

SZTEmagazin > Aktuális szám > Fókusz

SZEGEDI EGYETEM MAGAZIN



Czakó Gábor elméleti kémikus: „az az eredmény, amit a kutató nem publikál, nem is létezik”

2017. október 02.

Miért éppen úgy zajlik le a kémiai folyamat, ahogyan? Ez és a reakció dinamikája érdekli az elméleti kémiával foglalkozó Czakó Gábor vegyészt. A Szegedi Tudományegyetem Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék adjunktusát, az MTA Kémiai Osztály legifjabb „nagydoktorát” az ide vezető útról, a munkájáról, illetve a Science magazinban, a Nature lapcsaládban megjelent publikációról kérdeztük.



Cikk nyomtatás



Link küldés

Tetszik 0

Tweet

– Az alapvető kémiai reakciók dinamikáját és mechanizmusait szeretném mélyebben megérteni. Kutatócsoportommal megpróbáljuk kiterjeszteni vizsgálatainkat az úgynevezett kisebb bio-rendszerek felé. Így mostanában például aminosavak modellezésén is dolgozunk – mutatta be *Czakó Gábor* elméleti kémikus a tudománynak azt a szeletét, amely pillanatnyilag a legjobban érdekli. A **Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék adjunktusa** 2017-ben védte meg akadémiai doktori disszertációját. Ezzel a 36 éves szegedi kutató **az MTA Kémiai Osztály legfiatalabb nagydoktora** lett.

„Kiszámolta” az energiagát alakját

– A kémiai reakciók hogyan mennek végbe lépésről lépésre? Erre a kérdésre keressük a választ, de nem kísérleti körülmények közepette, hanem **számolással modellezzük, miként zajlik le a kémiai reakció**. Mi a **fizika törvényeit alkalmazzuk a kémiára**. Így egy mozifilmhez hasonlatosan le tudjuk játszani, mi történik egy kémcsőben. Így **új reakció utakat fedezünk fel, szabályozni tudjuk a kémiai átalakulásokat, mélyebben érthetjük meg a természetben végbemenő folyamatokat**. Mindez később tananyaggá válhat egy iskolai könyvben – magyarázta alapkutatásuk célját és kilátásait *Czakó Gábor*.



– Az energiagáton kell egy reakciónak keresztülmennie ahhoz, hogy a reagáló atomokból és molekulákból termékek képződjenek. Tehát **energiát kell befektetni egy reakcióba ahhoz, hogy e gáton túllendülhessenek az folyamat alkotóelemei**. Ez régóta ismert tény a kémiában, középiskolában is tanítják. Ám az energiagát két legfontosabb tulajdonságáról még nem tudunk eleget. Az energiagát magasságát már régóta vizsgálják a kutatók, ám a másik lényegi tulajdonság, a gát alakjának a kísérleti meghatározása eddig lehetetlennek tűnt. Egyik kutatási partnerünk, a tajvani csoport egy olyan mérési eljárást dolgozott ki, ami **az energiagát alakjának a meghatározására** szolgál. Ám ezekhez a mérésekhez **elengedhetetlen az elméleti támogatás, amikhez a számításokat én végeztem**. Ugyanis ezek a számítások bizonyították, hogy a tajvaniak kísérletei visszaadják az energiagát alakját. Az elméleti szimulációk és a kísérletek eredményeit összevetettük és kiderült az egyezés – magyarázta legutóbbi, a **Nature Chemistry-beli publikációjuk** újdonságtartalmát

Czakó Gábor, a négy szerzős cikk közül az egyetlen magyar kutató. (Az SZTE Hírportál erről szóló **információja itt (/sztehirek/2017-szeptember/szegedi-elméleti-kemikus)** olvasható.)

– A szegedi kutatócsoportunk más tagjaival közösen is publikáltunk már. Például 2017-ben jelent meg a Brit Kémiai Társaság vezető folyóiratában, a **Chemical Science** (<http://www.rsc.org/journals-books-databases/about-journals/chemical-science/>)-ben az a három szerzős cikkünk, amelyben – az egyik PhD-hallgatónkat is bevonva – **bemutattunk egy érdekes helyettesítési reakciót**, a fogkrémekben is fellelhető fluoridion reakcióját a metil-jodiddal. Ezt a szimulációt **új módszerrel és technikával végeztük el**, amely

minden korábbinál pontosabbnak bizonyult, s ezt kísérleti eredmények is igazolták. Mindez **forradalmasíthatja a helyettesítési reakciók szimulációját** – hozott egy újabb példát a szegedi elméleti kémikusok sikerére *Czakó Gábor*, aki már elindította azt a habilitációs folyamatot, amelynek végén docensi, majd egyetemi tanári kinevezést kaphat.

„Jósol” a helyettesítési reakciókról

– **A metánnak**, a földgáz fő alkotó elemének a **más anyagokkal**, például az oxigénnel és a halogén atomokkal **kialakuló reakcióit vizsgáljuk**. A másik kutatási irányunk **az úgynevezett helyettesítési reakciók** egyik típusának vizsgálata, amelyet S_N2 névvel illetnek a tudományos publikációkban. Ekkor a molekulák egy csoportját másféle atomokkal helyettesítjük, **így alakítjuk át az egyik molekulát egy másikká** – választa munkájukat. – Mi **nemcsak megmagyarázzuk** a már megtörtént reakciók lefolyásának a jellemzőit, hanem **jóslásokat is teszünk** az eddig nem ismert új útvonalakról.

– Száz éve ismert az úgynevezett S_N2 helyettesítési reakciók útja, ám a mi szimulációnk talált egy új útvonalat – összegezte **a 2015-ben a Nature lapcsalád egyik multidiszciplináris folyóiratában, a Nature Communicationsban publikált eredményük** lényegét *Czakó Gábor*. Az erre épített, de az ausztriai Innsbruck egyik kutatócsoportjának kísérleti eredményeivel bővített témakörből született **a 2016-os Nature Chemistry cikk**. A szegedi kutató és társa által vizsgált helyettesítési reakció a szerves kémia egyik legfontosabb folyamata, mert **számos vegyület előállítását teszi lehetővé, és kulcsszerepet játszik a biokémiai folyamatokban is**.

A metán reakcióit a kísérlet és az elmélet együtt magyarázza

– A világ vezető kutatócsoportja a metán reakcióit vizsgáló, fentebb említett tajvani csapat – jelentette ki az amerikai években megismert partnereiről *Czakó Gábor*. – Mindig **hasznos a kísérleti csoporttal való együttműködés, mert az elmélettel kiegészülve a legérdekesebb eredményeket adhatja** – magyarázta. Szerinte **a kémia már nem kifejezetten kísérleti tudomány**, ugyanis számos eset bizonyítja: **elméleti úton pontosabban kiszámítható egy reakció útja**. Így küszöbölhető ki az olyan hibalehetőség, ami abból adódik, hogy a kémiai anyag nem stabil, vagyis bomlékony, vagy éppen mérgező, ezért nem jól vizsgálható. – A **számolás** sokszor **gyorsabb és olcsóbb, mint a kísérlet, ami fontos szempont például a gyógyszeripar számára**.



– Amerikai és kínai elméleti kémiai kutatócsoportokkal is együtt dolgozom, ígéretes eredménnyel. Korábban **a metán és a klóratom reakciójáról publikáltam az amerikai Science magazinban. A Nobel-díjas John Polanyi által kidolgozott reakciódinamikai alapszabályok módosítására tettünk javaslatot**. Míg ő elméletét egy kétatomos molekulának egyetlen atommal való reakciója alapján fogalmazta meg, addig **mi ötatomos molekulát vizsgáltunk**. Azt találtuk, hogy csak némi módosítással alkalmazható az általános érvényűnek gondolt szabály. Ezt követően **az Amerikai Tudományos Akadémia folyóirata (PNAS)** kért fel egy cikk megírására, így 2012-ben az oxigén atom és a metán reakcióját tárgyaló közleményünket a **PNAS** közölte. Ezen sikerek után a legújabb eredményeinket is a világ vezető folyóiratai közzétették; **az elmúlt három évben három közleményünk jelent meg a brit Nature lapcsalád hasábjain**. Minden cikkünk komoly **nemzetközi visszhangot** váltott ki.

Csapat és szuperszámítógép kell

– Csapatban dolgozunk mi, elméleti kémiával foglalkozó kutatók is. A külföldi kísérletes kutatóktól érkező adatokkal kapcsolatos **számításokat végzünk a „szuperszámítógépeinkkel”,** a részeredményeket folyamatosan megbeszéljük, **értelmezzük a csoportban**, majd megfogalmazzuk és cikké gyúrjuk az összegzést – avatott be munkamódszerébe a kutató, aki egyetért a megállapítással: *„amit a kutató nem publikál, az az eredmény nem létezik”*.

– A munkanapom nagyobb részét a kutatás teszi ki, de tanítani is szeretek. **A tehetséggondozást nagyon fontosnak tartom**. Előadásaim egy része kifejezetten kapcsolódik a kutatócsoportom témáihoz. Ezeket **az oktatáshoz kötődő alkalmakat használom ki, hogy felkeltssem az érdeklődést az elméleti és kémiai és a kutatómunka iránt** – fogalmazott.

– Határterülete a kémiának, a fizikának, a számítástechnikának és a matematikának az elméleti kémia. **Ahogy egyre mélyebben ásunk a kémia reakciók természetének a megértése terén, úgy kell elmélyedni a matematikában, a fizikában és az informatikában is**. A középiskolai matektudás kevés ahhoz, hogy azokat az egyenleteket megoldjuk, amelyek leírják e kémiai reakciókat. Sőt: e bonyolult egyenleteket papír alapon meg sem lehet oldani, külön programokat írunk, hogy a számítástechnika fejlődésével egyre pontosabb számításokat tudjunk végezni – mosolyodott el elsőszámú kísérleti eszköze, a komputerje előtt ülő kutató.

Szentestől Szegeden át Thaiföldre

– **Tehetség és szorgalom, illetve jó tanár kell ahhoz, hogy a természettudományos vonalon rendezett versenyeken sikert arasson a diák.** Velem a szentesi általános iskolában *Balogh Terézia* tanárnő szerette meg a kémiát. Diákként sokat köszönhetek a kémiai versenyeknek, amelyek egyfajta edzésnek számítottak – fogalmazott a természettudományokkal való első találkozásairól *Czakó Gábor*, aki a szegedi Radnóti Miklós Kísérleti Gimnáziumban *Meleg István* tanítványaként ért el sikereket. Harmadik osztályos gimnazistaként negyedik helyezett lett az Országos Középiskolai Tanulmányi Versenyen, majd **1999-ben** eljutott **a Thaiföldön rendezett Nemzetközi Kémiai Diákolimpiára**, a nagy-nagy megmérettetésre: a szegedi Radnóti gimnázium kémia tagozatos „titánjaként” ezüstéremmel tért haza.

– **Minden természettudomány, így a kémia nyelve is a matematika.** De jó esetben a kísérletezés is felkelti egy diák figyelmét a kémia iránt. Ám a kísérletek preparatív része egyre kevésbé érdekelt, inkább arra voltam kíváncsi, hogy mi van mögötte, miért éppen úgy zajlik le a kémiai folyamat, ahogy – avatott be a kémiai iránti vonzalmának alakulásába *Czakó Gábor*. Elárulta: a budapesti családi kötődés és a diákolimpiára történő felkészítők alatt az ottani oktatókkal való találkozás az oka annak, hogy nem a szegedi egyetemen, hanem az elméleti kémiában erősnek számító ELTE vegyész szakján szerzett MSc-oklevelet, majd 2007-ben PhD-fokozatot.

Hisz a Lendületben

– Reakciódinamikával az atlantai Emory University nemzetközi élvonalba tartozó kutatócsoportjában kezdtem el foglalkozni. Négy év után az ELTE-re tértem haza. Onnan 2015-ben hívott az elméleti kémia oktatójának és saját kutatócsoport alapítására a Szegedi Tudományegyetemre *Tóth Ágota* professzor – vázolta fel életrajzát *Czakó Gábor*, akit eredményeiért **2012-ben a Magyar Tudományos Akadémia ifjúsági Polányi-díjjal** tüntetett ki, és aki ugyanebben az évben megkapta a Junior Prima-díjat (https://www.mfb.hu/sites/default/files/booklet_2012.pdf) is.

– **Az MTA Lendület pályázatán eddig ötször indultam, de pályázati támogatást – talán tudománypolitikai okok miatt – sajnos még nem nyertem. Nem adom fel**, ismét benyújtom a kutatási tervemet, **mert szeretnék itthon maradni és itt eredményesen dolgozni** – hangsúlyozta *Czakó Gábor*, aki **Magyarországon egyedülálló módon az elmúlt két évben kétszer is a Nature Chemistry szerzőjeként** hívta föl magára a figyelmet. A fentebb bemutatott, hazai és nemzetközi körökben is kiemelkedő jelentőségű kutatómunkája alapján talán nem várat sokat magára a Lendület pályázat odaítélése. Czako Gabor úgy véli: **az elméleti kémia területén megfelelő számítógépes- és munkaerő-kapacitás elnyerése esetén még az eddigieknél is eredményesebb lehet ötletei megvalósításában, tartósan a világ élvonalában maradhat.** Immár több mint tíz munkatársával egyetemben oly eredményesen foglalkozik a kémiai reakciók titkainak föltárásával, hogy a **csapatát bemutatásra méltónak találta az Amerikai Kémiai Társaság szaklapja is**, egy úgynevezett Feature Article formájában, amely hamarosan megjelenik.

SZTEinfo – Újszászi Ilona

Fotók: Bobkó Anna

 Cikk nyomtatás

 Link küldés

Tetszik 0

 Tweet

Letöltés



(/sztemagazin/aktualis-

szam/2017-hu-szte-szem)



(/sztemagazin/aktualis-szam/2017-eng-szte-szem)