

A bírálóbizottság értékelése

Czakó Gábor tudományos munkássága a reakciódinamika területén figyelemreméltóan termékeny és rövid időn belül jelentős nemzetközi visszhangot váltott ki. (Több mint félszáz tudományos publikáció szerzője, melyekre több mint 1200 független hivatkozás történt.). Doktori tézisei a molekuladinamika kváziklasszikus alapú elméleti megközelítésével kapcsolatos metodológiai újításai mellett (1. pont) néhány molekulából álló víz klaszterek (2. pont), halogén illetve oxigén atom metán molekulával való reakciója (3. pont) és bimolekulás nukleofil szubsztitúciós reakciókra vonatkozó eredményeit (4. pont) foglalják csokorba. A bírálóbizottság a pályázó téziseiben megfogalmazott állítások mindegyikét tartalmilag elfogadta és új tudományos eredménynek tekinti.

A pályázó elméleti újításai és kitartó szorgalma eredményeképp tudott kísérleti eredményeket értelmezni illetve megerősíteni (e.g. a John Polányi megfogalmazta szabályok sérülése poliatomos rendszerek kis energiájú ütközésekor; forgási állapotok gerjesztésének szerepe a reaktivitásban Cl vagy O és CHD_3 reakciójában). A pályázó munkája nyomán új kísérlet tervezésére is sor került, mely a korábbi kísérlettel ellentétben az elméleti predikcióval egybehangzó eredményt hozott (t.i. poliatomos rendszerek nagyenergiás ütközésekor a Polányi szabályok érvényben maradnak). Eredményei közül a bizottság e helyt kiemelendőnek tartja még egy új reakcióút, az ú.n. dupla inverziós mechanizmus azonosítását bimolekulás nukleofil szubsztitúciók esetén.