

A Debreceni Egyetem FIZIKAI TUDOMÁNYOK doktori iskolájának kutatási témái

2026.

Vezető: Dr. Kun Ferenc
egyetemi tanár

Debreceni Egyetem TTK, Elméleti Fizikai Tanszék
Cím: 4026 Debrecen, Bem tér 18/b
Postacím: 4002 Debrecen, Pf. 400.
Telefon: +36-52-509-201, Fax: +36-52-509-258
Elektronikus levél: ferenc.kun@science.unideb.hu
URL: <http://physphd.unideb.hu>

Szerkesztette:
Dr. Oláh László

Tartalomjegyzék

I. Atom és molekulafizikai program	3
II. Magfizikai program	19
III. Szilárdtestfizika és anyagtudományi program	29
IV. Fizikai módszerek interdiszciplináris kutatásokban program	42
V. Részecskefizikai program	60

Debrecen, 2026. január

I. Atom- és molekulafizikai program

Témavezető: **Dr. Nagy Ágnes**

PF1/43-93

Sűrűségfukcionál-elmélet

A sűrűség-fukcionál elmélet az atomok, molekulák, szilárdtestek és klaszterek elektronszerkezetének leírására alkalmas elmélet, melyben az elektronsűrűség az alapvető mennyiség, nem a hullámfüggvény. Ez óriási egyszerűsítést jelent, lévén az előbbi háromváltozós mennyiség, míg az utóbbi 4N változós. A kutatás a sűrűség-fukcionál elmélet több területére terjed ki:

- kicserélődési-korrelációs potenciálok és
- energia-fukcionálok vizsgálata
- kinetikus energia, Pauli-energia, Pauli-potenciál
- gerjesztési energiák számítása
- pszeudo-potenciál a sűrűség-fukcionál elméletben
- a sűrűség-fukcionál elmélet "termodinamikai formalizmusa"

Témavezető: **Dr. Sarkadi László**

PF1/410-93

Atomi ütközésekben nyalábirányban emittált elektronokra vonatkozó vizsgálatok

A kutatási téma az atomfizika egy régi problémaköréhez kapcsolódik. Ennek gyökere a Coulomb-erő hosszú-hatótávolságú természete, amely bizonyos esetekben óriási nehézségeket okoz az elméleti értelmezés számára. Ilyen eset pl. az atomi ütközések során a nyaláb irányában emittált elektronok energiaspektrumában fellépő "cusp" csúcs.

A cusp jelenségét már évek óta vizsgáljuk az ATOMKI-ban. A vizsgálatok számos kérdést vetettek fel, amelyek megválaszolása többek közt célkitűzése lehet egy doktori munkának is. Konkrétan a következő két kutatási feladatot kellene elvégeznie a jelöltnek:

1. Egyik legjelentősebb eredményünket semleges atomi lövedékek alkalmazásával nyertük. A megfigyeléseinket interpretáló egyik elmélet alapvető feltételezése az volt, hogy a kísérletben bombázó részként használt He atomok egy része gerjesztett (metastabil) állapotban volt. Egy előzetes kísérletünk igazolta ezt az elképzelést. További kísérletekre van szükség, amelyek során közel 100 %-ban metastabil állapotú He atomokból álló nyalábot előállítva és azzal elvégezve a kísérleteket az elmélet tesztelése céljából közvetlen összehasonlításra alkalmas adatokat nyerjünk.

2. Cusp vizsgálatainknak egy másik iránya az elektronkorreláció kutatása, amely a nagyenergiájú atomi ütközések fizikájának "forró" témái közé tartozik. Ezt jelenleg két elektron aktivizálódásával járó folyamatok megfigyelésével tanulmányozzuk. Az elektronkorreláció igen hatásosan vizsgálható a rendelkezésünkre álló elektron-spektroszkópiai módszerrel az atomi rezonanciaállapotok gerjesztése útján is. A cusp környezetében a lövedék elektronállapotainak gerjesztéseiből származó egészen kis átmeneti energiájú (kb. 10 meV) rezonanciák is kimutathatók. Egy előzetes mérés során egyszerűen pozitív szén ionok cusp spektrumában figyeltünk meg több kisenergiájú auto-ionizációs

csúcsot, amelyeket még nem sikerült azonosítanunk. A kutatási feladat ezen a területen a VdG-1-gyel előállítható könnyű és nehezebb ionok (atomok) gerjesztései során előálló rezonanciák tulajdonságaira és gerjesztési lehetőségeire vonatkozó szisztematikus vizsgálatok.

Témavezető: **Dr. Sulik Béla**

PF1/422-96

Az ionizációs folyamat részletes vizsgálata ion-atom ütközéséből kilépő elektronok többszörös differenciális spektrumainak mérésével

A kutatás az atomi ütközési folyamat jobb megismerésére irányuló, elsősorban kísérleti munka. A rugalmatlan ion-atom ütközések alapfolyamatainak (ionizáció, gerjesztés, elektron-átadás, ezek kombinációi) elméleti leírását elsősorban a Coulomb-kölcsönhatás hosszú hatótávolsága teszi nehezzé. A pontos differenciális mérések alapvető jelentőségűek az atomi szóráselmélet fejlődése szempontjából.

Ha a lövedék nem teljesen lefosztott ion, hanem maga is hordoz elektronokat, az ütközési folyamat meglehetősen bonyolult. A lövedék elektronjai árnyékolják a lövedék magjának terét, de elektron-elektron ütközések révén maguk is hozzájárulhatnak a céltárgy ionizációjához. A kilökött elektronok spektruma ilyen esetekben tartalmazza a lövedékről eltávolított elektronokat (az ún. elektronvesztési folyamatból származó elektronokat) is. A különböző komponensek úgy választhatók jól szét, ha az elektronspektrumot az ütközésből kilépő lövedék (ill. az ionizált célatom) töltésállapotával koincidenciában mérjük. A koincidenciában mért kétszeresen differenciális elektronspektrumok értelmezése az atomi ütközésekre eddig kidolgozott szinte teljes elméleti arzenált igénybe veszi és jelenleg is viták tárgyát képezi az atomi ütközések fizikájában. A fenti mechanizmusok pontos ismerete nemcsak a fizikai megértés, hanem az alkalmazások (plazmafizika, sugárbiológia, stb.) szempontjából is alapvető.

Kutatásaink célja különböző töltésállapotú szén és nitrogén ionok nemesgáz atomokkal (He, Ne, Ar) való ütközéséből kilépő elektronok teljes szög és energia-eloszlásának kísérleti meghatározása koincidenciában a szórt ionok töltésállapotával, az 50-150 keV/u bombázó energia tartományban. Célunk a nyert adatok minél teljesebb elméleti értelmezése. Szűkebb célkitűzés az elektronvesztési folyamatot meghatározó mechanizmusok tanulmányozása, különös tekintettel az - elméleti szempontból legérdekesebb - 180 fok körüli tartományra. Néhány előzetes méréstől eltekintve, a kutatások most indulnak. A PhD hallgató tehát a kezdetektől kapcsolódhatna be egy témába. A munka, különösen az első időkben, túlnyomóan kísérleti jellegű, magas színvonalú kísérleti technika elsajátítását igényli. A mérések egy részét nemzetközi együttműködésben tervezzük.

Témavezető: **Dr. Biri Sándor**

PF1/427-03

Nagy töltésű nehézion plazmák vizsgálata

Az elmúlt években az ATOMKI-ban egy Elektron Ciklotron Rezonancia (ECR) ionforrás került üzembe helyezésre, amivel létrejött Magyarország és Közép-Kelet-Európa első, erősen lefosztott nehézionnyalábot szolgáltatni képes részecskegyorsítója. Az ionforrás a

periódusos rendszer legtöbb eleméből képes erősen ionizált plazmát és tetszőleges lefosztottságú, kisenergiájú nyalábot előállítani (<http://www.atomki.hu/ECR>).

Az ECR ionforrás mellett és részben magán az ionforráson lehetséges kísérleti atom- és plazmafizikai kutatások elsődleges célja e szokatlan, földi körülmények között máshogyan nehezen előállítható anyag jobb megismerése diagnosztikai módszerekkel (Langmuir-szondák, látható fény és röntgendetektorok), melynek eredményeképpen egy sor fizikai paraméter (pl. ion-töltéseloszlás, plazmapotenciál, elektronsűrűség és hőmérséklet, atomi átmenetek) jobb megismerése válik lehetővé. A szükséges berendezések (detektorok, spektrométerek, számítástechnika) az ATOMKI-ben a DE-KFI-ben és külföldi együttműködő partnereinknél rendelkezésre állnak. A másodlagos kutatási téma fullerén plazmák és ionnyalábok előállítása új módszerekkel, endohedrális (centrumában idegen atomot tartalmazó) fullerének előállítása, keletkezési mechanizmusának kutatása. E témák megkövetelik az ECR ionforrás részletes megismerését és felügyelet melletti önálló üzemeltetését is.

Az ECR csoport kifejlesztett egy PC-szoftvert, mellyel bonyolult mágneses ionsapdák és az e csapdában végbemenő elemi folyamatok egy része (töltött részecske mozgás, elektron ciklotron rezonancia, stb.) szimulálhatók. A program szisztematikus futtatására épülő kiegészítő kutatások elsődleges célja különböző (nemcsak ECR) ionsapdák tanulmányozása, kísérleti eredmények (végrehajtott és tervezett) számítógépes szimulációja.

Témavezető: **Dr. Tőkési Károly**

PF1/428-03

Töltött részecskék kölcsönhatásai szabad atomokkal és szilárdtestek felületeivel

A lassú és nagytöltésű ionok (HCI) előállításához szükséges eszközök megjelenésével (elektron ciklotron rezonancia ionforrás (ECR), elektron-nyaláb ionforrás (EBIS)), a tudományos aktivitás, mind kísérleti, mind elméleti szempontból, óriási mértékben megnőtt a HCI-szilárdtest kölcsönhatások tanulmányozása terén. Egyik legalapvetőbb sajátága ezeknek a kutatásoknak a felületi elektronok erős Coulomb perturbáció jelenlétében létrejövő komplex több-test válaszában nyilvánul meg. Ezeken felül a többszörösen töltött ionok és szilárdtestek kölcsönhatásainak tanulmányozása jelentős műszaki jelentőséggel bír, például az ionok által kiváltott anyagkárosodás, a felületi módosítások és a plazma-fal kölcsönhatásának megértésében.

Másrésről, a múlt század kezdetétől folyamatos érdeklődés övezi a különböző ionok fékeződésének vizsgálatait atomokon, molekulákon és szilárdtestekben. Ezeket a munkákat sok tekintetben sarkalta az a tény, hogy a nagytöltésű ionok kölcsönhatásainak pontos ismerete igen sok alkalmazásban kap nagy gyakorlati jelentőséget (felületi diagnosztika, spektroszkópia). A többszörösen töltött ionok és szilárdtest kölcsönhatásainak vizsgálatakor a paramétertartomány jelentősen eltér az egyszeresen vagy kétszeresen töltött ionokétól. A legfontosabb ezek közül az ion semlegesítődése többszörös elektronbefogás által, ami akár 100 elektronos folyamatokig is elmehet. Ez igen jelentős kihívást okoz az elméletnek. Mivel a rezonáns átadási folyamatok nagyon messze vannak az alapállapottól, azt várhatjuk, hogy ezek az állapotok nagy távolságban keletkeznek a felülettől, amikor az atomi hullámfüggvények elkezdik érinteni a felületet. Ez az egyszerű kép azt a lehetőséget kínálja, hogy az ion-felület kölcsönhatásai a felülettől nagy távolságokban vizsgálhatók. Pl. azon ionok fékeződésének a tanulmányozása, amelyek a kölcsönhatás egész idejében nem ütköznek bele a felületbe (ld. lent mikrokapillaris céltárgy), megteremti annak a lehetőségét,

hogy a felületi veszteségi függvény a tömbi veszteségi függvény hozzákeveredése nélkül vizsgálható. Ez a technika csak a közelmúltban került bevezetésre.

Elméleti leírása ezeknek az új típusú folyamatoknak távol áll a teljes megértéstől. Korai munkák klasszikus dinamikai leírásokra épülnek, amelyek igen hatékonyan bizonyultak a kísérleti eredmények leírásában. A tervezett munkák egyik célkitűzése a klasszikus elméletek részletes tesztjének elvégzése és kvantummechanikai többtest elmélet kidolgozása nagy töltésű iononok és szilárdtest kölcsönhatások tanulmányozására.

Témavezető: **Dr. Sulik Béla**

PF1/429-06

Relativisztikus atomfizika tárológyűrűkben

A téma a nagyenergiás atomfizika és magfizika egyik központjának, a németországi Darmstadt-ban található Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) gyorsítóközpont nemzetközi együttműködésben tervezett továbbfejlesztéséhez (Facility for Antiprotonic and Ionic Research, FAIR, <http://www.gsi.de/fair>) kapcsolódik, annak is a tervezett atomfizikai (Stored Particle Atomic Physics Research Collaboration, SPARC, <http://www.gsi.de/fair/experiments/sparc/>) együttműködéséhez. Itt az elkövetkező négy-öt évben kísérleti berendezések fejlesztése folyik majd, amelyeket távlatilag az érdekelt fejlesztők és otthoni intézményeik elsőbbséggel használhatnak.

Az ATOMKI a Debreceni Egyetemmel közösen két óriás mágneses elektronspektrométer (http://www.gsi.de/onTEAM/grafik/1068560945/TR_ELOI.pdf) és egy – az ütközésből kilépő valamennyi részecske lendületvektorát meghatározni képes komplex berendezés – egy „reakciómikroszkóp” (<http://www.gsi.de/fair/experiments/sparc/coltrims.html>) kifejlesztésében kíván szerepet vállalni. Ehhez a munkához a gyakorlatban egy, vagy két PhD hallgató darmstadti kiküldésével tudunk hozzájárulni. A hallgató(k) előreláthatólag a Debreceni Egyetem / GSI / Universitat Giessen közös témavezetésével végeznék munkáját (munkájukat), amely jelentené:

- az első fázisban a spektrométerek tervezését (az abban való jelentős részvételt) az elérhető legjobb professzionális tervezőprogramok (OPERA, TOSCA) segítségével,
- és hasonló munkát a reakció-mikroszkóp tervezésében.
- Ezen túl, részt venne a jelenlegi gyorsítókön folyó kísérleti atomfizikai kísérletekben (pl egy és kételektronos nehézionok ionizációja, kételektronos rekombináció, radiatív elektronbefogás, a QED pontosságát, érvényességi tartományát ellenőrző mérések, stb.).

Részletes információt a témavezető (sulik@atomki.hu) tud adni.

Témavezető: **Dr. Vibók Ágnes, Dr. Halász Gábor**

PF1/431-08

Foton indukált nemadiabatikus kvantum molekula dinamika

A molekuladinamikai folyamatok kvantummechanikai leírására a fizika és kémia egyik leggyakrabban használt közelítési módszere az 1927-ben kidolgozott Born-Oppenheimer (BO), vagy adiabatikus közelítés, amely az elektronok és a jóval nehezebb atommagok mozgásának szétválasztásán alapul. Bár a BO közelítés gyakran elegendő pontosságú a molekuláris sajátságok és folyamatok kívánt szint megértéséhez, - ezen esetekben ugyanis

mindig teljesül, hogy az elektron energiák jól elkülönülnek egymástól -, a jelenségek egy lényeges csoportja azonban mégsem írható így le. Ez akkor fordul el, amikor két vagy több elektronállapot azonos energiával rendelkezik ("kónikus kereszteződések"), vagyis elfajult elektronállapotokkal van dolgunk. Ilyenkor átmenetek jönnek létre az egyes adiabatikus elektronállapotok között.

Nagyon sok olyan biológiai, kémiai, fizikai folyamat játszódik le a természetben (pld. a legtöbb fotokémiai reakció is), amikor egy molekuláris rendszerben degenerált állapotok lépnek fel, és ezáltal indokoltá válik a nem adiabatikus közelítésben történő leírás. Kónikus kereszteződések már megjelennek kis molekulák alacsonyán fekvő elektron állapotai között is, számuk azonban rohamosan növekszik az atomok ill. a vizsgálni kívánt elektronállapotok számának növekedésével. Sok atomos rendszer esetén gyakorlatilag végtelen sok kónikus kereszteződéssel kell számolnunk, amelyek csatornaként szolgálnak a gyors sugárzás mentes átmenetek számára a megfelelő elektronállapotok között. A nagyon gyors (femto szekundumos) dinamikai folyamatok mindig a kónikus kereszteződésekön keresztül játszódnak le.

Témavezető: **Dr. Sulik Béla**

PF1/434-08

Biológiai sugárkárosodás és iontechnológia folyamatok szempontjából fontos atomi és molekuláris ütközési folyamatok

Olyan ion-atom és ion-molekula ütközési folyamatokat vizsgálunk, amelyek meghatározó szerepűek a biológiai szövetek kis és nagy molekuláinak károsodásában, (ez elsősorban az ionsugaras rákgyógyászat fejlődése szempontjából fontos terület), valamint olyanokat, melyek az ion-szilárdtest ütközések megértése és a megfelelő alkalmazások szempontjából lehetnek fontosak. Elsősorban kis molekulák ionbombázás hatására történő szét-töredését mérjük és modellezzük, valamint azokat a sajátos ionizációs mechanizmusokat kutatjuk, melyek az ionok anyagban való lelassulása során gyors elektronokat keltenek. Ezeket a jelenségeket az ATOMKI Van de Graaff gyorsítója és elektron-ciklotron rezonanciás (ECR) ionforrása mellett tanulmányozzuk, részben nemzetközi együttműködésekben. A PhD hallgató elsődleges feladata a kísérleti munkában való részvétel, majd az önálló kísérleti munka lesz, de bekapcsolódhat a jelenségeket értelmező számolásokba is.

Részletes információt és irodalmat a témavezető (sulik@atomki.hu) tud adni.

Témavezető: **Dr. Sulik Béla**

PF1/435-08

Szigetelő nanokapillárisok kölcsönhatásai ionokkal: Ionnyalábok terelése, fókuszálása

A téma egy 2002-ben felfedezett új jelenség vizsgálata és alkalmazása. Jó szigetelő fóliákban kialakított, 50-200 nm átmérőjű csövecskék képesek néhány keV energiájú ionokat eredeti irányuktól jelentősen (5-25 fokkal) eltéríteni. A jelenséget a kapillárisok belső feltöltődése teszi lehetővé, amely **önszervező** módon megy végbe. Ezt a jelenséget tanulmányozzuk az ATOMKI elektron-ciklotron rezonanciás (ECR) ionforrása mellett, és nemzetközi együttműködésekben. Távolati célunk a jelenséget felhasználó, görbített fóliákkal történő ionfókuszáló elemek készítése keV energiájú ionnyalábokhoz. A PhD hallgató

elsődleges feladata a kísérleti munkában való részvétel, majd az önálló kísérleti munka lesz, de kíváncsú (és érdekes) a jelenséget értelmező modellszámolásokba is bekapcsolódnia.

Részletes információt és irodalmat a témavezető (sulik@atomki.hu) tud adni.

Témavezető: **Dr. Halász Gábor**

PF1/436-08

Elfajult állapotok molekuláris rendszerekben

A molekuladinamikai folyamatok kvantummechanikai leírására a fizika és kémia egyik leggyakrabban használt közelítési módszere az 1927-ben kidolgozott Born-Oppenheimer (BO), vagy adiabatikus közelítés, amely az elektronok és a jóval nehezebb atommagok mozgásának szétválasztásán alapul. Bár a BO közelítés gyakran elegendő pontosságú a molekuláris sajátságok és folyamatok kívánt szint megértéséhez, - ezen esetekben ugyanis mindig teljesül, hogy az elektron energiák jól elkülönülnek egymástól -, a jelenségek egy lényeges csoportja azonban mégsem írható így le. Ez akkor fordul el, amikor két vagy több elektronállapot azonos energiával rendelkezik ("kónikus kereszteződések"), vagyis elfajult elektronállapotokkal van dolgunk. Ilyenkor átmenetek jönnek létre az egyes adiabatikus elektronállapotok között.

Nagyon sok olyan biológiai, kémiai, fizikai folyamat játszódik le a természetben (pld. a legtöbb fotokémiai reakció is), amikor egy molekuláris rendszerben degenerált állapotok lépnek fel, és ezáltal indokoltá válik a nem adiabatikus közelítésben történő leírás. Kónikus kereszteződések már megjelennek kis molekulák alacsonyán fekvő elektron állapotai között is, számuk azonban rohamosan növekszik az atomok ill. a vizsgálni kívánt elektronállapotok számának növekedésével. Sok atomos rendszer esetén gyakorlatilag végtelen sok kónikus kereszteződéssel kell számolnunk, amelyek csatornaként szolgálnak a gyors sugárzás mentes átmenetek számára a megfelelő elektronállapotok között. A nagyon gyors (femto szekundumos) dinamikai folyamatok mindig a kónikus kereszteződésekön keresztül játszódnak le.

Témavezető: **Dr. Vibók Ágnes**

PF1/437-11

Lézerrel szabályozható nemadiabatikus folyamatok molekuláris rendszerekben

Molekuláris rendszerekben, amikor két vagy több elektronállapot azonos energiával rendelkezik elfajult vagy más néven degenerált elektronállapotokkal van dolgunk. Ilyenkor átmenetek jönnek létre az egyes adiabatikus elektronállapotok között, melyekért az ún. nemadiabatikus csatolások a felelősek. Nagyon sok olyan kémiai, fizikai folyamat játszódik le a természetben, pl. disszociáció, proton transzfer, több atomos molekulák izomerizációs folyamatai vagy gerjesztett állapotok sugárzásmentes lebomlásai stb., amikor egy molekuláris rendszerben degenerált állapotok (ún. „kónikus kereszteződések”) lépnek fel. Ezen kónikus kereszteződések az elektron energiaszintek között kulcsfontosságú szerepet játszanak a nemadiabatikus molekuláris folyamatokban. Ilyenkor a mag és az elektronmozgás csatolódik, amelynek következményeként az energiacserélődés az elektronok és magok között igen jelentőssé válhat.

Nemrégiben megmutatták, hogy kónikus kereszteződések kialakulhatnak akár álló, akár pedig haladó lézerhullámok hatására is egy molekuláris rendszerben. Míg a „természetes” kónikus kereszteződések nem szabályozhatóak, addig a fénnel indukált

megfelelőik, igen. Ezen utóbbiak helyzetét a lézer frekvenciája, míg a nemadiabatikus csatolásuk erősségét a lézer intenzitása határozza meg. Vagyis változtatva a lézer fény frekvenciáját és intenzitását, eltérő tulajdonságú kónikus kereszteződések alakíthatunk ki. Ilyen módon szabályozni tudjuk a molekuláris rendszerbe „mesterségesen bevitt” nemadiabatikus hatások erősségét. Ezzel egy új, „lézer-anyag” kölcsönhatáson alapuló kontroll elmélet alapjai teremthetők meg.

A doktori munka célja lézerrel indukált kónikus kereszteződések hatásának vizsgálata két ill. háromatomos molekulák különböző fizikai tulajdonságaira (fotodisszociáció, irányítottság, stb.).

A téma elméleti, de a kapott eredmények és koncepciók ellenőrzése céljából kísérleti kollaborációban tervezzük végezni.

Témavezető: **Dr. Nagy Ágnes**

PF1/439-13

Kvantum fázisátmenetek, klasszikus és kvantum káosz

A kvantum-fázisátmenetek nulla hőmérsékleten következnek be. A klasszikus fázisátalakulásoktól eltérően, a kvantum-fázisátmeneteket a kvantumfluktuációk indukálják. A kvantum-fázisátmeneteket gyakran modelleken (pl. Dicke, vibron) tanulmányozzák. Ezek Hamilton-operátorai $H = h + \lambda V$ alakúak, ahol h integrálható. A λ kontrollparaméter egy bizonyos értékénél hirtelen változások következnek be a rendszerben.

A Dicke-modell esetében megmutatták, hogy az átmeneti pontban a rendszer kvázi integrálhatóból kaotikussá válik, Mivel a kvantummechanika lineáris, ezért a klasszikus értelemben vett káosz nem létezik. A kvantum káosz a klasszikusan kaotikus rendszerek kvantummechanikai tanulmányozását jelenti. A kvantum-fázisátmenetek gyakran előjelei a kvantumkáosz megjelenésének. A kutatás a kvantum-fázisátmenetek, a klasszikus és kvantum káosz és ezek kapcsolatának vizsgálatára irányul.

Témavezető: **Dr. Vibók Ágnes**

PF1/441-14

Foton indukált elektron és magdinamika molekuláris rendszerekben attoszekundumos és néhány femtoszekundumos időskálán

A huszadik század végére a femtoszekundumos lézerimpulzusok kifejlesztésével lehetővé vált az ún. pumpa-próba kísérletek kidolgozása, amelyek segítségével sikerült megvalósítani molekuláris rendszerek atommagjainak szabályozását. Jelen századunkra pedig az attoszekundumos lézerimpulzusok megjelenésével már az atomok elektronjainak megfigyelése is megvalósulhatott. Kézzelfogható közelségbe került, hogy atomok, molekulák és szilárdtestek belsejében végbemenő elektromos folyamatok is befolyásolhatóak legyenek.

A Ph.D munka keretében a csatolt mag- és elektrondinamika egyidejű leírására szeretnénk hatékony elméleti eljárást kidolgozni néhány atomos molekulák esetére. Megfelelő elméleti módszer(ek)e)t kell kidolgoznunk, amely segítségével többek között időfelbontásos fotoelektron spektrumot, illetve fotoelektron szögeloszlást tudunk számítani. Az ily módon kapott mennyiségek összevethetőek a kísérletekből kapható eredményekkel. A tervezett feladataink részben új elméleti módszerek kifejlesztését (amelyek eddig nem álltak

rendelkezésre többatomos rendszerek leírására), részben pedig a kísérleteket támogató konkrét rendszerekre történő számítások elvégzését jelentik.

Témavezető: **Dr. Gulyás László**

PF1/442-15

Sokelektronos folyamatok egyszerű atomi és molekuláris ütközésekben

A közelmúltban kifejlesztett reakciómikroszkóp új fejezetet nyitott az atomi és molekuláris ütközések tanulmányozásában. Számos folyamat esetében kinematikailag teljes mérések állnak rendelkezésre, amelyek értelmezése igen komoly kihívások elé állítja az elméleti vizsgálatokat. Több elektron átmenetével járó jelenségek igen sok ütközésben figyelhetők meg. Ezek viszonylag egyszerű értelmezése az ún. független részecske közelítésben adható meg, ahol az egyrészecskés folyamat (gerjesztés, ionizáció, elektronbefogás) mind pontosabb ismerete igen fontos az elektronkorreláció lehetséges szerepének meghatározása szempontjából.

A jelen kutatási téma keretében többelektronos folyamatok vizsgálatát tervezzük egyszerű atomi (Z^{q+} - He, Li, Ne,...) és molekuláris (Z^{q+} - H₂, H₂O, CH₄,...) ütközésekben olyan nagy és közepes lövedék energiákon, ahol perturbációs eljárások alkalmazhatóak az elméleti leírások során. Az egyrészecskés folyamatokat torzított hullámú közelítésben tárgyaljuk. Lehetőség szerint az ún. sztatikus (szabad atom ill. molekula állapotokban) és a dinamikus (ütközés alatti) korreláció, valamint molekulák esetében a szétesés folyamatát is igyekszünk beépíteni a formalizmusba.

Témavezető: **Dr. Mezei Zsolt**

PF1/443-19

Elemi molekuláris folyamatok a hideg ionizált közegekben

A hideg ionizált közegek (HIK) - csillagközi molekuláris felhők, szupernóvák, bolygók, üstökösök légköre, hideglaboratoriumi és fúziós plazmák - rendkívül gazdag kémiai és fizikai folyamatok tárhelye, amelyekért főként a HIKben nagyszámban jelenlevő elektronok, kozmikus ionizáló részecskék/sugarak, valamint fotonok és gerjesztett állapotban levő semleges és töltött molekuláris céltárgyak felelősek. Ezen, gyakran nem egyensúlyi környezetek sikeres modellezése a kulcsfontosságú radiatív és/vagy elemi ütközési folyamatok alapos ismeretén (teljesen differenciális - „state-to-state” - hatáskeresztmetszeten és reakciósebességen) alapul. Különösen fontos ezen reaktív folyamatok elágazási arányainak ismerete, hiszen ezen hideg ionizált közegek kémiai összetételére adnak részletes leírást [1]. A lejátszódó elemi folyamatok általános elméleti leírása komoly kihívást jelent, lévén a jelenlevő többszörös kontinuumok - elektron/ion, semleges/semleges, kation/anion, semleges/ion stb. - a végtelen számosságú magasan (szuper) gerjesztettmolekula-állapot sorozatok (Rydberg-állapotok), valamint az elektronok és a magok mozgását leíró nem adiabatikus csatolások koherens kölcsönhatásának köszönhetően. A jelen kutatási projektben asztrofizikailag releváns, a csillagközi molekuláris felhőkben nemrég felfedezett - (HCl⁺, SH⁺ [2], N₂H⁺), valamint az úrrakéták és műholdak elektromos meghajtásához javasolt molakulaionok (I₂⁺ [3]) elemi folyamataival foglalkozik. Magába foglalja a semleges és töltött molekuláris rendszerek szerkezet és spektroszkópiái számításait (standard kvantumkémiai és R-mátrixon alapuló módszerek), valamint a reaktív ütközési folyamatok

nukleáris dinamikáját (a sokcsatornás kvantum defektuson alapuló elmélet /multichannel quantum defect theory: MQDT/ [4]), mely pontos molekuláris adatokon - a semleges molekula kötött és disszociatív állapotainak, valamint a molekulaion alap és gerjesztett állapotainak adiabatikus és/vagy diabaticus potenciális energiafelületei és a disszociatív molekuláris állapotok ionizációs kontinuummal való csatolási függvényei - alapszik.

[1] E. Roueff, EPJ Web of Conferences 84, 06004 (2015).

[2] D. O. Kashinski, et al, I. F. Schneider and J. Zs. Mezei, J. Chem. Phys. 146, 204109 (2017).

[3] P. Grondein et al, Phys. Plasmas 23, 033514 (2016). [4] Ch. Jungen, in Handbook of High Resolution Spectroscopy, Wiley, Chichester, New York (2010).

Témavezető: **Dr. Bene Erika**

PF1/444-19

Kvantumkorrelációk vizsgálata molekuláris rendszerekben

A kvantumfizika és információelmélet határterületén elhelyezkedő kvantuminformatika a kvantumrészcscékbe kódolt információ továbbításának és feldolgozásának lehetőségeit vizsgálja. Segítségével olyan informatikai alkalmazások válnak lehetővé, mint például a kvantumszámítógépek, kvantumszimulátorok, lehallgatásmentes kvantumkommunikáció, illetve megnövelt csatornkapacitás érhető el. Ezen alkalmazások nagy részben annak köszönhetők, hogy a térben elkülönült kvantumrészcscék egymással a klasszikusnál erősebben lehetnek korreláltak, ún. összefonódott állapotot alkotva. Ismeretes, hogy a kétdimenziós állapotterek, ún. qubitek összefonódásán túl, a kettőnél magasabb dimenziós összefonódottság vizsgálata új távlatokat nyithat meg a különböző informatikai alkalmazásokban, különösen a kvantumtitkosítás terén.

Jelen téma keretében a többdimenziós összefonódottság mennyiségi jellemzését tűzzük ki célul. A PhD hallgató a kétfermionos rendszerekből származó kvantumkorrelációk dimenzionalitásának vizsgálatába kapcsolódik be a következő feladatok elvégzésén keresztül:

- (i) A megkülönböztethetetlen részecskés rendszerek Slater-számának – vagyis az adott kétfermionos rendszer előállításához szükséges minimális számú Slater-determinánsok számának – a becslésére semidefinit programozáson alapuló numerikus módszer kifejlesztése és tesztelése;
- (ii) Az új numerikus módszer segítségével a Slater-számot jelezni képes ún. Slater-tanúk előállítása;
- (iii) A fenti összefüggések speciális 2-elektronos molekuláris rendszerekre történő alkalmazása.

Kvantuminformatikai alkalmazások hitelesítése

Az elmúlt években a kvantumrendszerek szabályozott előállításában történő technológiai fejlődés lehetővé tette, hogy a kvantuminformatika eredményeit egyre szélesebb alkalmazási területeken hasznosítsák, mint például az adatvédelem biztonságában, molekuláris folyamatok szimulációjában, vagy a példátlan számítási teljesítményt nyújtó kvantumalgoritmusokban. Ugyanakkor rendkívüli kihívást jelent az, hogy az új kvantumeszközök és protokollok a specifikációnak megfelelően működjenek. Ezzel kapcsolatban a következő gyakorlati kérdés merül fel: A kvantumeszközt felhasználó személy hogyan tud megbizonyosodni arról, hogy az eszköze egy kitűzött számítási problémát helyesen old meg? Ezen hitelesítési feladat egy nagyon fontos szempont az EU kiemelt kvantumtechnológiai programjában is.

A téma keretében a Ph.D. hallgató a jövőbeli kvantuminformatikai alkalmazások megvalósítása szempontjából kulcsfontosságú hitelesítési feladat megoldásához járul hozzá azáltal, hogy hatékony módszereket dolgoz ki (i) soktest-kvantumrendszerek, (ii) sokdimenziósan összefonott rendszerek, illetve (iii) kvantumhálózatok hitelesítésére. Az (i) esetben olyan protokollok megalkotása a cél, amely nemlokális korrelációkat képes sokrészecskés rendszerekben detektálni és emellett alkalmas kvantumszimulátorok tesztelésére; a (ii) esetben a cél sokdimenziósan összefonódott kvantumrendszerek igazolása a kvantumeszközök különböző fokú megbízhatósága esetén; míg a (iii) esetben hálózatba kötött kvantumrészecskék között létrejövő valódi kvantumjelenségek felderítése a cél. A fenti feladatok megvalósításával kapcsolatosan kísérleti csoportokkal történő együttműködés is várható.

Fúziós plazmában lejátszódó atomfizikai folyamatok modellezése

A jelenleg ismert energiatermelő módszerek hosszú távon nem lesznek képesek maradéktalanul ellátni az emberiség igényeit. Az energiátárolás hatékonyságának gyors növekedése híján egyre sürgetőbb egy általunk szabályozható, de környezetkímélő megoldás kifejlesztése. Az egyik legjobb megoldásnak ígérkezik a fúziós erőművek megvalósítás.

A doktori tanulmány fő célja a fúziós plazma és az anyag kölcsönhatásának vizsgálata, amely magában foglalja az ionok és a fal közötti kölcsönhatás vizsgálatát és a plazma és az ionok kölcsönhatását.

A fúziós kamra falát képező Be, C, Fe és W atomok esetében (valamint a H, Ne és Ar és a fúziós plazmában lévő egyéb atomok esetében) minden egyes atomhéjra vonatkozóan részletes számításokat tervezünk, hogy meghatározzuk az ionizációs és töltésátrendeződési hatáskeresztmetszeteket H, D, T, H^+ , D^+ , T^+ lövedékek esetében. A számításokhoz a klasszikus pályájú Monte Carlo különböző változatait fogjuk használni. A H, D, T, Be, C, Fe és W céltárgyak, és He, He^+ és He^{2+} lövedékekre meghatározzuk az energia- és szög szerinti differenciális hatáskeresztmetszeteket.

Követelmények: Klasszikus és kvantumfizikai ismeretek

A programozási nyelv ismerete (Fortran, C, C++, ..., stb.)

Az angol nyelvű kéziratok készítése.

Ultrahideg molekuláris gázok

A javasolt kutatási téma az ultrahideg ($< 1 \mu\text{K}$) kvantumgázok gyorsan növekvő területéhez kapcsolódik. Ezek a rendszerek várhatóan jelentős szereppel bírnak majd a jövő kvantumtechnológiájában, ami a Horizont 2020 programjának egyik kiemelt kutatási területe. A kutatások ezen iránya jól szemlélteti a modern atom- és molekulafizika valamint optika kapcsolódását a kondenzált anyagok fizikájához, ami esetünkben az ultrahideg degenerált atomi és molekuláris kvantumgázok területe. Ezen területhez kapcsolódó fejlesztések, elért eredmények értékelésének látványos példája az utóbbi időszakban odaítélt Nobel–díjak: 1997-ben az atomok lézeres hűtésének értékelése, amely a Bose-Einstein-kondenzátumok megfigyeléséhez vezetett (2001), 2003-ban a szupravezetés és szuperfolyékonyság elméletéért járó díj, 2005-ben az optikai fésű módszerének díjazása, majd 2007-ben a koherens kontroll értékelése. A molekulák az atomokhoz képest gazdagabb belső szerkezettel rendelkeznek, ezért az ultrahideg molekuláris gázok létrehozása nagy érdeklődésre tart számot, a többretű külső manipulálási lehetőség miatt. Jelentőségük a kvantuminformációhoz kapcsolódó eszközök fejlesztésében, a kvantum-összefonódás tesztelésében, kvantumszimulátorként való alkalmazásukban, nagy-felbontású molekulaspektroszkópiában, alapvető fizikai elméletekre irányuló precíziós mérésekben van. Az ultrahideg, alapállapotú atomi gázokkal ellentétben molekuláris gázok esetén kísérletileg még nem sikerült megfelelő részecskeszámot elérni, amely lehetővé tenné a kvantumdegeneráltság megfigyelését. Kutatásunk szorosan kapcsolódik olyan kétatomos molekuláris kvantumgázok kísérleti megvalósításához, amelyeket két alkálifém atom (pl. KCs) vagy egy alkálifém atom és egy alkáli földfém atom (pl. RbSr) segítségével hoznak létre. A jelen kutatási témában javasolt molekulaszerkezeti számítások [1, 2, 4] az ultrahideg molekulák előállításának egyik kulcsfontosságú eleme, az ultrahideg ütközésekre vonatkozó vizsgálataink félklasszikus [3] illetve kvantummechanikai módszerek segítségével pedig a rugalmatlan ütközések visszaszorítására irányulnak a nagyobb részecskesűrűség megvalósításának érdekében.

[1] A. Orbán, R. Vexiau, O. Kriegelsteiner, H.C. Naegerl, O. Dulieu, A. Crubellier, N. Bouloufa-Maafa, Model for the hyperfine structure of electronically excited KCs molecules, *Phys. Rev. A* 92, 032510 (2015)

[2] R. Vexiau, D. Borsalino, A. Orbán, M. Lepers, M. Aymar, O. Dulieu and N. Bouloufa-Maafa, Dynamic dipole polarizabilities of heteronuclear alkali dimers: optical response, trapping and control of ultracold molecules, *Int. Rev. in Phys. Chem.* 36, 709, (2017)

[3] A. Orbán, O. Dulieu, N. Bouloufa-Maafa, Optical fields to control ultracold atomic/molecular collisions, *Journal of Physics Conference Series* 875, 9 (2017)

[4] A. Orbán, T. Xie, R. Vexiau, O. Dulieu, N. Bouloufa-Maafa, Hyperfine structure of electronically-excited states of the $^{39}\text{K}^{133}\text{Cs}$ molecule, *Journal of physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* 52, 135101 (2019)

Asztrofizikai szempontból fontos molekulák szétesésének kísérleti vizsgálata

Az üstökösök, holdak és bolygók atmoszférájának molekulái állandóan ki vannak téve a napszél és a kozmikus sugárzás károsító hatásainak. Az Atomkiben többek között ezeket a folyamatokat is vizsgáljuk laboratóriumi körülmények között. A napszélben és

különböző sugárzási övezetekben előforduló ionok és a molekulák ütközéseiben keletkező molekulatöredékek energia- és szögeloszlását mérjük elektrosztatikus spektrométerekkel és repülési-idő mérő berendezésekkel. A hallgató feladata a kísérletekben való részvétel és a kísérleti berendezések továbbfejlesztése, illetve az adatok értelmezése és felhasználása alkalmazásokban.

Témavezető: **Dr. Juhász Zoltán**

PF1/449-19

Asztrofizikai jegek spektrális vizsgálata

Az Atomki eszközparkja (ECR, Tandetron iongyorsítók és infravörös spektrométerei) és a magyar-brit együttműködésben idetelepült vékony jégrétegeket előállító és vizsgáló 2 berendezés (Ice Chamber for Astrophysics/Astrochemistry, Atomki-Queen's University Ice Laboratory for Astrochemistry) lehetővé teszi, hogy a bolygóközi térben előforduló jegek fizikai és kémiai változásait tanulmányozzuk ion- és elektronbesugárzás hatására. Ezekben általában bonyolult szerves molekulák is keletkeznek, amelyet a közeljövőben különböző űrmissziókkal is vizsgálni fognak. Az űrszondák adatainak értelmezéséhez a Földön végzett kísérletek is szükségesek. A gyorsítók lefedik a napszél és kozmikus sugárzás csaknem a teljes ionenergia-tartományát, amelyek hatásai így tanulmányozhatók. A jegeken kívül más szilárd anyagok is vizsgálhatók. A hallgató feladata kísérletek végzése egy általa választott asztrofizikai problémakör felderítésére az adatok értelmezése és publikációja.

Témavezető: **Dr. Csehi András**

PF1/450-20

Molekuláris folyamatok kvantum kontrollja klasszikus és kvantumos fénnel

A gyors elektronok és lassú magok mozgásának szétválasztásán alapuló Born-Oppenheimer (BO) képen az atommagok az elektronfelhő effektív potenciálterében mozognak. Ezen ún. potenciális energia felületek a molekulák belső sajátságai, melyek alapvetően meghatározzák az atommagok mozgását. Periodikus külső elektromágneses tér jelenlétében a dinamikus Stark-effektus révén a potenciális energia felületek módosulnak, ezáltal lehetőség nyílik a molekulák belső mozgásának szabályozására, különböző reakcióutak aktiválására, tiltására. Femtoszekundumos lézerpulzusok idő- és frekvenciatérbeli alakításával (pl. fázismoduláció, csörpölés) a maghullámcsomag időfejlődését irányíthatjuk a potenciális energia felületek deformálásán keresztül. A foton módus kvantumos leírásával pedig a fény-anyag kölcsönhatás közvetlenül a fázistérben válik kontrollálhatóvá, új perspektívát nyitva ezzel a kvantum kontroll területén.

A PhD munka keretében kis molekulák nagy pontosságú kvantum molekuladinamikai szimulációját tervezzük klasszikus és kvantumos fény jelenlétében. Az elsődleges cél egy hatékony elméleti eljárás kidolgozása, melynek segítségével meghatározhatjuk a kívánt reakcióutat eredményező optimális téralakot. Különös figyelmet fordítunk az elfajult elektronállapotok környezetében lezajló ultragyors folyamatokra is, ahol az elektronok és magok mozgása erősen csatolódik és ezáltal a BO közelítés érvényét veszíti. Kvantumos fény

alkalmazásával (Fock, koherens, összenyomott és összenyomott koherens) új kontroll sémák kidolgozását tervezzük rávilágítva ezzel a klasszikus leírás korlátaira.

Témavezető: **Dr. Tőkési Károly**

PF1/451-20

Ultragyors folyamatok vizsgálata intenzív lézer-anyag ütközésekben

Atomok, molekulák és szilárdtestek részecskenyalábbal történő besugárzása az egyik leghatékonyabb módszere az anyag szerkezetének tanulmányozására. Attoszekundomos, ultrarövid lézerimpulzusokkal történő besugárzás, melyeket magasrendű felharmonikusok előállításával (High Harmonic Generation, HHG) segítségével hoznak létre új perspektívát nyit a rendszerek szerkezetének megismerésében. A vizsgálatok újszerűsége abban rejlik, hogy az elektronok mozgása azok természetes, attomásodperces időskáláján figyelhetők meg. Az attomásodperces fizika egy új tudományterület, amely hihetetlenül rövid időintervallumokkal dolgozik.

A PhD munka klasszikus vagy kvantummechanikai alapokon nyugvó program fejlesztése lesz, mellyel atomok és/vagy molekulák gerjesztése és ionizációja vizsgálható (holografikus minták, Fotoelektronok sávozódásának az értelmezése és leírása).

Követelmények: Klasszikus és kvantumfizikai alapismeretek.

A programozási nyelv ismerete (Fortran, C, C ++ stb.).

Az angol nyelvű kéziratok készítése.

Témavezető: **Dr. Mezei Zsolt**

PF1/452-21

Molekuláris gyökök és kationjaik elektron-indukált reaktivitása nem-egyensúlyi plazmákban

A nem egyensúlyi plazmák (NEP) olyan gyengén ionizált gázok, amelyek elektronokat, semleges és töltött molekulákat, nagy atom/molekulaklasztereket és szilárd nanorészecskéket tartalmaznak. Szerepük a technológiai iparágakban jelentős, alapeszköznek számítanak az alkalmazott tudományok területén, a komplex anyagoktól és nanoszerkezetektől kezdve, a bonyolultabb (opto)elektronikai eszközökig, ideértve gyógyszeripari alkalmazásokat is. Kulcsfontosságú szerepük van az energiatárolásban, a szénhidrogén alapú üzemanyagok kezelésében és konverziójában. Ezen túl a komplex szerves molekulák keletkezéséhez vezető szénhidrogén-kémia nagy fontosságú az asztrofizika [1,2] és a bolygó légkörök [3] számára. Mindezek ellenére, a NEP a ma napig nem teljesen ismertek, mivel nagyon változatos természetű jelenségek színterét képezik, az atomi/molekuláris méretektől a teljes plazma méretéig terjedő skálán. Ezek mellett mikro és a makro folyamatok is lejátszódnak, vagyis az elektronok és atomok/molekulák közötti gázfázisú ütközések (electron-heavy): rekombináció, disszociáció, gerjesztés és ionizáció, a keletkezett szekundergyök ion ütközések (heavy-heavy), plazma-felület kölcsönhatási folyamatok, molekulaklaszterek/nanorészecskék növekedése és dinamikája, transzport jelenségek, kollektív és kormosplazma effektusok stb. Az ilyen komplex környezetek kinetikus modellezése többléptékű (multiscale) fizikai és numerikus modelleket [4], valamint a plazmákban zajló elemi folyamatok kísérleti tanulmányozását igényli [5].

A jelen kutatási téma a NEP-ban lejátszódó elemi elektron/molekula ütközési folyamatok tanulmányozását tűzi ki céljául. Szénhidrogén alapú NEP-re, és azon belül az acetilén (C_2H_2) és a metán (CH_4) molekulákra összpontosítunk. A plazma gázmolekulái elektronokkal történő reaktív elemi folyamatainak eredményeként szekunder gyököket eredményeznek. Ezek a gyökök jelentősen megváltoztathatják a NEP tulajdonságait, és drasztikusan megnövelik például a gyémánt lerakódási sebességet.

A fő kérdés tehát, amire keressük a választ az az, hogy a szénhidrogén plazma alap gáz elektronokkal való kölcsönhatása során keletkező másodlagos gyökök hogyan járulnak hozzá a plazma tulajdonságainak megváltozásához az elektronokkal történő ionizációs / gerjesztési / rekombinációs / disszociációs folyamatokon keresztül. A reakció dinamikák és a releváns reakció útvonalak feltérképezését és azonosítását, valamint az adott folyamatok hatáskeresztmetszetét és reakciósebességét kvantumkémiai számításokra támaszkodó sokcsatornás kvantum defektuson alapuló módszerrel (multichannel quantum defect theory) [2], valamint az R-mátrix elmélettel [6] fogjuk meghatározni.

Irodalomjegyzék:

- [1] Tielens A.G.G.M, Rev. Mod. Phys. 85, 1021 (2013);
- [2] Mezei J.Zs. et al., ACS Earth Space Chem. 3, 2367 (2019);
- [3] Sciamma-O'Brien E. et al., Icarus 209, 704 (2010);
- [4] Mikikian M., et al., Plasma Phys. Control. Fusion 59, 014034 (2017);
- [5] Hassouni K., et al., J. Phys. D: Appl. Phys. 43, 153001 (2010);
- [6] Tennyson J., Phys. Rep. 491, 29 (2010)

Témavezető: **Dr. Márton István**

PF1/453-23

Félig-eszközfüggetlen EPR-steering sok mérésre és több részecskére

A véletlenszerűség a kriptográfiai alkalmazások, numerikus eljárások és szimulációk kulcsfontosságú erőforrása. A véletlenszám előállításának hagyományos módjai egy adott eszköz belső működésének, vagy a konkrét protokoll tökéletes ismeretén alapulnak, amely a gyakorlati alkalmazásokban gyakran nem teljesül. A legújabb kvantumtechnológiák egyik speciális alkalmazásaként azonban egyre inkább elérhetővé válnak a Bell-egyenlőtlenségek sérülésén alapuló, eszközfüggetlen módon hitelesített véletlenszám-generáló módszerek. Ebben a projektben a célunk a félig-eszközfüggetlen kvantum véletlenszám-generátor elrendezésben rejlő lehetőségek megértése és feltárása, amelynek fő gondolata az, hogy az eszközfüggetlen szemlélet egy részét megtartjuk, és csak enyhe feltételezésekkel élünk a konfigurációval kapcsolatban, az eszközök részletes modellezése nélkül. Az a reményünk, hogy a félig-eszközfüggetlen konfiguráció hardverkövetelménye nem lesz olyan magas, mint az eszközfüggetlen eseté. A projekt során a jelölt részt vesz az implementálásához szükséges elméleti és numerikus háttér biztosításában, amely a standard kétrészecskés elrendezésen kívül a több részecskés EPR-protokollok elemzését is magában foglalja. Az egyik fő cél annak a kérdésnek a megválaszolása, hogy a ciklikus EPR-steering jelenséget mutató korrelációk segítenek-e a félig-eszközfüggetlen kvantum véletlenszám-generátorok könnyebb technológiai megvalósításában.

Űrkémiai jelentőségű molekuláris kölcsönhatások vizsgálata robusztus kvantumkémiai és szóráselméleti módszerekkel

A csillagközi tér molekulafelhőiben uralkodó fizikai-kémiai viszonyok minél pontosabb ismerete elengedhetetlen az anyag űrbeli körforgásának leírásához, azon belül is a csillagok és bolygók kialakulásának, és különösen az összetett szerves molekulák eredetének a megértéséhez. Az extrém űrbeli környezetekben a sugárzási és ütközési folyamatok egymással versengenek a molekulaszintek betöltéséért. Az ilyen folyamatok részletes megértése ezért kulcsfontosságú a csillagászati megfigyelések értelmezéséhez, de ezen kívül erős interdiszciplináris jelentőséggel bír a fizika és a kémia különböző területein is.

A projekt célja összetett csillagközi molekulák és a világűrben gyakori ütközési partnerek (H_2 , He, H) közötti kölcsönhatási dinamika vizsgálata. Ehhez első lépésben többdimenziós potenciális energiafelületeket fogunk fejleszteni nagy pontosságú kvantumkémiai módszereket alkalmazva. A potenciálok megfelelő analitikai illesztése után ütközés-dinamikai számításokat fogunk végezni egzakt kvantummechanikai és félklasszikus szóráselméleti módszerekkel, melyek nagyrészt új módszertani fejlesztéseket igényelnek. A munka utolsó fázisában forgási és rezgési állapotok szerint szelektív hatáskeresztmetszeteket és hőmérsékleti sebességi együtthatókat fogunk meghatározni űrkémiai szempontból kulcsfontosságú molekulák ütközéseire. Ezeket beépítjük sugárzásátviteli modellekbe is, amelyek lehetővé teszik a modern csillagászati távcsövek, úgymint a JWST, ALMA, GBT, Yebes, IRAM stb. által végzett megfigyelések részletes szimulációját.

A projekt a molekulafizika, fizikai kémia, valamint az asztrofizika és űrkémia iránt érdeklődők számára ajánlott. A jelöltnek rendelkeznie kell alapvető kvantummechanikai és molekulaszpektroszkópiai ismeretekkel, valamint affinitással nagy léptékű numerikus számítások elvégzéséhez, kémiai folyamatok szimulációjához, valamint módszertani és kódfejlesztéshez. A jelöltnek lehetősége lesz Magyarország legnagyobb teljesítményű szuperszámítógépét, a Komondort is használni.

Ion-atom ütközések optikai árnyékolása

A javasolt kutatási téma az ultrahideg ($< 1 \mu K$) kvantumgázok gyorsan növekvő területéhez kapcsolódik. Az atomok lézeres hűtéséhez és csapdázásához köthető fejlesztések és eredmények (Nobel-díj: 1997, 2001) a kvantumgázokhoz kapcsolódó számos új jelenség kísérleti megfigyelését tették lehetővé az elmúlt évtizedekben. Ezzel párhuzamosan jelentős elméleti fejlesztések is megvalósultak ezen újszerű kvantumanyagok modellezésére. Időközben a lézeres hűtés alkalmazása atomi ionok esetén is elérhetővé tette a jóval 1 Kelvin alatti hőmérsékletek elérését (Nobel-díj: 2012). Ezt követően több kísérleti csoportban is felmerült az alacsony hőmérsékletű atomok és ionok kölcsönhatásának vizsgálata, amelynek eredményeként létrejöttek az úgynevezett hibrid csapdák. Az ilyen típusú rendszerek egyedi lehetőséget nyújtanak a soktest kvantumfizikai rendszerek tanulmányozására, kondenzált anyagok kvantumszimulációjára vagy kvantuminformációs protokollok megvalósítására. Ezen alkalmazási területek mellett az ultrahideg kémiában a hibrid csapdás vizsgálatok lehetőséget biztosítanak napjaink azon kihívásának megvalósítására is, amely a reaktív folyamatok magas szintű szabályozását jelenti, vagyis adott reakcióutak és reakciótermékek kiválasztását. A

hibrid-csapdás kísérletek egy részében [1, 2] egyetlen alapállapotban levő iont ágyaznak be egy ultrahideg, alapállapotú atomi gázba, ahol az ion szennyeződésnek tekinthető. Az atomok közötti gyenge, R^{-6} szerinti hosszú hatótávolságú kölcsönhatáshoz képest, ahol R a részecskék közötti távolság, az ion és atom közötti erős, R^{-4} -es kölcsönhatásnak köszönhetően, a háromtest-események valószínűsége megnő ezekben a degenerált gázokban [2]: molekulaion keletkezhet, ami az alkalmazások szempontjából nem kívánatos veszteség. A javasolt elméleti PhD téma keretében az ionvesztések megelőzése érdekében az úgynevezett optikai árnyékolás (OS) [3, 4] lehetőségét fogjuk megvizsgálni, amellyel a rövid hatótávolságú ion-atom ütközések létrejötte akadályozható meg. Az alapelv az, hogy az ütközés vonzó jellegű bemeneti csatornáját lézer segítségével egy taszító hosszú hatótávolságú csatornához csatoljuk, amelynek eredményeként az ütköző részecskék visszaverődnek, elkerülve a rövid hatótávolságú reakciózónát. Vizsgálatainkat a Li-Ba⁺ rendszer [1], [5] esetén végezzük el. Ezen ütközési rendszer különlegessége, hogy a nemradiatív töltéscserélődés, ami ion-atom ütközéseknél általában az egyik legvalószínűbb folyamat, itt nem lehetséges, ugyanis a két ütköző alapállapotban levő részecske bejövő csatornája egyben a rendszer tényleges alapállapota. A többi alkálifém atom – alkáliföldfém ion rendszernél ez a feltétel nem teljesül. Első lépésként a két különböző atom ütközésének árnyékolására kidolgozott OS módszerünket [4] terjesztjük ki ion-atom ütközésekre. Előzetes szerkezetszámításaink alapján a Ba⁺(6s) + Li(2p) aszimptotikus limithez taszító jellegű potenciális energiagörbék is tartoznak, ami lehetőséget ad az OS séma vizsgálatára. Így az árnyékoló lézert a Li atom 2s → 2p átmenetéhez képest hangoljuk el. Azonban az ilyen egyfotonos OS egyik fő korlátja az árnyékoló lézer nem rezonáns fotonjainak szóródása, ami a kvantumgáz melegeedéséhez vezethet. Ennek kiküszöbölésére a következő lépésben az árnyékolási sémánkat kiterjesztjük a kétfotonos optikai árnyékolásra, amelyet molekula-molekula ütközési rendszerekre javasoltak [6]. Az egy/kétfotonos OS megvalósítása szükségessé teszi az árnyékolási sémában szereplő állapotok komplexitásának (finom- és hiperfinomszerkezet) figyelembevételét, így a doktorjelölt magas szintű molekulaszámításokba kapcsolódik be, az alacsony energiájú ütközést leíró csatolt csatornás számolások mellett.

- [1] P. Weckesser, F. Thielemann, D. Wiater, A. Wojciechowska, L. Karpa, K. Jachymski, M. Tomza, T. Walker, and T. Schaetz. Observation of Feshbach resonances between a single ion and ultracold atoms. *Nature*, 600, 429, 2021.
- [2] A. Mohammadi, A. Krüchow, A. Mahdian, M. Deis, J. Pérez-Ríos, H. da Silva, M. Raoult, O. Dulieu, and J. H. Denschlag. Life and death of a cold BaRb⁺ molecule inside an ultracold cloud of Rb atoms. *Phys. Rev. Res.*, 3, 013196, 2021.
- [3] T. Xie, M. Lepers, R. Vexiau, A. Orbán, O. Dulieu, and N. Bouloufa-Maafa. Optical shielding of destructive chemical reactions between ultracold ground-state NaRb molecules. *Phys. Rev. Lett.*, 125, 153202, 2020.
- [4] T. Xie, A. Orbán, X. Xing, E. Luc-Koenig, R. Vexiau, O. Dulieu, and N. Bouloufa-Maafa. Engineering long-range interactions between ultracold atoms with light, *J. Phys. B*, 55, 034001, 2022.
- [5] X. Xing, P. Weckesser, F. Thielemann, T. Jónás, R. Vexiau, N. Bouloufa-Maafa, E. Luc-Koenig, K.W. Madison, A. Orbán, T. Xie, T. Schaetz, and O. Dulieu. Competing excitation quenching and charge exchange in ultracold Li-Ba⁺ collisions. *J. Phys. B*, 57, 245201, 2024.
- [6] C. Karam, R. Vexiau, N. Bouloufa-Maafa, O. Dulieu, M. Lepers, M. Meyer zum Alten Borgloh, S. Ospelkaus, and L. Karpa. Two-photon optical shielding of collisions between ultracold polar molecules. *Phys. Rev. Res.*, 5, 033074, 2023.

II. Magfizikai program

Témavezető: **Dr. Cseh József**

PF2/43-93

Szimmetriák az atommagokban

A sokrészeske-rendszeres leírására a fizika több ágában is igen hatékony eszköznek bizonyult a csoportelmélet használata. A magfizikában is számos algebrai modell született; különösen az elmúlt 15 év volt termékeny ebből a szempontból. A szimmetriák vizsgálata révén nemcsak a kísérleti adatok nagy tömegét lehet egyszerűen rendszerezni és értelmezni, hanem a különböző elméleti megközelítések egymáshoz való viszonya is áttekinthetőbbé válik.

A nukleonokat egyenként tekintetbe vevő héjmodell és az összes nukleon együttes mozgását tárgyaló kollektív modell fejlődése szempontjából egyaránt döntő fontosságúnak bizonyult a csoportelméleti megfogalmazás. A harmadik alapvető magmodellnek, melyben a magot nukleoncsoportok együttesének tekintjük, algebrai formalizmusa (ami kiterjed mind a modelltér, mind a kölcsönhatások kezelésére) napjainkban körvonalazódik. E leírás fejlesztése és alkalmazása számos olyan kérdést vet fel, amelyek doktori munka keretében megválaszolhatók. A magspektroszkópiai és reakcióvizsgálatok néhány klasszikus területén túl e kutatások olyan új jelenségekkel állnak kapcsolatban, mint az egzotikus radioaktivitás és a magok szuper (hiper, ...) deformációja.

A magfizikai vonatkozásokon kívül érdekes módszertani aspektusai is vannak az ilyen vizsgálatoknak, u.n. új algebrai struktúrák (Hopf algebrák) fizikai alkalmazhatóságának feltérképezése, a szimmetriafogalom általánosítása stb.

Témavezető: **Kunné Dr. Sohler Dorottya, Dr. Kuti István**

PF2/413-93

Középnéhez atommagok szerkezetének vizsgálata

Az atommagok szerkezeti vizsgálatának legfontosabb bemeneti információja a gerjesztett állapotok jellemzői: energiájuk, spin-paritás értékeik, bomlási módjaik, élettidejük, deformáltságuk. Ezeket az adatokat stabil vagy radioaktív ionnyalábokkal végzett magreakciókból nyerjük. Az atommagok gerjesztett állapotainak vizsgálatához a gamma-spektroszkópia az egyik legcélravezetőbb módszer. A tervezett kutatási téma egyik fő részét a közepes tömegszámú atommagok szerkezeti vizsgálatához kapcsolódó magadatok gyűjtése és feldolgozása képezi. Mivel a mérésekben az érdekes jelenségek igen kis valószínűséggel állnak elő, a kísérleti vizsgálatukhoz elengedhetetlen a technika fejlesztése, a hatékony reakciócsatorna-kiemelést végző részecske-detektorok használata. A téma másik fő részét magspektroszkópiai mérésekben alkalmazott detektorok felhasználása és fejlesztése adja.

Témavezetők: **Dr. Ditrói Ferenc**

PF2/418a-b-93

Töltött részecske magreakciók hatáskeresztmetszetének meghatározása

A magreakciók hatáskeresztmetszetének meghatározása fontos szerepet játszik a kölcsönhatások és a magreakciók mechanizmusának megértéséhez továbbá a különböző alkalmazási feladatok optimalizálásánál. A kidolgozandó téma ezen belül az alábbi két altémát érinti:

PF2/418a-93

Töltött részecske magreakciók hatáskeresztmetszetének meghatározása alapkutatói célokra

Az eltérő spinű izomér állapotok hatáskeresztmetszet aránya információt ad a végmag nívósűrűségének spineloszlásáról és a magreakció mechanizmusáról. Különösen fontosak a több bombázó részecskével végzett széles magtartományon végzett szisztematikus vizsgálatok. A mérések az ATOMKI MGC-20 ciklotron nyalábján történnek, aktivációs technikával. Az adatok értelmezését különböző reakció modellek segítik.

A vizsgálatok széles nemzetközi együttműködésben folynak.

PF2/418b-93

Töltött részecske magreakciók hatáskeresztmetszetének mérése meghatározása alkalmazási célokra

A gyorsítók gyakorlati alkalmazásainak jelentős része magreakciókon alapszik. A reakció hatáskeresztmetszetek ismerete fontos szerepet játszik az izotóptermelésnél, kopásvizsgálatoknál, aktivációs analízisnél és más egyéb területeken. A mérések konkrét alkalmazásokhoz kapcsolódva új vagy ellentmondásos gerjesztési függvények meghatározását érintik. A mérési technika és az adatok értelmezése az előző pontban leírtakhoz hasonló.

Mindkét altéma egyaránt tartalmaz kísérleti részt és a bizonyos elméleti számításokat.

A vizsgálatok széles nemzetközi együttműködésben folynak külföldi gyorsítók és kutatócsoportok bevonásával.

Témavezető: **Dr. Gál János**

PF2/427-96

Magfizikai kutatások céljaira szolgáló töltött részecske detektorok vizsgálata

Napjainkban a nagyspinű magállapotok, pl. az ún. szuperdeformált atommagok, vagy az igen kis hatáskeresztmetszetű magfolyamatok γ -spektroszkópiai vizsgálata sokelemes detektorrendszerek (pl. EUROGAM, vagy a kifejlesztés alatt álló EUROBALL) segítségével történik. Ezen detektorrendszerek fő alkotóelemei nagy hatásfokú Ge-detektorok, de a reakciócsatornák azonosítására ezen gamma-detektorokkal együtt más típusú detektorokból álló rendszerek alkalmazása is szükséges lehet. Az ilyen segéd-detektorrendszerek feladata pl.

a reakcióban keletkező részecskék fajtájának, energiájának és szögeloszlásának a meghatározása.

A nehézionokkal kiváltott magreakciókban a számos nyitott reakciócsatorna közül a vizsgálni kívánt végmagra vezetőt a kilépő neutronok és/vagy töltött részecskék számának és típusának ismeretében választhatjuk ki. Az ilyen mérésekben, pl. az erősen neutronhiányos atommagok vizsgálatakor, csak azokat az eseményeket használjuk, melyekre a reakciókban keletkező részecskék és a végmag által kibocsátott gamma-sugárzás között koincidencia volt. A töltött részecskék detektálására különböző félvezető és szcintillációs detektorok vagy ezek kombinációja használható. Szcintillációs detektorként erre a célra elsősorban a CsI(Tl) kristály+PIN fotodióda kombináció jöhet szóba. Az intézetben több éve folyik CsI detektorok és ehhez kapcsolódóan a töltött részecske diszkriminációhoz szükséges elektronika fejlesztése, a EUROBALL programhoz kapcsolódva.

Jelen téma keretében a jelölt feladata két detektortípusnak a vizsgálata. Az egyik a CsI(Tl)+PIN fotodiódából álló szcintillációs detektor, a másik pedig ezen detektornak és egy félvezető Si detektornak a kombinációja. Elsődleges cél a két detektortípus paramétereinek az optimalizálása, relatív előnyeiknek a vizsgálata.

A detektorjelek feldolgozása során az a cél, hogy az általuk szolgáltatott információt maximálisan kinyerjük, a különböző típusú részecskék (elsősorban az α részecskék és a protonok) diszkriminációjának a küszöbszintjét minél alacsonyabb energián valósítsuk meg. Ehhez szükséges a részecske-diszkriminációs módszerek optimalizálása és összehasonlítása. Az EUROBALL detektorrendszer elektronikus egységei VXI rendszerben épültek, ezért célszerű az általunk fejlesztett töltött részecske detektor elektronikus egységeit is VXI rendszerben tervezni. A VXI rendszer megismerése és alkalmazása ugyancsak részét képezi a témának.

Témavezető: **Dr. Lévai Géza**

PF2/428-96

Kvantummechanikai potenciálproblémák és alkalmazásaik

A szubatomi világ jelenségeinek leírásában igen hasznosnak bizonyultak a különféle potenciálokra alapozott modellek. Az ilyen jellegű feladatokat legtöbbször numerikus módszerek segítségével oldják meg, de egyes modellproblémák esetében lehetséges az egzakt analitikus megoldás is. Ez utóbbi esetek vizsgálata több szempontból is nagy jelentőséggel bír:

1. Az egzaktul megoldható problémák nagyban segítik a numerikus módszerek fejlesztését, mivel alkalmasak azok tesztelésére, illetve kiegészítésére.
2. Az elmúlt évtized során számos új eredmény született, amelyek segítségével az eddigiekben alkalmazott legegyszerűbb modellpotenciálok általánosíthatók és így az eddigieknél általánosabb, a konkrét alkalmazásokhoz jobban illeszkedő potenciálalakokra is megadható egzakt megoldás.
3. A potenciálokra alapozott leírás bővíthető a csatolt szabadsági fokú rendszerek irányába (spinek, többszörös rendszerek, stb.) és e téren is levezethetők egzaktul kezelhető problémák.

Az említett módszerek lehetséges alkalmazási területei között megemlíthetők a következők: árnyékolt Coulomb potenciálokra vezető feladatok, atomok elektromágneses térben, optikai potenciálok, rezonanciaállapotok leírása, stb.

Kollektív és individuális mozgásformák kölcsönhatása forgó atommagokban

Az atommag forgása a kvantummechanikai forgás egy sajátos formájának vizsgálatát teszi lehetővé, ahol a forgásnak más mozgásformákkal való kölcsönhatása olyan jelenségeket produkál, amelyek más forgó kvantummechanikai rendszerekben nem lépnek fel. Ilyenek például a királis szimmetria forgás miatti sérülése, a forgási sávok lezáródása, vagy a dipólus forgási sávokban megfigyelhető anomális energia eltolódás, valamint szuper- és hiperdeformált magalakok kialakulása. Ezen jelenségek kutatása adja a tervezett kutatási téma egyik fő részét. A kvantummechanikai forgás feltétele hogy a forgó objektum alakja gömbszimmetrikustól eltérő (deformált) legyen. Deformált magalakok a héjlezáródásoktól távoli tartományokban alakulnak ki, melyek jól ismertek a stabilitási sáv közelében, viszont a stabilitási sávtól távol még nem. A forgásra képes atommagok ezen új tartományainak (melyekben új jelenségeket remélhetünk felfedezni) felkutatása jelenleg folyik többnyire radioaktív nyalábok használatával. Ilyen vizsgálatok adják a tervezett kutatási téma másik fő részét.

A nukleáris medicinában és a magfizikában alkalmazott detektorok jeleinek digitális feldolgozásához kapcsolódó fejlesztések

Mind a klinikai PET kamerák megvalósításánál, mind a most épülő magfizikai detektorrendszerek (AGATA) esetében a detektorokat illetően napjainkban folyó generációváltásban a szegmentált szcintillátor-blokk/Avalanche Photo Diode (APD) mátrixok és az ahhoz illesztett kiszajú töltésérzékeny előerősítők fejlesztése az egyik legnagyobb szakmai presztízt jelentő feladat. A világon neves, nukleáris elektronikában élenjáró laboratóriumok egész sora fordít erre figyelmet nem csekély anyagi áldozatot is vállalva az említett eszközök tökéletesítéséért. Ehhez a trendhez igazodva célul tűztük ki azt, hogy a DSP technikára építve kifejlesztünk egy olyan új generációs Front-End elektronikát, mely az detektorrendszerek jeleinek a feldolgozását végzi.

Egy könnyű semleges bozon keresése

Az utóbbi években nagyszámú publikáció foglalkozott azzal a meglehetősen lehetőséggel, hogy a kozmikus sötét anyag MeV tömegű új elemi részecskékből állhat, amiket magfizikai laborokban is vizsgálhatunk. A fenti részecskék kimutatására egy kompakt pozitron-elektron spektrométert tervezünk építeni, aminek nagy térszőge, jó energia és jó szögfelbontása lesz. A jelenleg rendelkezésünkre álló részecskefizikai detektorokkal, adatgyűjtő rendszerekkel és számítógépekkel a differenciális belső párkeltési valószínűségeket az irodalomban találhatóknál sokkal pontosabban tudjuk majd vizsgálni, így reális esélyt teremtünk a jelenség pontosabb vizsgálatára és az előre jelzett új részecske kimutatására.

Szimbolikus és numerikus számítási módszerek háromtest rendszerek kvantummechanikai modelljében

Kvantummechanikai háromtest rendszerek ab initio leírása nagyon sok szimbolikus és numerikus számítást igényel. A sztochasztikus variációs módszer alkalmazása során célszerű a Hamilton-operátor mátrixelemeinek adott bázison történő szimbolikus kiszámítása. Erre a célra használható például a Mathematica programozási nyelv. A funkcionális és szabály alapú programozási technika segítségével célunk egy olyan általános programrendszer kifejlesztése, amely hatékonyan használható a háromtest rendszerek ab initio leírásában valamint a klasztermodell keretében is. A kvantummechanikai szórás háromtest probléma elvi és numerikus megoldása (hosszú hatótávolságú potenciál esetén) még napjainkban is nehézségekbe ütközik. Célunk új közelítő módszer bevezetése és alkalmazása atom és magfizikai rendszerekre. A komplex skálázás révén az eredetileg önadjungált Hamilton-operátor nem önadjungáltá válik és ekkor a sorfejtésen alapuló módszerek valószínűleg konvergensek. A módszer részleteinek kidolgozása után további igen fontos feladat egy hatékony numerikus program elkészítése.

Magszerkezeti vizsgálatok gamma-spektroszkópiai módszerekkel

Az atommagok gerjesztett állapotból alapállapotba többek között gamma-sugárzás kibocsátásával kerülnek vissza. A gamma-sugárzások jellemzőit, energiájukat, relatív intenzitásukat, multipolaritásukat illetve koincidencia kapcsolataikat, magfizikai kísérletek során kapott adatokból határozzuk meg gamma-spektroszkópiai módszerekkel. Ezen információk felhasználásával tudunk következtetni a gerjesztett állapot tulajdonságaira, vagyis energiájára és kvantummechanikai jellemzőire (spinjére és paritására), majd a kapott eredmények alapján a vizsgált állapotok szerkezetére, konfigurációjára.

Jelen téma keretében a jelölt feladata egyrészt a stabilitási sáv közelében elhelyezkedő normál deformált atommagok igen kis hatáskeresztmetszettel előálló speciális mozgásformáihoz tartozó állapotok legerjesztődése során kibocsátott gamma-sugárzások vizsgálata. A tervezett kutatási téma másik része annak felderítése, hogy a részecske-elhullatási vonal közelében található, extrém proton/neutron aránnyal rendelkező atommagok gerjesztett állapotai hogyan állnak elő, milyen szerkezetűek. Ezt a legújabb generációs radioaktív nyalábok mellett végzett kísérletekben gyűjtött adatok feldolgozásával végezzük el. Mindkét feladat a mai magszerkezet kutatás legjobban tanulmányozott irányvonalai közé tartozik.

Magfizikai, orvosi célú helyzetérzékeny detektorrendszerek és ezek digitális jelfeldolgozó elektronikájának fejlesztése

A nemzetközi együttműködésben végzett fejlesztések a DIAMANT töltöttreszcseke detektorrendszer detektorainak és jelfeldolgozó elektronikájának korszerűsítését, valamint az új PARIS gamma-detektorrendszer kifejlesztését jelentik. Mindkét projektum kapcsolódik a GANIL-ban megvalósítás alatt álló SPIRAL-2 nagyáramú gyorsító komplexum mellett tervezett magfizikai kutatásokhoz, melyekben az EXOGAM2 és a PARIS gamma-detektorrendszerek üzembehelyezését tervezzük.

A magfizikai alkalmazások mellett, különböző helyzetérzékeny redszerekkel is foglalkozunk, elsősorban új generációs orvosi és ipari képalkotó berendezések kifejlesztéséhez. Ezek a fejlesztések a félvezető-alapú fotodetektorok (Si fotoelektron-sokszorozók – SiPM, és lavina-fotodiódák – APD) alkalmazásának új lehetőségeit használják ki.

A doktorandusz feladata a detektorok prototípusainak és elektronikájuknak megépítése, bemérése. Továbbá a detektorrendszerek digitális jelfeldolgozáson alapuló elektronikájának a kifejlesztése és a programozható logikai áramkörökben (FPGA) implementált algoritmusok kidolgozása.

Egzotikus atommagok kísérleti vizsgálata

Az atommagfizika élvonalába tartozik manapság a radioaktív ionnyalábokkal végzett kísérleti munka, melynek célja az atommagok szerkezetének tanulmányozása extrém körülmények között, amikor az atommagban a neutronok és protonok aránya jelentősen eltér a stabilitási völgyben megszokottól. A kutatási téma egyik célkitűzése a mágikus számok változásának illetve a neutron és proton maganyag korrelációjának vizsgálata ilyen egzotikus, instabil atommagokban. Azonban a radioaktív ionnyalábok intenzitása gyakran nagyon kicsi, ezért a mérésekből a hasznos információ kinyeréséhez sok műszert kell alkalmazni, a magreakcióban keletkező összes részecske és sugárzás detektálására kell törekedni. Ezért célunk az is, hogy kísérleteinkhez megfelelő detektálóberendezéseket hozzunk létre, mely a kutatási témának szintén részét képezi. Vizsgálatainkat nagy nemzetközi együttműködésekben végezzük a Japánban (RIKEN kutatóintézet), Németországban (GSI kutatóintézet) és Franciaországban (GANIL kutatóintézet).

A nehéz elemek és izotópjaik keletkezése robbanásos folyamatokban

A világegyetemben előforduló, vasnál nehezebb stabil izotópok jelentős része robbanásos asztrofizikai folyamatokban jön létre. Az asztrofizikai r folyamat során, a szupernóvák robbanásakor illetve neutroncsillagok összeolvadásakor, gyors neutronbefogások

révén extrém neutron-gazdag magok jönnek létre melyek a fluxus megszűntével sorozatos béta bomlások révén építik fel a stabil izotópokat. A röntgen-kitörésnek nevezett, kettős rendszerekben játszódik le az asztrofizikai rp folyamat melynek során a proton elhullatási vonal közelében található izotópok jönnek létre, ezen magok β -bomlása a könnyű p magok gyakoriságához adhat járulékot. A modern radioaktív nyalábgyárakban – mint RIKEN Nishina Center – a robbanásos folyamatok elemszintézis-ösvényén található magok megfelelő intenzitással előállíthatóak és β -bomlásaik tulajdonságai (felezési idő, késleltetett részecskekibocsátás) tanulmányozhatóak, ezáltal az r illetve az rp folyamatok jobban megérthetőek. A jelölt feladata a detektorrendszerek adatainak kiértékelésével a létrehozott egzotikus magok felezési idejének, bomlás sémájának illetve a β -bomlás késleltetett részecskekibocsátási valószínűségének meghatározása.

A robbanásos folyamatok között külön kategóriát képvisel a γ folyamat melynek során nem részecske befogás, hanem fotobomlás, azaz (γ,n) , (γ,p) illetve (γ,α) reakciók, során jönnek létre a vasnál nehezebb proton-gazdag magok. Elméleti és kísérleti megfontolások miatt az inverz reakciók vizsgálata a célszerű; a hazai részecskegyorsítók ideális körülményeket biztosítanak a töltött részecskebefogások vizsgálatára illetve rugalmas szórás kísérletek kivitelezésére. A jelölt feladata a proton illetve alfa részecske befogási hatáskeresztmetszetek aktivációs technikával való mérése illetve a kísérletileg meghatározott rugalmas alfa részecske szögeloszlások segítségével az alfa részecske – mag optikai potenciál paramétereinek meghatározása lesz.

Témavezető: **Dr. Szücs Tamás**

PF2/457-20

A Napban és a csillagokban lejátszódó magreakciók vizsgálata

A Napban és a csillagokban a kisugárzott energia magreakciók sorozatával szabadul fel. Ezek a magreakciók felelősek a természetben megtalálható kémiai elemek kialakulásáért is. A csillagműködés és az univerzum elemeinek felépülésének megértését tűzte ki célul a Nukleáris Asztrofizika tudományága. Összeköti a magfizikát a csillagászati megfigyelésekkel és modellezésekkel.

A csillagokban lejátszódó magfolyamatok kísérleti vizsgálata a reakciók apró hatáskeresztmetszete miatt speciális kihívások elé állít, amelyek a kísérletek gondos megtervezését és kivitelezését igénylik. Néhány esetben különleges, a világon egyedülálló berendezések használatára is szükség van. Az apró jelek detektálását sokszor a környezet természetes sugárzása is megakadályozza. Ezt elkerülendő, a detektorok árnyékolását, jel/zaj arányát fejlesztjük újabb és újabb ötletek bevetésével.

A jelölt feladata a PhD téma keretében a csillagműködésben illetve a Nap energiatermelésében fontos magreakciók hatáskeresztmetszetének mérése, a kísérlet megtervezésétől a lebonyolításon át az adatkiértékelésig. A kísérleteket főként az Atomki gyorsítóinak használatával végezzük, de nemzetközi együttműködésre is van lehetőségünk. Ha a tanulmányozandó reakció megköveteli, külföldi intézetekben is végezhetünk méréseket, akár egyedülálló földalatti gyorsító-laboratóriumokban is.

Témavezető: **Dr. Tőkési Károly**

PF2/458-18

Töltött részecskék kölcsönhatásai szabad atomokkal és szilárdtestek felületeivel

(lásd a PF1/428-03 téma leírását)

Témavezető: **Dr. Csedreki László**

PF2/459-22

Asztrofizikai releváns magreakciók vizsgálata

A nukleáris asztrofizika célja a csillagok fejlődésének, energiatermelésének és a világegyetemben lévő elemek keletkezésének megértése. A folyamatok megértéséhez elengedhetetlen a komplex asztrofizikai modellszámítások elvégzése, amelyhez a csillagokban lejátszódó magreakciók nagypontosságú vizsgálata és ezen reakciók sebességének pontos megadása szükséges.

Az ATOMKI-ban rendelkezésre álló töltött részecske gyorsítók és nukleáris mérőberendezések (gamma, neutron és töltött részecske detektorok, nukleáris elektronika, stb.) révén az ATOMKI nukleáris asztrofizikai csoportja évtizedes tapasztalattal rendelkezik a könnyű és közepes rendszámú kémiai elemeken végbemenő releváns magreakciók in-beam gamma-spektroszkópiái és aktivációs módszerrel történő vizsgálatában. A hidrogénégés néhány kulcsreakciói és a nehéz elemek szintézisében szerepet játszó r- és p-folyamat reakcióinak tanulmányozása tartozik a fő témáink közé.

A jelölt feladata a PhD téma keretében a csillagok működésének megértéséhez szükséges magreakciók tanulmányozása a magreakciókban keletkezett kölcsönhatási termékek (könnyű töltött részecskék, elektronok, gamma-fotonok, neutronok stb.) vizsgálatán keresztül. Ez magában foglalja a mérések megtervezését, kivitelezését (céltárgykészítés és karakterizálás, in-beam spektroszkópia és aktivációs módszer alkalmazása) és az adatok kiértékelését elsősorban az ATOMKI eszközparkjára támaszkodva.

Témavezető: **Dr. Furka Andrea Ilona**

PF2/460-22

Modern sugárterápiás technikák elemzése

A sugárterápia, mint az onkológia szerves része, nagyon gyors technikai fejlődésen ment keresztül. Az újszerű technikák hosszabb túlélési időt eredményeznek az onkológiai betegek körében, ezért elengedhetetlen a lehető legjobb életminőség fenntartása és támogatása. Az elnyelt dózis, a beadás módja és a sugárzás minősége kulcsfontosságú a sugárterápia hatékonyságának maximalizálásához és a nem kívánt mellékhatások csökkentéséhez. A speciális dozimetriai mérések és a nagy hatásfokú minőségbiztosítás elősegíti a sugárterápia biztonságát. Egy-egy beteg számára több sugárterápiás tervet kell kidolgozni, és a sugárterapeuta az orvosfizikusokkal folytatott folyamatos konzultáció során kiválaszthatja az adott esetre a legmegfelelőbbet. A tervezés folyamata és az önellenőrzési módszerek fejlesztése jobb minőséget, így radikálisabb sugárkezelést eredményezhet, ami kedvező klinikai kimenetellel kecsegtet.

Lézerrel keltett neutronok hozamának optimalizálása

A nagy intenzitású impulzuslézerek megjelenésével a töltött részecskék lézeres úton való gyorsítása az elmúlt két évtized kutatásai nyomán mára közel került a felhasználói szinthez. A lézerrel gyorsított ionok spektrális hozama függ a lézerimpulzus valamint a céltárgy paramétereitől. A keltett neutronok energiája és hozama függ a keltő ionok spektrális hozamától, valamint a keltő kölcsönhatástól.

A PhD téma keretében a jelölt feladata az alapvető kölcsönhatások megértése mellett egy olyan gépi tanulási algoritmus adaptálása vagy kidolgozása, mely segítségével a lézerrel gyorsított deutériumok a $D(d,n)$ fúzióval keltett, legalább 1 MeV energiájú neutronok hozamát maximalizálni lehet. Az optimalizálás egy adott céltárgy esetén a lézerimpulzus paramétereinek változtatásával történik. A neutron keltési kísérletek teljes egészében a szegedi ELI-ALPS Lézeres Kutatóintézetben történnek, míg az előkészítés a Szegedi Tudományegyetem TeWaTi Lézeres laboratóriumában, illetve az ATOMKI laboratóriumaiban történhet.

A Béta-bomlás szisztematikus vizsgálata magszerkezeti és asztrofizikai kérdések megválaszolásának céljából

A béta-bomlás a magátalakulások legáltalánosabb formája és mint ilyen, releváns információkat nyújt a magszerkezet vizsgálatához, az elemkeletkezési folyamatok tanulmányozásához és gyakorlati alkalmazásokhoz. A tervezett kutatómunka keretében a jelölt a legkorszerűbb kísérleti berendezésekkel fogja igen proton-gazdag, valamint extrém neutron-gazdag magok bomlásának vizsgálatát elvégezni. A kísérleteket a kapcsolódó kutatásokban vezető szerepet játszó RIKEN Nishina Gyorsítóközpont Radioaktív nyalábgyárában nagy tisztaságú germánium detektorokkal, teljes abszorpciós spektrométerrel, illetve neutronszámláló berendezések használatával végezzük el. A tervezett PhD munka magában foglalja az összetett kísérletekben gyűjtött adatok elemzését Root és C++ környezetben, valamint az eredmények értelmezését elméleti magfizikai és asztrofizikai szakértőkkel együttműködve, valamint az eredmények rangos folyóiratokban történő publikálását.

Modern neutronforrások tesztelése és alkalmazásai

A neutronok tanulmányozása és alkalmazása meghatározó szerepet játszik a fizika számos területén, többek között a nehéz elemek nukleoszintézisének megértésében, a nukleáris reakciókban megvalósuló energiatermelés elméletében és gyakorlati alkalmazásában, az anyagtudományban, valamint a neutronok orvosi és egészségtudományi felhasználásában.

A HUN-REN ATOMKI fő erősségét a töltött részecske-gyorsítók, a radioaktív források és a korszerű nukleáris kísérleti berendezések (gamma-, neutron- és töltött részecske-detektorok, nukleáris elektronika stb.) jelentik, amelyek biztosítják az intézet vezető szerepét a magfizika és a hozzá kapcsolódó területeken.

A jelölt feladata a PhD téma keretében a neutronok tanulmányozásához és alkalmazásához kapcsolódó nukleáris fizikai kísérletek végrehajtása lesz. Ez magában foglalja a kísérletek előkészítését és tervezését — beleértve új neutronforrások telepítését —, a mérések elvégzését (céltárgyak előállítása és jellemzése, „in-beam” spektroszkópia, aktivációs technika alkalmazása), valamint az adatok elemzését. A feladatokat a jelölt elsősorban a HUN-REN ATOMKI kísérleti berendezésein végzi.

III. Szilárdtestfizika és anyagtudományi program

Témavezető: **Dr. Gulácsi Zsolt**

PF3/413-95

Szupravezető tulajdonságok réteges felépítésű rendszerekben

A réteges felépítésű rendszerek szupravezető tulajdonságainak tanulmányozása szorosan kapcsolódik a magashőmérsékletű szupravezetők tárgyköréhez, és ugyanakkor a mesterségesen előállított réteges anyagok tanulmányozásában is fontos jelentőséggel bír [1]. Elsősorban azon specifikus tulajdonságokra szeretnénk koncentrálni a téma keretén belül, melyek különböző típusú, síkok közötti csatolásokhoz kapcsolódnak. Ilyen csatolás például a különböző síkokban elhelyezkedő részecskék közötti fellépő, rendszer által közvetített kölcsönhatás [2], vagy a síkok között fellépő pár-átugrások által előidézett csatolás [3]. Ezen hatások szerepét szeretnénk tanulmányozni a szupravezető tulajdonságok kiépítésében, a kritikus hőmérséklet kialakításában, illetve a kondenzált fázis tulajdonságainak meghatározásában. Elemezni szeretnénk továbbá a síkokban és síkok közt lejátszódó effektusok egymás közötti viszonyát.

Hivatkozások:

- [1] Physica C235-240, Part 1-3/Dec. 1994, tartalmazván a július 1994-ben Grenoble-ban bemutatott magashőmérsékletű szupravezetőkre vonatkozó Konferencia anyagát.
- [2] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi: Phys. Rev B37, 2247(1988); Phys. Rev. B40, 708(1989); Phys. Rev. B42, 3981(1990).
- [3] W. C. Wu. A. Griffin: Phys. Rev. Lett,74, 158(1995).

Témavezető: **Dr. Gulácsi Zsolt**

PF3/417-96

Sokrészecskés rendszereket érintő egzakt megoldások

Az utóbbi periódusban [1], olyan módszer bontakozik ki, mely a $D > 1$ dimenziós sokrészecskés rendszerek egzakt ellenzését teszi lehetővé, lényegi információkat szolgáltatván a modell-leírások eredményeiről, pontosságáról és helyességéről. Tudvalevő, hogy az egzakt eredmények területén, eddig, csupán a $D = 1$ dimenziós kvantummechanikai rendszerek voltak igazán hozzáférhetőek s ezért, a kialakulóban lévő eljárás az elméleti leírás szempontjából fontos előrelépést jelent majd. Az alkalmazási területek különösképpen érintik az elméleti szilárdtestfizika lényegi területeit, szervesen kapcsolódnak az erősen korrelált rendszerek (pl. magashőmérsékletű szupravezetők, nehéz-fermionos rendszerek, fém-szigetelő átmenet, kvantum-Hall effektus) jellemzéséhez, továbbá itineráns és lokalizált rendszerek kiértékeléséhez.

Az új módszer lényege abban áll, hogy a rendszer alapállapotának kiértékelésekor rigorózus matematikai eljárások segítségével, az alapállapot-energiára vonatkozólag egzakt alsó és felső korlátot szab, a megfelelő sajátfüggvények meghatározásával együtt. A két korlát

egyenlővé tétele a paramétertér bizonyos területein egzakt megoldást szolgáltat. A levezetett információk olyan tartományokat érintenek amelyek eddig vagy csak gyenge minőség-közelítő módszerekkel, vagy egyáltalán nem voltak hozzáférhetőek.

Irodalom:

1.) J. de Bor, S. Schadsehneider, Phys. Rev. Lett. 75(1995)4298. A. Korepin et al., Phys. Rev. Lett. 74(1995)789.

Témavezető: **Dr. Gulácsi Zolt**

PF3/423-97

A periodikus Anderson modell elméleti vizsgálata.

Az erősen korrelált rendszerek egyik alapmodellje a periodikus Anderson modell, mely a sávon belül nemkölsönható töltéshordozó rendszer és a periodikusan elhelyezkedő ráccsomópontokhoz kötött és Hubbard kölcsönhatási taggal jellemzett lokalizált nívókon tartózkodó elektronok, hibridizációs tagon keresztül egymásra hatását tanulmányozza. Pillanatnyi ismereteink szerint a modell a nehézfermionos sokrészecskés rendszerek leírásának egyik legalkalmasabb módját képezi. Mindannak ellenére hogy a modell kulcsszerepet tölt be a napjaink szilárdtestfizikájában, a többi lényegi alapmodell nagy hányadától eltérően, egzakt megoldása még $d = 1$ dimenzióban sem ismert, továbbá nagyobb dimenziókban vett viselkedésének és jellemzőinek paraméterei majdnem teljes egészében a nyitott kérdések kategóriájába esnek. A témakör fejlődését csoportunk régóta szem előtt tartja, a modell leírásában fontos saját eredményei is vannak (Zs. Gulácsi, R. Strack, D. Vollhardt: Phys.Rev. **B47** (1993) 8594.), és az időközben levezetett új tudományos eredmények felhasználásával a modell elemzését folytatni szeretnénk. A célkitűzés: nagyon jóminőségű, lehetőleg közelítésmentes eredmények levezetése a $d \geq 1$ dimenziós periodikus Anderson modellre vonatkozólag, olyan eredményekét, melyek a rendszer fizikai viselkedését kellő minőségben pontosítják. Kiindulópontként a Strack és Vollhardt (Phys. Rev. Lett. **70** (1994) 2637.) által javasolt eljárást választjuk, mely dimenziótól független módon egzakt alsó és felső határt szab az alapállapot energiának, majd az így kapott értékeket a paramétertérben egymásba tolja. A módszer továbbfejlesztési lehetőségei is az érdeklődés központjába állnak.

Témavezető: **Dr. Gulácsi Zsolt**

PF3/424-97

Rendezett fázisok síkos felépítésű rendszerekben

A síkos felépítésű rendszerek érdekes átmenetet képeznek a két dimenziós illetve három dimenziós rendszerek között. Síkokon belül a kétdimenziós jelleg dominál erős elvi megszorításaival a hosszútávú térbeli rendezettséggel jellemzett rendezett fázisokkal szemben. Ezzel ellentétben, maga a síkos felépítésű rendszer az egymásra helyezett és egymáshoz kölcsönhatások révén kapcsolt síkjaival már háromdimenziós testet épít fel, mely (a dimenzionalitás szempontjából) restriktio-mentes a rendezett fázisok megjelenése szempontjából, ezek fellépését teljesen más eredetű fizikai paraméterek határozzák meg. A két rendszertípus közötti átmenet határán rendkívül érdekes jelenségek játszódnak le melyek fizikai kiértékelése napjaink szilárdtestfizikájának egyik lényegi tárgykörét alkotják (a magashőmérsékletű szupravezetők például szintén ebbe a kategóriába tartoznak). A síkok közötti csatolások változtatásával a síkos felépítésű rendszer modell eredményeit mindkét

említett dimenzió irányába eltolni lehet, lehetőséget nyitva arra, hogy a két véglet közötti átmenet jellemzőit elemezni tudjuk. Ezen témakör kérdéseivel szeretnénk foglalkozni, főképp a kondenzált fázisok jellemzése szempontjából. A tanulmányozás során nemcsak szupravezető, hanem mágneses és töltés, illetve spin sűrűség jellegű rendezettségi formák megjelenési körülményeit is elemezni szeretnénk. A csoport adott területen vett jártassága megvan (M. Gulácsi, Zs. Gulácsi: Phys. Rev. **B42** (1990) 3981.; Zs. Gulácsi, M. Gulácsi, B. Jankó: Phys. Rev. **B47** (1993) 4168.). A témához vett hozzáállás kiindulópontját a Strack és Vollhardt által kifejlesztett (Phys. Rev. Lett. **70**, (1994) 2637.) közelítésmentes módszer alkotja majd, mely továbbfejlesztése szintén célkitűzésünk.

Témavezető: **Dr. Beke Dezső**

PF3/428-99

Martenzites átalakulás alakmemória ötvözetekben

A martenzites átalakulás és az alakmemória effektus a modern fizikai fémtan legfontosabb problémái között szerepel. A transzformáció jellemző paraméterei erősen függenek az anyag feszültségi állapotától és mikroszerkezetétől. Cél a transzformációs tulajdonságok fenti paraméterektől való függésének vizsgálata kísérleti módszerekkel, különböző (Ti-Ni, Cu-Zn-Al) alakmemória ötvözetekben.

Témavezető: **Dr. Gulácsi Zsolt**

PF3/432-99

Rácsmodellek alacsonykoncentrációs határesetének tanulmányozása

Erősen korrelált sokrészecskés és fermionikus rendszerek leírásában fontos szerepet játszó modellekre, főként a Hubbard modellre, fogunk koncentrálni két térdimenzióban. Kezdetben kis rendszerek kerülnek előtérben, amelyeken levezetett eredményeket tetszőleges nagy rácsra általánosítani szeretnénk. A cél az, hogy kevés részecskeszám mellett kialakuló alapállapotok és gerjesztett állapotok rejtett szimmetriáit vizsgáljuk lehetőleg közelítésmentes módon. Tudományos szempontból erre azért van szükség, hogy a kétdimenziós sokrészecskés és kvantummechanikai rendszerek pontos megoldásaihoz vezető úthoz kapcsolódóan potenciálisan új információkat vezessünk le és ezeket a rendszer további jellemzésében alkalmazzuk. A témakör a sokrészecskés fermionikus rendszerek kiskoncentrációs határesetben vett kvantumfolyadék viselkedésének elbírálása szempontjából is rendkívül aktuális és a kvázi-kétdimenziós rendszerekben fellépő kondenzátumok (pl. magas hőmérsékletű szupravezetők) elvi megértésének fontos lépését jelenti.

A témakör tudományos publikációs háttere nagyon nagy, de rendkívül szegényes. A 2D Hubbard modell esetében például a 2-részecske alapállapotú hullámfüggvény ismert explicit módon csupán [1], mindannak ellenére, hogy a kétrészecske energiaspektrumot megadó kifejezés rendelkezésre áll [2]. Az elemzés napi szinten az érdeklődés központjába áll [3] és a kétdimenziós kvantumkondenzátumok alaptulajdonságaihoz közvetlenül kapcsolódik [4].

- [1] L. Chen, c. Mei: Phys. Rev. **B39**, 9006, (1989).
- [2] D. C. Mattis: Rev. Mod. Phys. **58**, 361, (1986).
- [3] O. Tjebberg: Jour. Math. Phys. **39**, 6416, (1998).
- [4] A. C. Cosentini et al. Phys. Rev. **B58**, R14685 (1998).

Témavezető: **Dr. Langer Gábor és Dr. Csík Attila**

PF3/433-99

Multirétegek termikus stabilitásának vizsgálata

A nanoméretű, amorf és kristályos multirétegek iránt egyre szélesebb érdeklődés mutatkozik nemcsak az alapkutatás, hanem az ipari alkalmazások oldaláról is. Az okok abban keresendők, hogy ezek a multirétegek legtöbb esetben különleges mágneses, elektromos, mechanikai és optikai tulajdonsággal rendelkeznek. Hosszabb idő elteltével, vagy hőterhelés hatására a legtöbb multiréteg szerkezete morfológiai változásokon megy keresztül, amely általában együtt jár az említett speciális tulajdonságok megszűnésével. Emiatt a multirétegek termikus stabilitásának kutatása, valamint a szerkezeti változásokat befolyásoló tényezők megismerése rendkívül fontos a rétegrendszer élettartamának előrevetítéséhez.

Témavezető: **Dr. Csarnovics István**

PF3/436-02

Fotostimulált folyamatok félvezető nanostruktúrákban

A fényérzékeny kalkogenidekben ismert fotostimulált szerkezeti változásokat és az amorf rétegek optikai, elektromos paramétereire gyakorolt hatásukat olyan réteges nanostruktúrákban tanulmányozzuk, melyekben a rétegek összetétele, technológiája, vastagsága, interdiffúziója lényegesen kihat az említett és más paraméterek változásainak mechanizmusára, nagyságára. Ebből következhet az adott anyagok optikai adattárolásra, optoelektronikai elemek előállítására való alkalmassága, illetve a más amorf félvezetőkből készült nanostruktúrák vizsgálatainak módszertani, illetve alap- vagy alkalmazott kutatási megalapozása.

Témavezető: **Dr. Csarnovics István**

PF3/437-02

Félvezető nanokompozitok méretkorlátozott tulajdonságai

Fényérzékeny kalkogenid alapú vegyület-félvezető nanokristályok optikai, elektromos és más tulajdonságait vizsgáljuk a szemcsék összetétele, mérete valamint a mátrix (félvezető vagy szigetelő üveg, amorf réteg) összetétele, technológiája függvényében, különös tekintettel a lézerfényrel stimulált változásokra, melyek alkalmazhatók az optikai jelek feldolgozásában.

Témavezető: **Dr. Csarnovics István**

PF3/438-02

Amorf anyagok sugárzással stimulált változása és alkalmazása az optoelektronikában

Elektromágneses sugárzás és gyorsított részecskék (elektronok, protonok, neutronok, ionok) hatását vizsgáljuk olyan széles tiltott sávú amorf félvezető és szigetelő anyagok, vékony rétegek szerkezetére, optikai és mechanikai paramétereire, valamint azok irányított változásainak mechanizmusára, melyek optikai elemek, integrált optikai szerkezetek előállítására alkalmazhatók.

Magneto- és electrorheológiai folyadékok nemegyensúlyi folyamatainak vizsgálata

A magnetorheológiai (MR) folyadékok általában egy nemmágneses viszkózus folyadékban szuszpendált mikrométer méretű részecskékből állnak, amelyek permanens mágneses dipólmomentummal rendelkeznek. Az electrorheológiai (ER) folyadékok hasonló összetételűek, azzal a különbséggel, hogy a passzív folyadékban szuszpendált részecskék elektromos dipólmomentumot csak egy külső elektrosztatikus térben fellépő indukció révén nyernek.

MR folyadékokban külső mágneses tér nélkül, a dipól-dipól kölcsönhatás és a részecskék Brown-mozgásának összjátéka eredményeként a részecskék aggregálnak és komplex struktúrákat építenek fel. Ilyenek például a dipól lánc, gyűrű, labirintusszerű, fraktál és kompakt objektumok. Külső mágneses tér jelenlétében viszont a részecskék a tér irányával párhuzamos láncokat alkotnak, majd a láncok nagyjából egyenközűen elhelyezkedő oszlopokba rendeződnek. Hasonló struktúra kialakulás ER folyadékokban csak külső tér jelenlétében figyelhető meg. Mind az ER és MR folyadékok rendkívüli technológiai jelentőségűek, mert a részecskék formálta struktúrák gyökeresen megváltoztatják a kolloid rheológiai és optikai tulajdonságait, s lehetőségünk van arra, hogy a kolloid ezen jellemzőit a külső hajtó térrel kontrolláljuk. Ezért ezeket a kolloidokat 'okos folyadékoknak' is nevezik.

A rheológiai folyadékok lehetővé teszik kétdimenziós kolloidkristályok tanulmányozását is. Permanens dipólmomentummal rendelkező részecskéket viszkózus folyadék felszínére helyezve külső mágneses térben kétdimenziós kolloid kristályok állíthatók elő. A tér irányának megfelelő elforgatásával sikerült generálni az összes síkbeli kristálytípust.

A doktori téma keretében a magneto- és electrorheológiai folyadékokban fellépő struktúra képződéssel járó folyamatok elméleti vizsgálatát kell végezni szoros együttműködésben kísérleti csoportokkal. A kutatómunka magában foglalja az aggregációs kinetika és a klaszter-klaszter aggregációs folyamat vizsgálatát, a kolloid rheológiai és optikai tulajdonságaira való hatásuk elemzését, továbbá a kétdimenziós kolloidkristályok létrejöttének, stabilitási tulajdonságaiknak és olvadásuknak a tanulmányozását.

Szilárdtestek törésének és fragmentációjának vizsgálata

A rendezetlen mikroszkópikus tulajdonságokkal rendelkező anyagok külső terhelés alatt bekövetkező törése nagyon fontos tudományos és technológiai probléma, amelynek elméleti leírása a statisztikus fizika és a számítógépes fizika számára is tartogat kihívásokat. Általános tapasztalat, hogy a rendezetlen mikroszkópikus tulajdonságokkal rendelkező szilárdtestek külső terhelés alatt, egy meghatározott kritikus terhelés értéknél elvesztik integritásukat és két vagy több darabra törnek. A törés folyamata és eredménye, a test jellemzői mellett, erősen függ a terhelés sebességétől is. Lassan növekvő terhelés esetén a szilárdtest tipikusan két, közel azonos méretű darabra esik szét (*kvázisztatikus törés*), viszont ha nagy energiát közlünk egy testtel rövid idő alatt, akkor az nagyon sok apró darabra hullik (*fragmentáció*). A dinamikus törés jelensége átmenetet képez a kvázisztatikus törés és a

fragmentáció között. *Dinamikus törés* akkor jön létre, ha egy testtel rövid idő alatt nagymennyiségű energiát közlünk, de a határfeltételek biztosítják, hogy egyetlen repedés keletkezik, amely nagy sebességgel terjed.

A doktori munka célja rendezetlen mikro-tulajdonságokkal rendelkező szilárdtestek törésének és fragmentációjának vizsgálata. A kutatómunka elsősorban elméleti jellegű, de az elméleti vizsgálatokat kísérleti csoportokkal szoros együttműködésben tervezzük. A jelölt munkájának részét képezi kísérleti eredmények feldolgozása, illetve részvétel a kísérletek tervezésében és kivitelezésében. A törés és fragmentáció jelenségének elméleti vizsgálata számos olyan problémát vet fel, amelyeket egzakt, analitikus módszerekkel nem lehet kezelni, így az elméleti megközelítések jelentős része számítógépes szimulációra épül. A szimulációk során mind determinisztikus (molekuláris dinamika), mind sztochasztikus (Monte Carlo) módszereket is felhasználunk.

Témavezető: **Dr. Erdélyi Zoltán**

PF3/451-10

Diffúzió és szilárdtest reakciók vizsgálata vékonyrétegekben: kísérletek és szimulációk

Felületanalitikai módszerek alkalmazása diffúziós átalakulások vizsgálatára nanokristályos és amorf rétegekben. Egyedi határfelületek elmozdulásának vizsgálata mélységi profilírozással.

Fázisnövekedési kinetikák szimulációja, feszültségek szerepének vizsgálata.

Témavezető: **Dr. Gulácsi Zsolt**

PF3/452-11

Erősen korrelált rendszerek jellemzése

Az erősen korrelált rendszerek általában olyan sokrészecskés és kvantummechanikailag viselkedő rendszerek, amelyekben a részecskék közötti kölcsönhatások aránylag nagy értékűek, így a korrelációs hatások is nagyok, ezáltal az alacsony szintű közelítésekben levezetett rájuk vonatkozó eredmények nem megbízhatóak. Ezen rendszerek elméleti jellemzése tehát magas fokú közelítés, vagy pontos úton történik, ez adja az e csoportkörbe tartozó anyagok érdekességét. Számos, ma az érdeklődés középpontjába álló ilyenszerű rendszer van, pl. szerves periodikus rendszerek, szerves vezetők, ritkaföldfém ötvözetek és vegyületek, réteges felépítésű rendszerek, stb. Ezen anyagok fizikai tulajdonságainak jellemzésével foglalkozna a kutatási téma.

Témavezető: **Dr. Daróczy Lajos**

PF3/453-13

Zajjelenségek martenzites átalakulást mutató anyagokban

A martenzites átalakulást mutató anyagokban különböző zajjelenségek figyelhetők meg az ausztenit és martenzitfázisban, valamint az átalakulás során is. A különböző eredetű jelek más-más fizikai folyamatról hordoznak statisztikai jellegű információt, így ezek összevetése, korrelációja fontos összefüggéseket tárhat fel a martenzites átalakulások mechanizmusáról.

Az átalakulás során mindig detektálható akusztikus emissziós jel valamint igen kis fűtési/hűtési sebességek esetén zajszerű viselkedést mutató termikus (DSC) jel is.

Ferromágneses alakmemória anyagokban ezek mellett mágneses emisszióból származó jelek is megfigyelhetők, amelyeket hőmérséklet-változással vagy deformációval válthatunk ki.

A kísérleti munka fő célkitűzése a különböző jelek megbízható, lehetőleg szimultán detektálása és a kapott zajspektrumok statisztikai feldolgozása.

Témavezető: **Dr. Erdélyi Zoltán**

PF3/454-14

Alkalmazások szempontjából fontos nanoanyagok vizsgálata

A különböző alkalmazási igények folyamatos kihívás elé állítják az anyagtudósokat. Állandó az igény új tulajdonsággal bíró vagy azonos tulajdonságokkal rendelkező, de olcsóbban előállítható anyagok létrehozására. A jelen kutatási téma ehhez az igényhez kíván alkalmazkodni azáltal, hogy a rendelkezésünkre álló kísérleti és elméleti (számítógépes szimuláció is) eszközökkel alkalmazási potenciállal rendelkező nanoanyagokat – elsősorban réteges szerkezetű (pl. nanolaminátok, multirétegek, mag-héj struktúrák) – kívánunk tervezni és előállítani, valamint tulajdonságaikat (pl. termikus stabilitás, elektromos, optikai) vizsgálni.

Témavezető: **Dr. Cserháti Csaba**

PF3/455-16

Kirkendall eltolódás vizsgálata nanoskálán

Diffúzió kontrollált szilárdtestreakciók esetében a Kirkendall-sík eltolódása a klasszikus elmélet alapján magyarázható. A jelenség oka a különböző nagyságú atomi áramok miatt keletkező, a gyorsabb komponenssel szembe mutató eredő vakanciaáram, amely részben felelős a keveredés során felépülő mechanikai feszültségekért. Ezen feszültségek részleges, vagy teljes relaxációja vezet a Kirkendall-hatáshoz. Amennyiben a relaxációs folyamat gyors és teljes a keveredést a kölcsönös diffúziós együttható írja le. Ebben az ideális esetben a Kirkendall-eltolódás a diffúziós folyamat idejének négyzetgyökével arányos. Az hatás jól ismert kétalkotós, mikroszkópikus méretű mintadarabokban, de a méret 'nano'-tartományba csökkentése (vékony filmek, nano-héjak, vagy nano-szálak) újabb kérdéseket vet fel. Ebben a mérettartományban a vakancia források és nyelők közötti karakterisztikus távolság összemérhetővé válik a minta méretével, így eltérés várható a fenti esettől. A keveredést ilyenkor a lassúbb komponens diffúziója vezérli. Ilyen összetett körülmények között vizsgálunk vékonyréteg szerkezeteket különböző geometriában (sík, hengeres, gömbi) különböző fémes rendszerekben. A téma technológiailag többek között azért is fontos mivel Kirkendall-sík a diffúziós kötés leggyengébb pontja.

A kísérleti munka célkitűzése adatgyűjtés a mintákban létrejövő koncentráció-eloszlásról, valamint a Kirkendall-sík helyzetéről. Ehhez különleges kísérleti technikákat használunk: SNMS mélységi profilírozás, különböző röntgen- és neutron-diffrakciós módszerek, amelyek ideálisak a nanoskálán zajló folyamatok vizsgálatára.

Atommozgási folyamatok 2 és 3 dimenziós szerkezetekben

Mikro- és nanométeres méretű, sík és hengeres geometriájú szerkezeteken vizsgálunk atommozgási folyamatokat. Vizsgáljuk az kiindulási anyagok közt végbemenő diffúziós, szilárdtest reakciós folyamatot, valamint annak függését a görbületi sugártól.

A téma kidolgozása elsősorban kísérletes kutatást igényel, a minta gyártásától az előkészítésten és a morfológiai és analitikai vizsgálatokon keresztül, az eredmények kiértékeléséig. A hőkezelések során végbemenő folyamatokat mikroszkópos módszerekkel kell vizsgálni és kiértékelni. Az eredmények kiértékeléséhez a tanszékünkön korábban kifejlesztett modelleket lehet használni illetve kell kiterjeszteni a vizsgált rendszerekre.

Fázisátalakulások zajos jellegének vizsgálata

Jól ismert, hogy martenzites átalakulások szakaszos jellegűek, azaz ezek során különböző (termikus, akusztikus és –ferromágneses anyagokban – mágneses) zajokat lehet észlelni. Ugyancsak vannak utalások az irodalomban arra, hogy alacsony hőmérsékleten a diffúzió illetve a szilárdtest reakciók is szaggatott jellegűek. A fenti jelenségek megértésének gyakorlati jelentősége van az acéliparban, az alakemlékező ötvözetek alkalmazásaiban, valamint a vékony filmek és multirétegek nanotechnológiáiban (ahol szilárdtest reakciókkal érik el kívánt tulajdonságokat) használt anyagok jobb funkcionális paraméterinek megvalósításában. Tehát, a szilárdtest fázisátalakulások során keletkező zajokat a fenti anyagokban fogjuk vizsgálni, differenciális pásztázó kaloriméterrel (DSC) és akusztikusan és mágnesen emittált jelek észlelésével.

Kockázat alapú megközelítések korrodált túlnyomásos olaj és gázipari berendezések megbízhatóságának értékelésében

Kár statisztikák olaj-finomítói iparágban tranzit olaj- és gázvezetékek valamint túlnyomásos berendezések esetében. Az olaj és gáziparban fellépő korróziós károk. Mérnöki módszerek a megbízhatóság értékelésére korrodált csővezetékek és nyomás alatti berendezések esetében, valamint ezek összehasonlítása. A kockázat alapú felülvizsgálat alapelvei. Az API 581 eljárások alapvető felépítése. A finomító iparban alkalmazott anyagok adatbázisai. A kiválasztott anyagok korrózióval szembeni ellenállásának kísérleti ellenőrzése a megfelelő paraméter térben. A mintadarabok metallográfiai, valamint kémiai elemzése fény és elektronmikroszkópokkal (pásztázó és transzmissziós), felületérzékeny technikákkal (szekunder semleges részecske tömegspektrometria, röntgen foto-elektron spektroszkópia), valamint röntgen diffrakcióval.

Molekulasugár-epitaxiával növesztett GaAs-alapú nanostruktúrák vizsgálata

Ezidáig a rácsállandó eltérésen alapuló feszültségindukált módszert alkalmazták a nulla-dimenziós III-V-anyagú nano-struktúrák előállítására. Ilyen struktúrákra tipikus példa a GaAs felületen a rácsfeszültség relaxációja nyomán képződő InAs kvantumpont. E területen egy új lehetőségként a csepp-epitaxia jelent meg. Ez az új módszer nemcsak alternatívája a korábbi technikának, de segítségével gyűrű és kettős gyűrű alakú kvantum struktúrák és inverz kvantum pontok, valamint kvantum-pont-molekulák is előállíthatóak. Bővebb információ a csepp epitaxiáról a mellékelt linken található:

<http://www.intechopen.com/books/quantum-dots-theory-and-applications/quantum-dots-prepared-by-droplet-epitaxial-method>

A csepp-epitaxiás módszer előnye a szabad anyagválasztás és a forma és az eloszlás variálhatósága, valamint teljesen kompatibilis a molekula-sugár-epitaxiával. Ennek a technikának a közben tartható műveléséhez elengedhetetlen a növekedés kinetikájának megértése, amelynek elméleti leírásában még sok a fehér folt. A jelentkező a fent vázolt munkába kapcsolódna be a következő módokon: méréskiértékelés, számolások, modellezések, szimulációk valamint kísérletek végzése molekula-sugár epitaxiás berendezésen.

Szükséges ismeretek és készségek: kondenzált anyagok fizikája, kreativitás, önállóság, együttműködő-képesség, angol szakszöveg értése, jó gyakorlati érzék (kísérleti munkák esetére).

Fém nanorészecske alapú plazmonikai nanostruktúrák paramétereinek és érzékenységének modellezése

A nanotechnológia fontos területe a nanostruktúrák előállítása, vizsgálata és alkalmazási lehetőségeinek feltérképezése. Külön csoportot alkotnak a plazmonikai nanorészecskék, amelyek anyagának típusától, alakjától, méretétől függően más tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezeket a nanostruktúrákat egyre szélesebb körben vizsgálják és érzékelőként használják.

A doktori munka célja a fém nanorészecske alapú plazmonikai nanostruktúrák paramétereinek modellezése és optimalizálása. A kutatómunka elsősorban elméleti jellegű, de az elméleti eredményeket kísérleti csoportokkal szoros együttműködésben tervezzük. A jelölt munkájának részét képezi eddig ismert kísérleti és elméleti eredmények feldolgozása, a nanostruktúra előállítási technológiájának és vizsgálati módszereinek, valamint alkalmazási, különös tekintettel az érzékelésre, lehetőségeinek megismerése. E mellett megismeri a lokalizált felületi plazmon rezonancia (LSPR) és a felület erősített Raman szórás (SERS) jelenségeinek elméleti és kísérleti hátterét. Továbbá megvizsgálja a fém nanostruktúrák paramétereinek és érzékenységének modellezési lehetőségeit, feltételeit és eddigi hátterét. A cél elérése érdekében pedig megfigyeli a különböző fém nanorészecskék összetételének, méreteinek, alakjának hatását

azok LSPR és SERS érzékenysége. Mindezek mellett meghatározza az adott nanostuktúrák kísérleti előállításának optimális paramétereit, alkalmazásának lehetőségeit, valamint valós kémiai és biológiai anyagok érzékelésének feltételeit.

Témavezető: **Dr. Csarnovics István**

PF3/461-19

Fém nanorészecske alapú plazmonikai nanostruktúrák előállítása és paramétereinek vizsgálata

A nanotechnológia fontos területe a nanostruktúrák előállítása, vizsgálata és alkalmazási lehetőségeinek feltérképezése. Külön csoportot alkotnak a plazmonikai nanorészecskék, amelyek anyagának típusától, alakjától, méretétől függően más tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezeket a nanostruktúrákat egyre szélesebb körben vizsgálják és érzékelőként használják.

A doktori munka célja a fém nanorészecske alapú plazmonikai nanostruktúrák előállítása és azok paramétereinek vizsgálata. A kutatómunka elsősorban kísérleti jellegű, de a kísérleti eredményeket elméleti csoportokkal szoros együttműködésben tervezzük. A jelölt munkájának részét képezi eddig ismert kísérleti és elméleti eredmények feldolgozása, a nanostruktúra előállítási technológiájának és vizsgálati módszereinek, valamint alkalmazási, különös tekintettel az érzékelésre, lehetőségeinek megismerése. E mellett megismeri a lokalizált felületi plazmon rezonancia (LSPR) és a felület erősített Raman szórás (SERS) jelenségeinek elméleti és kísérleti hátterét. Munkája során elsajátít több nanostruktúra előállításhoz és vizsgálathoz szükséges módszert. A cél elérése érdekében megvizsgálja az előállított nanostruktúrák paramétereinek (alakjának, anyagának, méretének) hatását azok érzékelési paramétereire. Mindezek mellett megvizsgálja valós kémiai és biológiai anyagok érzékelésének feltételeit és paramétereit, valamint az adott nanostruktúráknak plazmonikai elemek előállítására való alkalmazhatóságát

Témavezető: **Dr. Takáts Viktor**

PF3/463-20

XPS-LEIS mérési módszerek a felületfizikában és anyagtudományban

A röntgen gerjesztésű fotoelektron spektroszkópia (XPS – X-ray Photoelectron Spectroscopy) és az alacsony energiájú ionszórásos spektroszkópia (LEIS – Low Energy Ion Scattering Spectroscopy) a szilárdtest-felületek meghatározó analitikus vizsgálati módszerei. Míg az XPS mind kvalitatív, mind pedig kvantitatív anyagelemzésre alkalmas a minták legfelső 6-8 nm-es rétegvastagságban, a LEIS egzaktul a legfelsőbb egy atomi rétegnek a vizsgálatára alkalmas. Mindkét mérési módszer kizárólag ultranagy vákuumban alkalmazható, így a mérések mellett a mintapreparálást is el kell sajátítani. A mért spektrumok kiértékelése matematikai eljárások után válik pontosan értelmezhetővé és nem csak az anyagösszetételre, de a kémiai állapotokra is kapunk információt. A kutatási téma során több különböző minta elemzésére kerül sor. Ezek lehetnek laboratóriumban előállított, és lehetnek iparban használt félvezető vagy fém(ötvözet) minták.

Témavezető: **Dr. Takáts Viktor**

PF3/464-20

Ultrahagy-vákuumú pásztázó szondás mikroszkópia (UHV-SPM)

Atomi feloldású felületi domborzatokat és az azokon lejátszódó jelenségeket ultrahagy vákuumban működő pásztázó szondás mikroszkóppal lehet vizsgálni. Jelenlegi témában az alagútáram mikroszkópot, a pásztázótűs atomerő-mikroszkópot és a Kelvin-szondát fogjuk használni. A kutatómunka végzéséhez feltétlenül szükséges a vákuumtechnikai ismeretek és a tématerületre vonatkozó eljárások elsajátítása, mintapreparálási módszerek és technikák megtanulása. A témakiírás fő irányvonala kristályos és polikristályos anyagok szerkezeti és elektronszerkezeti tulajdonságainak a vizsgálata. Ehhez szükséges lesz az SPM kalibrációját ismert kristályos anyagok segítségével elvégezni, továbbá egykristály hordozók ultrahagy vákuumban történő preparálása és vékonyrétegek előállítása. Az így kapott mintákon lehetőség nyílik termikusan és lézernyalábbal indukált felületi atomi mozgások vizsgálatára.

Témavezető: **Dr. Katona Gábor**

PF3/465-17

Vékonyfilmek szerkezetátalakulásai

A vékonyfilmek és heterostruktúrák sok esetben sajátos viselkedésének megértéséhez, alkalmazásukhoz fontos tulajdonságaik és szerkezetük kapcsolatának, valamint a szerkezet változásainak az anyagjellemzőkre gyakorolt hatásának ismerete. Gyakran a megfelelő tulajdonságú anyagot több lépésben, pl. leválasztás utáni hőkezeléssel lehet létrehozni. A kutatás célja és a doktorandusz feladata vékonyrétegekben, heterostruktúrákban bekövetkező szerkezetátalakulások kinetikájának valamint az egyéb (pl. mágneses, elektromos, magnetoelektromos) tulajdonságok ennek során bekövetkező változásának illetve ezek kapcsolatának feltárása.

Témavezető: **Dr. Tőkési Károly**

PF3/466-20

Egyszerű és többrétegű mintákban lejátszódó transzport folyamatok vizsgálata

Folyamatos érdeklődés és erőfeszítés van a szilárd anyagok optikai állandóinak meghatározására, mivel azok fontosak mind az alap kutatásokban, mind az alkalmazásokban. A jelen kutatások újraéledését részben az indokolja, hogy sok anyagnak még mindig alig ismertek ezek az adatok, vagy az aktuális adatbázisban rendelkezésre álló adatok pontatlanok. Feladat: különböző (egyszerű valamint több rétegből álló) minták esetében, kísérleti és/vagy részletes Monte Carlo számítások elvégzésére az elektronok rugalmas (rugalmatlanul) visszaszórt elektronspektrumainak vizsgálatára. Többszörös elektronszórás spektrumtorzító hatásának elemzése. Felületi hatások vizsgálata. Szilárd anyagok optikai tulajdonságainak felülvizsgálata a visszaszórt elektronok energiavesztései spektroszkópiai spektrumának "fordított" Monte Carlo módszerének elemzése alapján.

Követelmények: Klasszikus és kvantumfizikai alapismeretek.

A programozási nyelv ismerete (Fortran, C, C++ stb.).

Az angol nyelvű kéziratok készítése

Anyagvizsgálati módszerek fejlesztése

A kutatás célja anyagvizsgálati módszerek megvalósítása, az mérésekhez szükséges elektronikai berendezések fejlesztése, tesztelése és gyakorlati alkalmazhatóságuk bemutatása. Az anyagtudományban a hagyományos mérés technikák mellé egyre növekvő igényekkel jelentkezik a méretcsökkenésekkel összefüggő újabb eljárások megvalósítása. A mágneses anyagok vizsgálatában a mikroszerkezeti változások követése, vagy a nagyon kis tömegű vékonyrétegek között lejátszódó kölcsönhatások vizsgálata már nem lehetséges a hagyományos, tömbi anyagokra kifejlesztett, sokszor nagyműszeres technikák alkalmazásával. A doktori munka során a hallgató megismerkedik a mágneses és/vagy termikus mérés technikákkal, azok előnyeivel, hátrányaival valamint a mérőberendezések felépítésével. Az elméleti anyagtudományi és elektronikai tudásra támaszkodva az újonnan megjelenő igényeket kielégítő mérőberendezések fejlesztése a cél. A mérőberendezések megépítése után tesztmérésekkel, kalibrációval mutassa be a berendezések gyakorlati alkalmazhatóságát. Elvárások a jelentkezővel szemben: villamosmérnök vagy fizikus vagy anyagtudós diploma, mérés technikai és elektronikai jártasság, angol nyelvtudás.

Alakemlékező ötvözetek szuperelasztikus viselkedésének vizsgálata akusztikus emissziós módszerekkel

Az alakemlékező ötvözetek (Shape Memory Alloys, SMA-k) – például a NiTi és a NiFeGaCo rendszerek – egyedülálló funkcionális tulajdonságaikat a reverzibilis martenzites fázisátalakulásoknak köszönhetik, amelyek lehetővé teszik az alakemlékező effektust és a szuperelasztikus viselkedést. Az utóbbi évtizedben fokozott figyelem irányult a „strain-glass” állapot tanulmányozására is, amelyben a kristályrácsban jelenlévő rendezetlenség gátolja a hosszú távú martenzites rendeződést, ezáltal üvegszerű, de részben szuperelasztikus mechanikai válaszokat eredményez. E komplex jelenségek mélyreható megértése korszerű, nagy érzékenységgű mérés technikai megközelítést igényel.

A tervezett kutatás célja különböző fémes SMA rendszerek – elsősorban NiTi és NiFeGaCo ötvözetek – szuperelasztikus és strain-glass viselkedésének vizsgálata akusztikus emissziós (AE) módszer alkalmazásával, mechanikai terhelés alatt. A kísérletek során a mintákat húzó- és nyomóirányú deformációknak vetjük alá, miközben az AE jelek rögzítésével valós időben követjük a mikromechanikai folyamatokat.

Az adatok feldolgozása korszerű jelfeldolgozási és statisztikai módszerekkel, valamint mintázatfelismerési eljárásokkal történik annak érdekében, hogy feltárhatók legyenek az egyes átalakulási mechanizmusokra jellemző akusztikus emissziós mintázatok, illetve azonosíthatók legyenek a klasszikus szuperelasztikus és a strain-glass viselkedés közötti különbségek. A vizsgálatokat kiegészíthetjük egyéb mérések (röntgendiffrakció, differenciális pásztázó kalorimetria) a fázisátalakulások részletesebb értelmezése céljából.

A kutatás várható eredményei hozzájárulnak az alakemlékező ötvözetek funkcionális tulajdonságait meghatározó alapvető mechanizmusok mélyebb megértéséhez, valamint elősegíthetik olyan SMA anyagok fejlesztését, amelyek fokozott fáradási ellenállással és stabilabb szuperelasztikus viselkedéssel rendelkeznek. A téma részletes iránya és módszertani kerete a kutatás előrehaladtával, az elért kísérleti eredmények alapján kerül pontosításra.

A szerkezeti átalakulások zajos jellegének vizsgálata acélokban

Az anyagokban végbemenő szerkezeti átalakulások nagy része nem folytonos jellegű. Klasszikus példák erre a ferromágneses anyagok mágnesezési folyamatai és a martenzites átalakulások. Ezekben az esetekben mágneses (Barkhausen) és akusztikus zajok keletkezhetnek. Ferromágneses martenzites anyagok esetében mindkét zajjelenség egyidejűleg felléphet. Ezek mellett még nagyon sok egyéb folyamat, mint pl. a plasztikus deformációk vagy egyes oxidációs folyamatok is eredményezhetnek akusztikus zajokat nem folytonos jellegükből eredően. A zajok mérése és analízise rendkívül érzékeny és hatékony eszköz a szerkezeti átalakulások kutatásánál a legkülönbözőbb anyagi rendszerek esetében.

Az ipari alkalmazások területén a vas-alapú ötvözetek meghatározó szerepet játszanak. A martenzites átalakulás eredményeként ezek az anyagok egyedülálló tulajdonságokat mutatnak. A mangántartalmú TRIP (transzformáció-indukált plaszticitás) acélokban végbemenő nem-termoelasztikus átalakulás rendkívül nagy képlékeny alakváltozási képességet eredményez nagy szilárdság mellett. Az ausztenit fázis ikerképződéssel történő képlékeny alakváltozása (TWIP, ikresedés indukálta plaszticitás) szintén hasonló kedvező tulajdonságokat eredményez. A plasztikus deformáció folyamata ezekben az anyagokba igen összetett, hiszen a klasszikus diszlokációmozgás mellett az előbb említett deformáció-indukált martenzites átalakulás, illetve az ikerhatár mozgás is párhuzamosan végbemegy. Mindegyik részfolyamat kisebb-nagyobb mértékben szakaszos jellegű, így akusztikus emissziót (AE) eredményezhet. Más vas-alapú rendszerekben (FeNiCoTi, FeNiAl or FePt stb.) termoeelasztikus martenzites átalakulás mehet végbe, ahol a belső határfelületek (elsősorban ikerhatárok) mozgása jelentős akusztikus aktivitással jár együtt. Amennyiben az átalakulás során a mágneses szerkezet is megváltozik, akkor mágneses zaj emissziója is lehetséges.

Az akusztikus és mágneses zajmérési technikák és a modern zajanalízis eredményeinek a felhasználása kiegészítve más eljárásokkal (DSC, mikroszkópia, röntgendiffrakció stb.) lehetővé teszi a nem folytonos jellegű átalakulások természetének pontosabb megismerését.

IV. Fizikai módszerek interdiszciplináris kutatásokban program

Témavezető: **Dr. Szikszai Zita**

PF4/412-94

Ionnyalábokon alapuló analitikai módszerek alkalmazása régészeti leletek és művészeti tárgyak vizsgálatára

A magfizikai gyorsítóknál előállított ionokat felhasználó roncsolásmentes módszerek, mint amilyen a PIXE (proton induced X-ray emission), a PIGE (proton induced gamma-ray emission), vagy az RBS (Rutherford backscattering) a művészeti tárgyak vagy a régészeti leletek vizsgálatára is alkalmazhatók. Ez elemanalízist jelent, vagyis meg kell határozni, hogy a mintában milyen elemek vannak jelen, és milyen koncentrációban.

Az analízis a történelemnek vagy a régésznek olyan kvantitatív információt szolgáltat, amelyik segíti őt a tekintett korban dolgozó művész, vagy használati eszközöket előállító mesterember munkamódszerének, megismerésében. Ezekre az ismeretekre a múzeumokban is szükség van restaurálások előkészítésénél és kivitelezésénél, a művészeti tárgyak valódiságának eldöntésében, eredetük meghatározásában. A modern lég- és egyéb szennyezések agresszív hatása veszélyezteti kulturális örökségünket. A szabadban lévő művészeti tárgyak eróziója, kopása közismert, de minden művészeti tárgy ki van téve ennek, függetlenül attól, hogy hol van. A szennyezés és az öregedés okozta kopási folyamatok tanulmányozása a legkülönbözőbb analitikai módszerek felhasználását igényli.

A doktori munka témája a fenti módszereknek régészeti leletekre való alkalmazása, az ezekkel kapcsolatos módszertani problémák megoldása.

A doktori témára elsősorban kísérleti érdeklődésű, fizika (esetleg kémia) szakos diplomával rendelkező jelentkezőt várunk.

Témavezető: **Dr. Molnár Mihály**

PF4/418-99

Atomerőművek környezeti hatásai

Az atomerőművek légkörbe emittált globális szennyezői közül a ^3H , ^{14}C , ^{85}Kr a legfontosabb. A trícium HTO és HT, a radiokarbon szénhidrogén és szén-dioxid formában kerül kibocsátásra. A globális szennyezők mérése céljából mintavevőket telepítettünk az atomerőmű kéménylevegőt ellenőrző rendszerére, melyek kémiai formák szerint monitorozzák a radiokarbon és trícium kibocsátást, valamint levegőmintát gyűjtenek ^{85}Kr mérése céljából. Mintaelőkészítő és dúsítási eljárásokat fejlesztettünk ki az aktivitáskoncentrációik meghatározása érdekében, melyeket proporcionális és folyadékszintillációs számlálási technikák segítségével mérünk. A környezeti levegőben és a talajvízben is monitorozásra kerül a trícium, valamint a radiokarbon aktivitáskoncentrációja. Szivárgáshidraulikai és szennyeződésterjedési modellt adaptáltunk a területre, valamint elkészültek a terület szennyezettségi térképei.

A kidolgozandó téma keretében feladat az eddigi mérési adatsorok feldolgozása, a légköri és vízi radionuklid transzport számítások összevetése a mért értékekkel, az

atomerőmű melletti figyelőkutak rendszeres mintázása. A környezeti radiokarbon, trícium és kripton-85 minták feldolgozása, aktivitáskoncentrációjuk meghatározása.

Témavezető: **Dr. Csige István**

PF4/421-02

Radon a mofettákban

A vulkáni utóműködés végső terméke a gáz alakú széndioxid, a száraz mofetta. Ilyen például Erdélyben a Torjai-Büdös-barlang vagy Magyarországon a mátraderecskei széndioxid-gázszivárgás is. A mélységi eredetű gáz útja során a kőzetekből és a talajból különböző radonizotópokat is vesz fel. A felszíni radonexhaláció változása így nyomjelzője lehet a széndioxid feláramlási területeknek, amelyek a felszínközeli törések mentén fordulnak elsősorban elő. A mofettákat ugyanakkor száraz széndioxid-fürdő formájában gyógyászati célokra is alkalmazzák, ahol számolni kell a széndioxid mellett jelen lévő radonnal kapcsolatos sugárterhelések kockázatával is. Ennek a munkának a célja a mofettákban és széndioxid-fürdőkben előforduló radonizotópok térbeli és időbeli változásának vizsgálata és az eredmények környezetfizikai, környezet-geokémiai és környezeti-sugáregészségügyi értelmezése.

Témavezető: **Dr. Palcsu László**

PF4/427-08

Cseppkövek folyadékzárvaiban lévő nemesgázok mint a múltbeli klíma vizsgálatának új eszköze

A közeljövő éghajlatában bekövetkező változásokat annál pontosabban lehet megjósolni, minél részletesebben ismerjük a múltban megtörtént változásokat és annak okait. Ezért vált a múltbeli klíma kutatása napjaink egyik legaktuálisabb, legfontosabb kutatási területévé. Számos módszert alkalmaznak a múltbeli klimatikus viszonyok felderítésére, melyek mindegyike valamiféle geológiai képződmény vizsgálatához kötődik. A módszerek közös jellemzője, hogy a minták hordozta valamilyen tulajdonságból közvetett, tapasztalati úton juthatunk éghajlat-információhoz. Az egyetlen közvetlen, azaz abszolút hőmérséklet-meghatározási módszer, a felszín alatti vízben oldott nemesgázok koncentrációjának mérésén alapul. A módszer alapja, hogy a Ne kivételével a nemesgázok oldhatósága vízben – különösen a xenoné – a hőmérséklet emelkedésével erősen csökken. A vízben oldott nemesgáz koncentrációját az oldhatóság és a parciális nyomás szorzata adja meg. Mivel a nemesgázok parciális nyomása levegőben ismert, a vízben oldott nemesgázok koncentrációjából a beoldódás hőmérséklete kiszámítható.

A cseppkövek folyadékzárvaiban oldott nemesgázok koncentrációja ugyanígy a képződésük idején uralkodó környezeti hőmérsékletet tükrözi, tehát a cseppkőminták kormeghatározása és folyadékzárvaikban oldott nemesgázok koncentrációja alapján a múltbeli klímaváltozásokról elvileg közvetlen információ nyerhető. A PhD munka során a hallgató részt vesz a cseppkövek folyadékzárvaiban oldott nemesgázok meghatározására szolgáló minták előkészítésében és a nagy pontosságú tömegspektrométeres mérés módszerének kidolgozásában. Megvizsgálja, hogy a cseppkövek folyadékzárvaiban oldott nemesgázok mennyire alkalmasak a barlanghőmérséklet tanulmányozására. Ehhez laboratóriumi karbonát-mintákat készít, illetve recens cseppkőmintákat elemez, és a mérések során kapott nemesgáz-koncentrációkból beoldódási hőmérsékleteket számol, amelyeket

összevet a cseppkő képződése során uralkodott tényleges hőmérséklettel. Ezt követheti idősebb cseppkövek vizsgálata, a kapott eredmények értelmezése a múltbeli klímaváltozással kapcsolatban.

Témavezető: **Dr. Uzonyi Imre**

PF4/429-08

Ionsugaras mikroanalitika a geológiai kutatásban

A geológiai minták általában krisztallitok és amorf komponensek komplex halmazai. Vizsgálatukkal következtetéseket vonhatunk le a Föld belsejében zajló geokémiai folyamatokra, valamint a Föld felszínét érő behatásokra. Kémiai összetételük elemzése alapját képezi nyersanyag lelőhelyek feltárásának és ásványok feldolgozásának.

A néhány MeV energiájú gyorsító berendezésekre alapozott ionsugaras analitikai technikákat (részecske-indukált gamma-/röntgenemisszió: PIGE/PIXE, Rutherford-féle visszaszórás analízis: RBS, magreakció analitika: NRA) roncsolásmentességük, kiváló érzékenyséjük, laterális és mélységi felbontóképességük, valamint a standardnélküli analízis lehetősége miatt, egyre szélesebb körben használják a geológiai kutatásban. Pásztázó nukleáris mikroszondák és az ionsugaras módszerek együttes alkalmazásával elvileg lehetőség van az elemi összetétel meghatározása a mikroszkópikus méretek tartományáig $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ síkbeli és — elemtől, mintától függően — 10-20 nm mélységi felbontással, valamint 1-100 ppm közötti detektálási határértékkel.

Együttműködésben a Debreceni Egyetem Ásvány- és Földtani Tanszékével. Ionsugaras módszerekkel különböző lelőhelyről származó obszidián minták összehasonlító geokémiai vizsgálatát végeztük el, ásványokat és kőzetek analizáltunk. Jelentős erőfeszítéseket tettünk kozmikus mikroobjektumok (mikrometeoritok, szferulák) valamint meteoritok becsapódása során képződő ún. impak anyagok vizsgálata terén is (pl. Barringer-Kráter, Arizona).

Ezen kutatások inspirálják az ionsugaras analitikai eljárások folyamatos továbbfejlesztését érzékenység, detektálható elemek tartománya, pontosság, laterális feloldás és detektálási küszöbök javítása tekintetében. Ezért célul tűztük ki a 2D kvantitatív mikroanalitikai eljárások (elsősorban a micro-PIXE technika) elvi-fizikai alapjainak a vizsgálatát, az adatbázisban használt alapvető paraméterek egy részének pontos kísérleti meghatározását.

Témavezető: **Dr. Csige István**

PF4/430-09

Építési területek radonveszélyességének jellemzése

A lakosság természetes forrásokból eredő sugárterhelésének legnagyobb része a lakások légterében lévő radon gáz bomlástermékeinek belégzéséből származik. Ez a sugárterhelés szerepet játszik a tüdőrák kialakulásában. A radon elleni hatékony védelem többek között megkívánja, hogy a jövőben felépülő épületek esetében már az épület tervezése, építése során figyelemmel legyünk arra, hogy a majdani épület radon szempontjából is biztonságos legyen. Mivel a kiemelkedően magas radontartalomért az esetek nagy többségében a talajból az épületbe áramló radon gáz a felelős, ezért a jövőben épülő épületek esetében nagy jelentősége lehet annak, hogy mennyire radonveszélyes az adott építési terület. Ennek a munkának a célja, hogy továbbfejlessze az építési területek radonveszélyességének meghatározására szolgáló eljárásokat.

Alternatív módszerek fejlesztése a légkör fosszilis CO₂ hányadának mérésére

A jelenleg használatos módszereknél egyszerűbb és olcsóbb eljárások kifejlesztése lenne kívánatos a légköri CO₂ fosszilis tüzelőanyagokból származó hányadának becslésére. Jelenleg a világon kevesebb, mint tíz olyan mérőállomás van, amely a fenti paramétert a Kyotói Egyezményben előírt pontossággal tudja mérni. A cél olyan mintavételi eljárás(ok) kifejlesztése, amelyek lehetővé teszik hosszabb időintervallumot reprezentáló levegőmintákban a fosszilis CO₂ direkt mérését. Megvizsgálandó, hogy a levegő CO₂ tartalmának ismerete milyen feltételek mellett ad reális becslést a CO₂ fosszilis hányadára. E célból kifejlesztésre kerül egy nagy pontosságú online monitoring rendszer, amelynek segítségével a CO – fosszilis CO₂ kapcsolat vizsgálható regionális szinten. Megvizsgálandó továbbá, hogy a faévgyűrűk ¹⁴C aktivitása felhasználható-e az atmoszféra múltbeli fosszilis CO₂ tartalmának becslésére. Ehhez olyan magyar (K-Pusztai és Hegyhátsági) és külföldi (Kosetice, Csehország) megfigyelőállomások közeléből származó fák évgyűrűinek ¹⁴C aktivitásának mérését kell elvégezni, ahol a múltban az atmoszférikus CO₂ koncentráció mérése folyamatos volt. A faévgyűrűk radiokarbon tartalmának mérése AMS módszerrel egyelőre külföldi laboratórium(ok)ban, a minta-előkészítés az ATOMKI-ban történne. Ennek alapján várhatóan rekonstruálhatók lesznek az atmoszféra fosszilis CO₂ tartalmának az elmúlt évtizedekben bekövetkezett változásai.

Protonnyalábos mikromegmunkálás

A mikroalkatrészek, mikroérzékelők, mikrogépek és mikro-elektromechanikus rendszerek gyártástechnológiája dinamikusan fejlődő terület, világszerte jelentős kutatási kapacitást képvisel. Jelenleg számos technológiát alkalmaznak mikrostruktúrák előállítására (pl. optikai litográfia, elektronnyalábos litográfia, fókuszált alacsony energiájú ionnyalábos megmunkálás, stb.). Ezen módszerek nagy része vékonyréteg mikrostruktúrák előállítására képes, mivel az optikai, az elektron és az alacsony energiájú ionszondák nyalábjainak behatolási mélysége általában mindössze néhány mikrométeres nagyságrendű a reziszt anyagokban. A vékony mikroalkatrészek (pl. gyorsulásmérők, giroszkópok, stb.) gyártása sikeresnek mondható, azonban egyre növekvő igény mutatkozik valódi 3 dimenziós mikrostruktúrák előállítására is (pl. mikrocsatornák, folyadék áramlásmérők, szelepek, mikro-üregrezonátorok, stb.)

A magas oldalarányú mikromegmunkálás (HARM - High Aspect Ratio Micromachining) technológiák lehetővé teszik 3 dimenziós, vastag mikrostruktúrák készítését általában olyan ionizáló szondák felhasználásával, amelyeknek nagy a behatolási mélysége a rezisztben. Két ilyen módszer a LIGA (Lithographie Galvanoformung Abformung), amely röntgensugárzást alkalmaz; és a néhány MeV energiájú protonokat használó PBW (Proton Beam Writing), a behatolási mélység mindkét esetben ~100 µm. HARM módszerekkel már számos mikrostruktúra készült (pl. mikroprés, fogaskerekek, csatornák, stb.)

A LIGA eljárás során szinkrotronból származó nagy intenzitású röntgensugárzás halad át egy megfelelően kialakított maszkon, majd az átjutó fotonok hozzák létre a mintázatot az erre alkalmas reziszt anyagban. Ezzel szemben a PBW direkt írásos technika, így azzal az előnnyel rendelkezik, hogy nincs szükség maszkra. Tehát a PBW ideális eszköz a reziszt anyagok kutatásához, és prototípus mikrostruktúrák készítéséhez. Jelenleg egy NKTH pályázat áll elbírálás alatt, amelynek célja röntgen maszkok készítése a LIGA-hoz.

A témavezető Szingapúrban töltött posztdoktori tanulmányútja során részt vett a PBW módszer kifejlesztésében, majd hazatérve, Debrecenben is meghonosította ezt a módszert.

Témavezető: **Dr. Fenyvesi András**

PF4/433-10

Nagyenergiájú neutronok okozta sugárkárosodási és sugárvédelmi problémák

Nagyintenzitású gyorsneutron komponens tartalmazó kevert terek például az alábbi területeken játszanak komoly szerepet:

- nukleáris energetika: hasadási és fúziós reaktorok, radioaktív hulladékokat átalakító rendszerek,
- anyagszerkezeti kutatási célokat szolgáló nagyintenzitású gyorsneutron források: SNS, J-PARC, ESS, IFMIF, stb.,
- nagyenergiájú részecskegyorsítók és részecskefizikai kísérletek környezete,
- világűr kutatás,
- repüléstudomány,
- katonai alkalmazások,
- sugárterápia.

A sugárzási környezetben levő közegek atommagjaival kölcsönható neutronok egyrészt atomkilöködési kaszkádok révén sugárkárosodási folyamatokat indíthatnak el, másrészt a magreakciókban radioizotópok is keletkezhetnek, melyek a közegek felaktiválódását is eredményezhetik.

A tervezett kutatómunka elsősorban a gyorsítók elemeiben és környezetében felmerülő sugárkárosodási és sugárvédelmi problémák modellezését és kísérleti vizsgálatát célozza meg, különös tekintettel az ESS (European Spallation Source) szempontjából fontos problémákra.

Témavezető: **Dr. Kun Ferenc**

PF4/436-11

Szilárdtestek törésének és fragmentációjának vizsgálata

A rendezetlen mikroszkópikus tulajdonságokkal rendelkező anyagok külső terhelés alatt bekövetkező törése nagyon fontos tudományos és technológiai probléma, amelynek elméleti leírása a statisztikus fizika és a számítógépes fizika számára is tartogat kihívásokat. Általános tapasztalat, hogy a rendezetlen mikroszkópikus tulajdonságokkal rendelkező szilárdtestek külső terhelés alatt, egy meghatározott kritikus terhelés értéknél elvesztik integritásukat és két vagy több darabra törnek. A törés folyamata és eredménye, a test jellemzői mellett, erősen függ a terhelés sebességétől is. Lassan növekvő terhelés esetén a szilárdtest tipikusan két, közel azonos méretű darabra esik szét (*kvázisztatikus törés*), viszont

ha nagy energiát közlünk egy testtel rövid idő alatt, akkor az nagyon sok apró darabra hullik (*fragmentáció*). A dinamikus törés jelensége átmenetet képez a kvázisztatikus törés és a fragmentáció között. *Dinamikus törés* akkor jön létre, ha egy testtel rövid idő alatt nagymennyiségű energiát közlünk, de a határfeltételek biztosítják, hogy egyetlen repedés keletkezik, amely nagy sebességgel terjed.

A doktori munka célja rendezetlen mikro-tulajdonságokkal rendelkező szilárdtestek törésének és fragmentációjának vizsgálata. A kutatómunka elsősorban elméleti jellegű, de az elméleti vizsgálatokat kísérleti csoportokkal szoros együttműködésben tervezzük. A jelölt munkájának részét képezi kísérleti eredmények feldolgozása, illetve részvétel a kísérletek tervezésében és kivitelezésében. A törés és fragmentáció jelenségének elméleti vizsgálata számos olyan problémát vet fel, amelyeket egzakt, analitikus módszerekkel nem lehet kezelni, így az elméleti megközelítések jelentős része számítógépes szimulációra épül. A szimulációk során mind determinisztikus (molekuláris dinamika), mind sztochasztikus (Monte Carlo) módszereket is felhasználunk.

Témavezető: **Dr. Kun Ferenc**

PF4/437-11

Lavinák dinamikája és statisztikus jellemzői komplex rendszerekben

A nagyszámú, kölcsönható elemből álló, hajtott, disszipatív rendszerek közös tulajdonsága, hogy a külső hajtás eredményeként metastabil állapotba kerülnek, amelytől egy relaxációs mechanizmussal szabadulnak meg. Míg a hajtás egy lassú, sima függvényekkel leírható folyamat, addig a relaxáció gyorsan játszódik le és mikroszkópikus szinten a rendszer elemeinek lavinaszerű átrendeződésével jár. Ilyen dinamikai jellemzőkkel rendelkezik a Földkéreg, vagy egy mechanikai terhelésnek kitett heterogén szilárd test, ahol a hajtást a lassan változó terhelés, a relaxációt pedig földrengések, illetve repedések lavinaszerű létrejötte jelenti.

A doktori munka keretében lavinák kialakulásának dinamikáját, valamint statisztikus jellemzőit vizsgáljuk komplex rendszerekben. A földrengések és a heterogén anyagok kúszó törésének analógiájára építve olyan statisztikus fizikai modellt dolgozunk ki, amely képes leírni a lavinákat jellemző valószínűség eloszlások univerzális aspektusait. A doktori munka fontos célja annak tisztázása, milyen körülmények között lehetséges a lavinák dinamikája alapján előrejelzést adni a közelgő katasztrófális törésről, illetve egy nagyerejű földrengésről. A kutatómunka elsősorban elméleti jellegű, analitikus számításokat, valamint a Monte Carlo és molekuláris dinamikai módszerekre épülő számítógépes szimulációt igényel. A kutatómunkát szoros együttműködésben végezzük kísérleti partnerekkel, így a feladatok részét képezi mérési adatok feldolgozása is.

Témavezető: **Dr. Kertész Zsófia**

PF4/438-11

Légköri aeroszol jellemzése nukleáris mikroanalitikai módszerekkel

A levegő minőség egyik legfontosabb jellemzője a légköri aeroszol (PM10, PM2.5) koncentráció. Az emberi egészségre gyakorolt negatív hatásuk valamint a Föld sugárzási egyensúlyának alakulásában játszott szerepük miatt a légköri aeroszol részecskék tulajdonságainak pontos, kvantitatív felmérése már nemcsak a kutatók számára fontos, hanem az egyes kormányok és hatóságok számára is.

A doktori munka célja légköri aeroszol jellemzése és az embert érő aeroszol-terhelés vizsgálata. A munka szervesen kapcsolódik az MTA Atommagkutató Intézetében ionnyaláb analitikai technikákon alapuló aeroszol kutatáshoz. A PhD hallgató feladata bekapcsolódni ezekben a kutatásokba, mintavételi, mintapreparálási és analitikai módszerek fejlesztése, és a légköri aeroszol komplex jellemzése.

Egyik fő kutatási irány a meglévő, Európában egyedülálló, 25 éves múltra visszatekintő adatbázis feldolgozása (pl. hosszú távú tendenciák, szezonális változások megállapítása, hosszú távú transzportfolyamatok vizsgálata valamint forráselemezés statisztikai módszerekkel).

Feladat még a módszerfejlesztés terén a levegőre kihozott ion mikronyaláb megvalósítása, tesztelése és alkalmazása légköri aeroszol kutatásban.

Témavezető: **Dr. Nándori István**

PF4/439-12

Mágneses nanorészecske rendszerek relaxációjának elméleti vizsgálata

Mágneses nanorészecskék relaxációjának hőtermelés céljából végzett vizsgálata, azaz a lokalizált lázterápia ötlete több évtizedre tekint vissza. A szervezetbe juttatott mágneses nanorészecskék külső változó mágneses tér hatására hőt termelnek, ami felhasználható a tumorsejtek elpusztítására. A lokalizált hőkezelés sok esetben ígéretes kiegészítő kezelési eljárás is egyben, mivel sugárterápiával kombinálva a sejtciklus más-más szakaszára hatnak. Bizonyos német klinikákon már gyakorlatban is alkalmazzák a mágneses lázterápiát mégis eddig komoly akadályba ütközött hatékonyságunk elfogadható szintre való emelése. Ennek az oka, hogy a szervezetbe juttatott mágneses nanorészecskék, többnyire gyorsan kiürülnek. Ezért fontos kérdés a "hőtermelési hatékonyság" növelése például fizikai paraméterek optimalizálásával.

A jelen kutatási téma célkitűzése a mágneses lázterápia hatékonyabbá tétele; konkrétan egy újonnan javasolt (J. Racz, P. F. de Chatel, I. A. Szabo, L. Szunyogh, I. Nandori, Phys. Rew. E 93, (2016) 012607) külső gerjesztő tér tanulmányozása. Az említett publikációban közölt előzetes eredmények alapján, ez az új típusú gerjesztő tér hatékonyabb hőtermelést tesz lehetővé. A feladat, a kísérleti megvalósításhoz elengedhetetlen statikus tér és termikus fluktuációk figyelembe vétele.

Témavezető: **Dr. Csige István**

PF4/440-13

Felszín alatti szennyezett áramlások hidrodinamikai modellezése

Az utóbbi években egyre nagyobb figyelem fordult a felszín alatti vizeknek veszélyes (többek között radioaktív) ipari hulladékokkal történő elszennyeződése felé. Ezek a kutatások nagymértékben támaszkodnak a szennyezők terjedését leíró modellszámításokra. A tervezett kutatás célja ilyen koncepcionális földtani-fizikai, matematikai, numerikus és számítógépes modellek fejlesztése és alkalmazása egyes hazai radioaktív-hulladéktárolókra. A feladat kidolgozására rendelkezésre állnak véges differenciák (Visual Modflow) és végeselem (COMSOL Multiphysics, Subsurface Flow Module) módszereket használó számítógépes alkalmazások.

Új paleoklimatológiai, izotóphidrológiai vizsgálati módszerek fejlesztése és alkalmazása

Kutatásaink alapvetően azokra az érzékeny és pontos analitikai eljárásainkra épülnek, melyeket az utóbbi évtizedekben honosítottunk meg intézetünkben. Ezen módszereket szeretnénk továbbra is fejleszteni, illetve új vizsgálati eljárásokat szeretnénk kidolgozni, melyeket aztán izotóp-hidrológiai és paleoklimatológiai kutatásokban alkalmaznánk.

Terveink között szerepelnek az alábbi témakörök:

- Karbonátok korolása $^{230}\text{Th}/^{234}\text{U}$ módszerrel, a módszer pontosságának növelése, kettős spike bevezetése, különféle mérési protokollok kidolgozása, a korolási tartomány határainak kiszélesítése.
- Cseppkövek folyadékzárványainak hidrogén- és oxigénizotóp-összetételének vizsgálata a múltbeli barlangi környezetfejlődés rekonstruálása érdekében.
- Klímarekonstrukció felszín alatti vizek beszívárgási hőmérsékletei és korolása alapján különféle időskálán.
- Módszerfejlesztés a felszín alatti vizek lítium izotóparányának ($\delta^7\text{Li}$) meghatározása céljából, mélységi vizek lítiumtartalmának vizsgálata, a lítium fejlődéstörténetének rekonstrukciója..

Makroszpikulák szerepe a Nap légkördinamikájában

A Naplégkör magas, több millió fokos hőmérséklete a modern asztrofizika egyik megoldatlan rejtélye, ami számos nemzetközi kutatóintézet programjában központi helyen szerepel (ESA, NASA, JAXA, etc...). A javasolt kutatási téma ebbe az erőfeszítésbe illeszkedik, mégpedig a Naplégkör lokális dinamikájának vizsgálatára koncentrálna, az ún. makroszpikulára fókuszálva. A makroszpikulák a Nap kromoszférájában feltűnő dzset-szerű, elongált mágneses plazmaszerkezetek, melyek energiát szállítanak néhány száz km/s sebességgel a Nap felsőbb légkörébe. Jellemző élettartamuk 15-25 perc, hosszuk akár 80 Mm is lehet, míg átmérőjük igen csekély (1-2 Mm) méretükhöz képest. Két kategóriába csoportosíthatók, attól függően hogy a nyílt mágneses erővonalakkal rendelkező koronalyukakban, vagy a zárt erővonalas nyugodt Nap térségben keletkeznek.

Az SDO (Solar Dynamics Observatory műhold, amelynek a Témavezető a NASA által meghívott tudományos tanácsadója) Atmospheric Imaging Assembly (AIA) képalkotó távcsöve segítségével a makroszpikulák fizikai tulajdonságait, illetve azok napciklus során történő fejlődését kívánjuk meghatározni a projekt során. Következő lépésben a szpikulák maximális hosszúságában a nemrégiben általunk felfedezett közel kétéves periódust kívánjuk nagyobb statisztikán megerősíteni, illetve más makroszpikuláris jellemzőkben is kimutatni. A fenti vizsgálatot az AIA kamera összes hullámhosszaira (azaz a Naplégkörben lévő magasság függvényében) kiterjesztve fogjuk általánosítani. A Nap koronafűtése szempontjából elengedhetetlenül szükséges meghatározni, hogy ezek a dzsetek milyen mennyiségű nem-termális energiát szállítanak a Nap légkörének alsó rétegeiből a felsőbb régiókba, illetve a Napszélbe. Ennek keretében fontos paraméter a makroszpikulák rotációs sebessége-profilja. Ehhez a nemrég felbocsájtott Interface Region Imaging Spectrograph (IRIS) műhold adatait fogjuk vizsgálni és összevetni az SDO által mért adatokkal.

Az szoláris MHD elmélete szerint a makroszpikulák számára az Nap Tranzíciós Rétege egy vékony, membrán-szerű elasztikus felső határréteg. Amikor a felszálló makroszpikulák elérik a Tranzíciós Réteget, egy horizontálisan propagáló hullám keletkezik. Ezt a jelenséget Transition Region Quake-nek (TRQ) nevezik, amelynek gyaníthatóan *kiemelkedő* szerepet játszhatnak a Naplégkör fűtésében. Ha a makroszpikulák és a TRQ közötti kapcsolat feltárt részleteiben, jobban megismerhetnénk a plazmafűtési szempontból fontos energiatranszport módját a Nap légkörén keresztül. A jelen projekt utolsó fázisa, megvizsgálni hogy milyen módon jönnek létre a makroszpikulák illetve, milyen kapcsolatban állnak a Nap Konvekciós Zónájában működő mágneses napdinamóval és annak ciklusaival. Ehhez összetett numerikus MHD szimulációkra van szükség melyet a SAC (Sheffield Advanced Code) segítségével kívánunk elvégezni. Végezetül, de nem utolsó sorban, a fenti kutatás fontos része a Debreceni Napfizikai Obszervatórium műszereivel végzett észlelési napfolt-adatok elemzése, melyek szoros összefüggésben vannak a szpikulák eredetével.

Témavezető: **Dr. Baranyi Tünde**

PF4/443-17

A naptevékenység és szoláris irradiancia vizsgálata

A Nap elektromágneses sugárzási teljesítménye, az ún. szoláris irradiancia egyike a Föld klímarendszerét meghatározó legfontosabb energiaforrásoknak. Adatsora egyike a leghosszabb és legalapvetőbb klíma-adatoknak, amelyeket űreszközökkel mértek. A spektrális irradiancia (Solar Spectral Irradiance, SSI) vagy a teljes (a spektrumra integrált) szoláris irradiancia (Total Solar Irradiance, TSI) változása befolyásolhat egy sor sugárzási, dinamikai vagy kémiai folyamatot a Föld légkörében, és hozzájárulhat a klímaváltozáshoz. Az űreszközökön végzett mérések alapján a TSI $\sim 0.1\text{-}0.3\%$ mértékű változékonyságot mutat a különböző időskálákon, míg az SSI változásának mértéke hullámhosszfüggő. Jelentős erőfeszítések történnek arra vonatkozóan, hogy a változásokat mérjék, modellezzék, és tisztázzák ezekben a Napon található mágneses alakzatok szerepét. Jelenleg nincsen fizikai modellje ezeknek a változásoknak, de fél-empirikus és ú. n. helyetteseken alapuló (proxy) modelleket fejlesztenek, amelyek lehetővé teszik, hogy olyan hullámhossz-tartományban is vizsgáljuk a hatásokat, amelyekre vonatkozóan nincsenek direkt mérések, valamint ezek segítenek kiterjeszteni a szoláris-klimatikus kapcsolatok vizsgálatát visszafelé azokra az időkre, amikor még nem történtek közvetlen irradiancia-mérések. A proxy modellek a napfoltok sötétségét valamint a fáklyák és kisebb mágneses alakzatok fényességét jellemző napi indexeken alapulnak, és a modellek hatékonysága nagyban függ az indexek pontosságától. Ezekre a jelenségekre nézve a debreceni Napfizikai Obszervatórium naptevékenységi katalógusai a legteljesebbek. A jelölt egyik feladata az lesz, hogy a katalógusok alapján a modellek bemenő adatait javítsa. A jelölt másik feladata az lesz, hogy olyan statisztikai vizsgálatokat végezzen és proxy--modelleket készítsen, amelyek a szoláris alakzatok hozzájárulására vonatkozó nyitott kérdésekre keresik a válaszokat.. Például, a témavezető korábbi eredményei azt mutatják, hogy egy napfoltcsoport hozzájárulása nemcsak a foltok területétől és kontrasztjától függ hanem a foltcsoport fejlődési stádiumától és morfológiájától is. Többek között a jelölt feladata lesz az is, hogy ezeket az eredményeket megerősítse vagy cáfolja a új, nagy pontosságú irradiancia-adatok felhasználásával, pl. azokkal, amelyet a 2017 októberében felbocsátásra kerülő Total and Spectral Solar Irradiance Sensor (TSIS) műhold fog mérni.

Magnetohidrodinamikai hullámok a naplégykörben

Nagy felbontású földfelszíni- és világűrbeli észlelések segítségével a naplégykörben mindenütt megfigyelhetők MHD hullámok. Igen fontossá teszi őket, hogy ezek nyújthatják a naplégykör plazmafűtésének domináns forrását, amely a modern asztrofizika egyik kulcsfontosságú talánya. A naplégykörbeli MHD-hullámok kutatásának másik lényeges vonatkozása, hogy ahol e hullámok terjednek, ott egyúttal fel is használhatók a Nap mágneses plazmájának diagnosztikai vizsgálatára. E kutatási program célja, hogy kiterjessze az inhomogén hullámvezetőkre vonatkozó jelenlegi MHD-hullámelméletet. Az elmélet alkalmazására több szoláris jelenség esetében sor kerül, a pórusoktól a fényes mágneses pontokon át, a szpikulákig.

A kutatás magában foglal matematikai modellezést, valamint nagy spektrális, tér- és időbeli felbontású naptávcsövek adatainak elemzését. A megalkotott MHD-elmélet igazolása az analitikus eredmények észlelésekkel való alátámasztása által történik.

E téma kiváló matematikai modellezési képességeket igényel, melyeknek földfelszíni- vagy űrtávcsöves megfigyelések iránti érdeklődéssel kell társulniuk. A kutatás nagy valószínűséggel együttműködést tesz szükségessé a Sheffieldi Egyetem (UK) Solar Physics and Space Plasma Research Centre (SP2RC) központjának kollégáival. Így a hallgatónak némi időt az SP2RC-nél kellene töltenie, Erasmus+ vagy egyéb megoldás keretében.

Korszerű űridőjárás-előrejelzési módszerek fejlesztése

A flerek és koronakidobódások (CME-k) keletkezése az aktív régiók (AR) felett annak ellenére sem jól értett folyamat, hogy milyen fontos szerepe van a Nap-Föld kapcsolatokban, így különösen az emberiség és a kifinomult technológiai rendszerek védelmében a Napról gyakran hirtelen távozó, nagy sebességű töltött részecskék jelentette veszéllyel szemben. A Naprendszer e legnagyobb energiájú kitörései a 11 éves napciklust követik. A ciklus maximumának elérésekor számos, veszélyesen nagy intenzitású fler és CME történik (kb. havi 2-3). Legtöbbjük a napfoltcsoportokat övező mágnesesen aktív régiókból származik. Az űridőjárás-előrejelzésbeli előrelépés érdekében a hallgatónak általánosítania kell az előrejelzési módszert. Ehhez azt az átmeneti régióra és az alsó-koronára szükséges 3D-ban alkalmaznia, hogy azonosítani lehessen a fler/CME kilövélés előrejelzéséhez tartozó optimális magasságot a naplégykörben. Ezáltal a jelenlegi előrejelzési lehetőségek jelentős megnövelése várható, ami nagy gyakorlati fontossággal bír technológia-uralta világunkban. A hallgató elsősorban a következő célkitűzésekkel végzi a kutatást: (i) a pre-fler/CME dinamika és a kapcsolódó fizikai folyamatok vizsgálata az AR-ek feletti topológia felépítése által 3D-s naplégykörben, (ii) ezek időfejlődésének követése WGM alkalmazásával. E feladatok végrehajtása érdekében a hallgató (i) megismeri a potenciálú és a nemlineáris tér extrapoláció technikáit; (ii) elkészíti AR(-ek) 3D-s mágneses térképezésének adatbázisát, és (iii) új generációs, nagy tér- és időbeli felbontású napfolt-adatokat használ, melyeket földi- és űreszközök által készített magnetogramok, fehér fény és EUV megfigyelések kombinációja, többek közt az új Gyulai Napfizikai Observatórium használata biztosít.

A témához szükséges a földi- vagy űrtávcsöves megfigyelések készítése iránti érdeklődés. Ennélfogva valószínű, hogy a hallgatónak ilyen jellegű munkát kell végeznie

földfelszíni napkutató obszervatóriumokkal. A kutatás valószínűsíthetően együttműködést igényel a Sheffieldi Egyetem (UK) Solar Physics and Space Plasma Research Centre (SP2RC) központjának kollégáival. Ennélfogva a hallgatónak némi időt az SP2RC-nél kellene töltenie, Erasmus+ vagy egyéb megoldás keretében.

Témavezető: **Dr. Erdélyi Róbert**

PF4/446-18

Napfáklyák fejlődésének vizsgálata a napciklus során

A Naplégkör fáklyáinak keletkezése és azok tulajdonságainak változása a 11 éves napciklus során annak ellenére sem jól ismert fizikai folyamatok, jóllehet a fáklyák fontos információkat szolgáltatathat a Nap globális mágneses tere fejlődéséről. A napciklus és a napfáklyák közötti kapcsolat egy rendkívül izgalmas kutatási téma, hiszen rávilágíthat az űridőjárást szabályozó globális mágneses tér és az azzal szorosan összefüggő napaktivitás-előrejelzés rejtett folyamataira. Ezáltal, a jelenlegi előrejelzési lehetőségek jelentős javulása várható, ami komoly gyakorlati fontossággal bír GPS-alapú modern, technológia-uralta világunkban.

A legtöbb napfáklya a napfoltcsoportokat övező mágnesesen aktív régiókból származik. Azonban, a napciklus időbeni fejlődése során, a fáklyák kialakulási helye migrál az egyenlítői régiókból a pólusok felé. Az így kialakult migrációs utak időbeli és térbeli koherenciákat is mutatnak, ami jelenleg egy teljesen új és feltérképezetlen kutatási terület.

A hallgató legfőbb célja ezen migrációs koherenciák statisztikus feltérképezése, megértése és modellezése. A hallgató elsősorban a következő célkitűzésekkel végzi a kutatást: (i) fáklyamigrációk topológiai struktúrája és azok kinematikai vizsgálata a Nap felszínén, ill. (ii) ezek evolúciójának analízise és modellezése.

E feladatok végrehajtása érdekében a hallgató (i) megismeri a szükséges szakirodalmat, különös tekintettel a Nap hosszútávú globális mágneses tere kialakulásának és fejlődésének modelljeire (dinamó elmélet, ill. a Nap mágneses tere új, kettős-dinamó elmélete); (ii) elkészíti egy napciklus során felbukkanó fáklyák adatbázisát; (iii) újgenerációs, nagy tér- és időbeli felbontású napfáklya-adatokat használ, melyek földi- és űreszközök által készített magnetogramok és fehér fény megfigyelések kombinációja. Utóbbit, többek között, az új Gyula-i Bay Zoltán Napfizikai Obszervatórium (GSO) Solar Activity Magnetic Monitor (SAMB) műszere biztosítja; ill. (iv) elemezi, értelmezi és modellezi a kapott adatokat a kettős-dinamó elmélet függvényében.

A témához szükséges a földi- vagy űrtávcsöves megfigyelések készítése iránti érdeklődés. Ennélfogva elvárt, hogy a hallgatónak ilyen jellegű munkát kell végeznie földfelszíni napkutató obszervatóriumokkal. A kutatás együttműködést igényel a Sheffieldi Egyetem (UK) Solar Physics and Space Plasma Research Centre (SP2RC) központjának kollégáival. Ennélfogva, a hallgatónak némi időt az SP2RC-nél kellene töltenie, Erasmus+ vagy egyéb megoldás keretében.

Izotópos módszerfejlesztés és alkalmazása természetes- és antropogén szénforrások azonosítására

A kutatás keretében a legkorszerűbb stabilizotóp és radiokarbon analitikai módszerekhez fejleszt mintavételi, minta-előkészítési és mérési eljárásokat, annak érdekében, hogy azonosítsa a különböző természetes- és emberi eredetű szénforrások jelenlétét a vizsgált közegekben. A vizsgálatok tervezett fő célpontjai a különböző szennyezettségű területekről származó talaj- és rétegvíz, a levegő illetve aeroszol, a növények valamint egyes ipari termékek és hulladékok. Ezekben belül egyes kémiai formák izotópanalitikai célú elválasztási technikájának módszerfejlesztésére is sor kerül. A munka célja a fosszilis-, radioaktív- és biológiai eredetű szénforrások eddigieknél pontosabb kvantitatív kimutatása a fenti közegekből, többek között az emberi szennyezés és hatásainak felmérése érdekében, illetve az üvegházhatású gázok légköri mennyisége időbeli alakulásának és térbeli eloszlásának jobb megismeréséhez. A munka keretében a kutatóhelyen bevezetésre kerül a gyorsító tömegspektrométeres (AMS) radiokarbon mérések esetében a gázionforrásos módszer alkalmazása a fenti mintatípusokra, ami lehetővé teszi az 0,01-0,1 mg szénmennyiségek ^{14}C mérését. A szén-dioxid mellett, a légköri metán és szén-monoxid stabilizotópanalízise érdekében bevezetésre kerülnek lézerspektroszkópiai (Cavity Ring-Down Spectroscopy) módszerek is a laboratóriumban.

Ionsugárzás fizikai és kémiai hatásainak vizsgálata különböző anyagokban, valamint ezek alkalmazása

Ismeretes, hogy ionizáló sugárzás és anyag kölcsönhatása során különböző sugárzás indukált folyamatok játszódnak le, melyek az anyag kémiai és fizikai megváltozásához vezetnek. A nehéz töltött részecskék és molekulák közötti ütközések során végbemenő alapfolyamatok viszont még nem teljesen feltártak, annak ellenére, hogy e tudás igen fontos lenne számos alkalmazási területen, mint például űrkutatás, orvosi alkalmazások (pl. ionnyaláb terápia) vagy anyagtudomány. Az ion besugárzás során egy adott anyagból kialakuló végső termékek a reaktív közttermékek képződésétől és reakcióitól függenek (pl.: a gerjesztett állapotok, ionok, szabad gyökök). Az viszont nem ismeretes hogyan befolyásolják ezeket a reakciókat a besugárzás paraméterei (részecske típusa, energiája, vagy lineáris energia átadása (LET)). Ezek a folyamatok az alapjai ugyanakkor számos alkalmazásnak is, mint például ion nyaláb vagy elektron litográfia, új reziszt anyag fejlesztés, mikro- és nanoszűrők, mikrofluidikai eszközök létrehozása, többek között. A PhD hallgató feladata különböző szerves anyagok (polimerek) besugárzása, a fizikai és kémiai effektusok vizsgálata, valamint az eredmények hasznosítása különböző alkalmazásokban.

**Érzékelési elvek, érzékelő eszközök, érzékelő hálózatok, IoT rendszerek kutatás-
fejlesztése fizikai, környezeti, ipari, közlekedési, orvos-biológiai, villamos energetikai
folyamatok monitorozására**

A digitalizáció, a különféle folyamatok számítógépes irányítása, vezérlése meghatározóvá vált az élet számos területén. A folyamatirányítás megköveteli különféle információk begyűjtését a környezetből. Az érzékelés, mint a környezeti paraméterek detektálása és mérése szükséges a környezet változására adott adekvát válasz kidolgozásához. Az érzékelendő fizikai, kémiai, biológiai, stb. jelet az érzékelő eszköz, a szenzor fordítja le, konvertálja mérhető, általában elektromos jellé.

Új típusú szenzorok kutatás-fejlesztése első fizikai elveken alapul, az anyagtudomány és technológia segítségével készíthetők az adott feladatra alkalmas eszközök.

Fontos továbbá az eszközök integrálása szenzorhálózatokba, ezáltal térben és időben valósítható meg nagytömegű információ begyűjtése.

Új érzékelők kidolgozása és alkalmazása számos területen a kutatás-fejlesztés homlokterében van, például az önvezető járművek működése megvalósíthatatlan a környezetet folyamatosan monitorozó, az információt akár lokálisan is már előfeldolgozó intelligens érzékelők nélkül. Az ipari folyamatok irányítása, a robottechnika alkalmazása is az érzékelők által szolgáltatott adatokon alapszik. Az okos otthonok, az okos város, okos környezet, csakúgy, mint az orvosi diagnosztika vagy a személyre szabott orvoslás fontos területe az érzékelők alkalmazásának.

Az okos épületek fontos szerepet fognak játszani a villamos energia rendszer jövőbeni üzemében. Az általuk biztosított flexibilitás lehetővé teszi a megújuló energiaforrások nagyobb arányú integrációját a villamos energia rendszerbe. Az ICT és IoT technológiák alkalmazása növeli a villamos energia hálózat üzembiztonságát és rugalmasságát. Ezen technológiák együttes alkalmazása jelenti az első lépést az okos hálózatok megvalósításának irányába.

A kutatási téma széles körben öleli fel az érzékelés elveinek kutatását, a megvalósítás, az eszközfejlesztés és a különféle szenzorikai alkalmazások területeit.

A PhD hallgató feladat, az ipari partnerrel közösen, megújuló energiaforrásokat is alkalmazó okos épületek energiahálózatba történő integrációjának vizsgálata, a kapcsolódó hálózatszámítási, szimulációs és modellezési feladatok végrehajtása, tesztrendszerek vizsgálata és minősítése.

A környezeti hatások vizsgálata biológiai mintákban

Közismert, hogy a csont az egyik végső rendeltetési hely, ahol toxikus elemek lerakódnak. Ezért esélyünk van különféle környezeti hatások azonosítására és tisztázására csontok vizsgálatával. Jelen munka célja a csontok fő és nyomelemeinek vizsgálata különböző mérési módszerekkel. Méréseinkben a következő módszereket fogjuk használni: pásztázó elektronmikroszkópia (SEM), a fotoelektron spektroszkópia (XPS), Fourier-transzformált infravörös spektroszkópia (FTIR), indukzív csatolású plazma optikai emissziós spektroszkópia (ICP-OES).

Angol nyelvű kéziratok készítése.

Optikailag aktív nanokristályok és vékonyrétegek gerjesztése töltött részecskékkel

Egyes félvezetők különleges elektronikus szerkezetüknek köszönhetően képesek erős fénykibocsátásra külső gerjesztés hatására. Ez a jelenség még erősebben jelentkezik, ha azokat nanokristályos formában állítjuk elő, amikor is a keltett töltéshordozók térbeli kvantumbezárása következtében jelentősen megnő a gerjesztési folyamatok határfoka. Az ilyen anyagok egyrészt gyakorlati szempontból fontosak, például napelemek fényelnyelő rétegeként, fényforrásként (LED) vagy sugárzás detektorként alkalmazva. Másrészt, a gerjesztések által létrehozott töltéshordozók dinamikus tulajdonságainak és rekombinációs folyamatainak mélyebb megértése érdekében ezen anyagtipusok a félvezető kutatás napjaink egyik legfelkapottabb területe. Noha intenzív alapkutatások történnek e területen, töltött részecskékkel történő besugárzás okozta gerjesztési folyamatok még kevésbé ismertek. Az alapvető energiaátadási mechanizmusok ugyan viszonylag jól leírhatók, de azok kapcsolata a félvezetők optoelektronikus viselkedésével egy feltáratlan terület.

A témára jelentkező hallgató feladata nanokristályos rétegek előállítása, szerkezeti és morfológia vizsgálatuk pásztázó elektronmikroszkópos és röntgendiffrakciós módszerekkel. Az előállított rétegek besugárzása és optikai mérése az Atommagkutató Intézet Tandetron gyorsító berendezésénél történik. A hallgató megismerheti a legkorszerűbb mérőelektronikai megoldásokat, adatkiértékelést, a vizsgált folyamatok fizikai hátterét, ezáltal betekintést nyerhet a modern fizika több tudományterületébe egy interdiszciplináris kutatás résztvevőjeként.

Space radiation - mitigation and adaptation

The next decade will see humanity return to the Moon and the beginning of permanently crewed habitable structures in space. However space is a harsh environment and it is necessary to mitigate hazards such as stellar and cosmic radiation whilst adapting to the space environment. It is therefore necessary to not only protect humans going in space but to select and fabricate the materials with which to construct the structures within which humans and their equipment will operate.

Using the ion irradiation facilities at Atomki in this project we will explore the physical (and chemical) properties of materials needed for such architectures. This is materials science under space conditions. Materials include polymers, metallic composites and designed materials such as aerogels. Since transport of materials to the moon (and later Mars) is expensive we must use local resources such as lunar and Martian regoliths both as building materials and as a source of water, oxygen, ... etc, thus testing lunar and Martian regolith analogues will be important.

Simultaneously with such experimental studies it is necessary to develop a detailed space radiation code that can predict the physical (and chemical) changes induced by space radiation on materials. In collaboration with the MBN Research Centre at Frankfurt in a parallel PhD we will construct a radiation damage model that is based upon understanding of radiation damage at the atomic and molecular level leading to macroscale damage. Such a model is statistical in nature and requires inclusion of both quantum mechanical nature of atomic/molecular damage and a stochastic approach to the propagation of such damage to the macroscale. The final model should be predictive in nature in order to assign risk to structural failure (and biological effects)

Témavezető: **Dr. László Elemér**

PF4/453-23

Felhőfizikai folyamatok hatása a víz izotóp-összetételére

A réteges és konvektív csapadék kialakulása térben és időben jelentősen eltér, a függőleges légmozgások és az esőképződést szabályozó mikrofizikai folyamatok különbségei miatt. A réteges felhőzetre jellemző a nagy horizontális kiterjedés gyenge vertikális mozgással, míg a konvektív felhőzetre a nagy vertikális kiterjedés erős feláramlással. Ezek a különböző esőképződési mechanizmusok, felhőfizikai folyamatok a csapadéknak jellegzetes izotópösszetételt kölcsönöznek, amelyeket az időjárási paraméterek vizsgálatával lehet jobban megismerni. A kutatás fő hipotézise, hogy a réteges és konvektív esőtípusok változó aránya kontrolálja a víz izotópösszetételét rövid-távú változékonyságát, míg a hőmérséklet, csapadékmennyiség, vihar kiterjedése és iránya másodlagos szerepet tölt be. A következő kérdések kívánjuk megválaszolni a kutatómunka folyamán.

- (1) Tükrözi-e a réteges és a konvektív csapadék arányát a tríciumkoncentráció értéke?
- (2) Befolyásolja-e a csapadék tríciumkoncentrációt a mezo-léptékű konvektív rendszerek váltakozó gyakorisága?
- (3) Jellemezhető-e a kevert csapadék (amely tartalmaz réteges és konvektív csapadékot) sajátos izotópösszetétellel ($\delta^3\text{H}$, $\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$)?
- (4) Milyen arányban határozza meg a csapadéktrícium koncentrációját különböző földrajzi adottsággal rendelkező nedvesség-forrásrégiók?
- (5) Lokális vagy nagytérégi légköri folyamatok határozzák meg a tríciumkoncentráció szezonális változását?
- (6) A nedvességforrásrégiók meghatározására a trícium koncentráció mellett alkalmazható-e ^{17}O többlet, mint független hidrológiai nyomjelző?

Témavezető: **Dr. Battistig Gábor**

PF4/454-23

Hajlékony, nyomtatható elektronikai egységek fejlesztése érzékeléshez

A kutatás célja olyan elektronikai technológiai eljárások és alkotóelemek fejlesztése, megvalósítása és alkalmazásának bemutatása, amelyek lehetővé teszik hajlékony, akár viselhető elektronikai egységek létrehozását és működésük demonstrálását. A kutatás középpontjában olyan nyomtatási eljárásokon alapuló technológiák állnak, amelyek lehetővé teszik hajlékony, polimer hordozón vezető, dielektrikum és esetleg érzékelő rétegek előállítását, lehetőség szerint fenntartható, lebomló anyagokból.

A hallgató alapos irodalmi áttekintést végez a nyomtatható elektronikában alkalmazott anyagok és technológiák aktuális eredményeiről. Ennek alapján kiválasztja azt az anyag-hordozó-technológia keretrendszerét, amelyben a kísérleti munkáját végzi.

A hallgató tesztszerkezeteket, tesztáramköröket készít, amelyekkel demonstrálja a kidolgozott technológia alkalmazhatóságát. Anyagvizsgálati módszerekkel tanulmányozza és elemzi az elkészült tesztstruktúrák mechanikai és elektromos tulajdonságait, és optimalizálja a technológiát.

A nyomtatható, hajlékony elektronika felhasználási területe nagyon széles. A hallgató a lehetséges felhasználások közül a testfelszínen vagy ruházatban elhelyezhető, az orvosi biológiai funkciókat monitorozó és kiértékelő berendezések megvalósításában demonstrálja a fejlesztett technológia alkalmazhatóságát. Ennek keretében: Megvalósít egy pulzus lefutást folyamatosan mérő és kiértékelő autonóm rendszert, amely alkalmas többféle természetes vagy kóros elváltozás kimutatására. A rendszer képes a mérési adatok valós idejű gyűjtésére, helyi kiértékelésére és vezeték nélküli továbbítására egy központi adatgyűjtő felé. Kidolgoz egy mérési eljárást a légzési folyamat - mellkas mozgásának - követésére. A rendszer szintén képes a mérési adatok gyűjtésére, helyi kiértékelésére és vezeték nélküli kommunikációjára egy központi adatgyűjtő felé.

Megvizsgálja a mesterséges intelligencia alapú adatfeldolgozás lehetőségeit a fejlesztett rendszerekben. Elemzi, hogyan lehet a begyűjtött adatokat mesterséges intelligenciával kiértékelni, és milyen lehetőségek vannak a várható folyamatok előrejelzésére.

Elvárások a jelentkezővel szemben: villamosmérnök vagy fizikus vagy anyagtudós végzettség, elektronikai és gyártástechnológiai jártasság, angol nyelvtudás.

Témavezető: **Dr. Tóth L. Viktor**

PF4/455-24

Galaxisok és csillagképződés különböző kozmológiai korszakokban

Az Univerzum legnagyobb ismert struktúrái, például a Hercules-Corona Borealis Great Wall, az Óriás GRB gyűrű és a Hatalmas Nagy Kvazársoport, mind speciális objektumok (gamma-felvillanások és kvazárok) inhomogenitásai az téridőben. Vajon ezek a struktúrák tömeg koncentrációk, vagy inkább más sajátosságok mintái, mint például a galaxisok átlagos csillagkeletkezési rátája (SFR), fémessége vagy speciális galaxis kölcsönhatások?

A hallgatónak kozmológiai szimulációkat kell használnia a nagyskálájú szerkezet nyomon követésére, a tömegnövekedéshez vezető galaxisokat érintő események és a galaxis paraméterek időfüggő variációjának vizsgálatára. Megfelelő szoftver eszközöket kell fejlesszen, illetve adaptáljon. A szimulációk eredményét össze kell vetnie archív adatokkal és dedikált új mérésekkel. Ezért optikai, infravörös és rádiócsillagászati megfigyeléseket kell tervezzen elvégezzen, feldolgozzon és értelmezzen. Ezek földi (interferometrikus is) és űrtávcsövek felhasználásával történhetnek.

A galaxisok paraméterei változásának meghatározásához a közeli galaxisok vizsgálata is szükséges, mert ezeknél nyílik lehetőség a galaxisokon belüli folyamatok követésére nagy térbeli felbontással. A cél a galaxis paraméterek nagyskálájú eloszlása mintáinak feltárása.

Eredményeit nemzetközi konferenciákon és magas impakt faktorú referált folyóiratokban kell publikálja.

A kutatást a müncheni Ludwig Maximilian Egyetem, a LAM Marseille és az IPAC Pasadena kollégáival való nemzetközi együttműködésben kell elvégezni.

Témavezető: **Dr. Tóth L. Viktor**

PF4/456-25

Galaktikus és extragalaktikus csillagkeletkezés vizsgálata

A Világegyetem megjelenését és kémiai összetételét alapvetően alakító csillagkeletkezés nyersanyaga, a hideg csillagközi gáz. Különböző skálájú transzport folyamatok juttatják azt a csillagközi felhőszálakba és azokon belül a csillagformáló felhőmagokba, illetve táplálják a csillagkeletkezést mutató galaxisokba. A táplálás és visszacsatolás határozza meg galaktikus és extragalaktikus skálán is a folyamat hevességét jelző úgynevezett csillagkeletkezési rátát. A kutatási projekt ezt vizsgálja galaktikus csillagkeletkezési régiókban és extragalaxisokban.

A doktori hallgató feladata, hogy mérések elemzésével írja le a 2-3 kpc-es galaktikus környezetünkben (lásd még Lokális Spirálkar) folyó csillagkeletkezést. Elemzésében egyszerűbb stabilitási és kölcsönhatási modelleket is kell teszteljen. A Galaktikus tapasztalatokat is felhasználva kell interpretálni az extragalaxisok folyamatait, különös tekintettel a legaktívabb csillagkeletkezési területek kialakulására, valamint a csillagkeletkezési területek legnagyobb tömegű csillagai és környezetük kölcsönhatásaira.

A folyamatok leírására mérési adatbázisok széles köre áll majd a hallgató rendelkezésére, ezek a teljesség igénye nélkül az EUCLID; Gaia; Herschel; JCMT űrtávcsövek archívumai, valamint annak a nemzetközi kutatócsoportnak a mérési adatbázisa, amelybe a doktori hallgató integrálódik. Utóbbiakat az Effelsberg-100m, JCMT, ALMA és egyéb földi mm-es és szubmm-es rádiócsillagászati obszervatóriumokkal észleltük. Amennyiben szükséges további méréseket is kell tervezni, végrehajtani és elemezni.

A kutatást a Helsinki Egyetem, a Toulouse-i Egyetem IRAP intézete és a Shanghai Astronomical Observatory kollégáival való nemzetközi együttműködésben kell elvégezni. Az eredményeket nemzetközi konferenciákon és referált folyóiratokban kell ismertetni.

Témavezető: **Dr. Petrik Péter**

PF4/457-25

Kísérleti és elméleti módszerek integrálása többösszetevős felületi nanoszerkezetek fejlesztésére

A többösszetevős felületi nanoszerkezetek az energiatárolás, a katalízis és az optoelektronika élvonalában állnak egyedi szerkezeti és funkcionális tulajdonságaik miatt. Lehetővé teszik továbbá olyan tulajdonságok precíz szabályozását, mint a vezetőképesség, a katalitikus aktivitás és az optikai válasz. E célok eléréséhez azonban a kísérleti mintakészítési technikák és az elméleti modellezés összekapcsolása szükséges. A jelen kutatás célja az, hogy unikális fejlesztés alatt álló kísérleti módszereket (mint például a kombinatorikus porlasztás és optikai mérés-technika) ötvözzön korszerű számítógépes modellezéssel, annak érdekében, hogy optimalizálja a nanoszerkezetek tulajdonságait célzott alkalmazásokhoz. A kombinatorikus porlasztási technika lehetővé teszi olyan anyagok gyors fejlesztését, amelyek összetétele és morfológiája széles skálán változik. Azok az elméleti modellek, amelyek pontosan előre jelzik a nanostruktúrák kialakulását és elektronikai tulajdonságait, megerősítik a kísérleti módszereket. E módszerek integrációja jelentős potenciált rejt magában az anyagtervezés terén. A nanostruktúrák kialakulásának és tulajdonságainak megértéséhez olyan

karakterizációs technikákat alkalmazunk, mint az in situ optikai spektroszkópia, mindenekelőtt a spektroszkópai ellipszometria, amely lehetővé teszi a szerkezeti változások valós idejű nyomon követését a mintakészítés és a hőkezelés során. A morfológiát, összetételt és felületi tulajdonságokat illetően olyan felületvizsgálati módszerek kerülnek bevetésre mint az elektronmikroszkópia, a röntgen fotoelektron-spektroszkópia és az atomerő-mikroszkópia. Az elméleti modellezés alapvető szerepet játszik a nanoszerkezetek tulajdonságainak tervezésében és optimalizálásában. Az anyagok optikai válaszát a transzfer mátrix módszerrel, végeelem-módszerekkel, RCWA (rigorous coupled wave analysis) és FDTD (finite difference in time domain) módszerekkel, valamint továbbfejlesztett diszperziós függvényekkel számoljuk. A kísérleti adatok és az elméleti modellek integrálása felgyorsítja a különleges anyagok tervezését és optimalizálását.

Témavezető: **Dr. Palcsu László**

PF4/458-26

A csapadék tríciumkoncentrációjának természetes szintjének meghatározása és annak kapcsolata a napsiklussal

A kontinentális jégtakarók értékes információt rejtenek a közepes és alacsony szélességi körök múltbeli éghajlati és környezeti viszonyairól. A jég stabilizotóp-összetétele, a jégben lévő por, oldható ionok és az elemiszén mennyisége szezonális változásait ki lehet használni a jégmagok kormeghatározásához. A sekély rétegek korolása a jég tríciumkoncentráció-mélység profil alapján történhet. Mivel a trícium kozmogén izotóp, a napsiklus hatása megfigyelhető az utóbbi évtizedekben hullott csapadék tríciumkoncentrációjának változásában. Valóban, a svájci-olasz Alpokban feltárt jégmagon végzett tanulmányunk bizonyítékot szolgáltatott arra, hogy a trícium természetes változását a napsiklus is befolyásolja.

A kutatási téma célkitűzései négy altéma köré épülnek fel:

1. Az újonnan fúrt jégmagok trícium idősorainak vizsgálata a kozmogén trícium és a 11 éves napsiklus közötti kapcsolat megerősítésére.
2. A trícium természetes szintjének meghatározása.
3. A jégrétegekben megőrződött por Sr-Nd-Hf izotóp-összetételei, a származási hely és a regionális/féltekei légköri cirkuláció közötti kapcsolat vizsgálata.
4. A plutónium izotóp kihullási viszonyainak értékelése távoli területek (pl. Tien Shan) jégmagjaiban.

V. Részecskefizikai program

Témavezető: **Dr. Dávid Gábor**

PF5/424-02

Semleges mezon keltse Au+Au tközsben a RHIC rendszeren (BNL, USA)

Az első év során a Relativisztikus Nehézion Ütköztetőn (RHIC, BNL) mért adatokból a π^0 -keltés jelentős csökkenése figyelhető meg nagy transzverzális impulzusoknál. Ez az eredmény nagyon különbözik attól, amit alacsonyabb energiákon észleltek korábban (AGS, SPS) és ez jelentős elméleti kutatásokat indított el. A doktorandusz feladatai: a RHIC második éves működésétől kezdődően gyűjtött adatok analízise, a π^0 - és η -ra vonatkozó hatáskeresztmetszetek kiértékelése a lehető legnagyobb transzverzális impulzusértékekig, az adatok összehasonlítása a legmodernebb elméleti eredményekkel. A jelöltnek részt kell vennie az adatgyűjtésben, a hitelesítésben és a PHENIX detektorrendszer elektromágneses kaloriméterének általános működtetésében, fejlesztésében.

Témavezető: **Dr. Dávid Gábor**

PF5/425-02

A direkt fotonok forrásai nehézion-ütközésekben a RHIC-rendszeren (BNL)

A Brookhaven National Laboratory (BNL, USA) területén működő Relativistic Heavy Ion Collider ütköztető korábbi eredményei megmutatták, hogy p+p ütközéseknél a direkt fotonok keltése a kettős nukleon-nukleon ütközésekkel skálázható. Mindazonáltal, az elméleti számítások, valamint az adatok részletesebb vizsgálata felveti annak lehetőségét, hogy ez sérülhet minden pT transzverzális impulzusnál: kis pT esetén termikus keltéssel, közepes pT-re kvark fékezési sugárzással és jet-foton konverzióval, végül a nagy pT tartományokban izospin effektusokkal és/vagy a szerkezet-függvények módosulásával. A jelölt feladata lesz olyan módszerek kidolgozása a PHENIX-detektor elektromágneses kaloriméterének méréseit felhasználva, amelyekkel a különböző forrásokból (keltési mechanizmusokból) eredő és a direkt foton-spektrumhoz adódó járulékokat el lehet különíteni egymástól. Elvárás továbbá, hogy résztvegyen az adatgyűjtésben, a kalibrációban és a PHENIX elektromágneses kalorimétere általános karbantartásában, valamint a kísérlet számára szükséges általános szoftver fejlesztésben.

Témavezető: **Dr. Dávid Gábor**

PF5/426-02

A kvark-gluon plazma megjelenési formáinak keresése Au+Au ütközésben a RHIC rendszeren (BNL, USA)

Az első év során a Brookhaven National Laboratory Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjén (RHIC) nyert adatok sok olyan idegesítően izgalmas eredményt hoztak, amelyek a kvark-gluon plazma lehetséges kialakulására utalnak Au+Au ütközésekben. Ugyanakkor ezek az eredmények eddig még nem alkottak koherens, meggyőző képet. Nagyon sok nyitott kérdés maradt mind elméleti, mind kísérleti oldalon. A jelölt feladatai: olyan módszerek ki-munkálása, amelyek nagyobb statisztikai megbízhatósági szinten korrelálják a különböző

kísérleti szignaturákat az elméleti elképzelések megerősítésére vagy elvetésére. A doktorandusznak részt kell vennie a PHENIX kísérlet adatgyűjtési tevékenységében, hozzá kell járulnia az általános és detektor-specifikus szoftverfejlesztéshez, továbbá a várakozásnak megfelelő nagy intenzitású nyalábon végzendő adatgyűjtéshez elengedhetetlen másod- és harmad-szintű trigger-algoritmuskon kell dolgoznia.

Témavezető: **Dr. Trócsányi Zoltán**

PF5/428-02

Sugárzási korrekciók számolása perturbatív QCD-ben

Az elemi részecskék erős kölcsönhatását leíró elméleti keret a kvantumszíndinamika(QCD). A QCD aszimptotikusan szabad elmélet, ami lehetővé teszi, hogy a nagyenergiájú részecskék kölcsönhatásai leírásakor perturbációs számítást használjunk. Az erős csatolás nagy értéke miatt azonban a Born közelítésben tett jóslatok meglehetősen pontatlanok. Ahhoz, hogy elegendően pontos elméleti jóslatot tegyünk, a folyamatok többségéhez elengedhetetlen a sugárzási korrekciók figyelembevétele. A javasolt kutatási téma a fenomenológiai szempontból legérdekesebb folyamatokhoz (Higgs keltés, háttér Higgs kereséshez, jet fizika) a sugárzási korrekciók meghatározása.

Témavezető: **Dr. Trócsányi Zoltán**

PF5/438-08

Új részecskék keresése az LHC CMS detektorával

Az LHC-n a legnagyobb energiájú elemi (parton-parton) ütközések energiája el fogja érni a TeV tartományt, így az egyik legizgalmasabb új „részecske” ami az LHC-n keletkezhet elegendően nagy energia kis térrészre való összpontosításával a mikroszkópikus fekete lyuk. A $(4+n)$ -dimenziós Planck-skálánál nagyobb tömegközépponti energiájú parton-parton ütközések egy része $(4+n)$ -dimenziós gravitációs kölcsönhatásként tekinthető. Az irodalomban léteznek olyan numerikus szimulációk, amelyek szerint ebben az esetben a mikroszkópikus méretű fekete lyukak keletkezésének valószínűsége nagy. A keletkező fekete lyuk Hawking-sugárzás révén mindenféle szokásos SM részecskébe pillanatszerűen elbomlik. A bomlástermékek tanulmányozásából következtetni lehet az extra dimenziók számára. Bár a folyamatok jelenlegi elméleti megértése meglehetősen bizonytalan, fekete lyukak keletkezését leíró esemény-generátor hozzáférhető, amelynek segítségével lehet tanulmányozni a fekete-lyukhoz vezető proton-proton ütközéseket. A kutatás célja az LHC CMS detektorán észlelt végállapotokban az extra dimenziók létezésére utaló részecskék keresése.

Témavezető: **Dr. Horváth Dezső**

PF5/440-10

Anyag és antianyag egyenértékűségének vizsgálata a CERN Antiproton-lassítójánál

A fizika egyik nagy rejtélye, hova lett az Ősrobbanás után az antianyag, miért nincsenek a Világegyetemben antianyag-galaxisok. A CERN Antiproton-lassítója az anyag és antianyag egyenértékűségét kimondó CPT-invariancia elvének ellenőrzésére épült 2000-ben. Az ASACUSA japán-dán-magyar-német-olasz-osztrák együttműködés többféle kísérletben

vizsgálja az antiproton tulajdonságait: méri az antiproton tömegét és mágneses momentumát antiprotonos hélium-atomokban nagy pontosságú lézerspektroszkópia alkalmazásával, illetve mérőberendezést készít elő antihidrogén-spektroszkópiára elektromágneses csapdában. A doktorandusz ezekbe a vizsgálatokba kapcsolódna be, követve korábbi magyar kollégáit. A magyar részvételt a K72172 OTKA-pályázat támogatja.

Témavezető: **Dr. Nándori István**

PF5/441-11

Fázisátalakulások vizsgálata renormálási csoport módszerrel

A renormálási csoport (RG) módszer a modern fizika egyik legeredményesebb és legdinamikusabban fejlődő ága. A módszer alkalmas arra, hogy a fizikai modellekben szisztematikusan távolítsuk el a kvantumfluktuációkat, és így megkapjuk annak alacsony energiás viselkedését. Ebből következtethetünk a modellek fázisszerkezetére.

A szimmetrikus fázis alacsony energiás leírása közismert. Azonban a szimmetriasértett fázis alacsony energián nehezen határozható meg, mert ott a RG egyenletek szingulárisává válnak. A probléma úgy tárgyalható, hogy olyan renormálási sémát választunk, ahol a szingularitás kezelhető. Egyrészt előfordulhat, hogy bizonyos sémákban a szingularitás meg sem jelenik, másrészt feltételezzük, hogy a szimmetriasértett fázisban egy infravörös fixpont van, ahol a modell csatolásai releváns módon skáláznak. Ennek segítségével a szingularitás közelében is meg tudjuk határozni a csatolások evolúcióját.

Célunk a csatolások skálázásának kiszámolása szimmetriasértett fázis fixpontjai közelében skaláris modellekben. Vizsgálni kívánjuk a modellek alacsony energiás viselkedését, és meghatároznánk a fázisátalakulást jellemző kritikus exponenseket. Ehhez a hullámfüggvény renormálás evolúcióját is figyelembe kell vennünk, de ez a renormálási csoport módszerrel konzisztens módon megtehető.

Témavezető: **Dr. Sailer Kornél, Dr. Nagy Sándor**

PF5/442-12

Nyílt kvantummechanikai rendszerek vizsgálata funkcionális renormálási csoporttal

A cél nem egyensúlyi, egyszerű, nyílt kvantummechanikai rendszerek kvantumtérelméleti módszerrel történő tárgyalása. Vizsgálható lehet állapotok koherens szuperpozíciójának környezeti hatás okozta dekoherenciája, fázisátalakulás vizsgálata a környezethez való csatolás, vagy a környezet hőmérsékletének változása hatására.

Számos olyan fontos, kísérletileg megvalósítható egyszerű kvantummechanikai rendszer van, amelyik jól modellezhető a kvantum Brown-mozgással: egy külső erő hatása alatt mozgó részecske csatolva van a környezetéhez. A környezet általában jól modellezhető Caldeira és Leggett nyomán végtelen sok független kvantumoszillátor akár zérus hőmérsékletű, akár véges hőmérsékletű rendszerével. A funkcionális renormálási csoport módszer alkalmas arra, hogy egyrészt kezelje a külső erő hatása alatt mozgó részecske nem perturbatív viselkedését (pl. anharmonikus oszcillátor esetén), másrészt hogy a környezethez történő erős csatolás esete is tárgyalható legyen. A felvázolt általános modell alkalmas általában arra, hogy a klasszikus és a kvantumfizika közti átmenetet vizsgáljuk. Ennek egyik eszköze, hogy tisztázzuk a kvantum- és a termikus fluktuációknak a dekoherenciára gyakorolt

hatását. A fluktuációk szisztematikus eltávolítását a funkcionális renormálási csoport módszerrel végezzük el. A környezethez történő csatolás erősségének és a környezet hőmérsékletének függvényében a modellnek egy új, szimmetriasértett fázisa jelenik meg. Feltételezzük, hogy ebben a fázisban egy infravörös fixpont van, ahol a modell skálázási tulajdonságai megváltoznak. A fixpont lehetővé teszi, hogy a szingularitás közelében is meg tudjuk határozni a csatolások evolúcióját. Vizsgálni kívánjuk a modell fázisait, és a fázisokat jellemző kritikus exponenseket. Ehhez a hullámfüggvény-renormálás evolúcióját is figyelembe kell vennünk, de ez a renormálási csoport módszerrel konzisztens módon megtehető.

Témavezető: **Dr. Kovács Tamás György**

PF5/443-13

Kvantum-színdinamika rácson

Az erős kölcsönhatás elméleti leírása a kvantum-színdinamika (QCD). Nemrégiben azt találtuk, hogy magas hőmérsékleten, amikor létrejön az ún. quark-gluon plazma állapot, a legalacsonyabb kvark állapotok térben erősen lokalizáltak. A jelenség analógiát mutat a szennyezett vezetők esetén régóta ismert Anderson lokalizációval. Részletesen szeretnénk vizsgálni a QCD-ben létrejövő lokalizált kvark sajátállapotok tulajdonságait és a spektrumban a lokalizált-delokalizált állapotok közötti átmenet természetét.

Témavezető: **Dr. Veszprémi Viktor**

PF5/444-14

Szuperszimmetrikus részecskék keresése az LHC CMS-detektorával

A CERN-ben található Nagy Hadron-ütköztető (LHC) 2009-es beindítása óta a világ legnagyobb részecskegyorsítója, amely protonok ütköztetésével mikroszkopikus robbanásokon keresztül új részecskéket hoz létre. Az így keltett részecskék milyenségéből és eloszlásából az anyag elemi építőkövei közötti alapvető kölcsönhatások fizikai törvényszerűségeire lehet következtetni. Az LHC kísérleteinek célja a Higgs-bozon pontos tulajdonságainak kimérése és a részecskefizika törvényeit jelenleg legsikeresebben összefoglaló standard modellen túlmutató fizikai törvények, mint például a szuperszimmetria elméletének, felfedezése. A gyorsító folyamatos fejlesztéseken megy keresztül, hogy egyre nagyobb ütközési energiákon egyre több adatot tudjon szolgáltatni. Következő, 2015 januárjában induló adatgyűjtési szakasza talán az LHC legfontosabb időszakának is tekinthető.

A Compact Muon Solenoid (CMS) egy általános célú részecskedetektor, amelyet új részecskék keresése céljából építettek. Közel két évtizede veszünk részt a CMS építésében és üzemeltetésében. Célunk a CMS töltött részecskéket nyomkövető rendszerének (ezen belül a Pixel detektorának) az LHC kihívásai szerinti továbbfejlesztése, valamint szuperszimmetrikus elmélet által jósolt részecskék keletkezésére utaló jelek keresése a CMS detektor által rögzített adatokban. A CMS nyomkövető berendezése alapvető szerepet játszik a szuperszimmetrikus folyamatok által keltett részecskék mérésében. A kutatást végző jelöltnek lehetősége lesz együttműködni a Wigner Fizikai Kutatóközpont, illetve a svájci Paul Scherrer Institute kutatóival, és gyakori látogatást tenni a CERN-be.

Elemirész ütközések nagy pontosságú leírása

A szubatomi méretskálakon érvényesülő természettörvények felderítésének nagyon fontos eszköze a nagyenergiás elemirész ütközések megfigyelése és elméleti értelmezése. A Nagy Hadronütköztetőnél az alapvető elemirész ütközési folyamatokra — mint a hadronzápor, nehéz kvark, Higgs- illetve vektorbozon keltés — vonatkozó kísérleti mérések nagy pontossága megköveteli a hasonlóan precíz elméleti jóslatok kiszámolását. Az elméleti jóslat bizonytalanságának csökkentése szempontjából hasznos, sőt esetenként elengedhetetlen a kvantumszándinamikai második sugárzási korrekciók ismerete. A javasolt kutatási téma ezen sugárzási korrekciók kiszámítása fenomenológiailag alapvető fontosságú részecskeütközési folyamatokhoz.

Funkcionális renormálási csoport módszer alkalmazása a kvantumelméletben

A cél a funkcionális renormálási csoport (RG) módszer alkalmazása kvantumelméleti modellekre. Az RG módszer a modern fizika egy széleskörben alkalmazott eszköze, amellyel főleg a vizsgált modellek fázisszerkezetét ismerhetjük meg. A fizikai modell nagy energiákon vett hatásából indulunk ki, és keressük az alacsony energiás viselkedést. A kvantumtérelmélet pályaintegrálos megfogalmazását használjuk, ahol maga a pályaintegrál a kezdeti- és a végállapotok között minden lehetséges pályát tartalmaz. Az egyes pályáknak a klasszikus trajektóriától való eltérései, mint kvantumfluktuációk vagy szabadsági fokok jelennek meg az elméletben, amelyeket szisztematikus módon figyelembe kell vennünk, ha valamilyen fizikai mennyiséget meg akarunk határozni. Ennek végrehajtására alkalmas eszköz az RG módszer. Az eljárás az effektív hatásra vonatkozó parciális differenciálegyenletre vezet, amit Wetterich egyenlet néven ismerünk. Az egyenletből a kölcsönhatásokat leíró csatolások (energia-)skálafüggését határozhatjuk meg. Ebből következtethetünk a modell alacsony energiás viselkedésére, fázisszerkezetére vagy akár a megjelenő dekoherenciára is. Az RG módszert skaláris modelleken (pl. d-dimenziós $O(N)$ -modell, sine-Gordon-modell), mértékelméleteken (pl. kvantum-elektrodinamika) vagy a kvantum Einstein gravitációs modellen fogjuk alkalmazni.

Neutrínó tömegének meghatározására kísérleti elrendezés szimulálása

A hallgató elsődleges feladata a témában született és publikált kísérleti javaslat (U. D. Jentschura, D. Horvath, S. Nagy, I. Nandori, Z. Trocsanyi, B. Ujvari, Int. J. Mod. Phys. E23 (2014) 1450004) szimulációjának folytatása. GEANT4 keret-rendszerben fogja modellezni a gyorsított részecskenyalábot, a kölcsönhatását a céltárggyal, a keletkezett részecskék bomlását, a keletkezett neutrínók kölcsönhatását a detektorral. A detektor elektronikáját, kiértékelő rendszerét is szimulálni kell. Ezek alapján optimalizálni kell a paramétereket (nyalábméret, nyalábenergia, mágneses tér nagysága stb.) és a modern adatanalízis eszközeivel a szimuláció alapján határozza meg a várható neutrínótömeg-határt. Kiemelkedően fontos, hogy

tanulmányozza a mai gyorsító és detektálási módszereket, és implementálni tudja az évek múlva várhatóan elérhető technológiákat.

Témavezető: **Dr. Ujvári Balázs**

PF5/450-16

Hardverfejlesztések a kísérleti részecskefizikában

A hallgató feladata két fő téma köré csoportosul:

1. Tesztelő műszer fejlesztése, üzemeltetése a 2021-től működő sPHENIX detektor elektromágneses kaloriméterének az érzékelői (szilícium fénysokszorozó, SiPM) működésének ellenőrzéséhez. A hőmérséklet, tápfeszültség és a sugárkárosodás függvényében kell meghatározni az erősítés mértékét. A SiPM érzékelőnek a jeleit feldolgozó digitalizáló egység lesz a trigger alapja. A munka elsősorban számítógépes szimulációk készítését jelenti, majd a digitalizáló egység tervének véglegesítése után egy, a szimulációval kapott paraméterek alapján a gyors, FPGA alapú, trigger elektronika tervezése, prototípus építése.
2. CMS Muon Endcap jelfeldolgozó és kiolvasó rendszere felújításakor besugárzási tesztekkel kell majd végezni. A hallgató feladata a sugárkárosodás szimulálása és a mérések elvének kidolgozása.

Ezenkívül a doktorandusz hallgató részt vesz még egyetemi hallgatói laboratóriumhoz kozmikus müont detektáló sokszálas kamra elkészítésében, kiértékelő algoritmusok megírásában.

Numerikus programkönyvtár fejlesztése sugárzási korrekciók számításához a kvantum-színdinamikában

A kvantum-színdinamikában számolt sugárzási korrekciók kulcsfontosságúak a Nagy Hadronütköztetőben (LHC) vizsgált folyamatok pontos megértése szempontjából. A standard modell ellenőrzése és esetleges azon túl mutató fizika keresése csak ilyen korrekciók figyelembevétele mellett lehetséges. Jelenleg a legnagyobb kihívást a második sugárzási korrekciók számolása jelenti, aminek elvégzésére jelen pillanatban nem áll rendelkezésre minden szempontból kielégítő általános keretrendszer. A hallgató feladata hozzájárulás egy ilyen keretrendszer kidolgozásához, majd az elkészült rendszeren belül az LHC számára lényeges folyamatok programozása, továbbá a programot felhasználva a sugárzási korrekciók kiszámítása.

Direkt foton mérés arany-arany ütközésekben

Nehézion-ütközésekben az anyag egy új formája, a kvark-glüon plazma jöhet létre, amelynek tulajdonságait a RHIC és az LHC gyorsító detektorainál tanulmányozták. Direkt fotonok keletkezhetnek a kvark-glüon plazma fejlődésének minden fázisában, ezért detektálásuk az ütközés teljes történetéről információt ad. A jelölt feladata a PHENIX detektorral 2014/2016-ban gyűjtött kombinált 200 GeV-es adatok kiértékelése. Ezek az adatok a korábbi publikációkhoz képest 15-szörös adatmennyiséget tartalmaznak, elemzésükkel a 200 GeV-es ütközések fotonjainak legpontosabb eredményeit adhatjuk meg a javított statisztika miatt, szélesebb tartományban. Így az elméleti számításokkal is jobban összevethető eredményt várunk.

Semleges mezon mérés arany-arany ütközésekben

Nehézion-ütközésekben az anyag egy új formája, a kvark-glüon plazma jöhet létre, amelynek tulajdonságait a RHIC és az LHC gyorsító detektorainál tanulmányozták. A nagy transzverzális impulzusú semleges mezonok, elsősorban pionok és kaonok, a részecskezápörök legjellemzőbb részecskéi. Mérésükkel a kezdeti ütközésekben keletkezett részecskék és a kvark-glüon plazma kölcsönhatását vizsgálhatjuk. A jelölt feladata a PHENIX detektorral 2014/2016-ban gyűjtött kombinált 200 GeV-es adatok kiértékelése. Ezek az adatok a korábbi publikációkhoz képest 15-szörös adatmennyiséget tartalmaznak, elemzésükkel a 200 GeV-es ütközések semleges mezonjai legpontosabb eredményeit adhatjuk, elemzésükkel a 200 GeV-es ütközések fotonjainak legpontosabb eredményeit adhatjuk meg a javított statisztika miatt, szélesebb tartományban. Így az elméleti számításokkal is jobban összevethető eredményt várunk.

**Szimulációs technikák a részecskefizikában és eta, K0S és omega mezonok megfigyelése
200 GeV Au+Au ütközésekben**

A nagy tranzverzális impulzusú (pT) hadronok keletkezésének mérése egy jó vizsgálati módszer a relativisztikus nehézion ütközések során keletkező forró és sűrű közeg tanulmányozásához. A legmagasabb pT-t eddig a legkönnyebb hadronnal érték el (π^0), de a RHIC PHENIX kísérletének nagy statisztikájú Run-14 és Run-16 Au+Au 200GeV-es adatkészlete lehetővé teszi a mérést nehezebb hadronok esetén (omega) és azoknál a hadronoknál, melyekben nyílt vagy rejtett ritkaság van (eta és K0S). A nehéz hadronok elnyomásának vagy annak hiányának megállapítása fontos további információkat nyújt a könnyű (u,d) és nehéz (s) kvarkok energiavesztési mechanizmusa közötti lehetséges különbségekről. Tanulmányozni fogjuk az eta keletkezését eta $\rightarrow$ gamma gamma bomlási csatornán, az omega keletkezését π^0 gamma bomlási csatornán, és amennyiben megvalósítható, K0S keletkezését a K0S $\rightarrow$ $\pi^0 \pi^0$ bomlási csatornák segítségével. A mérés során több lépésnél is a PHENIX detektor GEANT3 szimulációját használjuk. Verifikáljuk a CMS BTL aldetektorának a GEANT4 szimulációját a tesztmérések alapján, majd integráljuk a CMS teljes szimulációjához

Az első év során a Brookhaven National Laboratory Relativisztikus Nehézion Ütköztetőjén (RHIC)