

## Válasz Dr. Czakó Gábor bírálatára

Először is hadd köszönjem meg a bírálatra szánt idejét, az igen alapos munkáját és a jobbítás irányába tett javaslatait. A továbbiakban nemcsak a konkrét kérdésekre, hanem a bírálat során előkerülő egyéb kritikai megjegyzésekre is reagálnék az alábbiakban.

Az akadémiai doktori dolgozat, még ha tézis formában is íródott, egy kutató életművét hivatott bemutatni, amely rendszerezve összefoglalja az évek (évtizedek) során elért tudományos eredményeket. Véleményem szerint, egy ilyen átfogó mű megírása során a szerzőnek talán van joga, de legalábbis lehetősége egy akár saját szubjektív sorrendet is követni. Ehhez kb 20 tudományos publikációt szoktak javasolni kiválasztásra, melyek a legnagyobb impaktot hozták a karrierje során, illetve a ő maga a legfontosabbnak ítél az életében. A kiválasztás a jelöltre van bízva és így mindig önkényes. Ennek az iránymutatásnak megfelelően jómagam kb 40 publikációt szemezgettem ki a 488 publikációm közül. Kérem higgyék el, ez nem volt könnyű feladat.

Bírálóm kritikai szemmel elemezte az általam elért összesített impakt faktort és az akkumulált hivatkozások számait. Szeretném megjegyezni, hogy ez a tudományos pontgyűjtögetés, azaz tudománymetria, csupán a digitalizációval, 1990 óta kezdődött és csak az ezredfordulón kezdett valódi paramétert jelenteni egy kutató teljesítményének megmérésére.

- 1) Jelenleg, én csak sajnálhatom, hogy a 1990-es évek előtti mérőszámaim igazából nem léteznek, de véleményem szerint 1963-tól kezdődő és 1990-ig tartó 27 éves időszakra, amely az én aranykorom volt, is magas tudománypontokat kapnék.
- 2) Természetesen, mivel az évek növekedésével egyre több és több publikáció kerül közlésre és ezek hivatkozzák egymást ezek a megszerezhető tudománymetriai pontszámok exponenciális növekedéshez hasonló görbét mutatnak az évszámokkal. Ezek alapján, egy mai kutató akár 10 év alatt is össze tud gyűjteni közel annyi „tudománypontot”, mint egy idősebb kolléga a teljes karrierje során.
- 3) További hátránynomnak tekintem, hogy a hivatkozások életideje kb. 10 évre tehető, tehát az én 1990-es évek előtt írt dolgozataim már nem is fognak hivatkozási pontokat termelni, mivel a legtöbb kutató már nem is hivatkozta az 1980 előtti közleményeket.

De ezek mellett is értem vagy érteni vélem a tisztelt Bíráló azon érvelését, hogy a kvantumkémiai „igazi” nagyágyúk több „tudománypontot”, azaz hivatkozást és impaktot szereztek nálam és elfogadom, hogy manapság már csak ez az egy keretrendszer számít. Ha drámai példával akarunk élni, az általam igen nagyra tartott Schrödinger sem szerzett sok tudománymetriai pontszámot, bár mindenképpen el szeretném kerülni az összehasonlítást.

Ezzel kapcsolatban szeretném felhívni a lelkes, fiatalabb kollégák figyelmét, hogy rajtam kívül számos elismert kutató, több Nobel-díjas tudós is többször felhívta már a figyelmet arra, hogy csupán a mesterségesen is befolyásolható tudománymetriai mérőszámok összehasonlítása egy teljesen eltorzított képet alakíthat ki a kutatókról és általuk űzött tudományterületekről. Érett kutatóként különösen nagyon kritikusan kellene kezelnünk ezeket az adatokat.

Bírálóm megjegyezte, hogy az általam kinevelt és felsorolt több mint 20 professzorból nem mindenki felel meg a hazai egyetemi tanári kategóriánka. Kutatói életem nagy részét, azaz 45 évet a nyugati világ egyetemi rendszerében töltöttem, így engedtessek meg nekem, hogy én a dolgozatomban használt és a nyugati típusú egyetemeken bevett professzori kategorizálást használjam. Ha ez bárkinek új lenne, elmondanám, hogy a nyugati nómenklatúrában van „assistant professor”, „associate professor” és „full professor”, amelyek közül a magyar rendszerben csupán a „full-professor” számít igazi egyetemi tanárnak. Az általam megadott professzori lista az általam kinevelt és nyugati rendszerben valóban professzorrá avanszált személyeket gyűjti össze, akik komoly karriert futottak be és nagy részével a mai napig személyes kapcsolatban vagyok.

Külön hálával tartozom Bírálómnak, hogy korábbi poszt-dokom, majd kiváló kollégám dr. Schaefer-t és dr. Pople-t is megemlíti a kvantumkémiai nagyágyúk között. A Kingston-i egyetemen doktorált Schaefer 1965 után csatlakozott a csoportomhoz és a Torontó-i egyetem számítógén végezte számolásait részben az én iránymutatásaim alapján, így én őt is a tanítványomnak tartom. De ha már a nagyoknál maradunk, akkor dr. Schaefer is csupán csak egy azok közül, akiknek korai életszakaszában reményeim szerint valódi inspirációt és lehetőséget adhattam. Ennél a pontnál szeretném hangsúlyosan megjegyezni, hogy én sokkal büszkébb vagyok a kezem alatt kinevelt diákok, majd későbbi professzorok karrierjére, mint hogy a saját tudományos pontszámaim végeredményével büszkélkedhessek, mint ahogy ez ma trendszerű.

Ezt az iránymutatást vagy életfilozófiát az én korábbi mentoromtól dr. Slater-től kaptam (1962–1964), aki szintén többre tartotta a jövő kutatógeneráció kinevelését, mint a saját látszólagos karrierjének építését. Ő szintén arra volt büszke, ha a diákjai tehetségesebbek, okosabbak és sikeresebb kutatók lesznek, mint ő maga volt. Örömmel emlékszem a vele töltött értékes időkre.

A felsorolt nagyágyúk között, dr. Pople is szerepelt és nekem volt vele is szakmai kapcsolatba kerülni a 60-as években. Ekkoriban a kutatók még elsősorban semi-empirikus megközelítést használtak. 1963-ban a csoportunkban megírásra került POLYATOM program és Franciaországban erről tartottam előadást. Az előadásom végén Pople megkérdezte tőlem, hogy hogyan számoljuk az integrálokat és egy hosszú megbeszélés után megígértem, hogy elküldöm a kódot. Pople, a vállalatának megalapítását követően és persze jelentős fejlesztések után megjelent a Gaussian 70, melyet az általunk, 1963-ban kidolgozott algoritmusra épült. Bevallom, a későbbiekben már mi is a Gaussian programot használtuk, mivel az már professzionális keretben működött.

A dolgozat rövid, tézises terjedelméből adódóan, a Bíráló által kifogásolt hiányosságok, így például a módszerek részletes ismertetésére és több tudományos konkrétum valóban kimaradt. Ezen a ponton, így utólag egyet kell értek, hogy egy kicsit több tudománytörténeti háttéranyag színesítette volna a dolgozatot, azonban az idő és az oldalszám is keretet szabott.

Az ábrák és reakcióegyenletek szerkesztésénél több helyen igyekeztem, az eredeti publikációból áttemelni a grafikai anyagot, mint ahogy ezt több korábbi dolgozatok esetében is többször láttam és azt gondoltam, hogy ez elvárt. Ezek az ábrák természetesen az adott kor

technikai színvonalát is tükrözik. Ahol nem volt korábbi ábrám, ott segítséget kérve újra rajzoltam a képleteket ChemDraw-val.

**A Bíráló több konkrét kérdéssel is megtisztelt, amelyekre alább válaszolok.**

(1) *„A szerző közel 20 éve visszatért hazánkba. Miért most jutott arra az elhatározásra, hogy beadja az MTA doktori dolgozatot?”*

Az akadémiai doktori fokozat megszerzésével igazából az utolsó hivatalos egyetemi pozícióm megszüntetése után került. Ekkor már betöltöttem a 80-at és abba kellett hagynom a diákokkal való foglalkozást. Leegyszerűsítve, időm lett arra, hogy nekiálljak, korábban nem volt időm. Azt azonban szeretném itt megjegyezni, hogy a dolgozatot én 2018-ban beadtam, mely igen hosszadalmas, ezeddig négyéves procedúrán ment át. Jómagam is rövidebb folyamatra számítottam, és örülök, hogy most itt állhatok.

(2) *„A reakciódinamikai szimulációkról nem esik szó a dolgozatban. A dinamika elméleti leírása nem része a kémia digitalizációjának? Ha igen, ennek fényében hogyan látja a terület jövőjét?”*

A Bíráló kérdésével és rejtett véleményével teljes mértékben egyetértek. A kémiai rendszerek dinamikus rendszerek és talán a végső és leginkább helyes megközelítést a kvantumkémiaiával kapcsolt molekuladinamikai leírásmód adhat. Én még a relativisztikus leírásmódot is ide csatolnám, mivel nézetem szerint összességében ennek is jelentős hatása van a könnyűatomok, és főleg a hidrogénatomok viselkedésének leírására. Gondoljunk csak az alagúteffektusra.

Sajnos, az én világomban erre még esély sem volt. Kezdetekben még a statikus leírásmód is szenzáció volt. Azért nem beszéltem erről, mert ennek az igen modern és fontos területnek nem vagyok szakértője. Azonban, ennek ellenére foglalkoztam dinamikai problémákkal, csak a dolgozatomban erre nem tértem ki. Michael Owen-nel együtt végeztünk molekuladinamikai számításokat az alfa szénatomon gyököt viselő aminosavból felépített peptidek konformációs viselkedését, mely az Alzheimer kór kialakulásának egyik lehetséges módja. A gyökös aminosavra új molekuladinamikai parametrizálást végeztünk sikerrel, kimutatva, hogy ezek az aminosavak hajlamosak béta szerkezetet kialakítani és elvezetni a plakkképződéshez.

(3) *„Mi az, ami álmok és mi az, ami realitás a jövőképpen megfogalmazott célok tekintetében?”*

A jövőkép se nem álom, se nem realitás. A jövőkép mindössze azt jelenti, hogy kvantumkémiai számítások segítségével meg tudjuk jósolni energetikai alapon, hogy egy kérdésre hipotetikus reakció kivitelezhető-e vagy sem. Más szóval kifejezve mindez a kvantumkémia predikciós erejéről szól, melyben én mélységesen hiszek. Nagyon fontosnak tartom, hogy kutatóként legyenek vízióink, merjünk olyan problémákat, megoldandó feladatokat felvázolni, ami forradalmian megváltoztatja a jelenünket. A legtöbb elismert kutató is ilyen víziókban hisz vagy hitt, ez tesz minket igazán kutatóvá.

**Végül utólag szeretném ismét megköszönni a dolgozatomban bírálatára szánt időt.**

**Budapest, 2022 május 6.**

**Csizmadia G. Imre**