

KOLOSSVÁRY ISTVÁN

kémikus



1963-ban született Budapesten. Középiskolai tanulmányait a Fazekas Mihály Fővárosi Gyakorló Gimnázium Matematika tagozatán végezte, majd a Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karán szerzett diplomát. Doktori munkáját a Grazi Műszaki Egyetemen készítette, majd 4 év posztdoktori ösztöndíj következett az Egyesült Államokban, először a clevelandi Case Western Reserve University, majd New Jersey-ben az akkori Ciba-Geigy Gyógyszerkutató Intézetében. Ezidő alatt tanult bele a számítógépes molekulamodellezés tudományművészeti műhelytitkaiba, és kutatási területének a makromolekulák konformációs változásainak és belső mozgásainak számítógépes vizsgálatát választotta. Ezután egy időre visszatért a Műegyetemre, majd vendégprofesszorként a New York-i Columbia Egyetemen, és gyógyszerkutatóként a Novartis-nál dolgozott. 26 évesen kandidátus, 29 évesen egyetemi docens, 37 évesen az MTA doktora. Hobbija a sporton kívül a globális optimálás matematikai problémája, és a kvantumfizika filozófiai és teológiai határmezsgyéin való barangolás. Jelenleg a New York-i D. E. Shaw Research kutatója, ahol az Anton névre keresztelt speciális célú, molekula dinamika szimulációkat végző superszámítógép és kapcsolódó szoftver kifejlesztésében vett részt, valamint egyetemi magántanárként a Műegyetem gyógyszermérnöki képzésében oktat. LMOD és MINTA nevű algoritmusait világszerte használják új gyógyszer-molekulák tervezésében. Mindkét módszer a molekulák kisméretű rezgőmozgásainak hatékony számításán alapszik. LMOD-dal elsősorban fehérjemolekulák vagy azok komplexeinek termodinamikailag stabil konformációit (3-dimenziós szerkezetét), MINTA-val pedig a stabilitás mérőszámát, a szabadentalpiát lehet becsülni.

- *Jellemezze magát egy a Nature vagy Science folyóiratokban közölt cikk cím terjedelmében*

Összefüggések keresése elsősorban gondolkodással egy adatokkal túlterhelt tudományos kutatói környezetben.

- ***Hatottak-e Önre középiskolai tanárai?***

Elsősorban Horváth Antal angoltanárom, akitől a teljes élet szeretetét és tiszteletét tanultam, valamint Reményi Gusztáv, aki egy-egy matematikai igazság teljes mélységében való megértésének életre szóló élményét adta. Ez a fajta *értés* teljesen háttérbe szorult a mai tudományban, és a *működés* váltotta föl.

- ***Hogyan és miért választott szakterületet?***

Egyetemi tanulmányaim végére leginkább oda jutottam, hogy a vegyészek közt jó matematikusnak, a matematikusok között pedig jó kémikusnak számítottam, és nagyon érdekelték a számítógépek, amelyek épp akkor váltak elérhetővé közönséges halandók számára, így aztán a számítógépes molekulamodellezés ideális kutatási területnek ígérkezett. A konkrét szakterület választás azonban egy teljesen véletlen dolognak köszönhető, ugyanis Magyarországon az elsők közt írtam egy molekulagrafikai programot, ami végül elindított ezen a pályán, ugyanis így kerültem kapcsolatba Náray-Szabó Gáborral, aki ennek a területnek hazai úttörője.

- ***Miért döntött a tudományos kutatás mellett?***

Mindig vonzottak a járatlan ösvények, és annak reménye, hogy valami ténylegesen új dologra bukkanjak.

- ***Melyik cikk és/vagy könyv hatott leginkább munkájára?***

Mezey Pál „Potenciális energia hiperfelület” című könyve, amely megépítette azt a hidat, ami azóta is biztosítja számomra a biztonságos átjárást a kémia és a matematika között tátongó szakadék fölött.

- ***Hogyan látja a tudás terjedését?***

A mai világban a tudásnak nincs igazán becsülete, csak ha valami társadalmilag hasznosnak vélt dolgot lehet vele előállítani. Pedig a tényleges tudás terjedése elsősorban az emberek gondolkodásmódját terelné jobb irányba, és hosszútávon sokkal nagyobb társadalmi haszonnal járna.

- ***Mennyire tartja jónak a kutatók hierarchiáját?***

A kutatás iparaggá vált, és mint ilyen nem lehet meg hierarchia nélkül. A kutatási mechanizmus pályázati pénzekből tudományos folyóiratokban megjelenő cikkeket és eladható termékeket ill. licenszeket állít elő egy nagy létszámú kutatói gárda munkája által. Ennek a munkavállalói seregnek megvanak a kétkezi munkásai, művezetői, igazgatói, stb., és ez a rendszer csak így tartható fenn. Amennyiben a tudomány inkább magáról a tudásról szólna, a hierarchia is más lenne, és személyiségek köré rendeződne, amit talán a félig-meddig kihalt iskolateremtés szóval jellemezhetnénk.

- ***Hogyan igyekszik elfogadtatni kutatási eredményeit?***

Nem vagyok saját magam aktív menedzsere. Tapasztalatom szerint a jó tudományos munkát mindig észreveszik azok, akik igazán számítanak egy szakmában.

- ***Látogat-e el néha könyvesboltba, miért?***

Feltétlenül, elsősorban azért, mert a könyvesbolt az egyetlen hely, ahol megadatik a könyvekbe való belelapozás alapvető élménye.

- ***Mennyi időt tölt naponta az Interneten?***

Jó néhány órát, de nem feltétlenül keresgéeléssel vagy levelezéssel megy el az idő, hanem a munkám jelentős részét ténylegesen az Interneten keresztül végzem, amikor pl. sok ezer km-re lévő számítógépeken dolgozom.

- ***Szeret-e konferenciákra, kongresszusokra járni, miért?***

Igen, leginkább a kutatótársaimmal való személyes kontaktus miatt.

- ***Hogyan viseli, ha egy kéziratát a bíráló visszautasítja?***

Természetesen nem örülök neki, de ettől azért még jól alszom, és igyekszem orvosolni a tényleges hibákat, hiányosságokat. Megemlíteném, hogy nagyon jónak tartom a matematikusok és fizikusok ArXiv rendszerét, ahol előzetes bírálat nélkül publikálhatnak a kutatók, de munkájukat az egész tudományos közösség górcső alá veszi. Ez sokkal egészségesebb, mint a sajnos jelentős mértékben korrupt folyóirati bírálati rendszer.

- ***Érzett kutatói életében frusztrációt? Mi vagy ki okozta?***

Kutatói pályám igazán szerencsés volt e téren, senki és semmi nem állított elém igazán komoly akadályokat.

- ***Tapasztalt frusztrációt kollégáinál?***

Sajnos nem egy esetben.

- ***Mi volt a legjobb tanács, amit valaha kapott?***

Merjek nemet mondani.

- ***Mi befolyásolja legjobban a döntéshozatalát?***

Kutatással kapcsolatos döntéseimet alapvetően két tényező alapján hozom, mindenképpen elvek mentén, és a saját tudományos érdeklődésem alapján döntök.

- ***Fontosnak tartja a díjakat a tudományban, miért?***

Fontosnak tartom őket, mint az élet bármely más területén, és ugyanazokkal a fenntartásokkal. Nagyon jó dolog díjat kapni, de nem szabad magáért a díjért ringbe szállni. Az a fontos, hogy az ember kihozza magából a maximumot.

- ***Miért tartja hasznosnak a nyelvtudást?***

Túl a nyilvánvaló kommunikációs előnyökön, egy új nyelv ismerete egy új nép ismeretét és ezen keresztül megszeretését hozza magával.

- ***Mi jelent Ön számára pihenést?***

A Természet csodálata, családi utazások, sportolás, zenehallgatás, olvasás.

- ***Mit tart eddigi kutatásai legeredményesebbjének?***

Sikerült egyszerű rendszert találnom a gyűrűs molekulák látszólag reménytelenül bonyolult belső mozgásaiban.

- ***Publikációi idézettségét csak számolja?***

Körülbelül öt évenként.

- ***Elolvassa az Önt idéző cikkeket, miért?***

Nagyon ritkán, leginkább akkor, ha valaki továbbfejlesztette valamilyen algoritmusomat, hogy tanuljak belőle.

- ***Sportol?***

Rendszeresen, aminek komolyságáról az is árulkodik, hogy komolyabb sportbaleseteket is sikerült elkönyvelnem.

- ***Mi a jó oktató ismérve?***

Az oktatásban csak az számít, hogy a hallgatók mélyen megértsék azt, amit az oktató el kíván nekik mondani. A miérték és a hogyanok nem fontosak, az oktatónak a megértetés a feledata. Aki az oktatást pódium alkalomnak tekinti, ne oktasson.

- ***Hogyan magyarázna meg leegyszerűsítve és közérthetően egy bonyolult tudományos ismeretet?***

Képekkel és asszociációkkal. Hiába sántít minden hasonlat, segít ráérezni a dolgokra.

- ***Ha létezne időutazás, kivel ebédelne szívesen a tudományon kívüli világból?***

Tilhard de Chardin. Az „Emberi jelenség” című könyvét számtalanszor elolvastam, és szeretnék tőle egy csomó dolgot megkérdezni. Hogyan látná ő a tudomány, filozófia és teológia egymást kölcsönösen kiegészítő módon való együttélésének lehetőségét a mai világban?

- ***Melyik az az egyetlen tény a tudományról, amiről Ön szerint a nagyközönségnek tudnia kellene?***

Talán az, hogy nem kell félni tőle. Igaz ugyan, hogy súlyos erőfeszítések árán, de a tudomány mindenki számára elérhető.

- ***Mivel foglalkozott volna, ha nem a kutatást választja?***

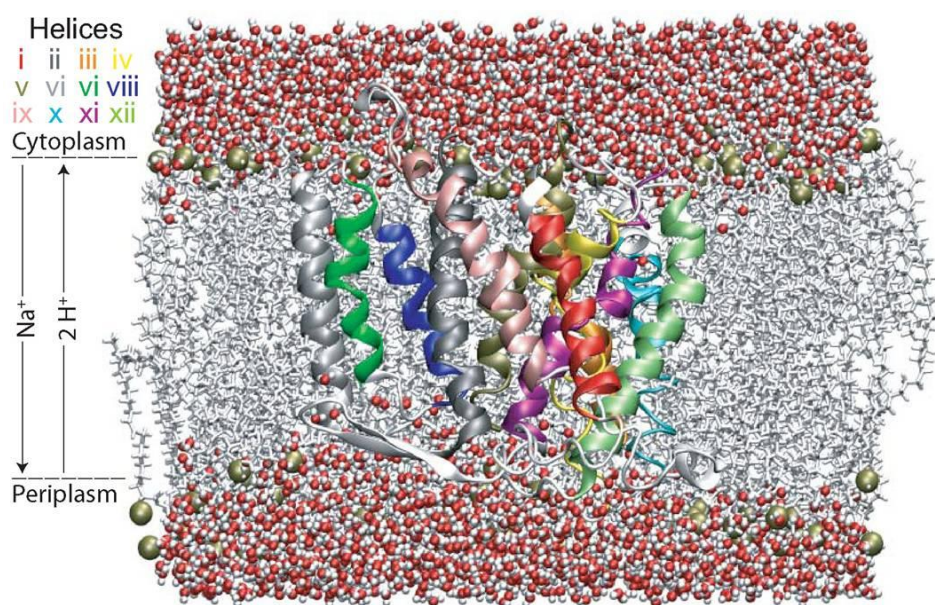
Gyerekkoromban sem akartam tűzoltó vagy rendőr lenni, világéletemben a túsztárgyalók munkáját irigyeltem.

- ***Ön az egyetlen kutató egy házibulin. Hogyan írná le közérthetően azt a tevékenységet, amiből él?***

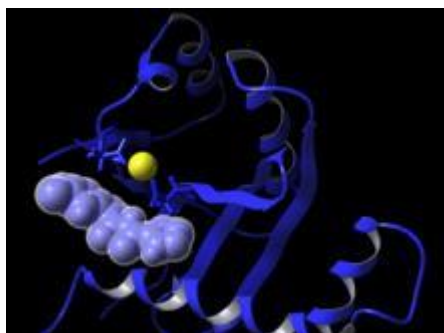
“Vízipók Csodapók” szerű rajzfilmeket készítek, amelynek a forgatókönyvét természeti törvények írják.

- ***Általában mit nem szeret igazán egy tudományos cikkben?***

Amikor nyilvánvaló, hogy a szerző írás közben azon gondolkodik, hogy vajon a bírálók mit várnak el tőle.



Az ábrán látható, sejtmembránba ágyazott Na^+/H^+ antiporter fehérje kulcsszerepet tölt be a sejtek sótartalmának szabályozásában. A bruttó folyamat során, sztöchiometrikusan a sejt egy Na^+ iont juttat a sejtmembránon keresztül a citoplazmából a periplazmába, míg a periplazmából két darab H^+ proton kerül át a citoplazmába. Számítógépes molekuladinamika szimulációval először sikerült az antiporter fehérje atomi szintű hatásmechanizmusára javaslatot tennünk, amelyet kísérletekkel is alátámasztottunk. A fehérje 12 hélikus szegmense a teljes membránt átéri, amelyet lipid molekulákkal modellezünk, alul és felül pedig a sejtplazma modellje látható, ami vízmolekulákból és ionokból áll. A két transzport proton a hélikus köteg közepén elhelyezkedő, fontos szabályozószerepet betöltő D163 és D164 aszpartátsav töltésének egyidejű szabályozásával egyrészt a Na^+ ion plazmából való megkötését biztosítja, másrészt a fehérje alakváltozását idézi elő, melynek eredményeként a Na^+ ion a transzportcsatornán keresztül kiürül (*Science* **317**, 2007, 799).



Az ábrán látható HIV integráz enzim sárga gömbbel jelölt magnézium kofaktorának közelében, komplexként kapcsolódó, kék golyósmodell formában ábrázolt gyógyszer molekula pontos “dokkolási” pozícióját pl. LMOD-dal határoztuk meg (*J. Am. Chem. Soc.* **123**, 2001, 12708).