

MTA ENERGIATUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONT
ENERGIA ÉS KÖRNYEZETBIZTONSÁGI INTÉZET

1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.; 1525 Budapest, Pf. 49.
telefon: (1) 392 2531; fax: (1) 392 2533
e-mail: belgya.tamas@energia.mta.hu; honlap: www.energia.mta.hu

I. A kutatóhely fő feladatai 2013-ban

Az MTA EK Energia- és Környezetbiztonsági Intézete (EKBI) az Izotópkutató Intézet (IKI) átalakításával 2013. január 1-jével alakult meg. Szervezetében átvette a megelőző IKI három szervezeti egységét (Nukleáris Analitikai és Radiográfiai Laboratórium, Sugárkémiai Laboratórium, Felületkémia és Katalízis Laboratórium). Az IKI Sugárbiztonsági Laboratóriuma átkerült az EK Atomenergiakutató Intézetéhez, onnan az EKBI-hez került a Környezetfizikai Laboratórium.

A 2013-ra kitűzött kutatási témákban már tükröződött a névváltoztatásban is megmutatkozó profilváltozás, az újabb témák már nagyobb hangsúlyt kaptak. A kutatási munka az alábbi témakörökben folyt:

- nukleáris analitikai, szerkezetvizsgálati és radiográfiai módszerek továbbfejlesztése és alkalmazása az energia-, anyagtudomány és interdiszciplináris kutatások területén;
- környezetfizikai kutatások végzése az energiatermelés, az egészségügyi hatásuk (pl. kis dózisok hatása) és a környezetbiztonság területén;
- környezetkímélő és energiatakarékos sugárkémiai folyamatok kutatása;
- energia- és költségtakarékos, ("zöld") katalitikus, ill. felületkémiai folyamatok tanulmányozása területén;
- új kutatási témák kialakítása a reaktorbiztonság, energiátárolás és megújuló energia területén.

II. A 2013-ban elért kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

a) Kiemelkedő kutatási és más jellegű eredmények

Nukleáris analitikai és radiográfiai kutatások

A nukleáris analitikai módszerek energiatudományi, kémiai és ipari alkalmazásai: In-beam katalízis kutatások során több közleményben publikálták a 2012-es PGAA mérési sorozat eredményeit. Azt találták, hogy az adalékolt cérium oxid katalizátor jobban köti meg a klórt a HCl oxidáció során, és a legjobb hatás háromértékű dopoló atomokkal érhető el. Az alap cérium oxid katalizátorok hatékonysága Hf vagy Zr megfelelő mennyiségének bevitelével kb. kétszeresére javítható. A cérium oxid alapú katalizátorokat sikerült olyan formában is előállítani, amely költséghatékonyabb és ipari méretekben is hasznosítható.

Zr-alapú fűtőelem-burkolatok és reaktoranyagok elemösszetételének helyfüggését vizsgálták a Fűtőelem és Reaktoranyagok Laboratórium munkatársaival közösen. Az eredmények igazolták, hogy – baleseti körülmények között – a fűtőelemek anyagának felhasadása és az abszorbeált hidrogén mennyisége között összefüggés áll fenn. A TU Braunschweig kutatóival együttműködve hatásfoknövelést lehetővé tevő, új generációs turbinalapátokban használható, nagy hőtűrő-képességű Co-Re-Cr ötvözetekben vizsgálták a hozzáadott bór mennyiségének és

felületi eloszlásának hatását az anyag mechanikai paramétereire. Azt tapasztalták, hogy a bőr feldúsul az anyagban lévő szemcsehatárokon, így csökkenti az anyag ridegségét és megakadályozza a törését, így az anyag magasabb üzemi hőmérsékletet visel el, javítva a turbina termikus hatásfokát. Ipari megbízásos mérések keretében napelem-alapanyagok összetételét határozták meg, különös tekintettel azok bőrtartalmára.

A nukleáris analitikai módszerek archeometriai alkalmazásai: 2013-ban – részben a K100385 sz. OTKA pályázathoz, részben az EU FP7 CHARISMA pályázathoz kapcsolódóan – folytatták a kárpát-medencei kőszközök nyersanyag-eredetének vizsgálatát. Közép-kelet európai és távolabbi lelőhelyekről származó obszidián pattintott kőszközöket és nyersanyagokat, radiolarit, tűzkő, kovakő eszközöket és nyersanyagokat vizsgáltak Prompt Gamma Aktivációs Analízissel (PGAA). Metabázit, kavics, szaruszirt, „zöldkő” anyagú csiszolt kőszközök (balták, vésők) és nyersanyagok összetételét vizsgálták, részben múzeumi gyűjteményekből, részben terepi gyűjtésről (Olaszország, Románia, Csehország, Lengyelország). Ezekkel a mérési adatokkal bővítették az eredet meghatározására alkalmas adatbázist.

A Szépművészeti Múzeum Egyiptomi Gyűjteményéhez tartozó, feltehetően a mostani palesztin/izraeli területről, i.e. 1750–1550-ből származó szoborcsoportot PGAA és Neutron Radiográfiai (NR) vizsgálatoknak vetették alá annak megállapítására, hogy a szobor bronz része öntéssel készült-e, ill. hogy a szoborcsoport másik részébe épített vas meteorit eredetű-e. Az eredmények szerint kizárható a meteoritvas alkalmazása.

A CHARISMA projekt során felhasználói méréseket végeztek kőszközökön, kerámiákon, üvegeken és fémtárgyakon (ezüst érmék, bronz és vas eszközök). Pozíció-érzékeny prompt-gamma elemvizsgálattal (PGAI) vizsgálták régészeti vastárgyak korróziós folyamatait a klórtartalmuk mennyiségi meghatározásával. Publikálták a világ egyik legrégebbi, ember alkotta vastárgyacról készült tanulmányt, amely az Altimetrics mutató alapján a legmagasabb értéket érte el az archeometriai cikkek között az Elsevier kiadónál, és a magyar médiában is jelentős visszhangot keltett.

Nukleáris és magadatok mérése és feldolgozása, valamint extrém körülmények között lévő anyagok vizsgálata IV. generációs (GEN IV) reaktorok tervezéséhez: Hatáskeresztmetszetek, (n,γ) spektrumok és bomlási sémák meghatározása témájában folyamatos az együttműködés a Berkeley National Lab. (LBNL) és a Charles Univ. Prága kutatóival. Ennek keretében a kálium mérések kiértékeléséből cikket jelentettek meg a Phys. Rev. C. folyóiratban, melyben megmutatták, hogy a statisztikus bomlási modell kielégítően leírja a befogással gerjesztett kálium magok bomlási folyamatát. A ^{196}Pt izotóp gamma-erősségfüggvényét (GSF) határozták meg a Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, és a Charles Univ. Prága kutatóival együttműködve, melyben bizonyították, hogy ugyanazzal a GSF-fel leírható mind a neutronbefogással, mind a rezonancia fluoreszcenciával gerjesztett ^{196}Pt atommagok bomlási spektruma. Az EU FP7 ERINDA és a TANDEM nemzetközi projektek keretében aktinidák (n,γ) spektrumának meghatározását végezték a Jülich GmbH Institute of Energy and Climate Research kutatóival közösen. Ezen kísérletek célja nukleáris hulladék jellemzéséhez kapcsolódó nukleáris adatok precíz mérése. Az IRMM kutatóival együttműködve megmérték a ^{235}U hasadási prompt-gammák spektrumát és a kis energiáktól eltekintve jó egyezést találtak a korábbi legteljesebb méréssel. A kis energián mutatkozó eltérés következtében az egy hasadásra eső átlagos gamma-szám emelkedett, míg az átlagos gamma-energia csökkent, miközben a teljes energia ugyanannyinak adódott. Ezen értékek mérési bizonytalansága pedig jóval kisebb, a GEN IV reaktorok számításához szükséges, 7,5%-nál. Az IRMM kutatóival

közösen publikálták a ^{206}Pb izotóp és az EK, LBNL, CERN kollaborációban vas izotópok prompt-gamma spektrumáról és befogási hatás-keresztmetszetről szóló közleményeket, melyekben jelentősen bővítették a bomlási sémákat és pontosították a befogási hatáskeresztmetszeteket.

Egy tervezés alatt álló IV. generációs reaktortípus hűtésére szuperkritikus vizet kívánnak felhasználni, ezért a szuperkritikus víz tulajdonságainak alaposabb megismerésére kifejlesztették az ANCARA mérőkört, amelyet működés közben Dinamikus Neutron Radiográfiai (DNR) képalkotó állomáson lehet tanulmányozni.

Metodikai kutatások: A NIPS mérőhelyen lévő Compton-elnyomós HPGe detektor válaszfüggényét és hatásfokát sikeresen modellezték 11 MeV energiáig MCNP-CP számolással. A PGAI módszerének megalapozása során szerzett tapasztalataikat és első háromdimenziós elemanalitikai eredményeiket publikálták, mellyel hozzájárultak egy ritka lelet szerkezetének és készítési technológiájának megértéséhez. E módszert sikerrel alkalmazták a nukleáris biztosítéki rendszerrel kapcsolatos ún. tokozott mintákra is. Részt vettek a NAÜ által koordinált (IAEA TC project RER 4/032/RER1/007, 2011-2013), WEPAL (WAGENINGEN Evaluating Programs for Analytical Laboratories) NAA összehasonlító körmérésben, növényi és talajminták szervesen összetevőinek meghatározása céljából. A labor a nemzetközi mezőnyben a legjobb kategóriába került. Geológiai minták méréséhez az NAA labort geológiai standard sorozat mérésével validálták. A standardok összetételét PGAA-val is meghatározták, elvégezték a két nukleáris analitikai módszer összehasonlítását, és megalapozták a két módszer együttes, egymást kiegészítő alkalmazásának lehetőségét.

A Wigner FK-val együttműködésben, reverz Monte Carlo szimulációs módszert alkalmaztak foszfáttartalmú elektrolitok szerkezetének leírására, neutron- és röntgendiffrakciós mérésekre támaszkodva.

Geológiai és környezetanalitikai kutatások: NAA méréseket végeztek lapis lazuli és kék pigment mintákon. A PGAA-val korábban mért fő- és nyomelem koncentrációk csak részben voltak alkalmazhatók a féldrágakövek eredetének meghatározásához. Az NAA-val mérhető további nyomelemek (főként ritkaföldfémek) koncentrációi a remények szerint segítséget nyújthatnak a féldrágakövek lelőhelyeinek azonosításában. Földköpenyből származó xenolitok összetételét vizsgálták NAA-val, a kapott eredmények a korábbi XRF mérésekkel jó egyezést mutatnak.

Alacsonyhárterű gamma-spektrometriai számlálókamrát és radon-záró mintatartót felhasználva építőanyagok aktivitás-koncentrációit mérték, mellyel bővítették eme anyagokra vonatkozó sugárvédelmi adatbázist, valamint nagyobb mintaszám gyorsabb vizsgálatára alkalmas módszert teszteltek. Megállapították, hogy a vizsgált kb. 40 építőanyag minta túlnyomó többségének aktivitás-koncentrációja nem haladja meg a határértékeket, amelyet viszont salak minták meghaladnak.

Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatok: A módszer katalitikus folyamatok tanulmányozására történő alkalmazásáról összefoglalót készítettek. Módosított ferriszilikátokban azonosították a katalitikus folyamatokban részt vevő vas komponensek állapotváltozásait. SBA-15 és SBA-16 hordozók szerkezeti különbségeinek hatásait vizsgálták kettős, vas-réz-oxid katalizátorokon a toluol oxidációjában. Megállapították, hogy a katalizátorszemcsék sokkal jobban beépülnek az SBA-15 mátrix csatornáiba, a kétfémes komponensek az SBA-16 szerkezetben kevésbé diszperzek – egy részük a csatornákat el is zárja. Rétegvegyületek, (ún. kettős hidroxidok, LDH) vizsgálata során megállapították, hogy a $\text{Ca}^{2+}/\text{Fe}^{3+} = 2$ aránynál alakul ki egyfázisú rendszer. Nagyobb Ca^{2+} tartalom (pl. $\text{Ca}^{2+}/\text{Fe}^{3+} \sim 3$) javítja az LDH stabilitását, ami pl.

későbbi katalitikus alkalmazások számára előnyös lehet. Hasonló eredményekre jutottak Mg/Fe LDH-k vizsgálatával is. Mössbauer-spektroszkópiás vizsgálataikat kiegészítették pozitron annihilációs mérésekkel is. A különböző élettartamú o-Ps komponensek jól jellemezték a vizsgált ferriszilikátok eltérő pórusszerkezetét.

Különböző permeabilitású nanokristályos mágneses FINEMET ötvözetekben határozták meg a mágnesezettség kitüntetett irányait. Töltés-kisütés ciklusok hatásait, valamint nehézion-besugárzás következményeit vizsgálták ^{119}Sn és ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópiával elektrolitikusan leválasztott Sn-Ni-Fe ötvözetekben, melyek Li elemek elektródjaiként is alkalmazhatók. Fe(II) citrát koordinációs polimer szerkezetvizsgálatához is alkalmazták a módszert.

Környezetfizikai kutatások és a megújuló energiával kapcsolatos kutatások

A széndioxid tárolása mélygeológiai formációkban: A CO₂ geológiai tárolás területén végzett kutatás számára a Magyar Földtani és Geofizikai Intézet potenciális fedőkőzet mintákat bocsátott a rendelkezésünkre. Ezeket az Oslói Egyetemmel együttműködésben, vízben oldott szuperkritikus CO₂-ban kezelték, így a fedőkőzetben egy lehetséges CO₂ injektálás hatására lejátszódó folyamatok előrejelzéséhez használható mintákat állítottak elő. A minták kezelés előtti és utáni állapotainak vizsgálata hozzájárulhat a CO₂ geológiai tárolás hosszú távú biztonságának értékeléséhez. Ezzel párhuzamosan, részt vettek a Spanyol Geológiai Szolgálatól származó CO₂-ban kezelt, potenciális spanyol tárolókőzet minták vizsgálatában. Ennek eredményeként megállapították, hogy kút közeli környezetben a kőzet pórusok agyagos kitöltésének egy része kimosódik.

Radioaktív hulladék geológiai tárolása: Magyar és svájci mélygeológiai tároló alapkőzetének radionuklid-megkötő tulajdonságait vizsgálták a nagyaktivitású radioaktív hulladékok mélygeológiai tárolóban történő biztonságos elhelyezésének témájában, svájci együttműködés keretében. Mikro-EXAFS kísérletekkel feltárták annak az okát, hogy a Ni és Zn esetén miért mutat eltérést a makroszkopikus kísérletekkel és a modellezéssel meghatározott szorpciós kapacitás. Az urán vonatkozásában kimutatták, hogy nagy oldatbeli koncentrációk esetén új fázis keletkezése a fő megkötési mód.

Kis dózisok biológiai hatása: Vizsgálták, hogy az ionizáló sugárzás okozta sejtpusztulás milyen szerepet játszik a rák kialakulásában. E témában a Leiden University Medical Center egy kutatócsoportjával közösen végzett kutatások fókuszában az inhomogén besugárzás szöveti sejtösszetételre gyakorolt hatásának tanulmányozása áll. Modellszámításainkkal meghatározták, hogy a dózisteljesítmény és a maximális osztódási gyakoriság függvényében milyen mértékben kell változnia az osztódásra képes sejtek számának, hogy a szöveti egyensúlyt fenntarthassák. Számításaik azt mutatják, hogy a fokozott sejtpusztulás miatt megnőtt sejtosztódási gyakoriság révén kialakuló mutációk száma nagyobb, mint a sugárzás közvetlen hatásaként keletkező mutációké.

Energia- és környezetkímélő sugárkémiai kutatások

Új, energiakímélő sugárkémiai eljárások alkalmazása a szennyvízkezelésben: Maleinsav, fumársav, valamint, aromás gyűrűt tartalmazó, hús különböző toxikus molekula hidroxilgyökkel indukált lebontását vizsgálták, levegővel telített, híg vizes oldatban. A hidroxilgyököt a víz radiolízisével állították elő. Megállapították, hogy a fenolok, a maleinsav és a fumársav nagyon hatékonyan lebonthatók. Amikor a fenol gyűrűhöz amin, acetamid, vagy hidrazo-csoport kapcsolódik, a hatékonyság kisebb. Ezt azzal magyarázták, hogy a

lebomlás során keletkező közttermékek reaktivitása az oldott oxigénnel szemben kicsi. A kísérletek során azt is bizonyították, hogy a toxikus vegyületek lebontásában a víz radiolízis redukív közttermékei, a hidrogén atom és a hidratált elektron is részt vesznek.

Egy igen gyakran alkalmazott, nem-szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyag, az ibuprofen hidroxilgyökkel indukált lebontásának mechanizmusára tettek javaslatot, valamint azonosították a keletkező közti- és végtermékeket. Impulzusradiolízis kísérletekben hidroxiciklohexa-dienil típusú gyököket sikerült beazonosítaniuk. Ezekből a közttermékekből végtermékek keletkeznek, melyek az ibuprofen hidroxilált származékai. A végtermékeket HPLC-MS/MS berendezés segítségével azonosították. Reduktív körülmények között vizsgálva az ibuprofen lebontását, megállapították, hogy a hidratált elektron a molekulát a karbonil csoporton támadja. Egyik fontos következtetésük, hogy az ibuprofen hatékonyabban lebontható oxidatív, mint redukív körülmények között.

A gyógyszermolekulák metabolitjai általában toxikusabbak, mint maguk a molekulák. Ezt tapasztalták ibuprofen esetében is, *Daphnia magna* standard mikrobioteszt és *Vibrio fischeri* luminescens baktérium teszt alkalmazásával. Levegővel telített oldatokban a toxikus hatás a besugárzás hatására először nőtt, majd csökkent a dózis növelésével. Ezt a jelenséget úgy értelmezték, hogy az első degradációs termékek (a hidroxilált ibuprofen származékok) toxikusak, azok bomlástermékei azonban már nem, vagy kevésbé toxikusak. Az eredmények bizonyították, hogy megfelelő dózis alkalmazásával az oldat toxikus hatása erősen csökkenthető.

A radiolízis elméleti kutatása: Fotokémiai vagy sugárkémiai úton keletkező H_2O^+ ion – hidratált elektron párok ikerrekombinációja egyaránt vezethet (a) H_3O vagy (b) OH^- keletkezésére. A folyamatok termodinamikai elemzése útján megmutatták, hogy az (a) folyamat endoterm, (b) exoterm, az eltérés azonban a víz szuperkritikus állapotában kisebb, mint szobahőmérsékleten.

Polimerek módosítása sugárzásos ojtással: Ojtott cellulózmintákon a korábbiakban leválasztott ZnO nanoszerkezetek erősen inhomogén elrendeződést mutattak. Az új kísérletekben változtatták az ojtási eljárást, ezzel növelték az ojtott nanorudak homogenitását megalapozva az energiatermelő szövet előállítását.

Nagy folyadékfelvevő képességű és megfelelő szilárdságú hidrogéleket állítottak elő vízdoldható cellulózszármazékokból (CMC: karboxi-metil-cellulóz, HEC: hidroxietil-cellulóz, HPC: hidroxipropil-cellulóz) nagyenergiájú sugárzás alkalmazásával. A keresztkötések számát a dózissal változtatták: a dózis növelése növelte a keresztkötések számát, és ezzel csökkentette a folyadékfelvevő képességet, növelte a gélesedett molekulák arányát és a szilárdságot. Desztillált vízben a duzzadóképes sorrendje: CMC>HEC>HPC. A felhasználás során a hidrogélekkel kapcsolatba kerülő elektrolitokból a CMC egy nagyságrenddel kevesebb folyadékot képes felvenni, mint desztillált vízből, a HEC-gél duzzadása kb. felére csökken, míg az eredetileg is kevésbé duzzadó HPC folyadékfelvétele nem változik. Izotóniás sóoldatban a folyadékfelvevő képesség sorrendje HEC>CMC>HPC. A cellulóz alapú hidrogélek különböző tesztoldatokban mért folyadékfelvevő képessége összemérhető a kereskedelmi forgalomban levő, akrilát típusú gélek megfelelő értékeivel. A cellulóz alapú hidrogélek textilbevonatként kötszerekre alkalmazhatók, önmagukban egészségügyi célra (pl. pelenkabetét) és talajjavításra használhatók.

Házi gyümölcsérlelő berendezés létrehozására irányuló munkájukat sikeresen lezárták. Megtalálták a megfelelő gázáteresztő képességű polimert. A partner intézményekben elkészült a berendezés prototípusa.

Energiatakarékos, környezetkímélő és gazdaságosságot elősegítő felületkémiai és katalíziskutatások

Metán száraz reformálása, a kis fűtőértékű földgáz vagy a biogázok hasznosítása: A kutatások távlati célja a hazai inertes gázokból hidrogén vagy szintézisgáz előállítása. A kutatómunka során először modellként tiszta metán+szén-dioxid keveréket alkalmaznak, melyből megfelelő katalizátoron szintézisgáz, azaz CO és H₂ 1:1 arányú keveréke nyerhető ($\text{CH}_4 + \text{CO}_2 \leftrightarrow 2\text{CO} + 2\text{H}_2$). A sikeres ipari alkalmazásnak gátat szab a katalizátorok mérgeződése, kokszolódása. Ezeket a folyamatokat tanulmányozva a 2013-as évben befejezték az Au-Ni/MgAl₂O₄ rendszer vizsgálatát és megállapították, hogy a vízgőzös reformálásról leírtakkal ellentétben a kétfémes AuNi ötvözet fázis kialakulása miatt a száraz reformálás során keletkezett szén lerakódások eltávolítása nehezebb, a katalitikus aktivitás pedig csökken. Tovább lépésként, Ni és Pt tartalmú nanoszerkezetű, ZrO₂-hordozós katalizátorok fejlesztését célozták meg, valamint vizsgálták a felületi szénképződés mechanizmusát ¹³C-nel jelzett CO₂ és CH₄ segítségével (EraChemistry–OTKA #NN107170: Dry reforming: from understanding the elementary steps to better catalysts”, 2012-2014). A felületi szénképződést és az egyensúlyi folyamatok mechanizmusát cirkulációs rendszerben, p<1 atm nyomáson vizsgálták jelzett (¹³C) reaktánsokkal, tömegspektrometriás detektálással, míg a többféle módszerrel előállított katalizátorminták elsődleges tesztelése és stabilitásvizsgálata átáramlásos reaktorban történt atmoszférikus nyomáson, on-line tömegspektrometriás és gázkromatográfiás analízissel. A katalizátorok szerkezetvizsgálatát TPO, XRD és TEM mérésekkel végezték. A kezdeti eredmények azt mutatják, hogy Pt katalizátorokon ugyan nem keletkezik szénlerakódás, de a hőmérséklet-programozott első reakció során kevésbé aktívak, mint a Ni minták. A kis fémtartalmú katalizátorokon a fordított vízgáz reakció is dominál még 600°C-on (a CO/H₂ arány>>1). Az izotópjelzéssel, 50 mbar nyomáson, cirkulációs reaktorban végzett mérések rávilágítottak arra, hogy az először (legalacsonyabb hőmérsékleten) keletkező CO termék a CO₂ aktiválásából származik. Az alacsony hőmérsékleten jelentős visszareakciót észlelve egyértelmű, hogy a felületi szénformák aktív résztvevői a reakciónak. A reakció után vákuumban végzett termikus deszorpció során tapasztalt jellegzetes CO₂-H₂-CO triplett csúcs a felületi köztitermékek (karbonátok vagy formiátok) bomlásának eredménye lehet. A szénképzésre hajlamos Ni és NiPt katalizátorokon CO deszorpció figyelhető meg, míg a Pt mintákon nem.

A szén-monoxid hidrogénben történő preferenciális oxidációja: A módszernek a PEM tüzelőanyag cellákat tápláló hidrogén CO mentesítésében van jelentősége. Folytatták a korábbi kutatásaikban kedvező tulajdonságúnak mutakozó mangán-kobalt vegyes oxid (MnCoO_x, Mn/Co atomarány=5/95 ill. 12/88) katalizátorok vizsgálatát, amelyben a megnövekedett CO oxidációs aktivitást és szelektivitást a Mn-nal szubsztituált Co₃O₄ spinel fázisnak tulajdonították. A MnCoO_x (Mn/Co=12/88) az XRD vizsgálatok alapján a kristályos vegyes spinel szerkezetű oxidfázis mellett kb. 30 % amorf fázist tartalmazott. 700°C-on levegőben végzett hőkezelésével növelték a minta kristályosságát, ami az amorf fázis 10%-ra, a fajlagos felületet negyedére csökkenését eredményezte. A hőkezelt minta aktivitása a fajlagos felület csökkenésének megfelelőnél lényegesen nagyobb mértékben csökkent, ami az amorf fázis jelenlétének fontosságát hangsúlyozza. Az Mn/Co=5/95 atomarányú MnCoO_x katalizátor hasonló, de kisebb mértékű deaktíválódást mutatott a 700°C-os hőkezelés hatására, míg az egyfémű közel 100%-ban kristályos Co₃O₄ spinel tartalmú CoO_x esetén a hőkezelés hatására csak a fajlagos felületcsökkenéssel arányos aktivitáscsökkenést tapasztalták. Érdekes módon a hőkezelt vegyes oxidok a PROX tesztet követő hőmérsékletprogramozott

oxidációval reaktiválhatók voltak, a minták megközelítették a kiindulási katalizátorok felületegységre vonatkoztatott aktivitását, míg az egyfémű CoO_x a hasonló kezelése után ugyanazt a felületegységre vonatkoztatott aktivitást mutatta. Mindezek alapján arra következtek, hogy a MnCoO_x mintáknak a Co_3O_4 -hez képest nagyobb aktivitása feltehetőleg a Mn szubsztitúciónál jelentősebb mértékben a rácsban lévő nagyobb hibahely koncentrációnak és az amorf fázis jelenlétének köszönhető, amelyek tartós hőkezelés hatására rendeződnek, ill. kristályosodnak, de gyors redukciós-oxidációs kezeléssel részben ismét létrehozhatók. A Co_3O_4 mintában ilyen hibahelyek, rendezetlen fázisok csak kis mértékben alakíthatók ki.

Mind energiatakarékossági, mind környezetvédelmi („zöld kémia”) szempontból fontos a *levegővel ill. oxigénnel*, mint környezetbarát oxidálószerrel végzett nagy szelektivitású *parciális oxidációs* folyamatok megvalósítása. Az aranykatalizátorok már bizonyított nagy szelektivitásának és aktivitásának további javítása, ill. alkalmazhatóságuk különféle funkciós csoportok szelektív oxidációjára történő kiterjesztése céljából az arany második fémmel történő kombinálása hatásait vizsgálják. E több éves kutatási téma keretében SiO_2 hordozós AuAg és Al_2O_3 hordozós AuCu katalizátor rendszereket vizsgáltak glükóz vizes oldatban végzett glükonsavvá történő oxidációjában. Kontrollált szerkezetű kétfémű nanorészecskéket hoztak létre folyadékfázisú redukcióval és stabilizáltak vizes szolokban, majd adszorbeáltattak hordozón és kalcináltak 400°C -on a szerves stabilizátor eltávolítására.

A korábbiakban a kalcinált, ötvözet részecskéket tartalmazó AuAg/ SiO_2 mintákon $\text{Ag}/\text{Au} < 1$ atomaránynál tapasztaltak szinergikus aktivitásnövekedést. 2013-ban tanulmányozták, hogy a kalcinált minták 350°C -on hidrogénben végzett redukív kezelése hogyan befolyásolja a katalizátor szerkezetét és aktivitását. UV-VIS, XPS spektroszkópiái, TEM és HRTEM vizsgálatok szerint mind a kalcinált, mind a redukált kétfémű minták dominánsan fémes állapotú kétfémű részecskéket tartalmaznak, a kalcinált mintákban helyenként Ag-oxid szigetekkel. A redukció hatására a kalcinált mintákban 3 és 5 nm közé eső átlagos AuAg részecskeátmérő és az SPR (felületi plazmon rezonancia) sáv hullámhossza alig változott, az XPS-sel becsült felületi Ag/Au atomarány csak csekély mértékben nőtt, s a katalitikus aktivitás is csak kis eltérést mutatott, trendje az Ag/Au arány függvényében ugyanaz maradt. Az eredmények és irodalmi előzmények, köztük DFT számítások alapján lehetséges mechanizmust javasoltak, s az Ag hatásaként az O_2 aktiválás köztitermékeként megjelenő H_2O_2 bomlás meggyorsítását valószínűsítették.

Az Al_2O_3 hordozós $\text{Cu}/\text{Au}=1/1$ atomarányú együtt redukált (Au&Cu), ill. Au-ra redukált Cu ($\text{Cu} \rightarrow \text{Au}$) és Cu-ra redukált Au ($\text{Au} \rightarrow \text{Cu}$) nanorészecskéket is előállítottak, amelyek szerkezetét és glükóz oxidációs aktivitását hasonlították össze kalcinált állapotban, és azt követő redukálás után. UV-vis és HRTEM vizsgálatok szerint a különböző AuCu szolok eltérő szerkezetű (ötvözet illetve mag-héj jellegű), 2-3 nm átlagos átmérőjű kétfémű részecskéket tartalmaztak, amelyekben különböző mennyiségű Cu-oxid volt kimutatható. Az AuCu/ Al_2O_3 rendszerben csak az Au&Cu/ Al_2O_3 mintán láttak az AuAg/ SiO_2 esetében tapasztaltnál lényegesen kisebb szinergikus aktivitás növekedést. Az AuCu/ Al_2O_3 katalizátorok kalcinált és kalcinált+redukált formájának aktivitása gyakorlatilag azonos volt, ami meglepő, tekintve, hogy a kalcinált mintákban több és magasabb oxidáltságú volt a Cu-oxid, valamint a részecskében kisebb Cu-tartalmú az AuCu ötvözetfázis, mint a redukció után.

Katalízis mechanizmus kutatása szelektív hidrogénezésben: A katalitikus hidrogénezésekben befejezték az aszimmetrikus indukció molekuláris feltételeinek vizsgálatát, mely során ciklikus, prokirális ill. királis ketonok enantioszelektív redukív alkilezését valószínűsítették meg.

Az eredményeikkel sikerült további bizonyítékot találni arra, hogy a vizsgált reakciók esetében az enantiodifferenciálódás nem kizárólag a homogén fázisban zajlik le, a heterogén katalizátor felületnek is jelentős szerep tulajdonítható a folyamatban. Erről közleményük jelent meg.

Nedves oxidáció: A kísérlettervezés módszerét használva, különböző modellvegyületek és katalizátorok működési határait derítették fel összehasonlító módszerrel. Megállapították, hogy a besugárzás és a nedves oxidáció kombinációja előnyökkel jár a fenol modellvegyület lebontásakor.

Üzemanyagok kéntelenítése: A Metropolitan Autonomous University, Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica kutatóival elkezdett együttműködés keretében azt vizsgálták, hogy milyen hatással van a gallium a NiMo, NiW katalizátorok kéntelvétele, kéncseré és katalitikus tulajdonságaira a tiofén kéntelenítés során, valamint azt, hogy a gallium milyen módon befolyásolja a Ni tömbi fázisba történő elmozdulását. Kísérleti eredmények alapján a tiofén kéntelenítés új mechanizmusára tettek javaslatot, amely során a katalizátor felületén adszorbeálódó tiofén és a szomszéd felületi -SH csoport kölcsönhatása sokkal jelentősebb az eddig leírt mechanizmusokhoz képest. Elméletük alátámasztására további DFT számítások elvégzését tervezik.

Biodízel előállítás: Triglicerideket és zsírsavakat tartalmazó növényi olajokból történő biodízel előállításához kapcsolódóan olajsav dekarboxilezését vizsgálták hidrogénező kezelés során szulfidált alumínium-oxidhordozós NiMo (P tartalommal) és NiW katalizátorokon. A vizsgálatok során egyértelműen bizonyítást nyert, hogy a dekarboxilezés során metán és CO₂ mellett CO is keletkezik, így a dekarboxilezés mechanizmusát tudták pontosítani. Az eredményekből egy PhD dolgozat került benyújtásra „A szulfid katalizátorokon kötött kén mozgékonyosságának hatása a tiofén kéntelenítés folyamatára” címmel a Pannon Egyetem Vegyészmérnöki- és Anyagtudományok Doktori Iskolájához.

b) Tudomány és társadalom

Előadást tartottak a budapesti Víz Világtalálkozó tudományos üzeneteinek megfogalmazása céljából az MTA Környezettudományi Elnöki Bizottsága szervezésében tartott Multidiszciplináris Víz Konferencia c. rendezvényen „Nagyhatékonyságú oxidációs eljárások a vízkezelésben: sugártechnológiai módszerek” címmel.

Az MTA Sugárvédelmi és Környezetfizikai Bizottsága tudományos ülést szervezett az MTA-n a Bábaapáti NRHT megnyitása alkalmából, melyet az MTA főtitkára nyitott meg az RHK vezetőinek részvételével és ahol Környezetfizikai Laboratórium (KFL) több kutatója is beszámolt a mélygeológia hulladéklehelyezés biztonságával kapcsolatos eredményeiről.

A KFL tevékenységéről a laboratórium vezetőjével készített interjú jelent meg az Innotéka magazin 2013. májusi számában. A nagy aktivitású radioaktív hulladékok elhelyezéséről, továbbá a KFL aeroszolok légúti kiülepedését modellező csoportjának munkájáról közérthető anyag jelent meg a XII. kerületi Hegyvidék helyi lap október 22.-i számában.

A Budapesti Neutron Centrum EU FP7 NMI3 és az NMI3 Imaging JRA keretében a mérési lehetőségeiket bemutató, népszerűsítő rövidfilm készült a Nukleáris Analitikai és Radiográfiai Laboratórium (NAL) munkatársaival a PGAA-NIPS berendezésen folyó munkákról, amelyek a projekt honlapján és a YouTube-on is elérhetők:

<https://www.youtube.com/watch?v=s-pmuGPJEG8>

<https://www.youtube.com/watch?v=CRoJi1JUzkg>

Előadásokat és laboratóriumi látogatásokat tartottak a Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából. Az Illyés Gyula Gimnázium 36 tanulójának szerveztek látogatást az MTA EK laboratóriumaiba és a Wigner FK gyorsítójába.

Rész vettek a „7th Central European Training School on Neutron Techniques CETS2013, 27-31 May, Budapest, Hungary” című neutron iskola szervezésében, előadások és gyakorlatok tartásában.

III. A kutatóhely hazai és nemzetközi kapcsolatai 2013-ban

A nagyszámú igényre tekintettel jelentősen túlteljesítették az EU FP7 CHARISMA projekt keretében lekötött mérési napokat. A CHARISMA és ERINDA projektek berendezés-hozzáférési programjának segítségével 37 külföldi vendégkutatót fogadtak. Sikeresen megrendezték a 6. International k_0 Users' Workshopot, amely a neutronaktivációs analitika egyik jelentős konferencia-sorozata. Jelentős hozzájárulással vettek részt a Németországban megrendezett NINMACH 2013 interdiszciplináris archeometriai konferencián. Öt alkalommal pályáztak sikerrel nyalábidőt a Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) mellett működő, prompt-gamma mérőhelyen, összesen 15 nap időkeretben. Itt magfizikai, geológiai, biológiai és kémiai katalizátor-témákban hajthattak végre olyan kísérleteket, amelyek a saját berendezésükön nem lettek volna lehetségesek. Marokkói és Szlovén TÉT pályázatok keretében kétoldalú együttműködést folytattak a PGAA, illetve a Mössbauer spektroszkópia területén. 2 fő marokkói és 1 fő szlovén vendéget fogadtak 2-2 hétre.

Támogatást nyújtottak az „Energy Conference - E2C 2013” szervezéséhez, amely 2013. október 27-30 között a budapesti Flamenco Hotelben került megrendezésre. A konferencián az első plenáris előadást az energiaügyért felelős államtitkár, a konferencia fő patrónusa tartotta. Az energiatudomány teljes spektrumából, három parallel szekcióban folytak előadások a három és fél napos rendezvényen. Magyar részről számos előadás hangzott el, közöttük az MTA EK kutatói is több előadással szerepeltek.

Hét MSc. csoportnak tartottak PGAA laborgyakorlatot (ELTE, BME, DE). Előadásokkal és laborgyakorlatokkal vettek részt a Közép-Európai Neutron Iskola (CETS2013) rendezvényén. Oktatási és képzési tevékenységet végeznek sugárkémia, anyagtudomány, környezetvédelem, és víztisztítás területén a BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Karán, az ELTE-n és a Szegedi Egyetemen, továbbá előadásokat tartanak az Óbudai és a Pannon Egyetemen. A BME-n és a Pannon Egyetemen katalízisoktatást és laborgyakorlatok vezetését végzik.

Új együttműködő intézmények: Kínai Tsinghua University, Beijing-gel szennyvizes témában, Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica (Mexikó), Department of Pharmacy of the Wrocław Medical University katalitikus folyamatok témában.

A Nemzeti Fejlesztési Minisztérium felkérésére a megújuló energiaforrások hasznosítására vonatkozó cselekvési terv felülvizsgálatához háttér tanulmányt készítettek melynek célja, hogy gazdasági modellezésen keresztül rávilágítson arra, hogy egyes gazdasági, környezeti vagy foglalkoztatási célkitűzések esetén milyen energiamix teljesíthetné optimálisan Magyarország 2009/28 EK irányelvben vállalt kötelezettségét. A munka 2014-ben is folytatódik.

Az Optenergy Kft. megbízásából barnamezős beruházás előkészítése céljából a Tisza II. Erőmű Üzemi területén megújuló energiaforrások fölhasználására végeztek felmérést.

Együttműködési megállapodást kötöttek a decentralizált villamosenergia-hálózatok területén folytatott kutatási, fejlesztési valamint innovációs tevékenységeik összehangolására a Bükk-Térségi LEADER Egyesülettel, amely egyben a Debreceni Egyetem AGTC MÉK Megújuló

Energia Forrás Kihelyezett Tanszéke is. Részletek: <http://www.youtube.com/watch?v=-Z4y9XoUKo8>.

IV. A 2013-ben elnyert fontosabb hazai és nemzetközi pályázatok rövid bemutatása

2013 szeptemberében a CIEMAT vezetésével elindult a CHANDA (*Solving Challenges in Nuclear Data for The Safety of European Nuclear Facilities*) projekt, amely nukleáris adatokkal kapcsolatos kutatások háttérét teremti meg 48 hónapra.

A beszámolási időszakban igen eredményesen szerepeltek az MTA Infrastruktúra pályázatán. Az év közepén sikerült a Budapesti Neutron Centrum berendezések korszerűsítéséhez mintegy nettó 57 MFt forrást elnyerni. A fejlesztések megvalósítása jelentős részben áthúzódik 2014-re. Ezek a fejlesztések jelentősen hozzájárulnak a közeljövő megújuló energia kutatások megalapozásához.

„Aeroszolkok kiülepedésének elméleti és kísérleti vizsgálata gyakori légúti betegségek esetén” (asztma, COPD) címmel támogatást nyertek a Kutatási és Technológiai Innovációs Alaptól (KTIA), KTIA_AIK_12-1-2012-0019, 30 hónap.

V. A 2013-ban megjelent jelentősebb tudományos publikációk

1. Rehren T, Belgya T, Jambon A, Káli G, Kasztovszky Z, Kis Z, I. Kovács, Maróti B, Szentmiklósi L et al. (15): 5000 years old Egyptian iron beads made from hammered meteoritic iron. J. Archaeol. Sci., 40: 4785-4792 (2013) <http://dx.doi.org/10.1016/j.jas.2013.06.002>
2. Schulze R, Szentmiklósi L, Kudejova P, Canella L, Kis Z, Belgya T et al. (11): The ANCIENT CHARM project at FRM II: Three-dimensional elemental mapping by prompt gamma activation imaging and neutron tomography. J. Anal. At. Spectrom, 28:1508-1512 (2013) <http://dx.doi.org/10.1039/c3ja50162k>
3. Firestone RB, Krlička M, Révay Z, Szentmiklósi L, Belgya T: Thermal neutron capture cross sections of the potassium isotopes. Phys. Rev. C, 87: Paper 024605 16 p. (2013) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.87.024605>
4. Lázár K: Mössbauer spectroscopy in catalysis, Hyperfine Interactions 217: 57-65 (2013) <http://dx.doi.org/10.1007/s10751-012-0720-6>
5. Berrezueta E, González-Menéndez L, Breitner D, Luquot L: Pore system changes during experimental CO₂ injection into detritic rocks: Studies of potential storage rocks from some sedimentary basins of Spain. Int. J. Greenh. Gas Control, 17:411-422 (2013) <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2013.05.023>
6. Homlok R, Takács E, Wojnárovits L: Degradation of organic molecules in advanced oxidation processes: Relation between chemical structure and degradability. Chemosphere, 91: 383-389 (2013) <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemosphere.2012.11.073>
7. Illés E, Takács E, Dombi A, Gajda-Schranz K, Rácz G, Gonter K et al. (7): Hydroxyl radical induced degradation of ibuprofen. Sci. Total Environ, 447: 286-292 (2013) <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.01.007>
8. Horváth A, Guczi L, Kocsonya A, Sáfrán G, La Parola V, Liotta LF et al. (8): Sol-derived AuNi/MgAl₂O₄ catalysts: Formation, structure and activity in dry reforming of methane. Appl. Catal. A-Gen, 468: 250-259 (2013) <http://dx.doi.org/10.1016/j.apcata.2013.08.053>