

MAGYAR EREDMÉNY A KÉMIAI ALAPKUTATÁSBAN

Molekulamodellező



A kémiát a fizika és az informatika határterületeivel kombinálva szerzett magának rövid idő alatt nemzetközi hírnevet Czákó Gábor, az Amerikából nemrég hazatért fiatal kutató.

Laikusok számára borzasztóan hangzó szóösszetétel a metán reakciódinamikája, vagyis a fiatal kémikus, Czákó Gábor kutatási témája. Pedig magyarra fordítva, azaz hétköznapi megközelítésben nem bonyolult dologról van szó, csupán arról, hogy miként lehet befolyásolni a földgáz legfon-

tosabb összetevőjének viselkedését. Amikor valaki otthon a gáztűzhelyen főzni kezdi a húslevest, tulajdonképpen metánt éget, azaz reagáltat oxigénnel. Czákó pedig pont azt vizsgálja, hogy ebben a folyamatban mi, mikor, milyen sebességgel és miért történik. Ma már közhely, hogy a világ földgázkészle-

te véges, és ennek következtében a felhasználás hatékonyságának kérdései egyre fontosabbakká válnak, mégis ennek tudható be, hogy a magyar kutató eredményei meghozták számára a nemzetközi hírnevet. Érdekes egybeesés, hogy munkájával éppen egy olyan szabályt sikerült új összefüggésekkel kibővítenie, amelyet egy magyar származású, főleg Kanadában dolgozó kémikusról, John Polanyirol neveztek el. Polanyi 1986-ban Nobel díjat kapott a munkájáért, hiszen az energiahasznosítás előre megbecsülhetőségét már akkor is kiemelt figyelem övezte. Közkeletű hasonlat, hogy a Polanyi-szabály olyan, mintha a közgazdaságtanban létezne egy biztos formula arra, hogy a befektetett pénz adott körülmények között milyen megtérülést hoz. A kutatók előtt már jó ideje világossá vált, hogy a Polanyi-szabály bonyolultabb esetekben nem teljes mértékben használható, ám egészen mostanáig nem tudtak pontosabb magyarázattal szolgálni a jelenség okaira.

Lényegében ezt a feladatot oldotta meg Czákó Gábor az atlantai Emory Universityn, a Joel Bowman professzor vezette kutatócsoportban. Az ehhez szükséges elméleti kémiai számításokhoz erős fizikai és programozó-matematikai háttértudásra volt szükség, hiszen a reakciókat nagy teljesítményű számítógépek segítségével, speciálisan erre a célra fejlesztett programokkal lehet csak modellezni. A munka oroszlánrészét elvégző Czákó négy évig dolgozott a posztgraduális állásban Atlantában, miután az Eötvös Lóránd Tudományegyetemen korábban megszerezte a PhD fokozatát. Szerződésének lejártával most visszatért az ELTE-re, ahol reményei szerint lehetősége nyílik majd egy saját kutatócsoportot szervezésére.

TORONTÁLI ZOLTÁN

Villáminterjú Czákó Gáborral

■ **Manapság sajnos egyértelműen adódik a kérdés: kalandvágyból jött haza Amerikából?**

– Maradhattam volna, de az igazán fontos lépés nem a hazajöveletem, hanem a négy évvel ezelőtti kiutazásom volt. Nagyon sokat tanultam kinn, például azt is, hogy a kutatói pálya első szakaszában ma már öngyilkosság túl hosszú ideig ugyanazon a helyen maradni.

– **Miért?**

– Azért, mert csak az boldogul hosszabb távon, aki egymás után különböző nemzetközi kutatócsoportok munkájába tud bekapcsolódni. Az ilyen módon, külön-külön megszerzett tudás újfajta kombinációival állhat elő valakinek a fejében egy új tudományos eredmény. Most itthon próbálok boldogulni, nem tudom, milyen lehetőségeim lesznek, de ha idővel sikerül

összehozni egy saját kutatócsoportot, akkor biztosan megtalálom a számításomat.

– **Az anyagi lehetőségeken kívül miben különbözik a hazai és az amerikai kutatói közeg?**

– Magyarországon az egyetemi alapoktatás színvonalas, a kutatási munkát is magában foglaló doktori képzésben viszont már nagyon vegyes a kép, nagyon jó és nagyon rossz példákat is látok. Amerikában elképzelhetetlen, hogy a tehetséges doktoranduszok egy része már a doktori képzés során elkallódjon, nálunk viszont sajnos előfordul. ●

FOTÓ: KÓHALMI PÉTER