

Bírálat

Csizmadia G. Imre „A szerves kémia digitalizációja” című MTA doktori dolgozatáról

Csizmadia Imre professzor emeritus a kvantumkémia nemzetközi szinten is ismert kutatója, a Magyar Tudományos Akadémia külső tagja, az MTMT szerint – összhangban a *Web of Science* adatbázissal – 488 külföldi folyóiratban megjelent cikk szerzője, amelyekre összesen 7403 (5118 független) hivatkozás érkezett, H-indexe 43. Tudományos eredményei messze meghaladják az MTA doktora cím elnyerésének követelményeit, viszont a munkáira kapott hivatkozások száma lényegesen elmarad a kvantumkémia nemzetközi nagyágyúinak (pl. Pople, Schaefer, Morokuma, stb.) adataitól.

A dolgozat tézises formában, a tradicionálistól eltérően történeti elbeszélés stílusában íródott, és a szerző kvantumkémiai munkásságának fél évszázados történetét foglalja össze. A rövid, 37 oldalas értekezés Csizmadia Imre életútjának és motivációinak bemutatásával kezdődik, amit egy 3 mondatos deklaráció és egy 3 oldalas Bevezetés követ, felsorolva a professzorrá lett tanítványokat (20 fő, bár nem mindegyik professzor a szó magyar jelentése szerint), ezzel is bizonyítva a szerző iskolateremtő tevékenységét. Az alkalmazott módszereket tömören, 9 sorban foglalja össze. Ezt követi a 8 tézispont kifejtése 15 oldalas terjedelemben. A tézispontok megfogalmazása formabontó, különösen az utolsó, és jól szemlélteti a dolgozat stílusát és tartalmát, ezért idézem őket:

1. tézis: A legelső lépések, a szerves kémia digitalizációjának kezdete
2. tézis: Első lépések és első eredmények, molekulák szerkezete és tulajdonságai
3. tézis: Félúton a valós alkalmazások irányába, potenciális energia- és hiperfelületek
4. tézis: Az első valós, ipari alkalmazások és reakciómechanizmusok
5. tézis: Irány a biokémia, peptidok szerkezetvizsgálata kvantumkémiai módszerrel
6. tézis: Fizikai szerves kémiai koncepciók
7. tézis: Gyógyszeripari alkalmazások, a penicillin hatásmechanizmusának vizsgálata
8. tézis: Jövőképem

A dolgozat az utolsó (Jövőképem) tézispont 9 oldalas kifejtésével és az értekezés alapjául szolgáló 46 saját referencia felsorolásával zárul. A jövőbeli célok kétségtelenül ambiciózusak és üdvözlendőek, viszont a dolgozat nem győzi meg a bírálót ezen célok realitásáról. Mivel kutatóként támogatom az újításokat és a megszokottól eltérő megközelítéseket, a fenti tézispontokat a formabontó stílus ellenére elfogadom.

A dolgozat a rövid terjedelem ellenére sok elírást, formai hibát tartalmaz. A rövidítések feloldása számos helyen elmaradt és a reakcióegyenletek szerkesztése nem nevezhető igényesnek. Az eredmények leírása elnagyolt, kevés konkrétumot tartalmaz, persze ez részben magyarázható a történeti elbeszélés stílusával. Figyelembe véve a szerző több, mint

fél évszázados munkásságát és eredményeit, a stílust támogatom, sőt fiatal elméleti kémikusként kifejezetten érdeklődéssel olvastam a dolgozat történeteit. Viszont hiányérzetem is maradt, örültem volna bizonyos részek részletesebb kifejtésének, akár szakmai, akár tudománytörténeti szempontból. Kiemelendő, hogy a dolgozatot áthatja a számítástechnika jelentőségének hangsúlyozása, amit magam is fontosnak tartok, és a legtöbb esetben egyetértek a szerző állításaival.

A dolgozat tanulmányozása során az alábbi kérdések merültek fel bennem, amelyek az értekezés szakmai mélységéhez és stílusához illenek:

- (1) A szerző közel 20 éve visszatért hazánkba. Miért most jutott arra az elhatározásra, hogy beadja az MTA doktori dolgozatot?
- (2) Véleményem szerint a reakciómechanizmusok megértése túlmutat a stacionárius szerkezetek feltérképezésén, a reakciódinamikai szimulációk adhatnak mélyebb betekintést a kémiai folyamatok világába. Ilyen szimulációkról nem esik szó a dolgozatban. A dinamika elméleti leírása nem része a kémia digitalizációjának? Ha igen, ennek fényében hogyan látja a terület jövőjét?
- (3) Mi az, ami álom és mi az, ami realitás a jövőképben megfogalmazott célok tekintetében?

A dolgozattal kapcsolatos kritikai megjegyzéseim fenntartása mellett a határozott véleményem az, hogy Csizmadia Imre eredményei alapján kétségtelenül megérdemli az MTA doktora címet, így támogatom a nyilvános védés kiírását.

Szeged, 2022. március 9.



Czákó Gábor

az MTA doktora