

Válasz Dr. Szalay Péter bírálataira

Ez úton szeretném megköszönni a bírálatra szánt idejét, az igen alapos munkáját és a jobbítás irányába tett javaslatait. Hálás vagyok a kommentjeiért. A továbbiakban nemcsak a konkrét kérdésekre, hanem a bírálat során előkerülő egyéb kritikai megjegyzésekre is reagálnék.

Az akadémiai doktori dolgozat, bár tézis formában íródott, egy kutató életművét hivatott bemutatni, mely összefoglalja az évek során elért tudományos eredményeket. Ennek tükrében én sem tehettem mást, és kénytelen voltam az életem során publikált munkákból összefűzni a dolgozatom egy logikusnak szánt szálon. Mások eredményét nem tehettem bele. Véleményem szerint egy ilyen átfogó mű megírása során a szerzőnek van joga, talán legalábbis lehetősége, hogy egy saját, szubjektív sorrendet kövessen. Természetesen elismerem, hogy 1963 óta a számításhoz kémia hatalmasat ugrott előre, részben a matematikai módszertan fejlődésével, részben a számítástechnika hihetetlen kapacitásnövekedésével. Szándékom jelen esetben nem is az volt, hogy az akkori régmúlt világ eredményeivel vetélkedjek a jelenkor tudományos színvonalával szemben. Esélyem sem lenne, mivel ma egy telefonnal ki lehet számolni egy olyan eredményt, amire mi heteket vártunk. Igen, a modern világ győzött velünk szemben! Szándékom szerint csupán egy történeti összefoglalót írtam, amely részben a saját történetem is.

A dolgozat rövidegsége a tézisformának köszönhető. Azonban mivel ma főleg csak írok és időm az van, így a 37 oldal helyett akár 370 oldalt is beadhattam volna, de ez nyilván nem lehetett cél. A különös felépítés valóban a szokatlan helyzetnek köszönhető, mivel jómagam csak az aranyévet követően és évtizedekkel később folyamodtam a bizottság elé a cím megítélése céljából. Én eleve szokatlannak tartom, hogy egy kutatói életpályát dolgozat formában is be kell nyújtani, mivel a már elbírált tudományos publikációk talán önmagukban is megalapozzák és validálják egy kérelem elbírálásnak lehetőségét. Egy ilyen dolgozat mindenképpen számos jogos kritikai észrevételt generál, mivel a bírálónak bírálni kell és nem dicsérni, a szerző meg hibákat követhet el.

A második tézispont esetében a Bírálói felvetés valóban tetszetős. Itt a 30-as években, Dirac-tól származó idézet, amikor a kémiai tulajdonságokat visszavezették a kvantumkémia alapokra valóban lényegre törő. Azonban ebben az időben, pl Hückel idejében is, ezek a gondolatok szinte filozófikus szinten voltak értelmezhetőek, az elméleti kémiának a konjugáció és az aromaticitás/antiaromaticitás értelmezésétől eltekintve szinte semmi hatása nem volt a kísérleti kémiára. A tézispontbeli kijelentésem, amely talán túlzó volt, arra utal, hogy az általam is végzet kutatói munka, csak ebben az időben bizonyította valójában a számításhoz kémia alkalmazhatóságát, bár az kvantumkémiai elméletet ekkor már szinte mindenki elfogadta.

A harmadik tézispont esetében munkásságom a potenciálfelületek első szisztematikus és teljeségre törekvő számítását mutatta be, amely akkoriban az elsők között adta vissza a klasszikus kémiai szemléletet. A tézispontban nem az elsőbbségre szerettem volna felhívni a figyelmet, hanem a rendszerszerűsége, a kémiai intuícóra.

A hetedik tézisponttal kapcsolatban, hadd engedjek meg egy őszinte vallomást. A dolgozat kritériuma alapján a jelölt azoknak a munkáknak a kiválasztására van bátorítva, amelyeket ő maga fontosnak és relevánsnak ítél. Én ezt a publikációm, természetesen a társzerzőkkel együtt, az életművem egyik legfontosabb eredményének ítélem, annak ellenére, hogy ezt a tudományometriai pontszámok nem tükrözik. Ezt az elfogult véleményem annak tudom be, hogy ez a munka talán nevezhető egy olyan eredménynek, amikor kvantumkémia segítségével adunk egy lehetséges választ egy igen fontos gyógyszer, a penicillin típusú antibiotikumok működésére. Ha jól ellenőriztem, ma már 14 független idézete van, de bízom benne, hogy 10 év múlva már ez lesz az egyik fő idézet publikációm, mivel a gyógyszertervezésben ennek jelentősége véleményem szerint hatalmas.

A nyolcadik tézisponttal kapcsolatban elfogadom a Bíráló azon kijelentésével, hogy a jövőbeni tervek általában nem szerves része egy MTA doktori dolgozatnak, de úgy éreztem, hogy életművem összefoglalása során nem mehetek el jövőbeni terveim, vízióim bemutatása mellett. Elfogadom, hogy a fejezet mérete és súlya lényegesen nagyobb, mint amit általában egy ilyen szakasznak szánnak. Mindenképp szeretném megjegyezni, hogy az elmúlt néhány évben, a dolgozatom első benyújtása óta, a preparatív és az elméleti szerves elektrokémia is az egyik legintenzívebben növekvő kutatási iránnyá vált. Talán szomorú, de úgy éreztem, hogy az izoláltságomban (COVID és műtétek miatt) már csak ez a fórum maradt számomra.

Végül utólag szeretném ismét megköszönni a dolgozatom bírálatára szánt időt.

Budapest, 2022 május 6.

Csizmadia G. Imre