einstein egyenletek olyan térben lokalizált, szingularitás-mentes megoldásainak vizsgálata, melyek vákuumbeli gravitációs hullámoknak - geonoknak - felelnek meg. Vizsgálni tervezzük a komplex skalármezőket tartalmazó ún. Q-ball megoldásokat, amelyek többek között bozon csillagoknak felelhetnek meg.

Kiemelt cél a feketelyuk-kettősök összeolvadásának a megértése, mert ezek olyan gravitációs hullámokat keltenek, amelyeket a következő generációshullám-obszervatóriumok, így az Einstein-teleszkóp vagy az űrbe telepítendő LISA detektálhatnak. Az elméleti leírások kulcsa a kezdőérték-probléma korrekt kezelése. Sikeresen alkalmaztunk olyan, geometria által motivált mértékrögzítést, mely a kényszer- és evolúciós-egyenletek új típusú kezelésével a feketelyuk-probléma megoldását is lehetővé teszi. A világszínvonalú numerikus módszert tovább fejlesztjük. A gravitációshullámok kísérleti kutatásában a Virgo együttműködés keretében veszünk részt. Korszerű hullámformajólásokat dolgozunk ki gyenge tér közelítésben, ezzel a folyamatban lévő gravitációshullám-megfigyelésekhez és paraméterbecslési vizsgálatokhoz járulunk hozzá. Keressük ezek erős gravitációs térbeli viselkedését.

Elemi kvantummechanikai rendszerek azon ('legklasszikusabb') állapotait keressük, melyekben az egymással fel nem cserélhető operátorok szórása telíti a megfelelő határozatlansági relációt. A probléma tisztázása szükséges azon kérdés megválaszolásához, hogy a klasszikus határesetben hogyan lehet a háromdimenziós euklidészi tér metrikus geometriáját elemi kvantummechanikai rendszerek tulajdonságaiból származtatni. E kérdés természetesen kiterjesztése, hogy a Minkowski téridő metrikus struktúrája is származtatható-e így. További kérdés, hogy a klasszikus téridő görbültsége, a gravitáció is visszanyerhető-e így térelméleti rendszerekből; ill. mi az az extra input, ami a gravitációt alapvetően jellemző kvantum dekoherálást adja.

Az Elméleti Osztályon tevékenykedő magfizikus, részecskefizikus, asztrorészecske-fizikus, valamint gravitációs hullámok megfigyelésével, numerikus gravitációval foglalkozó kutatók (nemzetközileg is igen ritka) együttműködésében neutroncsillagok vizsgálatával foglalkozó elméleti kutatólaboratóriumot tervezünk alakítani, ahol a neutroncsillagok sűrű anyagának tulajdonságait, a csillagok szerkezetét, rezgéseit és neutroncsillag-kettősök ütközésének dinamikáját kutatjuk, s vizsgáljuk ezek hatását a kisugárzott gravitációs hullámokra. Ehhez modern relativisztikus térelméleti módszereket használunk a legmodernebb általános relativitáselméleti eljárásokkal és intelligens numerikus módszerekkel.

Kutatási koncepciónk az adottságaink - nemzetközileg is nagyon erős, sikeres, és elismert gravitációs, általános relativitásos és nehézionfizikával, erős kölcsönhatással foglalkozó csoportok - és napjaink fontos, aktuális tudományos problémái határozzák meg. Egyrészt az eddig is sikeres és Magyarországon egyedi kutatások folytatását, másrészt a tudományos képzettségünk és ismereteink újszerű összekombinálásából adódó új, ígéretes kutatási irányok indítását fogalmazzuk meg. Az eltervezett kutatások végrehajtása lehetővé tenné számunkra, hogy számos szakterületen elérjük, vagy megőrizzük nemzetközi vezető szerepünket. Az ERC pályázat elnyerése demonstrálná és tovább növelné a kiválóság alapuló hazai kutatások versenyképességét. Munkatársaink a kutatás mellett részt vesznek az egyetemi oktatásban, diákok témavezetésében, együttműködnek számos más európai és magyar kutatóintézetrel és egyetemmel. A közvetlen társadalmi hasznosság mellett hosszútávon is profitálhatunk az alapvető természeti jelenségek megértése révén.

Ahogy a CERN-beli fejlesztések is elvezettek a világháló kialakulásához, számítástechnikai fejlesztéseink is megtermékenyítően hathatnak. Erős számításgigényű, nagy adattömegű numerikus módszerek párhuzamosítását és hibrid számítástechnológiai architektúrákra (parallel CPU, GPU, FPGA) történő optimalizálását végezzük hazai és nemzetközi tudományos együttműködésekben (VIRGO, ALICE, PHAROS). Kvantumszámítógép-szimulációkat készítünk. Ipari partnerekkel új

nagysebességű hardverközelí numerikus és mesterséges intelligencia alapú eljárásokat fejlesztünk. Komplex nagyskálájú számítási rendszereket (Petaflop Analysis Facility) is tervezünk.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

T. Gombor, Z. Bajnok:

Boundary states, overlaps, nesting and bootstrapping AdS/dCFT
JHEP 10 (2020) 123 • e-Print: 2004.11329 [hep-th]
impakt faktor: 5.875

T. Csörgő, T. Novák, R. Pasechnik, *et al.*

Evidence of Odderon-exchange from scaling properties of elastic scattering at TeV energies.
Eur. Phys. J. C **81**, 180 (2021). <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-021-08867-6>
impakt faktor: 4.389

P. Kovács, Zs. Szép, Gy. Wolf,

"Existence of the critical endpoint in the vector meson extended linear sigma model"
Phys. Rev. D93, (2016) 114014; arXiv:1601.05291
impakt faktor: 4.568

Gy. Wolf, G. Balassa, P. Kovács, M. Zétényi, S.H. Lee:

Mass shift of charmonium states in $\bar{p}A$ collision,
Phys. Lett. B 780, 25 (2018).
impakt faktor: 4.384

K. Csukás, I. Rácz, and G. Z. Tóth,

Numerical investigation of the dynamics of linear spin s fields on a Kerr background: Late-time tails of spin $s=\pm 1, \pm 2$ fields
Phys. Rev. D100 (2019) 104025
impakt faktor: 4.833

D. Barta, M. Vasuth:

Fast prediction and evaluation of eccentric inspirals using reduced-order models
Phys. Rev. D97 (2018) 124011
impakt faktor: 4.368

P. Pósfay, G. G. Barnaföldi and A. Jakovác,

The effect of quantum fluctuations in compact star observables
Publ. Astron. Soc. Austral. 35 (2018) 19 • e-Print: 1710.05410 [hep-ph]
impakt faktor: 5.067

L. B. Szabados and P. Tod:

A review of total energy-momentum in GR with a positive cosmological constant,
Int. J. Mod. Phys. D28 (2019) 1930003 (2019), arXiv: 1808.09265 [gr-qc]
impakt faktor: 2.154

G. Fodor and P. Forgács:

Anti-de Sitter geon families,
Phys. Rev. D96, (2017) 084027
impakt faktor: 4.394

T.S. Biró, V.G. Czinner, H. Iguchi and P. Ván:

Volume dependent extension of Kerr-Newman black hole thermodynamics,
Phys. Lett. B803 (2020) 135344
impakt faktor: 4.384

Alapvető kölcsönhatások: nagyenergiás kísérleti fizika

A nemzetközi felfedező kutatások élvonalába tartozik az alapvető kölcsönhatások tanulmányozása. A kölcsönhatások természetét általában közvetítő terek matematikai leírásán keresztül értjük meg. Három kölcsönhatást sikerült kvantumozni szinten is értelmezni. Így jöttek létre az elektromágneses, a gyenge és az erős kölcsönhatások természetét leíró kvantumtérelméletek, majd ezeket sikerült egyesíteni a Standard Modellnek nevezett rendszerben, amely segítségével a legtöbb esetben több tizedesjegy pontosan reprodukálni tudjuk a fizikai kísérletek eredményeit. A Standard Modell az emberiség egyik legkomplexebb, egyúttal legpontosabb alkotása, segítségével nemcsak megérthetjük a környezetünkben található jelenségeket, hanem nagy pontossággal addig ismeretlen jelenségeket is meg tudunk jósolni az általunk eddig ismert energiatartományban. Ugyanakkor azt is megértettük, hogy ez a sikeresség egy magasabb energiatartományban már nem lesz igaz, ott a Standard Modellt tovább kell fejleszteni, ki kell terjeszteni. Ezért épülnek az egyre nagyobb gyorsítók és ezért koncentrálódnak a nagyenergiás fizikai kutatások a Genf mellett található CERN világlaboratóriumba. Magyarország 1992 óta tagja a CERN-nek, a Wigner FK-ból közel 50 kolléga és diák tudományos munkája kapcsolódik a CERN különböző felfedező jellegű alapkutatói programjához.

A nagyenergiás fizikai kutatások legfontosabb, egyúttal legígéretesebb projektjei jelenleg a CERN 27 km kerületű Nagy Hadronütköztetőjénél (LHC: Large Hadron Collider) folynak. A 2010-ben megkezdett kísérletek tudományos programja 2035-ig került megtervezésre. Párhuzamosan megkezdődött egy 100 km kerületű gyorsító megvalósíthatóságát vizsgáló projekt is. Ennek a gyorsítónak lesz a feladata a Standard Modellen túli világ részecskéinek felfedezése, a köztük lévő kölcsönhatások tanulmányozása.

A Wigner FK kutatói és mérnökei 30 éve aktívan részt vesznek a CERN-es kutatásokban és kutatás-fejlesztési programokban, a Wigner FK fogja össze a hazai nagyenergiás fizikai kutatások legtöbb projektjét. Az Nagyenergiás Fizikai Osztály (NFO) kutatócsoportjai részt vettek a Nobel-díjjal jutalmazott Higgs-bozon megtalálásában és tulajdonságainak részletes tanulmányozásában (CMS együttműködés), valamint a világegyetemet a kezdetekkor kitöltő, erősen kölcsönható anyag tulajdonságainak feltérképezésében (ALICE együttműködés). Hazánkban a CERN-es kutatások kapujaként átfogjuk a kísérleti nagyenergiás részecske- és magfizika széles területeit: a kérdésfeltevésektől és kísérleti javaslatok kidolgozásától, a detektorok és gyorsítóelemek fejlesztésétől és építésétől kezdve, a berendezések üzemeltetésén és az adatok felvételén keresztül az adatok kiértékelésig, valamint az eredmények értelmezéséig. Kutatásaink komplex, csúcstechnológiát alkalmazó berendezései mellett, hogy az alap kutatásban áttörést hoznak, régóta a technológiai fejlődés mozgatórugói is. A szükséges csúcstechnológiás fejlesztések eljutnak számos területre (számítástechnikai, ipari és orvosi alkalmazások).

Korábbi eredményeinkre alapozva hosszú távú célunk az aktív részvétel a tudományterület nyitott kérdéseinek megoldásában: az alapvető kölcsönhatások egyesítése, a sűrű anyag vizsgálata és a világegyetem kezdeti állapotának megértése, a világegyetem hiányzó anyagának megtalálása és új típusú részecskék felfedezése. A közelmúltban már elért – illetve a közeljövő gyorsító-technológiai fejlesztéseinek köszönhetően elérhetővé váló – energiákon akár eddig ismeretlen, alapvető kölcsönhatások is megjelenhetnek. Terveinkben alapozhatunk a Wigner FK-ban meglévő és fejlesztendő technikai háttérre (mikrostrukturális- és gázdetektor laboratórium, szupravezető mágnes laboratórium, ultrarövid impulzusú lézer laboratórium, DAQ laboratórium, FPGA/GPU heterogén fejlesztő-laboratórium).

Kutatási és fejlesztési stratégiánk a következő négy pilléren alapul:

Felfedező kutatások. Főbb kutatási témáink az LHC ALICE és CMS nagyenergiás kísérleteihez, közelebről az erős kölcsönhatás és új kölcsönhatási folyamatok kutatásaihoz kapcsolódnak. Az LHC következő kísérleti üteme várhatóan 2023 tavaszán kezdődik. A magyar vállalások szempontjából hangsúlyos adatfelvétel mellett (2022-24, Run3), vezető szerepet játszunk a kvark-gluon plazma legkisebb cseppjeinek nehéz kvarkokkal történő vizsgálatában, a kis rendszerekben kimutatható kvantum-szindinamikai folyamatok területén, valamint az előreszórás fizika és a gluonok alkotta állapotok (gluonlabdák) kísérleti kimutatásában. Egyes korábbi mérések az erős kölcsönhatás egy újfajta kvázi-részecskéjének megjelenésére utalnak, ezt tovább kívánjuk vizsgálni. Új kölcsönhatási folyamatok és részecskék keresésének eredményeit elsősorban a szuperszimmetria modellje által adott keretek között értelmezzük, ezzel egyidőben keresni fogjuk a szuperszimmetria megjelenésére utaló kísérleti eredményeket. Olyan modelleket is vizsgálunk, amelyek nem tételeznek fel új

részecskéket a neutrínó szektoron túl. A jóval az LHC energiák fölötti skálákat közvetett módszerekkel tervezzük tanulmányozni. Közülük a legígéretesebbek a részecskék elektromos dipólusmomentumát kereső kísérletek. Lézertérrel és plazmahullámmal működő gyorsítók kifejlesztéséhez kapcsolódva vizsgáljuk nagyintenzitású, ultrarövid lézerimpulzusok és anyag kölcsönhatását.

Gyorsítótechnológia. Új, innovatív részecskegyorsító komponensek kifejlesztése és újfajta, plazmaközeg alapú kompakt gyorsítók tervezésében és megvalósításában való részvétel. Célunk olyan technológiai központ és kompetenciák kialakítása, amelyekkel a kutatócsoportjaink növekvő sikerrel részt tudnak venni nemzetközi projekteken, így bekapcsolódási pontokat teremtenek a hazai ipar számára. Jelenleg két H2020 projektben is részt veszünk, melyek ugyanezeket a célokat tűzték ki a nemzetközi szinten. Az új mágneskonstrukciók és prototípusok kidolgozásán keresztül, valamint a lézerrel létrehozott plazma használatával, a jelenlegi eszközök alkalmazhatósága két irányban is kiterjeszhető: még nagyobb energiát előállító gyorsítók területén (Future Circular/Linear Collider [FCC/ILC]) másrészt a kisebb méretek, gazdaságosabb megvalósítás és üzemeltetés felé (kisméretű "asztali" lézer-plazma gyorsítók, orvosi alkalmazás, hadronterápia). Távlati célunk egy hosszú plazmacsatorna kialakítása illetve a szegedi ELI-ALPS lézerközponttal együttműködve gyorsított ionnyalábok létrehozása.

Detektorfejlesztés. A fejlődés élvonalába tartozó technológiák (félvezető, szcintillációs, gáz- és mikrostruktúras detektorok) meghonosítása és tudományos célú alkalmazása, továbbfejlesztése az ipari és orvosi hasznosítás irányában. A LHC későbbi, még nagyobb intenzitású működésére készülve (2027-, Run4), egy-egy új laboratórium felállításával részt veszünk nagy kísérletek új, szilícium alapú nyomkövető detektorainak fejlesztésében (ALICE ITS3) és gyártásában (CMS P2OT), továbbá ezen a területen fejlesztünk neutrínófizikához köthető kísérletekhez is (NA61). A félvezető detektorok alkalmazhatósága rendkívül sokrétű, az egyik ilyen fejlesztésünk a hadronterápiás képalkotást célozza monolitikus aktív pixel szilícium technológiával (MAPS). Másik fontos területünk a kozmikus részecskékkel való leképezés, aminek eredményei már most is közvetlenül hasznosíthatók (földalatti üregek és nagyobb struktúrák feltérképezése, vulkánkitörések dinamikájának megértése). Csoportjaink a CERN-en keresztül a legmodernebb technológiákhoz férnek hozzá: alkalmazás specifikus integrált áramkörök (ASIC), rugalmasan programozható logikai áramkörök (FPGA), optoelektronikai eszközök. A detektorfejlesztési tevékenység a HORIZON2020 program keretében fontos anyagi támogatást ad.

Adatgyűjtési és információs technológia. Egyes új technológiai megoldások, heterogén architektúrák alkalmazása, továbbá kísérleti fizikai rendszerek fejlesztése. Céljaink között szerepel – párhuzamosítható feladatok esetén – heterogén architektúrájú (CPU+GPU és CPU+FPGA) rendszerek felépítése, fejlesztése, amelyeket nyomkövető berendezések adatainak feldolgozására használunk. Az ilyen rendszereknek kiváló felhasználási lehetőségei nyílnak az Internet of Things világában, sőt a „Big Data” feldolgozásában is jelentős szerepet fognak játszani.

A megszerzett tapasztalatok társadalom számára közvetlenül és már rövid távon is hasznosulhatnak: jó példa erre az FCC projekt keretén belül az általunk kifejlesztett mágnes technológia alkalmazása orvosi gyorsítók esetében. Kiemelten fontosnak tartjuk a természettudományi kutatások eredményeinek terjesztését, a tudományos és műszaki pályák vonzóbbá tételét. Vezető kutatóink gimnáziumi és egyetemi előadásai, az általunk szervezett különféle rendezvények igazoltan irányítanak tehetséges fiatalokat természettudományos és műszaki pályákra.

A fenti elképzelések jól beleillenek az európai tervekbe, megerősítik a magyar elkötelezettséget (Kormány, NKFIH) az európai Detector és Accelerator R&D Roadmap irányába, a Joint ECFA-NuPECC-APPEC (JENAS) együttműködési tervvel összhangban. Mindezek széles nemzetközi együttműködések keretében valósulnak meg: gyorsítók esetében a HITRIplus, az I.FAST, az EuPRAXIA (H2020) illetve a CERN AWAKE; a félvezető detektorok esetében az INFN, a DESY/Helmholtz, az ETHZ/PSI, a HEPHY/ÖAW intézetekkel; gáz- és mikrostruktúras detektorok esetében az INTENSE és az AIDA2020 (H2020), MAGMA; sokféle tudományközeli felhasználással (a CERN kísérletei, U Bergen proton-CT).

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

S. Acharya et al. incl. G.G. Barnaföldi, G. Bencédi, D. Berényi, G. Bíró, L. Boldizsár, G. Hamar, P. Lévai, D. Varga, Z. Varga, M. Varga-Kőfaragó, R. Vértési [ALICE Collaboration],
Unveiling the strong interaction among hadrons at the LHC,
Nature 588 (2020) 232, (IF=42,779)

S. Acharya et al. incl. G.G. Barnaföldi, G. Bencédi, D. Berényi, G. Bíró, L. Boldizsár, G. Hamar, P. Lévai, D. Varga, Z. Varga, M. Varga-Kőfaragó, R. Vértési [ALICE Collaboration],
Production of light-flavor hadrons in pp collisions at $\sqrt{s}=7$ and $\sqrt{s}=13$ TeV, Eur.
Phys. J. C 81 (2021) 256, (IF=4,389)

V. Khachatryan et al. incl. G. Bencze, C. Hajdu, A. Házi, P. Hidas, D. Horváth, F. Siklér, V. Veszprémi,
G. Vesztergombi, A.J. Zsigmond [CMS Collaboration],
Measurement of long-range near-side two-particle angular correlations in pp collisions at $\sqrt{s}=13$ TeV,
Phys. Rev. Lett. 116 (2016) 172302, (IF=8,462; cited 67 times)

A.M. Sirunyan et al. incl. G. Bencze, C. Hajdu, D. Horváth, Á. Hunyadi, F. Siklér, T.Á. Vámi, V. Veszprémi,
G. Vesztergombi [CMS Collaboration],
Observation of Higgs boson decay to bottom quarks, Phys.
Rev. Lett. 121 (2018) 121801, (IF=9,227; cited 98 times)

D. Barna, M. Novák, K. Brunner, G. Kirby, B. Goddard, J. Borburgh, M.G. Atanasov, A.S. Ull, E.
Renner, W. Bartmann, and M. Szakály,
Conceptual design of a high-field septum magnet using a superconducting shield and a canted-
cosine-theta magnet,
Rev. Sci. Instrum. 90 (2019) 053302

[AWAKE Collaboration],
Proton Bunch Self-Modulation in Plasma with Density Gradient,
Phys. Rev. Lett. 125 (2020) 264801, (IF=8,385)

G. Demeter,
Propagation of ultrashort resonant ionizing laser pulses in rubidium vapor,
Phys. Rev. A 99 (2019) 063423

D. Varga, G. Nyitrai, G. Hamar, L. Oláh,
High efficiency gaseous tracking detector for cosmic muon radiography, Adv.
High Energy Phys. 2016 (2016) 1962317

G. Hamar, D. Varga, TCPD:
A micropattern photon detector hybrid for RICH applications,
Nucl. Instrum. Meth. A 849 (2017) 25

A. László, Z. Zimborás,
Quantification of GR effects in muon g-2, EDM and other spin precession experiments,
Class. Quant. Grav. 35 (2018) 175003

Funkcionális anyagok kutatása

A funkcionális anyagok a jövő globális kihívásaira és az ipar versenyképességének növelésére kínálhatnak innovatív megoldásokat, többek között a fenntartható fejlődés, információtechnológia (IT), környezeti problémák és a különféle betegségek leküzdése biokémiai vonatkozásainak témaköreiben.

A Nukleáris Anyagtudományi Osztályon (NAO) folytatott felfedező kutatásának célja, hogy a jelenségek pontosabb megismerésével, a nanoszerkezetű és a molekuláris anyagok tulajdonságainak és viselkedésének áttervezésével, a kutatás eredményeképpen javasolt új anyagok jellemzésével és tesztelésével előkészítse a funkcionális anyagok célzott, alkalmazott kutatását, majd az arra épülő innovatív termékfejlesztést. A kutatásokat többek között az unikális, nagy energiájú sugárzásra épülő érzékeny és szelektív lokális szondák alkalmazása emeli ki a hasonló kutatások közül.

A NAO kutatási témái a funkcionális molekulákhoz és nanostruktúrákhoz kapcsolódnak. Ezek a kor számos gazdasági és társadalmi kihívása közül például új IT-alapanyagok kifejlesztésére vagy környezetszennyező anyagok eliminálására nyújthatnak megoldást. A molekuláris rendszerek és a mágneses nanostruktúrák IT-potenciálja jelentős gazdasági megtérüléssel kecsegtet a felfedező kutatásokra épülő fejlesztések eredményeképp. Molekuláris szintű átalakulások állnak a molekuláris adattároló és kapcsoló eszközök, molekuláris napenergia-hasznosító rendszerek, katalizátorok, enzimek működése mögött; ezek használatba vételéhez és hatékonyabbá tételéhez meg kell ismerni a folyamatok részleteit. Funkcionális molekulákra vagy megfelelő alakú és anyagú nano- és heteroszerkezetekre építve létrehozhatók napfény hatására aktiválódó anyagok/eszközök/bevonatok, amelyek a légkör vagy a vizek szennyezőinek semlegesítését képesek katalizálni. Multiferroikus vékonyrétegekből és rétegszerkezetekből energiahatékony mágneses tárolóeszközök, vagy éppen miniatürizált hűtőgépek építhetők. Ionimplantációval – az alkalmazásoknak megfelelően – megváltoztathatók az anyagok felületi (mechanikai, optikai, mágneses, stb.) tulajdonságai.

A NAO-t a Wigner FK három kiváló kutatócsoportja alkotja; ezek a Femtoszekundumos Spektroszkópiai és Röntgenspektroszkópiai "Lendület" (femto-X) Kutatócsoport, a Funkcionális Nanostruktúrák kutatócsoport (amely belső kiválósági pályázaton kétszer is elnyerte a Wigner-kutatócsoport címet), és az Ionnyaláb-fizikai kutatócsoport. Az első úttörő eredményeket ért el a fényel aktivált funkcionális molekulák működési mechanizmusának kutatásában, a második a nevében is jelzett módon a nanostruktúrák készítésében és jellemzésében, míg a harmadik az ionnyaláb-anyag-kölcsönhatás vizsgálatában.

A kutatócsoportok kutatási feladatait és terveit, valamint jövőképeket alapvetően az elnyert és jelenleg is futó kiválósági pályázataik határozzák meg. Ezek mind funkcionális anyagok kutatásához kötődnek; ehhez használják, illetve üzemeltetik a Wigner FK nyílt hozzáférésű [Funkcionális anyagok laboratóriumát](#) (FunMatLab), amely [Magyarország legfontosabb kutatási infrastruktúrái közé tartozik](#). A FunMatLab egyesíti az Ionnyaláb-analitikai és implantációs laboratóriumot, a GINA polarizált neutronreflektometert, a nanorétegek előállítására szolgáló Molekulanyaláb-epitaxia (MBE)-, a Mössbauer-, valamint a Kémiai technológiai és izotóplaboratórium kutatási infrastruktúrákat. Ezek mellett épült ERC-támogatással a Nagy energiafelbontású röntgenspektroszkópiai és -optikai fejlesztőlaboratórium, illetve Lendület-támogatásból egy fs-időfeloldású tranziens optikai abszorpciós spektroszkópiai berendezés. Új lézerforrás létesült egy **VEKOP-projektből (VEKOP_2.3.2-16-2017-00015; 2017-2022)**, továbbá épül időfelbontott fluoreszcencia-berendezés, illetve femtoszekundumos stimulált Raman-szórás (SRS) vizsgáló spektrométer egy **NKP-projektből (2018-1.2.1-NKP-2018-00012; 2018-2023)**; utóbbiak kitöltik az optikai abszorpciós és röntgenes módszerekkel elérhető információ hézagait. Az SRS-berendezés az ELI-ALPS-nál is üzemeltethető lesz.

A NAO kutatási feladatai a berendezések komoly és folyamatos fejlesztését igénylik, hogy az osztály egyedülálló – nemzetközi szinten is versenyképes – hazai eszközparkját folyamatosan az élmezőnyben lehessen tartani. A NAO a FunMatLab-nál keletkező mérési adatokat a [FAIR](#) (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) elveinek megfelelően fogja kezelni.

A rendelkezésre álló infrastruktúra potenciálisan fizetőképes ipari vizsgálatok, anyagminősítések, stb. elvégzésére, illetve pályázatok keretében idelátogató kutatók fogadására is használható; például a **H2020-as IPERION HS projekt (2020-2023)** keretében már folyik a kulturális örökség tárgyainak vizsgálata. Az újonnan kialakított laboratóriumi röntgenspektrométer is alkalmas mintajellemzési, minőség-biztosítási feladatok ellátására. A kutatások közben fejlesztett módszerek és eszközök eladható termé-

kek prototípusait is megteremthetik, amelyeket tudástranszfer keretében felajánlhatók fejlesztőmérnököknek konkrét termékek kifejlesztésére. Több laboratóriumban tartanak emelt szintű hallgatói laboratóriumi gyakorlatot, képzéssel járulva hozzá az egyetemi oktatás magas színvonalához.

Az említett infrastruktúrák és kutatások nemcsak hazai viszonylatban egyedülállóak, de szervesen kapcsolódnak modern nemzetközi trendekhez is. Röntgenspektrométerek fejlesztése folyik az ELI-BEAMLINES-nál V4-támogatással, a svájci SwissFEL-nél szakértőként, az Európai XFEL-nél együttműködő partnerként. A NAO kutatói az LCLS és a SACLA XFEL-ek, továbbá az ESRF, APS, SLS, Soleil szinkrotronok, valamint számos további külföldi nagyberendezéseknek is felhasználói. A NAO főbb hazai együttműködő partnerei közül a Wigner FK SZFI-n kívül az Energiatudományi Kutatóközpont intézetei, az Atomki és a Természettudományi Kutatóközpont emelhető ki. Ezeket az együttműködések az egymást kiegészítő kompetenciák és műszerezettségek teszik előnyössé. A vállalati szférából eseti együttműködések említendők a MIRRORTRON Műszaki Fejlesztő és Szolgáltató Kft-vel és az EvoBlocks Kutató-Fejlesztő Kft-vel.

A femto-X kutatócsoport a 2022-2026-os években fő feladatának a funkcionális molekulák fejlesztését tartja; ebben az elektronszerkezet-modellezésen alapuló intenzív elméleti tervezőmunka mellett nagy szerepet játszanak az unikális röntgenspektroszkópiái és a hagyományosabb optikai szondákkal végzett ultragyors vizsgálatok. A fénnel aktivált funkcionális molekulák a napenergia hasznosításán keresztül a molekuláris kapcsolókig számos alkalmazásra találhatnak; jelenleg kutatóközponton belüli együttműködés folyik átmenetifém-alapú kapcsolható elektron- és mágneses állapotú molekulák nanorészecskékre történő integrálására, speciális transzport- és optikai tulajdonságú egységek kialakítása céljából (**PD-OTKA 2019-2022, PD-OTKA 2020-2023**).

A nagy áthatolóképességű sugárzásra épülő, elem- és spinszelektív, a lokális atomi szerkezetről és a célatom elektronszerkezetéről gazdag információt szolgáltató keményröntgen-spektroszkópiák viszonylag kevésbé ismertek és elterjedtek az anyagok jellemzésére használt technikák között. Ugyanis jószerivel csak nagyberendezéseknél (szinkrotronoknál és röntgen-szabadelektronlézereknél (XFEL)) érhetők el, és egészen mostanáig hiányzott a közbülső lépés, a megfelelő hatékonyságú laboratóriumi berendezés, amellyel – például a röntgendiffrakcióhoz hasonlóan – elvégezhető egyszerűbb minták kutatási vagy minőségbiztosítási célú rutinvizsgálata, illetve amely alkalmas az oktatásba történő bevonásra. A lágy- és keményröntgen-sugárzás közé eső tartományra pedig (ahová olyan, technológiai és biológiai szempontból releváns elemek, mint a P, S, és Cl K éle esik), most indult egy spektrométer fejlesztése egy **NKFIH-projekt (SNN 135636, 2020-2023)** keretében, együttműködve a TTK-val.

A Funkcionális Nanostruktúrák kutatócsoport fő feladata a 2022–2026 időszakban multiferroikus vékonyrétegekből és rétegszerkezetekből készíthető eszközök modellanyagainak vizsgálata és fejlesztése lesz. A fenntartható fejlődés egyik kulcskérdése az energiatakarékosság növelése, illetve az üvegházhatású gázok használatának visszaszorítása. Ilyen szempontból a légkondicionáló berendezések, illetve a különféle hűtőberendezések a legpazarlóbb használati tárgyaink közé tartoznak. A kutatócsoport kutatásai során maszktechnikával kombinált ionbesugárzással, illetve fókuszált lézeres hőkezeléssel laterálisan is nanoméretűvé tett mintázatú multiferroikus vékonyrétegekből és rétegszerkezetekből készíthető energiahatékony mágneses tárolóeszközök, valamint e rendszerek multikalorikus hatását felhasználó környezetbarát és hatékony miniatürizált hűtőegységek modellanyagait fogja fejleszteni.

Az Ionnyaláb-fizikai kutatócsoport feladatai a 2022–2026 időszakban egyrészt ionnyaláb-analitikai tevékenységhez kötődnek; a kutatócsoport elsősorban anyagtudományi és a kulturális örökséggel kapcsolatos analitikai vizsgálatokat lát el. Másrészt az ionimplantáció elemi folyamatait vizsgálják különféle anyagi rendszereken, illetve ennek felületmódosító hatásait használják ki különféle alkalmazásokra; ezek a kutatások a funkcionális anyagtudomány körébe tartoznak, és mint ilyenek szervesen kapcsolódnak mikroelektronikai, optoelektronikai, magnetooptikai és szenzorikai alkalmazásokhoz, de ugyanakkor a szilárdtest-fizikai kutatáshoz is. Az optikai távközlésben és a biokémiai érzékelőkben használt egyre fontosabb szerepet játszó elemeket és eszközöket (pl. sík és csatorna-hullámvezetőket) ionbesugárzással is elő lehet állítani. A tervezett kutatások és fejlesztések nagy része arra irányul, hogy az eszközök minden funkcióját egyetlen szeleten integrálják. Modellkísérletek fogják megmutatni, hogy az ionimplantálás és ionbesugárzás fotonikus integrált áramkörök előállítására is alkalmazható-e.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

Kunnus K, Vacher M, Harlang TCB, Kjær KS, Haldrup K, Biasin E, van Driel TB, Pápai M, Chabera P, Liu YZ, Tatsuno H, Timm C, Källman E, Delcey M, Hartsock RW, Reinhard ME, Koroidov S, Laursen MG, Hansen FB, Vester P, Christensen M, Sandberg L, Németh Z, Sárosiné Szemes D, Bajnóczi É, Alonso-Mori R, Glowina JM, Nelson S, Sikorski M, Sokaras D, Lemke HT, Canton SE, Møller KB, Nielsen MM, Vankó Gy, Wärnmark K, Sundström V, Persson P, Lundberg M, Uhlig J, Gaffney KJ: Vibrational wavepacket dynamics in Fe carbene photosensitizer determined with femtosecond X-ray emission and scattering.

NATURE COMMUNICATIONS 11: 1 Paper: 634, 11 p. (2020). IF: 12.121

Maroni P, Gvaramia M, Kosior D, Kubiak K, Scarratt L, Smith AM, Merkel DG, Bottyán L, Borkovec M: Structuring of colloidal silica nanoparticle suspensions near water-silica interfaces probed by specular neutron reflectivity.

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 22: 11 pp. 6449-6456. 8 p. (2020). IF: 3.430

Merkel DG, Lengyel A, Nagy DL, Németh A, Horváth ZsE, Bogdán Cs, Gracheva MA, Hegedűs G, Sajti Sz, Radnóczy GyZ, Szilágyi E: Reversible control of magnetism in FeRh thin films.

SCIENTIFIC REPORTS 10: 1 Paper: 13923, 11 p. (2020). IF: 3.998

Sárosiné Szemes D, Keszthelyi T, Papp M, Varga L, Vankó Gy: Quantum-chemistry-aided ligand engineering for potential molecular switches: changing barriers to tune excited state lifetimes.

CHEMICAL COMMUNICATIONS 56: pp. 11831-11834., 4 p. (2020). IF: 5.996

Németh Z, Bajnóczi ÉG, Bogdán Cs, Vankó G: Laboratory EXAFS determined structure of the stable complexes in the ternary Ni(II)-EDTA-CN⁻ system.

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 21: 18 pp. 9239-9245. 7 p. (2019). IF: 3.430

Dias MI, Kasztovszky Zs, Prudêncio MI, Valera AC, Maróti B, Harsányi I, Kovács I, Szőkefalvi-Nagy Z: X-ray and neutron-based non-invasive analysis of prehistoric stone artefacts: a contribution to understand mobility and interaction networks.

ARCHAEOLOGICAL AND ANTHROPOLOGICAL SCIENCES 10: 6 pp. 1359-1373., 15 p. (2018). IF: 1.978

Rácz AS, Kerner Z, Németh A, Panjan P, Péter L, Sulyok A, Vértesy G, Zolnai Z, Menyhárd M: Corrosion Resistance of Nanosized Silicon Carbide-Rich Composite Coatings Produced by Noble Gas Ion Mixing.

ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES 9: 51 pp. 44892-44899., 8 p. (2017). IF: 8.097

Deák L, Bottyán L, Fülöp T, Merkel DG, Nagy DL, Sajti S, Schulze KS, Spiering H, Uschmann I, Wille H-C: Realizing total reciprocity violation in the phase for photon scattering.

SCIENTIFIC REPORTS 7: Paper: 43114, 8 p. (2017). IF: 4.122

Biasin E, van Driel TB, Kjær KS, Dohn AO, Christensen M, Harlang T, Chabera P, Liu Y, Uhlig J, Pápai M, Németh Z, Hartsock R, Liang W, Zhang J, Alonso-Mori R, Chollet M, Glowina JM, Nelson S, Sokaras D, Asefa TA, Britz A, Galler A, Gawelda W, Bressler C, Gaffney KJ, Lemke HT, Møller KB, Nielsen MM, Sundström V, Vankó G, Wärnmark K, Canton SE, Haldrup K: Femtosecond X-Ray Scattering Study of Ultrafast Photoinduced Structural Dynamics in Solvated [Co(terpy)₂]²⁺.

PHYSICAL REVIEW LETTERS 117: 013002 (2016). IF: 8.462

Pápai M, Vankó Gy, Rozgonyi T, Penfold TJ: High-Efficiency Iron Photosensitizer Explained with Quantum Wavepacket Dynamics:

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS 7: pp. 2009-2014. 6 p. (2016). IF: 9.353

Naprendszerkutatás űrszondákkal

Az űrből fenyegető veszélyek és az űrgazdaságban rejlő hatalmas potenciál miatt elsődleges fontosságú a Naprendszert kitöltő anyag és az égitestek kölcsönhatásának (az űridőjárásnak), illetve az űrbéli por és egyéb szemcsék eloszlásának és dinamikájának vizsgálata. Nem elegendő azonban a földközeli hatások tanulmányozása, az előrejelzéshez és kárcsökkentéshez a Nap közelében zajló kiváltó folyamatokat, a hatások űrbéli terjedésének mikéntjét, és mindezek tudományos mozgatórugóit is ismernünk kell. A globális terjedési modellek mellett elengedhetetlen a napszél eredetű hatások és a magnetoszférák kölcsönhatásának jobb megismerése. Ez a kölcsönhatás más és más arcát mutatja a Naprendszer különböző égitestjeinél, a különbségek és hasonlóságok vizsgálata az alapvető tudományos jelentőségen túl fontos információkkal szolgál a Föld körüli térségben bekövetkező folyamatokról is. A kutatás módszere a Nap és a Naprendszer égitestjei és építőelemei (bolygók, holdak, aszteroidák, üstökösök és por) közötti fizikai folyamatok, továbbá a bolygók kozmikus környezetének űrszondás eszközökkel történő megfigyelése, valamint az így nyert adatok feldolgozása és kiértékelése elméleti és numerikus eszközökkel. Ehhez elengedhetetlen a részvétel nemzetközi űrkutatási projektek előkészítésében és megvalósításában.

Az űr hatalmas veszélyeket és felmérhetetlen lehetőségeket tartogat. A földtörténet során bekövetkezett drasztikus éghajlati változások és kihalási események jelentős részét űrbéli hatások okozták; ugyanakkor az egyre jelentősebb űrgazdaság nélkül már most elképzelhetetlen lenne a nemzetvédelem, kommunikáció, műsorszórás, navigáció és sok egyéb iparág. Ezen túlmenően, földi laborokban nem vizsgálható, alapvető fizikai folyamatokat is megismerhetünk az űrbéli jelenségek tanulmányozásán keresztül. Az űrt tehát kutatni kell, hogy felkészüljünk a veszélyekre és kiaknázzuk a sokasodó előnyöket.

Az űrkutatás sikerének kulcsa – a kiváló személyi feltételeken túl – elsősorban a résztvevő kutatócsoportok nemzetközi beágyazottsága. A Wigner FK Űrfizikai és Űrtechnikai Osztályának kutatói évtizedek óta sikeres résztvevői számos kutató űrmisszióknak, ideértve mind a bolygók és üstökösök környezetének kutatását, mind a bolygóközi teret tanulmányozó és a napközeli térségben helyszíni méréseket végző űrszondákat. Kutatóink kiépítették azt a kapcsolatrendszert és azokat a mechanizmusokat, amelyek hosszú távon is biztosítják a nemzetközi űrmissziókban való részvételünket; mérnökeink fedélzeti és földi támogató rendszerekkel járulnak hozzá a küldetésekhez. Mindezek garantálják, hogy a belátható jövőben továbbra is sikeresen tudjuk művelni a mélyűr titkainak űrszondás feltárását.

Az űrkutatás társadalmi haszna rendkívül sokrétű. Egyfelől az űrkutatási eszközök a világ technológiai élvonalát képviselik, az űrkutatásban való részvétel biztosítja, hogy az azzal foglalkozó kutatóegységek és kapcsolódó vállalkozások megismerhessék a legmodernebb eszközöket és technológiákat, és kimagaslóan magas hozzáadott érték arányú termékeket hozhassanak létre. Az űrgazdaság egy egyre gyorsuló ütemben fejlődő terület, amelynek nemzetgazdasági jelentősége ezzel arányosan növekszik. Talán még ennél is fontosabb, hogy az emberiségnek meg kell ismernie és fel kell mérnie az űrből fenyegető veszélyeket, és a veszélyek csökkentésének lehetséges módjait. Az óriás napkitörések vagy pl. az űrszemét akár már holnap, de az elkövetkező évszázadban szinte bizonyosan jelentős gazdasági és társadalmi károkat okoznak, ha a jelenség jobb megismerésével nem tesszük lehetővé a kárenyhítést.

A megkezdett kutatások folytatásaként a nemrég lezárult Rosetta (üstökös-kutató), Cassini (Szaturnusz-kutató), valamint több korábbi űrszonda adatainak kiértékelésében veszünk részt, az összegyűjtött adatmennyiség évekre elegendő felfedeznivalót biztosít. A folyamatban lévő űrmissziók közül dolgozunk a Cluster földközeli űrszonda-flotta adatain, a BepiColombo Merkúr-kutató, és a belső Naprendszer felderítését végző Solar Orbiter programon. A jövőbeli adatellátottságunk biztosítása végett munkatársaink részt vesznek a JUICE Jupiter-kutató és a Comet Interceptor üstökös misszió előkészítésében. Ezen túl több űridőjárás megfigyelő űrszonda, és a következő magyar űrhajós tudományos programjában is részt kívánunk venni, melyek előkészítő munkálatai érintik a tervezési időszakot.

A fenti adatokra támaszkodva a napszél és a kapcsolódó űridőjárás folyamatok vizsgálatát végezzük szinte a Nap közelében lévő forrásfelülettől egészen a Plutón túlig, a Helioszféra külső határáig. A belső Helioszférában zajló folyamatok modellezésével jobban megértjük az űridőjárás események kialakulását és bolygóközi terjedését. A kifejlesztett komplex modellek lehetővé teszik az űridőjárás

„megjósolását” egy adott helyen a Naprendszerben, a Helioszféra más pontjaiban végzett mérések eredményeit felhasználva.

Másik nagy kutatási területünk az égitestek körül kialakuló mágnesezett plazma-környezetek (a magnetoszférák) belső folyamatainak tanulmányozása. Ezekben az égitest esetleges saját mágneses terén túl meghatározó szerepe van a magnetoszférán belül található anyagforrások hatásának. Ezen hatás különböző megjelenési formáit fogjuk tanulmányozni üstökösöknél és bolygók környezetében is. Nagyon fontos szerepe van a plazmában található pornak is, amit szintén vizsgálni fogunk. Mind a napszél mind a magnetoszférák irányából közelítve eljutunk a talán legfontosabb feladathoz, ami az űridőjárás folyamatok magnetoszférákra gyakorolt hatásának vizsgálata. Ezt a Merkúr, Vénusz, üstökösök és óriásbolygók környezetében is vizsgálni fogjuk, az eredményeket összevetve a Földnél mért adatokkal.

Egy további fontos feladat az űrfizika máig meg nem értett alapvető fizikai folyamatainak kutatása. Ebből a mágneses átcsatolódást (rekonnekció), a napszél kaotikus és turbulens folyamatait és a mágnesezett plazma instabilitásokat tervezzük vizsgálni a kérdéses időszakban.

Új projektek megkezdését is tervezzük. Néhány évszázadonként óriás napviharok sújtják a Földet, melyek katasztrofális hatással lehetnek egy elektronikán alapuló civilizációra a kommunikációs, navigációs és villamos-energia hálózatok megbénításával. Az okozott kárt billió dolláros nagyságrendűre becsülik, a hosszan tartó áramszünetek és kommunikációs problémák emberi életek millióit veszélyeztethetik. Előzetes kutatásaink során rábukkantunk egy lehetőségre, mellyel az óriás napviharok hatásai enyhíthetők lennének. Ha a napkitörés sűrű plazmája és felerősödött mágneses tere nem tudna kölcsönhatásba lépni a magnetoszférával, a geomágneses energia felépülés és felszabadulás elkerülhető lenne. Előzetes számításaink szerint a kölcsönhatás elvileg megelőzhető a napvihar frontjának kilyukasztásával. Egy ilyen védekező rendszer létrehozásához szükséges technológia már ma is rendelkezésre áll, de a Nap-Föld kölcsönhatás annyira változékony és bonyolult, hogy gondos és kiterjedt kutatás szükséges a koncepció tudományos megalapozásához. Egy tervezett új projektben azokat a vizsgálatokat szándékozzuk elvégezni, amelyek alapján felmérhető lesz egy napviharok elleni védekezőrendszer megvalósíthatósága. A vizsgálatokkal előmozdítjuk a bolygóközi anyag és a bolygók környezetének kölcsönhatásával foglalkozó tudomány fejlődését, továbbá a Nap-Föld kapcsolat, valamint a bolygók környezetének a külső hatásokra adott válaszána jobb megértését. A koncepció nemzetközi szinten is alapvető újdonságot jelent, az eddigi passzív megismerés mellett felvetve az űridőjárás veszélyeivel szembeni aktív védekezés lehetőségét.

Hiánypótló tudományos műszerek fejlesztését tervezzük a közeljövőben az új magyar űrhajós tudományos programjával összefüggésben. A Wigner FK-ban a részecske- és szilárdtestfizikai kutatások és fejlesztések során felhalmozott tapasztalatok és innovatív ötletek alapján az űrkutatásban eddig nem elérhető mérési tartományokat célzunk meg, mind pontosságban, mind méretben is jelentős javulást tervezünk a napjainkban használt műszerek paramétereikhez képest. Ennek a fejlesztésnek az egyik kulcseleme lesz a két évvel ezelőtt a Csillagászati és Földtudományi Kutatóközponttal együtt Nagycenken elkezdett „Nulla mágneses tér laboratórium” létrehozása. Itt az űrbélihez hasonló (minimális erősségű) mágneses környezet megteremtésével lehetővé válik speciális, űrben is alkalmazható műszerek kifejlesztése és földi bemérése, valamint egyéb, alacsony mágneses teret igénylő űrfizikai kísérletek elvégzése. Ezzel egy olyan kutatási infrastruktúra jön létre, amely alkalmas űreszközök mágneses tisztaságának, szennyezettségének vizsgálatára, az űrbéli körülmények bizonyos aspektusainak földi szimulálására, műszerek kalibrálására. A Laboratóriumban anyagvizsgálati, geológiai, szilárdtestfizikai, sőt speciális biológiai és orvosi kutatások is végezhetők majd párhuzamosan az űrkutatási feladatokkal. Első felhasználása egy az eddigieknél lényegesen pontosabb űrbéli magnetométer kifejlesztése lesz a következő években. Kutatóink nemzetközi beágyazottsága biztosítani tudja a kifejlesztett műszerek többcélú felhasználását a később induló, a Holdat megcélzó, vagy akár a mélyűr tulajdonságait kutató programokban is. Törekedni kívánunk egy jól működő együttműködés kialakítására az újonnan alapított Földfizikai és Űrtudományi Kutatóintézettel, várhatóan velük együtt fejezzük be a Laboratórium létrehozását.

Az Űrfizikai és Űrtechnikai Osztályon jelenleg folyó kutatásokat OTKA, HORIZON2020 és ESA PRODEX pályázatok támogatják, amelyek folytatása várható. Az űrtechnikai fejlesztések tervezett ütemét jelentősen meggyorsítaná, ha a következő években egy állami űrtechnológiai program további forrásokat nyitna meg erre a célra. Az Űrfizikai és az Űrtechnikai Csoport rendelkezik a szükséges

kompetenciákkal. Az extra K+F források kiemelkedő eredmények megszületését tennék lehetővé a 2022-2026 időszakban.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

C. Goetz ... Z. Nemeth...:

First detection of a diamagnetic cavity at comet 67P/Churyumov-Gerasimenko,
ASTRONOMY & ASTROPHYSICS 588 Paper: A24 , 6 p. (2016)

Nyilvános idéző összesen: 82

G. Bertuccio, ... G. Erdos ...:

The THESEUS space mission concept: science case, design and expected performances,
ADVANCES IN SPACE RESEARCH 62 : 1 pp. 191-244. , 54 p. (2018)

Nyilvános idéző összesen: 74

E. Behar ... Z. Nemeth...:

Mass loading at 67P/Churyumov-Gerasimenko: A case study,
GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS 43 : 4 pp. 1411-1418. , 8 p. (2016)

Nyilvános idéző összesen: 51

Z. Nemeth ... A. Timar, K. Szego:

Charged particle signatures of the diamagnetic cavity of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko,
MONTHLY NOTICES OF THE ROYAL ASTRONOMICAL SOCIETY 462 : Suppl_1 pp. S415-S421.
(2016)

Nyilvános idéző összesen: 22

T.S. Horbury ... G. Erdos ...: The Solar Orbiter magnetometer, ASTRONOMY & ASTROPHYSICS
642 Paper: A9 , 11 p. (2020)

Nyilvános idéző összesen: 13

Timar, Z. Nemeth, K. Szego, M. Dosa, A. Opitz ...:

Modelling the size of the very dynamic diamagnetic cavity of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko,
MONTHLY NOTICES OF THE ROYAL ASTRONOMICAL SOCIETY 469 pp. S723-S730. , 8 p. (2017)

Nyilvános idéző összesen: 12

N. André, ... A. Opitz ...:

Virtual Planetary Space Weather Services offered by the Europlanet H2020 Research Infrastructure,
PLANETARY AND SPACE SCIENCE 150 pp. 50-59. , 10 p. (2018)

Nyilvános idéző összesen: 11

D. Vech, ... A. Opitz, K. Szego...:

Statistical features of the global polarity reversal of the Venusian induced magnetosphere in response
to the polarity change in interplanetary magnetic field,
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-SPACE PHYSICS 121 : 5 pp. 3951-3962. , 12 p. (2016)

Nyilvános idéző összesen: 8

Milillo ... M. Dosa ...:

Investigating Mercury's Environment with the Two-Spacecraft BepiColombo Mission,
SPACE SCIENCE REVIEWS 216 : 5 Paper: 93 , 78 p. (2020)

Nyilvános idéző összesen: 6

M. Dósa, and G. Erdős:

Long-term Longitudinal Recurrences of the Open Magnetic Flux Density in the Heliosphere,
ASTROPHYSICAL JOURNAL 838 : 2 Paper: 104 (2017)

Nyilvános idéző összesen: 4

Fizikai elvek, módszerek, nagy bonyolultságú számítások az élő és élettelen intelligencia kutatásában

A Wigner Fizikai Kutatóközpontban és jogelőd intézményeiben az elmúlt évtizedekben folyamatosan megtalálhatóak voltak azok az alapkutatói irányok, amelyek az adott időszak legmodernebb számítástechnikai eszközeit és módszereit igyekeztek használni, hogy korábban megszerzett nemzetközi versenyképességüket megtarthassák. A hazai finanszírozási forrásokra támaszkodva igyekeztünk beszerezni a legmodernebb számítógépeket és létrehozni a legújabb kiszolgáló rendszereket, hogy olyan speciális komputációs feladatokat is végre tudjunk hajtani, amelyre csak kevés helyen volt lehetőség a világban. Ez a stratégia azt is elősegítette, hogy a hazai kutatók sikeresen felkészülhettek a hazai berendezéseken arra, hogy projektjeikkel eljuthassanak a világ legmodernebb tudományos szuperszámítógépeihez és azok használatával nemzetközi elismerést szerezzenek. Ennek eredményeként jött létre 2013-ban a Wigner Adatközpont, amely Közép-Európa legmodernebb komputációs kiszolgáló intézménye. Azonban a legmodernebb hardware beszerzése ma már kevés a nemzetközi versenyképesség fenntartásához, mert magukat a számítógépeket már mindenki meg tudja vásárolni a világpiacon, illetve elérhető a tudományos együttműködéseknek köszönhetően. A tudományos életben sokkal fontosabbá vált az új komputációs módszerek kidolgozása, új elgondolások innovatív összekapcsolása, korábban elérhetetlennek tűnt számítógépes kapacitások alkalmazásának újragondolása. Mindez kiegészül azzal, hogy a különböző tudományterületeken kifejlesztett új komputációs módszerek nagyon sokszor sikeresen átültethetők, alkalmazhatók más területeken is. Ennek a felismerése vezetett a Wigner FK-ban a Komputációs Tudományok Osztálya felállításához, ahol a kutatócsoportok tudatosan alkalmazzák a területek közötti átjárást, egymástól tanulnak, miközben a Wigner FK többi alap és alkalmazott kutatási diszciplínájával is szorosan együttműködnek. Jelenleg Magyarországon ez az egyetlen szellemi műhely, amelynek a felfedező kutatásokra fókuszálva széles együttműködése és kisugárzása van a legmodernebb számítástechnikai eljárások tudományos és esetenként gyakorlati alkalmazása területén. Mindezt a tevékenységet a 2014-ben megalapított Wigner Felhőből kifejlődött ELKH Felhő szolgáltatása és a helyi GPU Laboratórium is támogatja.

A Komputációs Tudományok Osztálya (KTO) és kutatói ezen koncepció mentén kívánnak haladni és a következő négy évben a legújabb komputációs módszerek kifejlesztésével és alkalmazásával kívánják alapkutatói projektjeiket végrehajtani. Ezek a kutatásokat a fizika elveiből, módszereiből merítene, annak természettudományos modellalkotási szemléletét követik, és az adatelemzés, a gépi tanulás legmodernebb módszereinek fejlesztésére koncentrálnak. A kutatások fő területe a biológiai és a mesterséges intelligencia alapkérdéseinek megválaszolása, mélyebb összefüggések feltárása. Jelenleg az emberi és állati kognitív viselkedés alapjait és az idegrendszer működésének törvényeit tanulmányozzuk, valamint a biológiai alapú intelligencia kutatása területén szerzett tapasztalatok és fizikai elméletek ötvözésével a mesterséges intelligencia nagy kérdéseit vizsgáljuk, jelentős nemzetközi sikereket elérve. Az utóbbi években megcéloltuk a kvantumszámítási módszerek és eljárások fejlesztését, ami egyrészt eddig elérhetetlennek tartott számítási kapacitásokat nyithat meg, másrészt annak logikai szerkezete az emberi intelligencia megértéséhez is közelebb vihet.

Elméleti idegtudomány Kutatói stratégiánk alapját olyan új adatelemzési módszerek fejlesztése adja, amelyekkel bizonyos esetekben képesek vagyunk az ok-okozati hatásokat meghatározni pusztán a megfigyelések alapján. Az új módszerekkel új információ nyerhető a meglévő adatokból egy hiba, vagy egy rendkívüli esemény okaira is következtetni lehet. Az Országos Klinikai Idegtudományi Intézetrel együttműködve, a kauzalitás elemzési módszereken alapuló epilepszia diagnosztikai eljárásokat fejlesztünk, ezzel hozzájárulva a műtéti tervezés folyamatához, csökkentve a műtéti mellékhatások mértékét és javítva a műtétek sikerességét. Célunk a széles skálán szerveződő agykéreg, mint idegi hálózat szerkezetének és ezzel összefüggő működésének megértésében kritikus kérdés a különböző szerveződési szintek egymásra épülésének megértése. Praktikus oldalról közelítve a probléma kulcskérdés rendszer szintű betegségek megértésében és a mesterséges intelligencia alapját képező neuronhálózatok kialakításában.

Kognitív idegtudomány Az intelligens biológiai rendszerek leírása a matematika eszközeivel azt a perspektívát kínálja, hogy ki tudjuk alakítani azt az eszköztárat, mellyel mind az emberi agyban zajló komplex folyamatok megérthetőkké válnak, mind pedig olyan mesterséges rendszerek fejlesztéséhez tudunk hozzájárulni, melyek az emberi kognitív képességeket kihasználva jutnak túl a jelenleg elérhető mesterséges intelligencia rendszerek korlátain. A biológiai intelligencia megértése által

inspirált kognitív tudományt és idegtudományt egyaránt nemzetközi szinten őröző és ezeket gépi tanulással kombináló műhely azonban ritkaság és versenyelőnyt jelent a mesterséges intelligencia és idegtudomány új területeinek fejlesztésében. Kutatásaink a gépi tanulás központi komponenseit érintik: a mesterséges látás, tanító nélküli tanulás, probabilisztikus tanulás területein forró témának számít a reprezentáció tanulás, folytonos tanulás, ágens-kölcsönhatások, tömörítés, Bayes-i becslés fejlesztéseit használjuk a látás, tanulás, és memóriefolyamatok matematikai formalizációjára. Ezek a kutatások segítenek abban, hogy a tanulás hatékonyságát példátlan részletességgel térképezzük fel, ember és gép kölcsönhatását következő szintre emelhesünk, az érzékelés matematikájának megértésén keresztül a neurális kód olvasását és írását tegyük hatékonyabbá, és alkalmasint a kognitív rendszereken szerzett tapasztalatainkat ipari együttműködésekben is kamatoztassuk.

Mozgásrehabilitáció Társadalmilag nagy kihívás a mozgásukban károsodott emberek életminőségének javítása, életének meghosszabbítása, mindennapi feladataikban az önállóságuk növelése. Izomingerlő készülékeket és azoknak speciális szabályozását alkalmazva neurorehabilitációs tréning programokat fejlesztünk gerincvelősérült, végtag-bénult személyek számára. Fizikai törvényeken és elveken alapuló megoldást adunk élettudományokban felmerülő tudományos kihívásokra. A kutatásunk eredményeit már alkalmazzák az Országos Orvosi Rehabilitációs Intézet (OORI) napi mozgás-rehabilitációs gyakorlatában. Az emberi végtagmozgások mesterséges szabályozásához algoritmusokat fejlesztünk, amelyek mozgásanalizáló rendszerekkel mért adatoknak, kinematikai és bioelektromos idősoroknak dimenzióredukciós és optimalizációs módszerekkel való elemzésén alapulnak. Ez azt jelenti, hogy a sérült emberek megmaradt mozgási funkcióit mérjük és ezt használjuk fel az elvesztett mozgási funkciók mesterséges szabályozására. A kapcsolatot a mozgásfunkciók között, fizikai elveknek megfelelő módszerekkel tesszük lehetővé. Mozgásszabályozási módszereink a magyarországi, európai és észak-amerikai kutatóközpontok igényeivel kompatibilis fejlesztéseket tesznek lehetővé. Kutatásaink társadalmi relevanciája nemzetgazdasági szinten is jelentős. A gerincvelősérültek, központi idegrendszer sérültek támogatásának a társadalmi költségei óriásiak és egyre csak nőnek.

Kvantumszámítási algoritmusok elmélete Tervezzük a gépi tanulás legradikálisabb területének, a kvantumszámítógépekkel folytatott tanulás vizsgálatát is. Jelenleg multinacionális óriás cégek is nagy erőket fektetnek bele ezen új kutatási irányba. Kutatóintézetünk speciális előnye, hogy egyszerre van jelen a régóta felhalmozott kvantumfizikai és kvantuminformatikai tudás, illetve a gépi tanulással kapcsolatos szakértelem párosul az eredményességhez szükséges számítástechnikai háttér magas szintű ismeretével. Az elmúlt évben szoros kapcsolatot építettünk ki cégekkel, ami fontos lépés az elméleti oldalon megszerzett tudásunk gyakorlati hasznosítása irányába.

Gépi tanulás Az elmúlt években, a HORIZON2020 COMPARE európai együttműködés résztvevőjeként olyan bioinformatikai eszközöket fejlesztünk, amelyek segítik a járványok vizsgálatát, ezen belül a csoport elsősorban az adatbázis-rendszer és adatanalitikai platform fejlesztéséért felelős. Részt veszünk továbbá olyan mesterséges intelligencia alapú módszerek fejlesztésében, amelyek baktériumok genetikai szekvenciái alapján antibiotikum rezisztenciát tudnak meghatározni. Minden big data analízis alap gondolata, hogy megtaláljuk az adatok mögötti, eddig feltáratlan összefüggéseket. Az általunk követett út az, hogy olyan tulajdonságokat (feature) próbálunk az adatokból kinyerni, amely a teljes adathalmazra érvényesek lesznek. Az elmúlt években a matematikai formalizmust már megalkottuk, jelenleg az elvek gyakorlati alkalmazásán dolgozunk. Korábban már igazoltuk, hogy tetszőleges adathalmazra létezik, általában nagyszámú törvény. Ha pedig ismerjük a legfontosabb törvényeket, akkor már készíthetünk egy olyan „egyszerűsített”, de azért viszonylag komplex modellt, amellyel megnyílik az út a gyakorlati alkalmazás előtt.

Ezek a területek lefedik a KTO kutatócsoportjainak jelenlegi kutatási portfólióját. Ugyanakkor várható, hogy a következő 4 évben a komputációs módszerek viharos fejlődése, innovatív technológiai és hardware-megoldások bevezetése új kutatási irányok gyors felemelkedéséhez vezetnek. Ezért egy nagyon izgalmas, egyúttal nagyon termékeny időszakra számítunk a nemrég megalapított KTO életében. A Wigner FK vezetése támogatja, hogy az új diszciplínák képviselői helyet és lehetőséget kapjanak a KTO-n, felmerülhet új kutatócsoportok megalapítása is. Az itt folyó kutatások és fejlesztések számítástechnikai támogatása is fontos stratégiai terület. Így folyamatban van GPU-alapú klaszterek beszerzése és elhelyezése a Wigner Adatközpontban. 2022-re tervezzük egy kvantumszámítógép-emulátorként kiépítését, amely nemcsak a kutatók igényeit elégíti majd ki, hanem megalapozza azoknak a diákoknak a helyi továbbképzését, akiket komolyan érdekelnek a modern fizika kutatási irányai és a későbbiekben a KTO vagy a Wigner FK számos, nagy számítási igényű

csoportjában kívánják tehetségüket és eddig megszerzett tudásukat kamatoztatni, nemzetközi szintű eredményeket elérni.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

D Cserpan, D Meszéna, L Wittner, K Tóth, I Ulbert, Z Somogyvari, D Wojcyk:
Revealing the distribution of transmembrane currents along the dendritic tree of a neuron from extra-cellular recordings
eLife, 6, e29384,
impakt factor: 7.121

Z. Somogyvári, P. Érdi
From phase transitions to the topological renaissance: Comment on “Topdynamics of Metastable Brains” by Arturo Tozzi et al.
Physics of LIF:e Reviews,
impakt factor: 14.83

M. Bányai, A. Lazar, L. Klein, J. Klon-Lipok, M. Stippinger, W. Singer, G. Orbán
Stimulus complexity shapes response correlations in primary visual cortex
Proc Natl Acad Sci USA, (2019) 10.1073/pnas.1816766116,
impakt factor: 9.412

G. Orbán, Berkes P, Fiser J, Lengyel M
Neural variability and sampling-based probabilistic representations in the visual cortex.
Neuron, (2016) 92:530–543.,
impakt factor: 14.403

P Pósfay, GG Barnaföldi, A Jakovác ,
Effect of quantum fluctuations in the high-energy cold nuclear equation of state and in compact star observables
Physical Review C 97 (2), 025803, 2018
impakt factor: 2.988

A Jakovác, A Patkós,
Bound states in functional renormalization group International
Journal of Modern Physics, (2019) A 34 (27), 1950154,
impakt factor:1.153

J. Laczko, R.A. Scheidt, L.S. Simo, D. Piovesan
Inter-joint coordination deficits revealed in the decomposition of endpoint jerk during goal-directed arm movement after stroke.
IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering. (2017)
V. 25 Issue: 7 pp.: 798-810,
impakt factor: 3.41

L. Botzheim, J. Laczko, D. Torricelli, M. Mravcsik, L. Pons, F.O. Barroso
Effect of gravity and kinematic constraints on muscle synergies in arm cycling,
Journal of Neurophysiology, (2021) jn.00415.2020. In Press.
impakt factor: 2.225

F. B. Maciejewski, Z. Zimborás, M. Oszmaniec,
Mitigation of readout noise in near-term quantum devices by classical post-processing based on detector tomography,
Quantum (2021)4, 257 (2020),
impakt factor: 5.381

M. Oszmaniec and Z. Zimborás, Universal extensions of restricted classes of quantum operations,
Physical Review Letters (2017) 119, 220502,
impakt factor: 8.385

Lézeres fotonika és korszerű alkalmazásai

Az optika és a lézertechnológia fejlődése – különös tekintettel az intézetben korábban is kutatott ultrarövid lézerimpulzusok kibocsátására képes forrásokra – az alap- és alkalmazott kutatások szempontjából is kiemelten fontos, interdiszciplináris területtette a fotonikát. Tématerületünk fókuszában a femtoszekundumos fotonika és nanooptika, az optikai spektroszkópia és a plazmonika kutatása és alkalmazása, valamint a célzott tulajdonságokkal rendelkező fotonikai anyagok előállítása és jellemzése áll. Az osztály a következő években is a fotonika élvonalába tartozó területeken kíván tevékenykedni, az alapkutatástól a korszerű orvosi biológiai, információtechnológiai és spektroszkópiai alkalmazásokig.

Kutatómunkánk háttérét a technológia élvonalába tartozó folytonos és impulzusüzemű koherens fényforrásaink, saját fejlesztésű optikai, spektroszkópiai és lézerrendszereink és jól felszerelt laboratóriumaink biztosítják. Kiemelt hangsúlyt fektetünk kutatóink folyamatos képzésére és az utánpótlásra. Folyamatosan dolgozunk eddig is sikeres EU H2020, Lendület, OTKA, VEKOP, NVKP, NKP, VKE és más projektek alkotta pályázati portfóliónk bővítésén és új források bevonásán, valamint hazai és nemzetközi tudományos együttműködéseink bővítésén.

A legkorszerűbb lézerek segítségével végzett femtoszekundumos fotonikai és nanooptikai kutatások a másodperc milliomodrészének milliárdodrésze alatt lejátszódó folyamatok vizsgálatára irányulnak olyan nanorendszerekben, amelyek pl. ultranagy sebességű adatfeldolgozásra alkalmas optikai áramkörök fejlesztését teszik lehetővé. Az ehhez kapcsolódó EU H2020 projekt során eddig elért jelentős eredményeket a jövőben további kutatásokkal egészítjük ki a lézer- és eszközfelvezetés, a nanofabrikáció, a plazmonika, valamint az integrált optikai áramkörök létrehozása területén. Mindez lehetővé teszi egy új tudományterület, az ultragyors nanooptika újonnan alakuló nemzetközi kutatói közösségéhez való kapcsolódást is. Ezen kutatási irány társadalmi hasznosulása hosszabb távon olyan optikai eszközök létrehozásában ölt testet, amelyek a jelenleg használt mikroelektronikai eszközöknél 3-4 nagyságrenddel gyorsabb információfeldolgozást tesznek lehetővé.

Fontos kutatási területünk a szub-pikoszekundumos, femtoszekundumos lézerek és nemlineáris optikai jelenségek orvosi és biofotonikai alkalmazása. Az ultragyors szilárdtest- (pl. Ti-zafír), valamint szállézerrek (pl. Yb-adalékolt optikai szál) fejlesztésének célja nagy csúcsintenzitással, de alacsony átlagteljesítménnyel rendelkező, biológiai szövetekben nemlineáris optikai folyamatok gerjesztésére alkalmas fényforrások fejlesztése, amelyhez a kapcsolódó optikai technológiák (optikai vékonyrétegek, optikai szálátviteli rendszerek, pásztázó mikroszkópiás képalkotás) kutatása és fejlesztése társul, így a jövőben akár élő mintákon (pl. bőrön, agyszeleten) is végezhető valós idejű 3D mikroszkópiás képalkotás. A nemlineáris rezgési spektroszkópián – koherens anti-Stokes és stimulált Raman-szórás – alapuló új képalkotási eljárásokkal fiziológias folyamatok (pl. gyógyszermolekulák hatásmechanizmusának) időbeli vizsgálata, kóros szervi elváltozások (pl. basal cell carcinoma, sclerosis multiplex) szövettani és/vagy fiziológiai elemzése, EU H2020 projekt keretében a sejtmagokban sejtosztódáskor végbemenő folyamatok monitorozása válik lehetővé. Ezeket a módszereket a DNS hibridizációjának detektálására, genetikai mutációk kimutatására, vírusok azonosítására és más orvosi diagnosztikai célokra is fel kívánjuk használni. Ehhez a területhez kapcsolódik az aeroszolok egészségügyi hatásainak kutatása, a légúti transzport és kiülepedés meghatározása, valamint a kórokozók levegőben való terjedésének vizsgálata is.

A lézerspektroszkópia területén az optikai abszorpciós és rezgési spektroszkópia (Raman-szórás és infravörös elnyelés), valamint a fotolumineszcencia különböző rendezett és rendezetlen szerkezetekre és nanoanyagokra, biológiai rendszerekre és orvosi diagnosztikára kiterjedő alkalmazása mellett célunk a mérés-technikai módszerek fejlesztése, és újfajta mérőrendszerek építése és gyakorlati alkalmazása. A következő évek ígéretes kutatási iránya a Raman-szórás érzékenységét több nagyságrenddel megnövelni képes felületerősítést biztosító plazmonikus szerkezeteken alapuló új optikai eljárások kidolgozása, jellemzése, valamint gyakorlati alkalmazása.

A fotonikai anyagok kutatása hagyományos és nemlineáris optikai alkalmazások szempontjából előnyös tulajdonságokkal rendelkező kristályok és nanoszerkezetek célzott előállításával és jellemzésével foglalkozik. Ide sorolható az új fejlesztésű berendezéseinkkel a Czochralski-módszerrel levegőn növesztendő oxid egykristályok – elsősorban lítium-niobát (LN), lítium-niobát-tantalát (LNT) keverékkristályok, valamint a kedvező UV-áteresztőképességgel rendelkező borátok, pl. a lítium-ittrium-ortoborát (LYB) –

előállítására és tulajdonságainak kísérleti és elméleti vizsgálata; a különböző összetételű LNT-oxidkeverékek szintézise és XRD, STA, SEM, dielektromos és spektroszkópiai módszerekkel történő vizsgálata. Emellett kettős ritkaföldfém-adalékolással előállított kristályok energiatranszfer tulajdonságainak lézerspektroszkópiai vizsgálatával a koherens kvantum-kontroll folyamatok megértését célozzuk. A kristálymegmunkálási technológiánk fejlesztésével a hosszú hullámhosszú és terahertzes kutatások számára biztosítunk laboratóriumi hátteret. Egyedi kristálymintákat állítunk elő fotonikai kutatásokhoz egyetemeken és kutatóintézetek számára szerte a világon. Tervünk a már egykristály formában jól ismert LN és LYB nanokristály-előállítási technológiájának kidolgozása mechanikai őrléssel, illetve kémiai szintézissel, a ritkaföldfémekkel adalékolt nanokristályokon alapuló egyfotonforrás megvalósítása céljából. A fotonikai anyagokhoz tartozik az egyfotonforrásként, nagy érzékenységű optikai nanoszenzoroként és biológiai jelölőként használható, színcentrumokat tartalmazó gyémánt nanostruktúrák fejlesztése is, ahol előnyös optikai tulajdonságokkal rendelkező nanoszerkezetek és metafelületek előállítását tervezük. Ehhez kapcsolódik az általunk épített, kémiai gőzfázisú leválasztás elvén működő gyémántnövesztő reaktor alkalmassá tétele nanokristályos gyémánt nanooszlopok és más nanostruktúrák előállítására és idegen atomokkal való adalékolására. Ezen egyedi szerkezetek tulajdonságainak a különböző színcentrumok unikális optikai tulajdonságaival való ötvözése hatékonyabb nanofotonikai eszközök kifejlesztését eredményező újszerű vagy teljesen ismeretlen kvantumoptikai jelenségek tanulmányozását teszi lehetővé.

A lézerek környezetvédelmi alkalmazásainak területén analitikai és preparatív kémiai laborunkban nano- és makrokristályok, valamint környezeti anyagok (pl. folyami és tavi víz- és hordalékminták, légköri aeroszolok) kémiai összetételét vizsgáljuk nagyfelbontású és nagy érzékenységű atomspektroszkópiai módszerekkel. Fontos kutatási irányunk a lézerek és az optikai mérés-technika eszközeinek alkalmazása az aeroszolok keletkezésének, tulajdonságainak és terjedésének vizsgálatára. Itt a következő időszakban az aeroszolok optikai tulajdonságai, valamint az éghajlat és annak változása közötti kapcsolatok feltárásával (pl. szaharai homok, széntartalmú részecskék stb. esetén), valamint az aeroszolok intenzív fény-anyag kölcsönhatások során történő keletkezésével fogunk foglalkozni. Tervezzük mind laboratóriumi, mind terepi környezetvédelmi eszközök, pl. elektrolitkatódos atmoszférikus ködfénykiszűrés (ELCAD) fejlesztését.

Az osztály nagy hangsúlyt fektet az új kutatási eredmények gyakorlati alkalmazására. Az itt elért eredményekből korábban több szabadalom és berendezés (pl. CARS mikroszkópiás mérőrendszer, kézben tartható nemlineáris mikroszkópiás mérőfej, aeroszolok méreteloszlását és optikai tulajdonságait mérni képes berendezés) született. Alkalmazott kutatásokat a jövőben is folytatni kívánunk az optikai mérés-technika, spektroszkópia és 3D mikroszkópiás képalkotás, valamint a lézerek ipari alkalmazása, lézertükrökre és egyéb optikai elemekre leválasztható speciális, egyedi optikai vékonyrétegek fejlesztése területén. Ide sorolható a fluoreszcenciafluktuációs spektroszkópia során meghatározott fotonszámeloszlás hisztogramok és korrelációs görbék felvételére alkalmas rendszer tervezett fejlesztése és fotofizikai folyamatoknál való alkalmazása, valamint a mérés-technika kutatása, a Raman-szórás orvosi diagnosztikai alkalmazása és a kompakt és költséghatékony Raman-spektrométerek fejlesztése is.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

1. Krolopp Á, Csákányi A, Haluszka D, Csáti D, Vass L, Kolonics A, Wikonkál N, Szipőcs R "Handheld nonlinear microscope system comprising a 2 MHz repetition rate, modelocked Yb-fiber laser for in vivo biomedical imaging," Biomedical Optics Express 7, 3531-3542 (2016)
2. A. Ozsvár, R. Szipőcs, Z. Ozsvár, J. Baka, P. Barzó, G. Tamás, and G. Molnár „Quantitative analysis of lipid debris accumulation caused by cuprizone induced myelin degradation in different CNS areas,” Brain Res. Bull. 137, 277-284 (2018)
3. L. Kocsor, L. Péter, G. Corradi, Z. Kis, J. Gubicza, and L. Kovács: Mechanochemical Reactions of Lithium Niobate Induced by High-Energy Ball-Milling, Crystals, 9, 334/1-14 (2019)
4. K. Lengyel, É. Tichy-Rács, K. Timpmann, S. Vielhauer, I. Romet, L. Kovács, G. Corradi, R. Butkus, M. Vengris, R. Grigonis, V. Sirutkaitis, I. Sildos, V. Kiisk, L. Puust, V. Nagirnyi: Cooperative luminescence of Yb³⁺ ion pairs in Li₆Y(BO₃)₃:Yb single crystals, Journal of Luminescence, 230, 117732 (2021)
5. Kugler, Sz. ; Nagy, A. ; Kerekes, A. ; Veres, M. ; Rigó, I. ; Czitrovsky, A.; Determination of emitted particle characteristics and upper airway deposition of Symbicort® Turbuhaler® dry powder inhaler ; Journal of Drug Delivery Science and Technology 54 Paper: 101229 , 8 p. (2019)
6. Kugler, S.; Nagy, A. ; Osán, J. ; Péter, L. ; Groma, V. ; Pollastri, S. ; Czitrovsky, A.; Characterization of the ultrafine and fine particles formed during laser cladding with the Inconel 718 metal powder by means of X-ray spectroscopic techniques; Spectrochimica Acta Part B - Atomic Spectroscopy 177 Paper: 106110 , 11 p. (2021)
7. Rigó, I. ; Veres, M. ; Pápa, Zs. ; Himics, L. ; Öcsi, R. ; Hakkel, O. ; Fürjes, P.; Plasmonic enhancement in gold coated inverse pyramid substrates with entrapped gold nanoparticles, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 253 Paper: 107128 , 8 p. (2020)
8. Himics, L. ; Veres, M. ; Tóth, S. ; Rigó, I. ; Koós, M.; Origin of the asymmetric zero-phonon line shape of the silicon-vacancy center in nanocrystalline diamond films; JOURNAL OF LUMINESCENCE 215 Paper: 116681 , 7 p. (2019)
9. P Rácz, Z Pápa, I Márton, J Budai, P Wróbel, T Stefaniuk, C Prietl, JR Krenn, P Dombi, Measurement of nanoplasmonic field enhancement with ultrafast photoemission, Nano Lett. 17, 1181 (2017), IF=12.6
10. P Dombi, Z Pápa, J Vogelsang, SV Yalunin, M Sivilis, G Herink, S Schäfer, P Groß, C Ropers, C Lienau, Strong-field nano-optics, Rev. Mod. Phys. 92, 025003 (2020) IF=45.0

Kvantumkoherens anyagok

A szilárd testeket alkotó atomok nagy száma és a közöttük fellépő kölcsönhatások következtében a komplexitás minőségileg új szintjei valósulnak meg, amelyekben a rendszert felépítő atomok tulajdonságait messze túlhaladva alapvetően új, ún. emergens tulajdonságok jelennek meg. Emellett a kvantummechanikai effektusok is meglepő új jelenségekhez vezetnek kondenzált rendszerekben, mint pl. a szupravezetés és szuperfolyékonyság. Az utóbbi években pedig az anyagok eddig nem is sejtett új fajtáit ismertük meg topológiai osztályozás alapján. A szupravezetés és a szuperfolyékonyság mint a kvantummechanikai jelenségek makroszkopikus megjelenései már majdnem egy évszázada ismertek, azonban a sor nem állt meg: a kvantum Hall-effektus (Nobel-díj), a frakcionális töltések és mágneses monopólusok, a topológikus jelenségek (Nobel-díj), az időkristályok, a kvázikristályok (Nobel-díj), a morémintázatú anyagok – hogy csak néhány prominens példát említsünk – felfedezése mind a szilárd testekben megvalósuló állapotok különlegességét és sokféleségét jelenítik meg. A jelenségek megértése nem öncélú, hanem a potenciális technológiai felhasználásuknak is feltétele, az elméleti osztályon futó kutatások mindegyike konkrét anyagokhoz, azok atomisztikus megértéséhez kötődik.

Az Elméleti Szilárdtest-fizika Osztály figyelmét a közeljövőben olyan anyagok és jelenségek kötik le, amelyeket összefoglaló néven koherens kvantumállapotú anyagoknak vagy rövidebben kvantumkoherens anyagoknak lehet nevezni. Ezen új kvantumkoherens anyagok jelentőségét az adja, hogy olyan eszközöket ad az emberiség kezébe, amellyel lényegesen gyorsítani lehet új, praktikus anyagok felfedezését az energiatermelés és -tárolás számára (napelemek és akkumulátor), az emberi életminőségen lehet jelentősen javítani (új diagnosztikai és terápiás módszerek kvantumszenzorokra alapozva), és építőkövei az újfajta kvantumszámítógépeknek vagy forradalmian új, nagyon érzékeny szenzorok működésének. Lehetséges ismert fizikai megvalósítások körébe esnek a szupravezető áramkörök, topológikus szigetelők és szupravezetők, valamint molekulászerű vagy atomszerű képződmények – röviden ponthibák – félvezetőkbe, szigetelőkbe vagy szupravezetőkbe ágyazva. A fentebb említett anyagok tulajdonságainak és a környezetükkel való kölcsönhatásainak részletes és alapos ismerete szükséges ahhoz, hogy sikeres felfedező munkát lehessen végezni ezen a területen.

Az Elméleti Szilárdtest-fizikai osztály hagyományai és felhalmozott kompetenciái (amelyek Sólyom Jenő, Zawadowski Alfréd, Fazekas Patrik és Kollár János szellemi örökségén alapulnak), lehetővé teszi, hogy ezen anyagokat összetetten vizsgáljuk, akár a soktestprobléma, akár pedig a sávszerkezet-számítás oldaláról, mind analitikus, mind pedig numerikus módszerekkel, sőt, újabban egy egyedi kísérleti megközelítésben is, ahol a kísérleteket az elméleti kutatások vezérlik. A vezető kutatók mindegyike hosszú külföldi tapasztalatokkal és kiemelkedő publikációs tevékenységgel rendelkezik, továbbá két Lendület kutatócsoport is működik az osztályon. Úttörői voltak, és továbbra is élvonalbeli fejlesztői több, világszerte elterjedt algoritmusnak és numerikus programcsomagnak, mint például a DMRG, a BSKAN vagy az SKKR, amely alkotóiknak nemzetközi elismerést is hozott (Humboldt-, Hans Fischer senior-, Descartes-, Gordon Bell-díj, Marie Curie-ösztöndíj). Ezen módszereket folyamatosan fejlesztjük, és alkalmassá tesszük újabb és újabb anyagok és jelenségek elméleti vizsgálatára. Jelenleg a kvantumkoherens anyagokra való alkalmazás áll a középpontban. Az osztály munkatársainak korfája is egészséges, bizonyos témák kutatása csapatmunkában, mások mester-tanítvány megközelítésben folynak. A fiatal kutatók önállóan is eredményesek, amit számos Bolyai-ösztöndíj, ELFT-díj, MTA Poszt-doktori díj és egy Junior Prima díj tanúsít. Kutatásaink természetes módon integrálódnak a nemzetközi, magyarországi és intézeti kutatási szerkezetbe, formális és informális együttműködések, szemináriumokon, magyar és nemzetközi projekteken keresztül.

Összefoglalva elmondható, hogy az Elméleti Szilárdtest-fizikai Osztályon a komplex kvantum anyag tulajdonságainak és környezetével való kölcsönhatásának elméleti megértését és modellezését tűzzük ki célként az elméleti fizika matematikai és számítástechnikai módszereivel, beleértve az ehhez szükséges algoritmusok és módszerek (ab-initio módszerek, tenzorhálózatok) fejlesztését, kísérleti fizikusokkal együttműködve.

Nagy pontosságú számításokkal és szimulációkkal meghatározzuk, illetve optimalizáljuk az anyagok elektromos, optikai, mágneses és transzporttulajdonságait, felderítjük az alapvető kölcsönhatások összefüggéseit. Megvan annak a tudásnak a teljes vertikuma, amely lehetővé teszi olyan módszerek fejlesztését és implementálását hagyományos és kvantumszámítógépes környezetbe, amelyekkel a fenti komplex tulajdonságok kiszámíthatóak, ezzel járulva hozzá új típusú kvantumbitek felfedezéséhez

és azok hasznosításához. Az egyik előrehaladott kvantumbit-megvalósítás, a félvezetőalapú kvantumbitek kiemelkedő képviselője a gyémántba ágyazott ún. nitrogén-vakancia centrum (NV), amelynek elméletéhez és alkalmazásához fontos mértékben járulnak hozzá kutatási eredményeink. Ugyanakkor az NV centrum néhány magneto-optikai tulajdonsága nem ideális a fenti alkalmazásokban. A kutatások alaptézise az a feltevés, hogy létezik jobb paraméterekkel működő kvantumbit, ami az adott alkalmazáshoz, mint pl. nanoskálájú szenzorika vagy optikai szálas kvantumkommunikáció, jobban illeszkedik, mint az NV centrum. A számításokban valóban sikerült több kvantumbitet azonosítani háromdimenziós és újabban kétdimenziós anyagokban is. A kutatások során ezek egy részét sikerült előállítani az intézet sajátlaboratóriumában, amelyeket hasznosítani terveznek pl. tumorsejtek fényterápiájában, vagy idegtevékenységek valós idejű követésében. A kutatócsoport laboratóriuma a teljes vertikumot felöleli az előállítástól a legmodernebb magneto-optikai és kvantumoptikai mérés technikáig, ahol a számítások által vezérelt kutatásokat lehet kísérletileg igazolni, míg a számítási munkánkat kisebb helyi klaszterek és magyar illetve nemzetközi nagy-teljesítményű szuperszámítógép-központok segítik.

A szupravezető kvantumbitek lehetővé tették az első kvantumszámítógépek megépítését, és továbbra is ígéretes fejlesztési iránynak tűnnek, azonban az ilyen kvantumbitek rendkívüli „sérülékenysége”, a körülményekre való érzékenysége továbbra is sok fejtörést okoz a fejlesztőknek. Ezért világszerte nagy érdeklődés övezi a topologikus kvantumbitek kutatását, ahol a topologikus tulajdonságok védeltséget nyújthatnak a külső behatásokkal szemben. Ezen a területen is éppen a számítógépes módszerek hozhatnak áttörést. Az osztályon az ide vonatkozó anyagok olyan kvantitatív leírását végezzük, amely figyelembe veszi a valódi, atomi szintű mikro- és elektronszerkezetet. Folyamatosan fejlesztjük az erre a célra szolgáló, az inhomogén szupravezető rendszerek leírására is alkalmas, első elveken alapuló szimulációs módszereinket.

Ennek szellemében fejlesztünk olyan matematikai algoritmusokat is, melyek a kvantum rendszerek összetett szimulációit teszik lehetővé klasszikus számítógépeken polinomiális skálázódás mellett. Ezen algoritmusok a kvantuminformáció-elmélet számos koncepcióját magukban foglalják, így a kutatásban a renormálási csoport mellett a kvantum összefonódottság vizsgálata is nagy hangsúlyt kap. Az algoritmusok számítógépes implementációja szintén része a kutatási programnak, hogy az így megvalósuló programcsomagokkal anyagi rendszereket lehessen szimulálni a szilárdtest-fizikában, kvantumkémiában, magfizikában vagy éppen a fény és anyag kölcsönhatását a kvantumoptikában. A számítógépes tudomány fejlődését is szem előtt tartva az algoritmusok masszív párhuzamosítása és szuperszámítógépes rendszerekre való implementációja szintén kitűzött cél.

A fenti eredmények nagymértékben támaszkodnak a felületek pontos atomi szerkezetének megismerésére és az azon lezajló folyamatok helyes értelmezésére. Ezért első elveken alapuló pásztázószondás felületvizsgálati szimulációs módszerek alkalmazását tervezzük a folyamatosan növekvő számú és számos technológiai potenciállal bíró újfajta (elsősorban kétdimenziós) anyagok felületfizikai és kémiai tulajdonságainak felderítésére. A pásztázószondás elméleti módszerek továbbfejlesztését is tervezzük, elsősorban a spintranszportra fókuszálva, amely a topologikus tulajdonságú adattároló bitek (ún. "skyrmion" spinörvénystruktúrák) kontrollált manipulációjának (írás, olvasás, mozgatás, topologikus átváltás) megértéséhez és ezáltal ezek technológiai alkalmazásaihoz nyit utat.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

1. "DMRG on Top of Plane-Wave Kohn-Sham Orbitals: A Case Study of Defected Boron Nitride ", G Barcza, V Ivady, T Szilvasi, M Voros, L Veis, A Gali, and O Legeza, J. Chem. Theory Comput. 2021, 17, 2, 1143-1154 <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00809>
2. "Topologically protected, correlated end spin formation in carbon nanotubes ", CP Moca, W Izumida, B Dora, O Legeza, JK Asboth, G Zarand, Phys. Rev. Lett. 125, 056401 (2020)
3. "Imaging the Wigner Crystal of Electrons in One Dimension", I Shapir, A Hamo, S Pecker, CP Moca, O Legeza, G Zarand, and S Ilani, Science, Vol. 364, Issue 6443, pp. 870-875 (2019) DOI: 10.1126/science.aat0905
4. "Topological Magnons in Kitaev Magnets at High Fields", P. A. McClarty, X.-Y. Dong, M. Gohlke, J. G. Rau, F. Pollmann, R. Moessner, K. Penc, Phys. Rev. B 98, 060404(R)/1-6 (2018).
5. „Chiral spin liquids in triangular lattice SU(N) fermionic Mott insulators with artificial gauge fields”, P. Nataf, M. Lajkó, A. Wietek, K. Penc, F. Mila, A. M. Läuchli, Phys. Rev. Lett. 117, 167202/1-6 (2016).
6. "Spin-orbit coupling induced splitting of Yu-Shiba-Rusinov states in antiferromagnetic dimers" , P. Beck, L. Schneider, L. Rózsa, K. Palotás, A. Lászlóffy, L. Szunyogh, J. Wiebe, and R. Wiesendanger, Nature Communications 12, 2040 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41467-021-22261-6>
7. "Relativistic spin-polarized KKR theory for superconducting heterostructures: Oscillating order parameter in the Au layer of Nb/Au/Fe trilayers", Csire, G, Deak, A, Nyari, B, Ebert, H, Annett, JF. and Ujfalussy, B, Phys. Rev. B, 97,024514 DOI: 10.1103/PhysRevB.97.024514
8. "Proximity effect in a superconductor-topological insulator heterostructure based on first principles", Park, K, Csire, G and Ujfalussy, B, Phys. Rev. B, 102, 134504 DOI: 10.1103/PhysRevB.102.134504
9. Ab Initio Magneto-Optical Spectrum of Group-IV Vacancy Color Centers in Diamond, Thiering, G; Gali, A, Physical Review X, volume 8, Article number: 021063 (2018) 10.1103/PHYSREVV.8.021063
10. Stabilization of point-defect spin qubits by quantum wells, Ivady, V; Davidsson, Joel; Deegan, Nazar; Falk, Abram L.; Klimov, Paul V.; Whiteley, Samuel J.; Hruszkewycz, Stephan O.; Holt, Martin V.; Heremans, F. Joseph; Nguyen Tien Son; Awschalom, David D.; Abrikosov, Igor A.; Gali, Adam, Nature Communications, volume 10, Article number: 5607 (2019) 10.1038/S41467-019-13495-6

Komplex folyadékok

A Komplex Folyadékok Osztály fő tevékenysége a fluid fázisok szerkezetének, dinamikus viselkedésének, valamint a szilárd–folyadék határfelületek kölcsönhatásának vizsgálata. Az alkalmazott tudományos módszertan közös kulcseleme a szilárdtestek és a fluid fázisok jellemzésében szokásos leírásmódok együttes alkalmazása. Az osztály kutatóközösségének egészét erős nemzetközi beágyazottság és magas nemzetközi elismertség jellemzi, ami a legmagasabb szintű kutatási infrastruktúrák eléréséhez és a gazdag publikációs kihatáshoz is garanciát jelent.

A Részben Rendezett Rendszerek Kutatócsoport tevékenysége három tudományos témakört ölel fel. (i) Folyadékkristályokat tartalmazó rendszerek önszerveződési folyamatai fény, elektromos és mágneses tér hatására különféle határfelületek mentén, a kialakuló szerkezeti defektek és mintázatok elemi értelmezésével. (ii) Folyásjelenségek szemcsés anyagokban deformációs, alaki és részecske-kölcsönhatási paraméterek alapján való leírással. (iii) Elektrokémiai jelenségek során létrejövő nanostruktúrák képződése és elektrokémiai leválasztással kapott anyagok komplex szerkezeti jellemzése.

Az Elektromos Gázkisülések Kutatócsoport kutatásának központi vezérfonala az elektromos gázkisülések kísérleti vizsgálata és elemi fizikai törvények alapján való részletes leírása. Az elméleti leírás alapvetése a gyengén csatolt alrendszerek (töltött és semleges részecskék) viselkedésének jellemzése kinetikus elmélet és energiamérleg alapján, különös tekintettel olyan újszerű irányokra, mint nagy felületű homogén plazmák létrehozása, az erős mágneses tér hatására végbemenő filamentáció, illetve a részecskék struktúrákba rendeződéséért felelős folyamatok azonosítása. Erősen alkalmazás-orientált ága a gázkisülések kutatásának a plazmák alkalmazása fluid fázisok felhasználási igény szerint történő aktiválására és az aktivált állapot tartós fennmaradása feltételeinek tisztázása.

A Folyadékszerkezet Kutatócsoport folyadékok (vizes sóoldatok és víz–egyéb oldószer elegyek), továbbá folyadékszerű atomi elrendeződést mutató nemkristályos szerkezetű szilárd anyagok (pl. kalkogén üvegek, amorf ötvözetek), illetve sok komponensű, ún. „nagyentrópiás” kristályos fémötvözetek atomi szintű szerkezetvizsgálatával foglalkozik. A kísérleti kutatási eszköztár alapját röntgen- és neutron-diffrakciós eljárások képezik, amiket numerikus szimulációs módszerekkel, egységben kezelve értékelnek ki a maximális információkihozatal érdekében. A kísérleti módszereket olyan atomi szintű szimulációs eljárások egészítik ki, amelyek fejlesztésében a csoport nemzetközi szinten is vezető szerepet vállal.

Mindhárom csoport tudományos vizsgálatait a kísérleti tevékenység felől indulnak, ami a kutatói lelemény kiaknázására épülő, egyedi „tabletop” kísérletektől a nemzetközi összefogással megvalósult szuperberendezések (szinkrotronok, nagy feloldású röntgentomográfok stb.) eseti használatáig terjed. A kísérleti eredmények elemi fizikai törvények segítségével való értelmezését optimálisan egészíti ki a nagy számításgépi igényű, jellemzően sokrészecske-rendszerek egyedi elemeinek pontos nyomonkövetésével megvalósuló numerikus szimulációs eljárások csoportja. A numerikus eljárások továbbfejlesztése csoportspecifikusan a tudományos célok és az elérhető korszerű számítási kapacitások maximális kiaknázása mentén történik, jellemzően az adott számítási módhoz optimálisan felépített saját üzemeltetésű szerverekkel.

Az osztályhoz tartozó csoportok 4-5 fős, a kutatógárda permanens állományát képező, PhD-val rendelkező törzsgárdával és 1-3 diákkal dolgoznak. A csoportok állandói tagjai kivétel nélkül aktívak különféle pályázati támogatások elnyerésében. Az osztály 14 PhD-s munkatársa közül 6 rendelkezik az MTA doktora címmel, közülük ketten az utóbbi két évben szerezték ezt meg az intézetben végzett munkájukra alapozva. A következő kutatási időszakban további kollégák is pályázni fognak MTA doktori címre.

Vizsgálatainkhoz egyedi saját fejlesztésű kísérleti elrendezéseket alkotunk (pl. pásztázó drift cső, szimmetrikus elrendezésű gázkisülés), és saját fejlesztési bázison adaptálunk különféle komplexitású folyadék-, részecske- és atomi szintű numerikus modelleket (pl. kisülések modellezése, Reverse Monte Carlo szimulációk). A saját építésű kísérleti berendezésekben is kompromisszumok nélkül igyekszünk a világszínvonalat jelentő standardokat alkalmazni. Példa erre a nagysebességű képkészítés és az nagy adatmennyiséget jelentő képi információk kiértékeléséhez elengedhetetlen automatizált digitális képelemzési eljárások alkalmazása. Mérőállomásainkban gyakorta alkalmazunk lézeres eljárásokat (pl. lézerabszorpciós spektroszkópia sűrűségek meghatározására) és különféle mikroszkópiás módszereket.

A saját fejlesztésű kutatási infrastruktúrát külföldi vendégkutatók is használják. Ezek mellett számos kereskedelemben is elérhető magas színvonalú infrastruktúra elemmel rendelkezünk. Ilyen például a lágy anyagok vizsgálatához szükséges reométer vagy a 2018-ban üzembe helyezett modern pásztázó elektronmikroszkóp, amelynek közeljövőben történő fejlesztése in situ tűszondás mérőegységgel a berendezést regionálisan is egyedivé teszi. Utóbbi berendezéseket a kutatóközpont más kutatási egységei is sokoldalúan használják.

Az osztály munkájának egészét érintően jól azonosíthatók az eredményességi garanciák. Az osztály minden egyes kutatói közössége a mindenkori világszínvonal figyelembe vételével, illetve annak meghaladási igényével tevékenykedik. Ezt fémjelzi a csoportok vezető kutatóinak számos meghívása fejlett országok egyetemére (4 vendégprofesszori meghívás az utóbbi 5 évben), a magas fogadókészség nemzetközi nagyberendezések mellett, a számos pozíció vezető nemzetközi tudományos folyóiratok szerkesztőbizottságaiban, a vezető szerzői szerepek sora tematikus összefoglaló munkákban és az intenzív részvétel nemzetközi együttműködésekben. Osztályunk számos ma is aktív tagja nyert el intézeti publikációs és/vagy alkalmazott kutatási díjat, MTA elismerést és az Eötvös Loránd Fizikai Társulat által adományozott díjat. Az osztály tudományos publikációs kihozatala a felhasznált források arányában mind a kutatóközponton belül, mind nemzetközi összehasonlításban igen magas. A meglévő alap infrastruktúrák kihasználtsága jó, a pályázati aktivitás erős mind hazai, mind nemzetközi vonatkozásban. Utánpótlás-nevelésben minden csoportunk aktív. A csoportok profilja hazai vonatkozásban unikális, a véghezvitt metodikai fejlesztéseink számos esetben nemzetközi összehasonlításban is úttörő jellegűek.

A versenyképességi vonatkozásokat tekintve mindhárom csoport tevékenységében jól látható a gazdasági hasznosulás potenciálja. A teljesség igénye nélkül: (i) folyadékkristályokon alapuló, koloid részecskéket tartalmazó rendszerek „okos bevonatokban” történő alkalmazása; (ii) folyásjelenségeket mutató granuláris elegyek viselkedésének leírása (pl. silókban zajló folyamatok megértésében); (iii) plazmák által aktivált fluid fázisok alkalmazása biológiai rendszerekkel kapcsolatban (sejtaktiválás vagy antiszeptikus hatás, implantátumok biokompatibilitása); (iv) felületek tisztítása, kisülések alkalmazása mikroelektronikai gyártási folyamatokban; (v) többkomponensű alacsony szerkezeti rendezettségű anyagok optimalizálása információ- vagy energiatárolási célok érdekében; (vi) óriásmolekulák (pl. fehérjék) oldatszerkezetének leírása (lehetséges farmakológiai alkalmazásokkal). A potenciális hosszú távú versenyképességi hatások mellett minden lehetőséget megragadunk rövidebb időtávú együttműködésekre és a berendezéseink hasznosítására vállalkozásokkal való eseti együttműködésekben. Példák: (i) hidrogén-permeációs munkaállomás fejlesztése zománcozható acélok vizsgálatára; (ii) erőművi korróziós káresemény országos konzorciális vizsgálatában való aktív részvétel; (iii) acéllemez pácolás folyamatának laboratóriumi modellezése; (iv) gyógyszerfelszívódási folyamatok elméleti modellezése; (v) speciális berendezések bérbeadása vállalkozások átmeneti igényeihez igazodva és mérési szolgáltatások teljesítése.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

1. Zsurzsa, S; Péter, L; Kiss, LF; Bakonyi, I; Magnetic and magnetoresistance studies of nanometric electrodeposited Co films and Co/Cu layered structures: influence of magnetic layer thickness, *J. Magn. Magn Mater* 421, 194-206 (2017). IF: 3,046; Független hivatkozás: 25
2. Gillemot, KA; Somfai, E; Börzsönyi, T; Shear-driven segregation of dry granular materials with different friction coefficients, *Soft Matter* 13, 415-420 (2017). IF: 3,889; Független hivatkozás: 17
3. Salamon, P; Éber, N; Sasaki, Y; Orihara, H; Buka, Á; Araoka, F; Tunable optical vortices generated by self-assembled defect structures in nematics, *Phys. Rev. Appl.* 10, 044008, 13 p. (2018). IF: 4,782; Független hivatkozás: 5
4. Tóth-Katona, T; Jánossy, I; Photoalignment at the nematic liquid crystal-polymer interface: Experimental evidence of three-dimensional reorientation, *J. Mol. Liq.* 285, 323-329 (2019). IF: 5,065; Független hivatkozás: 1
5. Derzsi, A; Lafleur, T; Booth, J-P; Korolov, I; Donkó, Z; Experimental and simulation study of a capacitively coupled oxygen discharge driven by tailored voltage waveforms, *Plasma Sources Sci. Technol.* 25, 015004, 14 p. (2016). IF: 3,191; Független hivatkozás: 23
6. Hartmann, P; Reyes, JC; Kostadinova, EG; Matthews, LS; Hyde, TW; Masheyeva, RU; Dzhumagulova, KN; Ramazanov, TS; Ott, T; Kählert, H; Bonitz, M; Korolov, I; Donkó, Z; Self-diffusion in two-dimensional quasimagnetized rotating dusty plasmas, *Phys. Rev. E* 99, 013203, 8 p. (2019). IF: 2,296; Független hivatkozás: 9
7. Kutasi, K; Popovic, D; Krstulovic, N; Milosevic, S; Tuning the composition of plasma-activated water by a surface-wave microwave discharge and a kHz plasma jet, *Plasma Sources Sci. Technol.* 28, 095010, 11 p. (2019). IF: 3,191; Független hivatkozás: 11
8. Pothoczki, S; Pusztai, L; Bako, I; Variations of the Hydrogen Bonding and Hydrogen-Bonded Network in Ethanol-Water Mixtures on Cooling, *J. Phys. Chem. B* 122, 6790-6800 (2018). IF: 2,923; Független hivatkozás: 3
9. Pethes, I; Nazabal, V; Ari, J; Kaban, I; Darpentigny, J; Welter, E; Gutowski, O; Bureau, B; Messaddeq, Y; Jóvári, P; Atomic level structure of Ge-Sb-S glasses: Chemical short range order and long Sb-S bonds, *J. Alloy Compd.* 774, 1009-1016 (2019). IF: 4,65; Független hivatkozás: 8
10. Pethes, I; Pusztai, L; Ohara, K; Kohara, S; Darpentigny, J; Temleitner, L; Temperature-dependent structure of methanol-water mixtures on cooling: X-ray and neutron diffraction and molecular dynamics simulations, *J. Mol. Liq.* 314, 113664, 10 p. (2020). IF: 5,065; Független hivatkozás: 1

Modern szerkezetkutatás: atomi, nano- és mezo-szinten rendeződött hierarchikus szerkezetek vizsgálata

Az emberiség fejlődésében bekövetkező nagy változások gyakran köthetők az anyagról alkotott ismeretek bővüléséhez, illetve elmélyüléséhez, kezdve a bronz- és vaskortól a szilíciumkorszakon át a nano- és biotechnológiáig. Napjainkban az anyagok tulajdonságainak leírása már az atomi szintről kiindulva lehetséges, aminek köszönhetően alapvetővé vált olyan módszerek kifejlesztése és alkalmazása, amelyekkel az atomi szerkezetről közvetlen, illetve közvetett információt kaphatunk. Már olyan analitikus és numerikus modellek is elérhetőek, amelyek alkalmasak az atomi szerkezet ismeretében az anyagok elektromos, optikai vagy mágneses tulajdonságainak leírására, illetve a nano- és mezoszkopikus szintű önszerveződésének leírására.

A Kísérleti Szilárdtestfizika Osztályon az elsődleges célunk a felmerülő modern szilárdtestfizikai problémák saját módszereinkre, és külföldi nagy infrastruktúrákra alapozott világszínvonalú kutatása. Ezért erőforrásainkat az elmúlt évtizedekben arra összpontosítottuk, hogy egyedülálló összetételű, atomi, nano és mezoszkopikus szintű anyagszerkezeti vizsgálatokra, optikai, valamint mágneses tulajdonságok meghatározására alkalmas eszközparkot építettünk. Az eszközpark négy lábon áll: 1. direkt szerkezetvizsgáló módszerek (röntgendiffrakció, elektronmikroszkópia, atomerő mikroszkópia), 2. indirekt anyagvizsgáló módszerek (optikai spektroszkópia: abszorpció és lumineszcencia, távoli és közeli terű infravörös spektroszkópia, SQUID-magnetometria, Mössbauer, NMR és ESR-spektroszkópia), 3. szilárdtestkémia laboratórium, 4. számítástechnikai erőforrások.

A kísérleti vizsgálatokon felül alapvető fontosságú az eredmények értelmezése, illetve az elméleti számolásokkal végzett anyagtervezés és ezzel támogatott minta-előállítás. Ezért komoly erőfeszítéseket tettünk egy erős saját számítástechnikai háttér kialakítására, és az osztályon belül egy olyan alcsoport létrehozására, amely a számítógépes anyagtudomány területén felveszi a versenyt a nemzetközi mezőny legjobbjával. Ezen alcsoport fő kutatási iránya a megszilárdulási folyamatok során kialakuló komplex mintázatok számítógépes modellezése. Ezen túl ők alapozzák meg a csoport számítástechnikai hátterét.

Különös hangsúlyt kapott az osztály fejlődésében a jelentős pályázati potenciállal rendelkező, minőségi kutatóállomány biztosítása. Osztályunkon két kutatócsoport dolgozik: a Szerkezetkutató Laboratórium és a Nem-egyensúlyi anyagok csoport. Összesen három akadémikus, négy nagydoktor és hét tudományos főmunkatárs alkotja az aktív állomány gerincét. Tudományos kiválóságunk a számos elnyert hazai pályázaton túl nemzetközi pályázatokban is bizonyítottuk. Három-három FP6-os és FP7-es Európai Unió pályázatban, valamint 4 sikeres ESA pályázatban is részt vettünk.

Az elkövetkező 4 évre vonatkozó kutatási stratégia erre az eszközparkra és humán erőforrásra épül. Mivel a kutatások súlypontja nagyban eltolódik a statikus szerkezetek megismerésétől az egyes fizikai, kémiai és biológiai folyamatokban kialakuló nagyon rövid időskálán létező szerkezetek meghatározása felé, ezért a hazai mérési lehetőségeket kiegészítjük olyan nagy külföldi infrastruktúrák mellett végzett mérésekkel, amelyek lehetőséget biztosítanak igen gyors (10-9-10-15 másodperc időskálájú) folyamatok vizsgálatára is. Ilyen infrastruktúrák a szinkrotronok és szabad elektron lézerek. Mivel ezeknél igen nagy a verseny a mérési idők megszerzéséért, különösen fontos a megfelelően ütőképes, nagy tapasztalatú hazai humán erőforrás illetve a kiemelkedő nemzetközi kutatócsoportokkal való jó munkakapcsolat.

A fent körvonalazott általános stratégia hosszútávra meghatározott. Rövidebb távon mindig az aktuális, a szilárdtestkutatás homlokterében lévő területek szabják meg a kutatás irányát. Így az elkövetkezendő években kutatásainkat az atomi szerkezetek tanulmányozása mellett a hierarchikus nano- és mezo-szinten rendeződött szerkezetek vizsgálatára koncentráljuk. Kutatásaink jellege alapkutatás, mely a következő időszakban a bio-inspirált, mágneses és optikailag aktív anyagok előállítására, modellezésére és teljes körű karakterizálására irányul.

Ennek keretében elsősorban a következő anyagcsaládokkal tervezünk foglalkozni:

1. Az élettelen rendszerekben önszerveződéssel kialakuló kristályos mikroszerkezetek, valamint az élő

szervezetekben létrejövő kristályok morfogenezisének megértése önmagában is fontos feladat, ugyanakkor a gyakorlati alkalmazások szempontjából is nagy jelentőségű. E szerkezetek létrejötte az anyag tulajdonságait jelentős mértékben javíthatja. Ennek érdekes példái a puhatestűek által növesztett héjak, melyek hierarchikusan szervezett biokompozitok meglepően jó mechanikai tulajdonságokkal. Erősebbek és ellenállóbbak a tiszta szervesetlen összetevőiknél, de a modern ember alkotta kompozitoknál is. A csoportunkban ki-, ill. továbbfejlesztett fázismező módszerek széles körűen alkalmasak az ilyen szerkezetek kialakulásának vizsgálatára. Az egyszerűbb megszilárdulási jelenségeken túl leírhatóak velük az önszerveződő anyagokban, pl. eutektikus rendszerekben ill. biomorf anyagokban kialakuló mintázatok, de megtettük az első lépéseket a bonyolultabb, biológiai rendszerekben létrejövő hierarchikus szerkezetek, pl. a kagylóhéjak, ill. korallak vázának modellezésére. E vizsgálatok hosszú távon utat nyithatnak olyan bonyolultabb folyamatok matematikai leírásához is, mint a kovamoszatok vázának létrejötte, a csontképződés, vagy a vesekő-képződés, továbbá hozzájárulhatnak új bioinspirált anyagok kifejlesztéséhez.

2. Az előző években elindítottunk egy kutatást, amely a méretükkel összemérhető üregbe zárt nanorészecskék viselkedésének megértésére irányult. A szén nanocső alapú rendszerek közül két anyagcsoport, a nanocsőbe foglalt nanokristályok, valamint a Perovszkitot és szén nanocsöveket tartalmazó hibrid szerkezetek alapvető tulajdonságait és lehetséges felhasználási területeit tervezzük vizsgálni. A szén nanocsövekbe töltött molekulák segítségével létrehozhatunk nanomágneseket, illetve lumineszcens rendszereket. A csoportunk rendelkezik egy optikai közeltér mikroszkóppal, ami lehetővé teszi az ilyen rendszerek optikai tulajdonságainak vizsgálatát nanométeres térbeli pontossággal. Ez a műszer Magyarországon egyedülálló és világszinten is viszonylag ritkaságnak számít. A perovszkit típusú napelem-alapanyagok mellett, hogy energiahasznosításuk megközelíti az egykristály szilícium napelemekét, egyéb optoelektronikai felhasználás szempontjából is érdekesek (LED-ek, lézerek, detektorok). Alkalmazásuknál nagy problémát jelent levegőn történő stabilitáscsökkenésük. Nanocsövekkel keverve azonban olyan hibrid rendszereket képeznek, amelyekben a környezettel való kölcsönhatásuk minimalizálható, így stabilitásuk és ezzel technológiai alkalmazhatóságuk növelhető.

3. Szerves-fém hálózatok, azaz MOF-ok esetén, kihasználva a moduláris szerkezetükből adódó összetételbeli variálhatóságot, olyan új, kristályos üregrendszereket tervezünk előállítani, amelyek speciális dinamikai, optikai, sztereokémiai vagy elektronikai tulajdonsággal rendelkeznek. Ezen felül a nanoelektronikában használható nanorétegek előállítását is tervezzük réteges szerkezetű MOF-okból, egyedi rétegek leválasztásával.

4. Atomi és nanométeres skálájú mágneses vizsgálatokat tervezünk egyrészt új, Fe-alapú multirétegeken (pl. Fe-Ag), ami egyedülálló lehetőséget biztosít a mágnesség tömbi anyagtól eltérő megnyilvánulási formáinak feltárására (pl. szuperparamágneses viselkedés, nem-egyensúlyi mágneses ötvözetek kialakulása, stb.). Másrészt alkálifémekkel dópolt szénalapú nanoszerkezeteket is vizsgálunk, amelyekben a spin-relaxációs idő kedvező hosszúságú ahhoz, hogy az információ tárolhatóvá és szállíthatóvá váljon, így a spintronikában potenciálisan használhatóak.

Az anyagcentrikus kutatások mellett folytatjuk a röntgendiffrakció hagyományos mérési módszerein túlmutató, új mérési eljárások kifejlesztésére irányuló munkánkat. Ezek adnak lehetőséget a szinkrotron és röntgen szabadelektron lézer sugárforrásoknál végezhető kísérletekre. Jelenleg ezen a területen három témakörben kapcsolódtunk a nemzetközi kutatásokhoz:

1. Egyrészecske leképzés
2. Egy impulzusból való szerkezet-meghatározás
3. A diffrakciós fázisprobléma vizsgálata

Laboratóriumunkban ezek a kutatások jelenleg is folynak és az elkövetkező időszakban is tervezzük a bekapcsolódást nagy nemzetközi röntgen sugárforrásoknál folyó kísérletekbe, mind saját kezdeményezések útján mind nemzetközi kutatócsoportokhoz kapcsolódva.

Az osztályunkon a következő években az előzőekben felsorolt anyagcentrikus és módszerfejlesztésre irányuló kutatásokat tervezzük. Azonban az, hogy ezek közül melyeket milyen erővel fogjuk kutatni, illetve a felmerülő új kapcsolódó témák közül melyeket helyezünk majd a kutatásaink fókuszába, nagymértékben függ a nemzetközi trendektől.

10 kiemelt publikáció az elmúlt 5 évből (2016-2020)

1. K.E. Walker, G.A. Rance, Á. Pekker, H.M. Tóháti, M.W. Fay, R.W. Lodge, C.T. Stoppiello, K. Kamarás, A.N. Khlobystov: Growth of carbon nanotubes inside boron nitride nanotubes by coalescence of fullerenes: towards the world's smallest co-axial cable, *Small Methods* 1, 1700184-1-9 (2017) IF 12.130, hiv. 6
2. H.M. Tóháti, Á. Pekker, P. Andričević, L. Forró, B. Náfrádi, M. Kollár, E. Horváth, K. Kamarás: Optical detection of charge dynamics in CH₃NH₃PbI₃ - carbon nanotube composites, *Nanoscale* 9, 17781-17787 (2017) IF 7.76, hiv. 2
3. V. Schoeppler, L. Gránásy, E. Reich, N. Poulsen, R. de Kloe, P. Cook, A. Rack, T. Pusztai, I. Zlotnikov: Biomineralization as a Paradigm of Directional Solidification: A Physical Model for Molluscan Shell Ultrastructural Morphogenesis. *Advanced Materials* 30, 1803855 (2018) IF: 25.809 , hiv. 13
4. M. Du, M. Yao, J. Dong, P. Ge, Q. Dong, É. Kováts, S. Pekker, S. Chen, R. Liu, B. Liu, T. Cui, B. Sundqvist, B. Liu: New Ordered Structure of Amorphous Carbon Clusters Induced by Fullerene-Cubane Reactions, *Advanced Materials* 30, 1706916 (2018) IF 25.809, hiv: 6
5. T. Gorkhover, G. Faigel, et al.: Femtosecond X-ray Fourier holography imaging of free-flying nanoparticles, *Nature Photonics* 12, 50–153 (2018) IF: 37.8 hiv. 25
6. L.F. Kiss, J. Balogh, L. Bujdosó and D. Kaptás, Magnetic properties of Fe-Ag multilayers with varying layer thickness and bilayer number, *Phys. Rev. B.* 98, 144423. (2018) IF: 3.736 hiv. 0
7. L. Gránásy, G.I. Tóth, J.A. Warren, F. Podmaniczky, G. Tegze, L. Rátkai, T. Pusztai: Phase-field modeling of crystal nucleation in undercooled liquids – A review., *Progress in Materials Science* 106, 100569 (2019) IF: 31.560, hiv: 15
8. L. Rátkai, T. Pusztai, L. Gránásy: Phase-field lattice Boltzmann model for dendrites growing and moving in melt flow. *npj Comput. Mater.* 5, 113 (2019) IF: 9.341, hiv: 4
9. Y. Zhang, MG. Yao, MR. Du, Z. Yao, Y. Wang, JJ. Dong, ZX. Yang, B. Sundqvist, É. Kováts, S. Pekker, BB. Liu,: Negative Volume Compressibility in Sc₃N@C-80-Cubane Cocrystal with Charge Transfer, *Journal of the American Chemical Society* 142, 7584-7590 (2020) IF: 14.612 , hiv: 3
10. K. Kandrai, G. Kukucska, P. Vancsó, J. Koltai, G. Baranka, Á. Pekker, K. Kamarás, Z.E. Horváth, Á. Hoffmann, A. Vymazalová, L. Tapasztó, P. Nemes-Incze: Signature of large-gap quantum spin Hall state in the layered mineral jacutingaite *Nano Letters.* 20, 5207-5213 (2020) IF 12.279, hiv. 4

Kvantumoptika és kvantuminformatika

Az elmúlt évtizedekben a lézerfizikából kifejlődött kvantumoptika területe hozta el az egyedi kvantumrendszerek detektálásában és kontrollált manipulációjában azt a hatalmas előrelépést, amelyre a "második kvantumforradalomként" hivatkoznak, és amelynek újfajta alkalmazásokban történő kiaknázása a tudomány egyik fő fejlődési irányát határozza meg. A lehetséges alkalmazások egyik nagy köre a kvantuminformatika, amely a számítástudomány és a kommunikáció területén vezet szinte beláthatatlan jelentőségű új megoldásokra. A kvantumtechnológia területe az Európai Unió Horizon Europe programjának kiemelten finanszírozott zászlóshajója.

A Kvantumoptika és Kvantuminformatika Osztály (KKO) a hazai súlypont a következő szakterületeken: kvantumoptika, fény-anyag kölcsönhatás lézerekben, kvantuminformatika és a kvantummechanika alapjai. A kvantumoptika és kvantuminformatika kutatási területére nagyon jellemző a kísérleti és elméleti munka szoros összefonódása. Az osztály, munkatársainak a külföldi kísérleti csoportokkal való, korábban és most is intenzíven folyó együttműködése mellett integrálja az elméleti analitikus, a numerikus szimulációs, és a kísérleti munkát. Az elmúlt négy évben, egy Nemzeti Kiválósági Programban elnyert pályázati forrásból, 500 millió Ft értékben laboratóriumi fejlesztést hajtott végre az osztály: két lézerrel csapdázott hideg atomos és egy adalékolt nanokristály alapú kvantumoptikai kísérletet építettek fel. Az osztály egyik kiemelt stratégiai célja az, hogy a kvantuminformatika magyarországi fejlődésének a motorja legyen. Célkitűzésünk, a kísérletek fejlesztése mellett, hogy az osztályon hagyományosan erős, széleskörű elméleti alapkutatási témákra alapozva, gyakorlati jelentőséggel bíró kvantuminformatikai problémák megoldásához járuljunk hozzá.

Az osztályon a kutatómunkát 50 év körüli, sokéves külföldi tapasztalatot gyűjtött, rendszeresen nagy pályázatot (Lendület, Élvonat, Marie Curie ITN, EU FETOPEN, OTKA) vezető kutatók irányítják (4 fő), akiket számos felkészült 40 év körüli kutató (7 fő, korosztályuk élvonalából, legtöbben korábban Bolyai ösztöndíjasok, hárman Junior Prima díjat nyertek), és néhány fiatalabb posztdoktor követ (2 fő), valamint több nemzetközi tekintélyt szerzett idősebb kutató is itt dolgozik. Összhangban a legfejlettebb országokban megfigyelhető trendekkel, a kvantummechanikai témák a diákok körében népszerűek, így az osztályon is folyamatosan jelen vannak egyetemi és PhD hallgatók, ami további bővülési potenciált jelez.

A kísérleti kvantumoptika területén atomok és fotonok kontrollált kölcsönhatásán alapuló új módszereket fejlesztenek kvantumtechnológiai és kvantuminformatikai alkalmazásokhoz. A lézerrel hűtött és optikai rezonátorban csapdázott hideg Rb atomok kísérleti rendszere egy sokoldalú atom-foton interfész, amelyben a továbblépés iránya az atomok ultrapontos lézerspektroszkópiában felbontott szabadsági fokainak, a hiperfinom állapotok rezonanciáinak, illetve csapdázott atomok tömegközépponti mozgásának kiaknázása koherens kvantumos műveletekben. A meglévő kísérleti kompetencia kiterjed egyrészt a keskeny vonalszélességű, frekvencia-stabilizált diódalézer forráson alapuló optikai rendszerek építésére, lineáris és nemlineáris optikai eszközök széles spektrumának alkalmazására, másrészt atomok lézeres és mágneses terekkel történő manipulációjára UHV vákuum környezetben. A megépült rezonátoros QED kísérlet nemzetközi szinten is figyelemre méltó, amely egyedülálló lehetőséget ad soktest-problémákra jellemző kooperatív viselkedés, például fázisátalakulás vizsgálatára kvantumos rendszerekben. Az elkövetkező években a folyamatban lévő kísérletek nemegyensúlyi kritikus jelenségek feltárására vezetnek hideg atomok és fotonok kölcsönhatásában.

A soktestrendszerek nemegyensúlyi viselkedésének elmélete a KKO egyik kulcskompetenciája. A nyílt kvantum rendszerek disszipációs tulajdonságainak és a fluktuációknak a leírására szolgáló modern eszközöket alkalmazzuk (pl. Keldysh-Green függvény, Langevin egyenletek analitikus módszerek, illetve numerikus hullámfüggvény Monte Carlo szimulációk). Évek óta eredményes fókusztema a kvantum bolyongások tanulmányozása, amelyek a periodikusan gerjesztett, nem egyensúlyi kvantumrendszerek modelljeként is szolgálnak, kvantuminformatikai jelentőségük mellett. Általános, sok különféle fizikai rendszerre alkalmazható kérdéskör a térbeli inhomogenitás hatása soktestrendszerek kooperatív dinamikájára, fázisátalakulásokra. Komplex rendszerek leírásában megszerzett kompetenciánkat alkalmazzuk külső kutatócsoportokkal együttműködésben a fizikán kívül eső tudományterületeken is.

A kvantummechanika alapjainak és a kvantum mérés elméletének kutatása az elmúlt évtizedekben

új lendületet, és újfajta megközelítési lehetőségeket kapott azáltal, hogy kvantumoptikai rendszerek kísérleti tesztelési lehetőséget nyújtanak. A kvantumelmélet gravitációs módosulását leíró Diósi-Penrose modell és az ezzel rokon Newton-Schrödinger egyenlet ellenőrizhetővé válnak. Ezek a modelleknek kitüntetett kapcsolatuk van a kvantummérések több elméleti területével, így a folytonos mérésekkel. A matematikai kapcsolaton túl a különféle kvantumos mérési formák, az általános nem-projektív ill. gyenge mérés, a mérések visszacsatolása és az így létrejövő speciális nyílt kvantumrendszerek leírása képezik az alapját a kvantuminformatikai protokollokban megjelenő zaj jobb megértésének. Az általunk régóta vizsgált mérésekkel befolyásolt nemlineáris protokollok dinamikája egyszerre vet fel alapvető kérdéseket és vezet praktikus kvantuminformatikai eljárások fejlesztéséhez.

A kvantuminformatikában a következő években megerősíteni kívánt egyik gyakorlatias irány az elérhető NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) kvantumszámítógépek programozása, tesztelése és modellezése. A magas zajszint egyelőre korlátozza a valóban hatékony kvantumalgoritmusok végrehajtását, ezért fontos feladat a kvantumszámítógépek teljesítőképességének jellemzése a nyílt kvantumrendszereket leíró módszerek felhasználásával. Elérhető kvantumszámítógépekre implementálunk optimalizációs algoritmusokat, konkrét gyakorlati problémák megoldásában kompetenciát kialakítva. A zaj hatásának kivédésére ígéretes út egy logikai kvantumbit több fizikai kvantumbit együttes állapotába való kódolása topologikus kvantumkódokkal (pl. surface code). A topologikus kvantumbitek zajjal szembeni robusztusságának, és a rajtuk futó, diszkrét idejű dinamikát szimuláló kódok tulajdonságainak vizsgálatát tervezzük.

A kvantuminformatika másik fő alkalmazási területe a kommunikáció, ezen belül a kvantumkriptográfia megvalósítása. A titkosító kulcs kvantumos megosztása egyre magasabb TRL (Technological Readiness Level) besorolású gyakorlati megoldássá válik, melyben a kvantummechanika törvényei garantálják az átvitel biztonságát. Az elkövetkező öt évben kialakítunk egy kvantumos kulcsmegosztó végpontot, mely lehetővé teszi, hogy Magyarországon belül, de akár környező országokkal is kvantum-titkosított összeköttetést demonstrálunk. A kvantumos kommunikációs hálózat állomásának lelke egy nagyon magas hatásfokú szupravezető fotonszámológó (SNSPC), amelyet külső forrásból szereztünk be, és idén beüzemelünk. Ez a detektor új lehetőségeket nyit a KKO-ban folyó atom-foton és nanokristályos laboratóriumi munka számára is. Ez a munka előkészíti a még csak tervben lévő európai kvantumos hálózathoz (EuroQCI) való csatlakozást, amelyben jelenleg az alpprotokoll is kidolgozásra vár. Elméleti munkánkkal megalapozzuk ennek tervezését, kiépítését és későbbi használatát.

A kvantuminformatika alapvető építőeleme az egyfoton állapotot megvalósító forrás. A KKO másik kvantumoptikai kísérletének célja egy determinisztikus egyfoton-forrás a telekommunikációs hullámhossztartományban. Ehhez egy nanokristályba ágyazott ionok közül, konfokális mikroszkóppal kiválasztott egyetlen adalék ion és lézerfény között koherens, kontrollált kölcsönhatást valósítunk meg, amellyel egybites kvantumkapu műveleteket lehet végezni. Az egyfoton-forrásokhoz kapcsolódóan elméleti kutatást folytatunk a parametrikus lekonverzió alapuló multiplexelt forrásokról, és az elérhető hatékonyság növeléséről. Az egyfoton-források működésének optimalizálásához a veszteségi folyamatokat figyelembe vevő általános statisztikus elmélet kidolgozásával foglalkozunk.

A kvantummetrológiában kvantummechanikai rendszereket és az azokban megjelenő nemklasszikus korrelációkhoz vezető ún. összefonódottságot használjuk valamilyen fizikai paraméter, pl. a mágneses tér erősségének a megmérése. A kvantumrendszerek előnye, hogy a nagyobb pontosságot tesznek lehetővé a paraméterbecslésben, mint a klasszikus rendszerek, és a pontosság gyorsan nő az alkalmazott részecskék számával. Számos kísérletet hajtottak végre fotonokkal, hideg ionokkal és hideg atomos gázokkal. Egyes megoldások, pl. atominterferometrián alapuló graviméterek már kereskedelmi forgalomban kaphatók, és túlszárnyalják a hagyományos módszerek által biztosított pontosságot. A GEO600, amely évtizedek óta fejleszti a LIGO számára a technológiát gravitációs-hullám detektorhoz, már 2010 óta használ kvantummetrológiát távolságmérésre, az Egyesült Államokbeli LIGO és az Olaszországbeli Virgo pedig jelenleg ezzel a technológiával frissül. Az osztályon idén induló „Élvonal” pályázati projekt különböző kvantuminformatikai implementációk kvantummetrológiai célú alkalmazásainak kutatását tűzte ki célul.

10 kiemelt publikáció az utóbbi 5 évből (2016-2020)

1. G Tóth, T Vértési, P Horodecki, R Horodecki: *Activating hidden metrological usefulness*, Physical Review Letters 125, 020402 (2020)
2. R Juhász, IA Kovács: *Population boundary across an environmental gradient: Effects of quenched disorder*, Physical Review Research 2 (1), 013123 (2020)
3. A Vukics, A Dombi, JM Fink, P Domokos: *Finite-size scaling of the photon-blockade breakdown dissipative quantum phase transition*, Quantum 3, 150 (2019)
4. T Nitsche, S Barkhofen, R Kruse, L Sansoni, M Štefaňák, A Gábris, V Potoček, T Kiss, I Jex, Ch Silberhorn: *Probing measurement-induced effects in quantum walks via recurrence*, Science Advances 4 (6), eaar6444 (2018)
5. O Kálmán, T Kiss: *Quantum state matching of qubits via measurement-induced nonlinear transformations*, Physical Review A 97 (3), 032125 (2018)
6. B Blaß, H Rieger, G Roósz, F Iglói: *Quantum relaxation and metastability of lattice bosons with cavity-induced long-range interactions*, Physical Review Letters 121 (9), 095301 (2018)
7. K Lange, J Peise, B Lücke, I Kruse, G Vitagliano, I Apellaniz, M Kleinmann, G Tóth, C Klempt: *Entanglement between two spatially separated atomic modes*, Science 360 (6387), 416–418 (2018)
8. JM Fink, A Dombi, A Vukics, A Wallraff, P Domokos: *Observation of the photon-blockade breakdown phase transition*, Physical Review X 7 (1), 011012 (2017)
9. JK Asbóth, A Alberti: *Spectral flow and global topology of the Hofstadter butterfly*, Physical Review Letters 118 (21), 216801 (2017)
10. D Nagy, P Domokos: *Critical exponent of quantum phase transitions driven by colored noise*, Physical Review A 94 (6), 063862 (2016)