



SIMON ISTVÁN

Biológiai Tudományok Osztálya

Budapesten született 1947-ben. Okleveles fizikus. A biológiatudomány és a fizikatudomány habilitált doktora, egyetemi magántanár. Az MTA Természettudományi Kutatóközpont Enzimológiai Intézet tudományos tanácsadója, a Fehérjeszerkezet Kutatócsoport vezetője. Vendégoktató a Szegedi Egyetemen és az Eötvös Loránd Tudományegyetemen. Fehérjék szerkezetének elméleti és számítógépes vizsgálatával foglalkozik. Negyedszázada elsőként mutatta be, hogy egy fehérje térszerkezete a kémiai szerkezet alapján kiszámítható. Ehhez kapcsolódóan definiálta a stabilitási centrum fogalmát, diákjaival kifejlesztették a SCPred-algoritmust és -webszervert a centrumok elemeinek becslésére. A térszerkezeti energia számításával elért eredmények közül a legfontosabb, hogy feltárták a fehérjerendezetlenség statisztikus termodinamikai hátterét. Megalkották az IUPred- és az ANCHOR-algoritmust a rendezetlen fehérjék, fehérjeszakaszok és az azokon található funkcionális helyek szekvenciából történő becslésére. Legnagyobb vissz-

hangja a transzmembrán fehérjék szerkezet-szerveződése elméleti fizikai leírásának volt. A „Highly Cited Researchers 2014” lista három magyarországi kutatójának egyike. A Magyar Bioinformatikai Társaság elnöke.

*Mi volt az a döntő mozzanat az életében, ami erre a pályára vitte?*

Bioinformatikus vagyok. Ehhez legalább három döntő mozzanat kellett. Az első és meghatározó még iskolakezdés előtt történt. Koraérett voltam, feltűnően jól számoltam. Elkerülendő az ebből adódó esetleges problémákat, a Gyermeklélektani Intézetben azt javasolták szüleimnek, hogy hatéves koromban vizsgálzzak le az első osztályos anyagból, és második osztállyal kezdjem az iskolát. Az a tény, hogy fiatalabb voltam osztálytársaimnál, évfolyamtársaimnál, mindvégig speciális státust jelentett, és önbizalmat adott, akkor is, amikor nem voltam olyan jó tanuló. Biztos voltam benne, hogy valamilyen tudományos vagy mérnöki pályára kell kerülnöm.

A második mozzanat, hogy fizikusi diplomával nem találtam fizikus kutatói állást, biofizikusit viszont igen. Csak rövid időre terveztem itt dolgozni. Ez negyvenhét éve történt. A kezdeti sikerek miatt azonban maradtam az akkor szinte kizárólag kísérletes tudománynak számító biokémia/biofizika területén, noha mindig az elméleti munka érdekelt jobban. Később lassan sikerült elfogadtatni, hogy az elméleti és numerikus módszereknek is van létjogosultságuk.

A harmadik, igen szerencsés mozzanat a kilencvenes évek közepén következett be. A genom-projektek sikerei és a világháló kialakulása következtében létrejött egy új tudományterület, a bioinformatika. Mióta dolgozom, mindig ilyennel akartam foglalkozni. Ennek megfelelően, bár az első cikkemet

1971-ben publikáltam, az elmúlt húsz évben jelent meg a cikkeim hetven százaléka, és ezekre kaptam hivatkozásaim közel kilencven százalékát.

*Mi volt az az eredmény munkája során, amelyre igazán büszke?*

A kutató általában arra büszke, ha jelentősen hozzájárult tudományterülete ismeretanyagához. Fiatalabb koromban több fontos fehérje szerkezetéről publikáltunk kísérletes eredményeket. Később elméleti és numerikus módszerek alkalmazásával közöltem hasonlóan hasznos információkat fehérjéről, sőt ezekkel a módszerekkel a különböző típusú fehérjék szerkezet-szerveződésének megértéséhez is hozzájárultunk. A fehérjetudomány fejlődése szempontjából azonban valószínűleg sokkal nagyobb szolgálatot tettünk a világhálón elérhető tucatnyi szerkezetbecslő módszer és számos adatbázis megalkotásával. A hivatkozásokból láthatóan ezek sok ezer további eredeti közlemény megszületéséhez járultak hozzá. Ez a másodlagos hozzájárulás

valószínűleg fontosabb volt, mint a primer eredményeink közlése. Ezért vagyok büszke a diákjaimmel, munkatársaimmal publikált webszerverekre és adatbázis szerverekre.

*Magányos kutató vagy inkább csapatjátékos?*

Az általam művelt tudományterületeken – biofizika, biokémia, számítógépes kémia és bioinformatika – ritka az egyszemélyes eredeti közlemény. Ennek ellenére saját csoportom 1987-es létrehozásáig megjelent tizenkilenc közleményből hat volt egyszemélyes eredeti cikk. Az ezután megjelent több mint száz közleményből viszont már csak egy volt egyszemélyes cikk, és az sem eredeti közlemény volt. Szerencsére csoportomhoz tehetséges diákok csatlakoztak, így a csapatjáték velük folytatódhatott, az én feladatom pedig az utolsó szerző szerepe lett. Ennek a dinamikus csapatnak minden egyes tagja jelentősen hozzájárult az utóbbi évtizedek nagy sikerű cikkeihez. Büszke vagyok rájuk, és szerencsésnek érzem magam, hogy a csoportomban növekedett kollégák önállóan is sikeres kutatók lettek.

