

11. Téli Ásványtudományi Iskola, Balatonfüred, 2016. január 22-23
"Ásványok egyensúlyban"

Péntek (január 22.)				
10:30	10:35	Pósfai Mihály	Köszöntő	
10:35	11:05	Juraj Majzlan	Thermodynamics, the science in equilibrium	The central concept of thermodynamics, the equilibrium constant, will be discussed, mostly from a practical point of view on a few examples. The many uses and meanings of the equilibrium constant will be highlighted. The notion of enthalpy, entropy, and Gibbs free energy will be also introduced.
11:05	11:35	Juraj Majzlan	The joy of calorimetry	Calorimetric studies feed the thermodynamic databases with the data necessary for geochemical modeling. In this contribution, I will explain how different kinds of calorimetry provide the data and mention the pitfalls of the thermodynamic measurements. A practical application will be illustrated on iron oxides and arsenates.
11:35	11:55	Marton Aurél	Vizes geokémiai egyensúlyi modellek, programok működésének termodinamikai alapjai	A közismert sav – bázis, komplexképződési, redoxi, oldhatósági és határfelületi reakciók a vizes geokémiai rendszerekben egymás mellett szimultán játszódnak le, ami nagyszámú speciesz képződését eredményezi. A specieszek egyensúlyi koncentrációja a vonatkozó analitikai, sztöchiometriai és termodinamikai információk alapján felírt mérlegegyenletek és egyensúlyi összefüggések ismeretében számítható. Az előadás ezen információk figyelembevételével mutatja be fémionok speciációjának számítását olyan rendszerekben, amelyekben a víz/szilárd határfelületen a fémion adszorpcióját koordinatív és elektrosztatikus kölcsönhatások is irányítják.
11:55	12:10	Pósfai Mihály	Vizes geokémiai egyensúlyok modellezése VMinteq programmal	A geokémiai folyamatok termodinamikai modellezésével az adott rendszer egyensúlyi állapota meghatározható. A modellek hasznosak a folyamatok irányának meghatározására és kísérletek tervezésére, még akkor is, ha a rendszerben az egyensúly nem valósul meg. Az előadás néhány felszíni, vizes környezetre jellemző geokémiai probléma bemutatásán keresztül ízelítőt kíván adni a VMinteq szabad felhasználású szoftver alkalmazásának lehetőségeiből.
12:10	12:35	Szabó Péter	Kristályos anyagok számítógépes vizsgálata	Az előadásban bemutatásra kerül a molekuláris szimulációk szerepe a kristályokban: kristályszerkezetek energetikájának és spektroszkópiájának atomi szintű vizsgálata a kvantumkémia segítségével, mikro- és mezoszkópius rendszerek termodinamikai sajátságainak számítása molekuladinamikai és Monte Carlo módszerekkel.
12:35	12:55	Dódy István	A kristályok sem nőnek az égig!	Az ásványok mérete és habitusa összefüggésben látszik lenni kristályszerkezetükkel és képződésük paramétereivel. Van egy lappangó ága az ásványtannak, a morfogenetika, ami ezeket az összefüggéseket célozza meghatározni.
12:55	13:10	Hozzászólások és vita		
13:10	15:00	Ebédszünet		
15:00	15:15	Móricz Ferenc, Mádai Ferenc	Erősen oxidálódó bolíviai szulfidos meddőhányók csurgalékvizének geokémiai modellezése HSC Chemistry 7.1 programmal	A geokémia fontos eszközei az Eh-pH grafikonok, melyek szerkesztése bonyolult, azonban a számítógépekkel támogatott világunkban hatékony programok segítik munkánkat. Az előadásban a HSC Chemistry 7.1 geokémiai modellező program Eh-pH diagramkészítő modulja kerül bemutatásra. A főbb funkció- és paraméterbeállítások áttekintése után a programot egy esettanulmányon keresztül, a bolíviai Oruro város környéki erősen oxidálódó szulfidos meddőhányók csurgalékvizének modellezésével mutatjuk be.
15:15	15:30	Kovács István	Nem-polarizált, mennyiségi infravörös spektroszkópos elemzések jelentősége a földtudományi kutatásokban	Az előadásban bemutatom, hogy a nem-polarizált mennyiségi infravörös spektrometria milyen új távlatokat nyithat a technika földtudományi alkalmazásával kapcsolatban. A módszer számos előnye mellett szóba kerülnek azok a tényezők, amelyek esetlegesen szűkíthetik a módszertan szélesebb körű alkalmazási lehetőségeit.
15:30	15:45	Bíró Tamás, Kovács István	Hidrogén diffúziója kvarcban	A bükkaljai vastag piroklasztit-összletek "magjában" lényegesen kisebb a szerkezetileg kötött hidroxil tartalom, mint azoknak a feltehetően gyorsan kihűlt bázisán. Ez azt jelenti, hogy a piroklasztit-összlet "magjában" a hőmérséklet a kitérést követően még huzamosabb ideig (akár hónapokig, évekig) 400 fok felett maradhatott, míg a bázison gyakorlatilag pillanatszerűen hűlt le. Ezek az eredmények fontos következményekkel járhatnak a rétegtan és a geokronológia számára is.
15:45	16:00	Németh Tibor, Kovács Kis Viktória, Balázs Brigitta Réka, Dódy István	Agyagásványok átalakulása felszíni körülmények között: a nedvesítés–száritás hatása	Előadásunkban összefoglaljuk, hogyan változnak meg az agyagásványok egymást követő laboratóriumi nedvesítési–száritási ciklusokban. Különös figyelmet kapnak a duzzadó agyagásványok, melyek a legérzékenyebbek erre a folyamatra. Látni fogjuk, hogy tulajdonságaik jelentősen megváltozhatnak, s ezt több tényező befolyásolja, melyekkel talajban számolni kell.
16:00	16:15	Kis Viktória, Németh Tibor, Dódy István	Elektrondiffrakciós vizsgálatok montmorilloniton	A montmorillonit szerkezetét hagyományosan a TOT csillámszerkezetből származtatjuk, az anyagot rutinszerűen röntgen-pordiffrakcióval vizsgáljuk, azonosítjuk. A montmorillonit megfelelően híg vizes szuszpenzióban elemi egységekre esik szét. Ezeken végzünk elektron diffrakciós méréseket és vetjük össze a röntgen-pordiffrakció eredményeivel, illetve a klasszikus TOT szerkezeti modellel.
16:15	16:30	Hozzászólások és vita		

16:30	16:50	Kávészünet		
16:50	17:05	Szabó Ferenc	Fények és színek egyensúlyban	Kutatócsoportunk a fény- és színínger mérésével, a képi információ látásfiziológiailag és látáspszichológiailag helyes feldolgozásával, az optikai sugárzás vizuális és nem-vizuális hatásaival foglalkozik. Az előadás műtárgyak - freskók, festmények - pigmentjeinek anyagvizsgálati eredményein alapuló, színhelyes és a műalkotások számára kíméletes világításának tudományos kérdéseit mutatja be, többek között a Sixtus-kápolna új világítási rendszerének példáján.
17:05	17:20	Weiszbürg Tamás, Gherdán Katalin	"Gondoljunk csak a középkori templomok ablaküvegeire..."	Ódon skót kastélyok idegenvezetői a történeti hatás fokozására elmondják, hogy az ablaküvegek, mint nagyon viszkózus folyadékok, olyan régiek, hogy már az alsó peremük meg is vastagodott, az üveg lassan lefolyt. Ez a városi legenda még egy friss kiváló szakkönyvünkbe is beopta magát: "Ilyen körülmények között a földköpeny közetei már nem törnek, mint a földkéreg alkotói, hanem képlékeny alakváltozáson mennek keresztül, azaz mechanikai hatásra "folynak". Gondoljunk csak a középkori templomok ablaküvegeire vagy akár az autótutak aszfaltjára." Az előadás az üvegek folyadékkénti (téves) kezelésének eredetét tekinti át.
17:20	17:35	Takács József	A Magyar Korona vizsgálatainak áttekintése	A Magyar Koronát hazahozatala után több szakértői csoport vizsgálta különböző nézőpontból. A művészettörténészek, aranyművesek, mérnökök csoportjai más-más megfigyelések alapján különféle következtetésekre jutottak. Az előadás megkísérli röviden áttekinteni és egységesen értelmezni az eredményeket a Magyar Korona felépítéséről, díszítéséről, a zománcképek szerepéről, vagy éppen a keresztferdeségéről.
17:35	17:50	Papp Gábor	A Szent Korona drágakövei	A koronán 395 gyöngy és 106 kő található. E nagy szám ellenére az irodalom alig foglalkozik e drágakövekkel, mivel a történeti kérdések megoldásában nem segítenek. Emellett a Szent Korona az egyetlen történelmi jelentőségű korona, melynek köveit nem vizsgálták meg műszerekkel. A drágakövek elhelyezkedésének bemutatása mellett az előadás tárgya a korona drágakő-szimbolikája, az eddigi, szemrevételezéssel történt „meghatározások”, illetve a képek és feljegyzések alapján valószínűsíthető sérülések és cserék bemutatása.
17:50	18:05	Hozzászólások és vita		

Szombat (január 23.)				
09:00	09:15	Demény Attila, Németh Péter, Czuppon György, Leél-Össy Szabolcs, Szabó Máté, Judik Katalin, Németh Tibor, Stieber József	Amorf kalcium-karbonát képződése hazai barlangokban és a jelenség paleoklimatológiai jelentősége	Az aggteleki karszt barlangjaiban folyó paleoklimatológiai kutatás megalapozásaként a jelenleg képződő karbonát stabilizotóp-összetételének elemzését végeztük el. Az aktív képződő cseppkövekbe zárt oldatzárványok vízének oxigénizotóp-összetételei a kalcit krisztallitméretével korrelálnak. A minták szerkezetének részletes elemzésével nanokristályos kalcitot mutattunk ki, ami XRD, FTIR és TEM elemzések alapján amorf karbonátból (ACC) alakult ki. Az ACC kalcitosodása változást jelent a karbonát-víz izotópegyensúlyban az oldatzárványok vízének eltolódását okozva. Az elsőként a kutatócsoport által felismert jelenség a zárványelemzések paleoklimatológiai alkalmazhatóságára van alapvető hatással.
09:15	09:30	Németh Péter, Laurence A.J. Garvie, Peter R. Buseck	Nanogyémántok szerkezete	Előadásunkban a nanogyémántok szerkezeti sajátosságait ismertetjük. Bemutatjuk, hogy az irodalomban leírt nagyszámú - különleges képződési körülményeknek tulajdonított - sp3-as szénallotróp a jól ismert gyémánt szerkezetével, illetve szerkezeti hibáival, magyarázható.
09:30	09:45	Váczi Tamás	Transzlációs doménméretek sugárkárosodott cirkonban	A részecskesugárzás által károsított anyagok Raman-spektroszkópiai vizsgálatának egyik kulcsfontosságú paramétere a kristályos fázisban található transzlációs doménméret. A kristályos doménméretek vizsgálatát és geometriai modellezését mutatja be az előadás, illetve a kis doménméretek miatt előálló fononbezáródással való kapcsolatot a cirkon példáján.
09:45	10:00	Topa Boglárka Anna, Váczi Tamás, Weiszbürg Tamás	Mangán-oxidok Raman-spektroszkópiai vizsgálata	A Raman-spektroszkópia lehetővé teszi ásványok eredeti szöveti helyzetéhez kötött mikroléptékű azonosítását az ún. „ujjlenyomat” módszer segítségével, feltéve, hogy létezik olyan referencia adatbázis, mellyel összehasonlítható a vizsgált fázisok spektruma. Az előadás a mangán-oxidok/oxihidroxidok esetében ezen a téren fennálló hiányosságok pótlására irányuló lépéseket kívánja bemutatni, betekintést nyújtva a kezdeti eredményekbe, és azok gyakorlati hasznosíthatóságába.
10:00	10:15	Papp Richárd Zoltán, Zajzon Norbert	Új ásványtani és geokémiai eredmények az eplényi mangánérctelep kutatásában	Az 1975-ben bezárt eplényi mangánbánya modern, műszeres, mikroléptékű anyagvizsgálata eddig hiányzó láncszem volt a magyarországi mangánércutatásban. Számos jól dokumentált fűrészből származó minta részletes ásványtani (XRD, SEM-EDX, Raman, XRF, ICP-MS/OES és μ XRD) vizsgálatát végeztük el, mely során az oxidos ércek mellett az eddig kevésbé vizsgált karbonátos teleprész ásványtanát, szövetét és geokémiáját is megismertük. Az ásványos alkotók és azok egymáshoz viszonyított helyzetének meghatározása alapján próbáljuk modellezni a kialakulási környezetet és annak lehetséges változásait a szelvény mentén.
10:15	10:30	Hozzászólások és vita		
10:45	11:05	Kávészünet		
11:05	11:20	Dallos Zsolt, Dódy István, Kristály Ferenc, Kovács Kis Viktória	A csontok ásványai	Napjainkig nem teljesen tisztázott a csontásvány konkrét szerkezete és kémiai összetétele. Széles körben elfogadott közelítő nézet, hogy a csontok ásványa hidroxilapatitból (HAP) épül fel. Ez idáig egységesen csak annyi tisztázódott, hogy hagyományos vizsgálati módszerekkel nem, vagy csak rosszul jellemezhető a csontok szeretlen komponense.
11:20	11:35	Kőrösi László, Kovács János, Papp Szilvia, Mirko Prato, Alice Scarpellini, Andreas Riedinger, Monika Kus, Vera Meynen	PF-dópolt anatóz hidrotermális szintézise, szerkezete és fotokatalitikus aktivitása	A napfény hatására számos félvezető fém-oxid (például: anatóz, rutil) vizes közegben diszpergálva ún. fotooxidációs tulajdonságokat mutat, ami azt jelenti, hogy a fény segítségével felhasználhatók a környezetünkben lévő káros anyagok lebontására. Munkánkban anatóz fotokatalizátorok szintézisének optimalizálásával és kristálytani tulajdonságaival foglalkoztunk.
11:35	11:50	Mészáros Előd, Raucsik Béla, Varga Andrea, Schubert Félix	Egyensúly - a mikrotektonika szemszögéből	A kőzetek deformációja során gyakran nagy jelentősége van az egyensúlyra vezető folyamatoknak. Előadásunkban rövid betekintést nyújtunk a metamorf reakciók deformáció során betöltött szerepéről két aktív kutatási téma eredményein keresztül.
11:50	12:05	Papp Nikoletta, Mészáros Előd, Raucsik Béla, Varga Andrea, M. Tóth Tivadar	Szöveti egyensúly és megbomlásának bélyegei márványokban	A márványok szövete fontos információkat hordoz a kőzet metamorf fejlődéstörténetéről. Az előadásban bemutatjuk a márványok petrográfiai leírásánál alkalmazott szempontokat és a főbb azonosítható deformációs bélyegeket a dorozsmai mélyfűrészek márvány kőzetanyagának példáján.
12:05	12:20	Ábele Ferenc	A petrofizika szerepe és eszközei az olajiparban	A petrofizika az olajkutatás és termelés olyan speciális szakterületét képviseli, ahol a legváltozatosabb eszközök kerülnek bevetésre a tároló és az abban található folyadékok és gázok tulajdonságainak megismerésére. Laboratóriumi eszközök és módszerek kerülnek átdolgozásra és fejlesztésre ahhoz, hogy a fúrólyukakban, az ott uralkodó magas nyomás és hőmérsékleti értékek mellett szerezhető meg a kívánt információkat a petrofizikus számára.
12:20	12:35	Hozzászólások és vita		
12:35	12:40	Zárszó		