

Czakó Gábor (javaslat ifjúsági Polányi-díjra – 2012)

Rövid méltatás:

Czakó Gábor vegyész közel egy évtizedes tevékenysége a molekuláris kvantumkémia, az elméleti molekulaszpektroszkópia és különösen az elméleti reakciódinamika területén nemzetközileg elismert kutatóvá tette, módszerfejlesztési eredményeinek jelentős visszhangja volt a vonatkozó tématerületeken, kimagasló eredménye a Polányi-szabályok módosítására tett javaslata, melyet a *Science* magazin közölt 2011-ben.

Részletes indoklás:

Czakó Gábor már általános iskolai és gimnáziumi évei alatt is számos kémiaverseny eredményes résztvevője volt. 1999-ben ezüstérmét nyert a thaiföldi Nemzetközi Kémiai Diákolimpián, majd megkezdte egyetemi tanulmányait az ELTE vegyész szakán. 1999-ben a Magyar Kémikusok Egyesületétől Szent-Györgyi Albert emlékérmét kap, majd 2000-ben a Szeged Ifjú Tehetsége emléklakettet veheti át Szeged polgármesterétől. Egyetemi évei alatt Miniszterelnöki Ösztöndíjas, Köztársasági Ösztöndíjas és a Kar Kiváló Hallgatója. 2004-ben kapja meg vegyész diplomáját és kezdi meg PhD munkáját az ELTE Kémiai Doktori Iskolájában, az elméleti molekulaszpektroszkópia területén. 2002-ben társszerzője az ELTE Tudományos Diákköri Konferenciáján I. díjat nyert dolgozatnak, majd ugyanezzel a munkával 2003-ban az Országos Tudományos Diákköri Konferencián II. díjat nyer. 2006-ban és 2007-ben már témavezetőként kap elismerő okleveleket a házi és az országos Tudományos Diákköri Konferenciákon elért III. és II. helyezésekért.

Czakó Gábor PhD munkája során elméleti módszereket dolgozott ki kis molekulák rezgési-forgási színeképek nagy pontosságú, variációs alapú számítására. Az új technikákon alapuló számítógépes programokat számos molekulára (H_2O , CO_2 , N_2O , H_3^+ , CH_4 , stb) alkalmazta. Kidolgozott továbbá egy új adiabatikus közelítést, amely túlmutat a kémiában tradicionálisan alkalmazott Born–Oppenheimer közelítésen. 2007-ben *summa cum laude* minősítéssel védte meg „*Toward first-principles complete spectroscopy of small molecules*” címmel, angolul írt PhD disszertációját.

Dr. Czakó Gábor 2008. januárjától közel 4 éven keresztül volt az Emory University-n (Atlanta, Georgia, USA) posztdoktori ösztöndíjas Joel M. Bowman professzor csoportjában, ahol az elméleti reakciódinamika területén végzett eredményes kutatómunkát, amit 2011. decemberétől az ELTE Kémiai Intézetében folytat. 2009-ben közölt számításai rámutattak, hogy a CH nyújtási rezgés gerjesztése a CD kötéshez irányítja az F atomot az $\text{F} + \text{CHD}_3$ reakcióban. Ez a munka adta a magyarázatát egy, 2009 nyarán a *Science* folyóiratban megjelent [Zhang *et al.*, *Science*, **325**, 303 (2009)] meglepő kísérleti eredménynek. 2011-ben a $\text{Cl} + \text{CHD}_3$ reakcióra végzett minden eddiginél pontosabb számításokat, amelyek rávilágítottak a kémiában másodlagos kölcsönhatásként emlegetett van der Waals erők fontosságára, ezáltal módosítva a John Polanyi nevéhez fűződő kémiai szabályokat. A $\text{Cl} + \text{CHD}_3$ reakció dinamikáját tárgyaló cikket a világhírű *Science* magazin közölte [Czakó and Bowman, *Science* **334**, 343 (2011)]. Czakó Gábor kutatási eredményei széles körben keltettek érdeklődést, amit bizonyít, hogy a *Journal of the American Chemical Society* folyóiratban megjelent közleményét [Czakó and Bowman, *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 17534 (2009)] a *Science*, *Editor's Choice* a tudományos közvélemény figyelmébe ajánlotta és a *JACS* is a megjelenés hetében honlapjának főoldalán emelte ki a cikket. Továbbá, az $\text{F} + \text{CH}_4$ reakció potenciális energia felületéről közölt munkáját [Czakó *et al.*, *J. Chem. Phys.* **130**, 084301 (2009)] a *JCP* folyóirat szerkesztői a 2009-es évben az újság legfontosabb cikkei közé választották (lásd *JCP Editors' Choice for 2009*). A 2010-

ben megjelent elméleti–kísérleti *JCP Communication* [Czakó *et al.*, *J. Chem. Phys.* **133**, 131101 (2010)] egyike volt az újság 20 legtöbbet letöltött cikkének 2010. októberében. Továbbá, a néhány hónapja megjelent *JCP Communication* a víz dimer disszociációs dinamikájáról [Czakó *et al.*, *J. Chem. Phys.* **135**, 151102 (2011)] ugyanezt az elismerést érdemelte ki 2011. októberében. A *Science* cikk szintén komoly figyelmet kapott, hiszen a *ChemPhysChem* egy *Highlight* cikket közölt a napokban „*Reaction Dynamics: Rules Change with Molecular Size*” címmel, amely Czakó Gábor eredményeit mutatja be. Végül kiemelném, hogy a fent említett cikkek mindegyikében a Jelölt nem csak első, hanem levelezős szerző is.

Dr. Czakó Gábor, fiatal kora ellenére, már nemzetközi konferenciákon tart előadást (pl. *Dynamics of Molecular Collisions*, Snowbird, UT, USA, 2009. július), valamint rendszeres előadója a *Southeastern Theoretical Chemistry Association* által szervezett konferenciáknak. A közelmúltban is több nemzetközi konferencián mutatta be eredményeit: *PACIFICHEM*, Honolulu, Hawaii, USA, 2010. december, *Dynamics of Molecular Collisions*, Snowbird, UT, USA, 2011. július és *Quantum Reactive Scattering*, Santa Fe, NM, USA, 2011. július.

Dr. Czakó Gábor eredményes kutatómunkáját jól mutatja, hogy 38 elismert nemzetközi folyóiratban megjelent publikáció szerzője illetve társszerzője. 19 cikkben első szerző és már 14 cikkében ő a „*corresponding author*”. Kiemelném továbbá, hogy Jelöltnek már eddig 16 cikke jelent meg a *Journal of Chemical Physics*-ben, ami talán a legelismertebb folyóirat az elméleti fizikai kémia területén. Eredményei nem csak az elméleti kémikusok köreiben keltettek komoly érdeklődést, ezt jól bizonyítják a *JACS*-ben és *Science*-ben megjelent cikkek. Közleményeinek összesített impakt faktora 140, h-indexe 12, publikációira ezidáig közel 350 hivatkozás érkezett. Jelölt tudományos eredményei már a nagydoktori fokozat követelményeit is elérik.