

## Bírálat Csizmadia G. Imre *A szerves kémia digitalizációja* című doktori értekezéséhez

Szokatlan helyzet előtt állunk, hiszen az Akadémia külső tagjának akadémiai doktori disszertációját kell értékelni. Ez nem egy tipikus helyzet. Szokatlan azért, mert kész életmű szolgál a disszertáció alapjául és szokatlan azért is, mert ez az életmű minden tekintetben felülmúlja a szokásos, az elvárt és minden bizonnyal az összes ilyen értekezés alapjául szolgáló munkák súlyát. A szokatlan helyzet szokatlan megoldásokra ad lehetőséget, amivel a pályázó élt is és a bíráló is ehhez a helyzethez alkalmazkodik.

A disszertáció egy nagyon izgalmas életutat követ, Kanadától az USA-t érintve Magyarorszáig. Ez a történet olyan óriások pályájával fonódik össze, vagy zajlik egyidőben és nagyon közel egymáshoz, akiknek a munkáira és eredményeire a modern számításon kémia rendkívül nagymértékben ráépül: Slater, Herzberg, Sandorfy, Bader, Valleau, Huzinaga, Paldus, Rauk, Boyd, stb.

A disszertáció egy hatalmas és gazdag életút keresztmetszetét, illetve inkább néhány szeletét exponálja. A vezérfonal a szerves kémia. A szerző a rövid, tézises dolgozat formát választotta a nagylélegzetű, minden kiválasztott témát részletesen bemutató értekezés forma helyett. Szerintem ez remek választás, a kiválasztott munkák és eredmények jól vezérfonalra fűzhetők és az egész mű könnyedén áttekinthető. (Zárójelben jegyzem meg, hogy szerintem az értekezés forma fölösleges erőfeszítés: mind a pályázónak, mind a bírálóknak szükségtelen nehezítést jelent, és esetleges, szerintem nagyon limitált haszna messze nem áll arányban a ráfordított energiával és erőforrásokkal, amelyeket sokkal értelmesebben is lehetne hasznosítani - különösen olyan motivált és sikeres kutatók esetében, akik éppen az akadémiai doktori címre pályáznak.)

A disszertáció címe igen érdekes és annyiban újszerű, hogy egy általános, a szerző munkásságát is magába foglaló folyamatot, trendet exponál (*A szerves kémia digitalizációja*), amibe a szerző a kiválasztott eredményeit beilleszti. A "digitalizáció" szó több konnotációt is megenged; maga a disszertáció a kevésbé tipikus értelemben használja, vagyis a kvantumkémia szerves kémia területén történő alkalmazását érti ez alatt. Ma már természetesen ideérthető a mesterséges intelligencia használata is, például szintézistervezésnél, új szintetikus stratégiák kidolgozásánál; ugyanakkor továbbra is ideérthető a tipikus, a hagyományos "digitalizáció" jelentéskör, azaz a szerves kémiai adatbázisok létrehozása, fejlesztése és ezeknek az adatbázisoknak a használata a napi rutin során.

A disszertáció kronológiai sorrendben tekinti át a szerző által fontosnak ítélt eredményeket, miközben szélesebb perspektívába is helyezi azokat. A kronológiai sorrend együtt jár azzal, hogy a bemutatott rendszerek komplexitása egyre növekszik. Ez lehetőséget teremt arra, hogy érzékelhessük, hogyan növekedtek a modellezni kívánt méret és időskálák és mindezt hogyan tette lehetővé az elérhető számítási kapacitás szédületes növekedése. Érzékeltetésül: az első, a disszertációban bemutatott munka 4 atomos molekulán készült (HCOF), míg egy jóval későbbi, a penicillin hatásmechanizmusát elemző cikkben ab initio számítások és klasszikus dinamikai számítások kombinációjáról van szó, ahol a docking site ab initio modellezése mintegy 150 atomot jelent, míg a fehérje részlet több, mint 3000 atom

(persze itt klasszikus számításról van szó, ahol a jelenlegi kapacitások még több nagyságrendet megengednének).

A bemutatott eredmények a maguk idejében legtöbbször élvonalbeliek, state-of-the-art kategóriások voltak. Például a HCOF számítás a maga idejében az első szerves molekulán végzett ab initio számítás volt. (Azonban érdekes kérdés, hogy vajon a számítási kihívásokat érdemes-e azzal szemléltetni, hogy egy molekula szerves-e, vagy szervetlen.) A problémák, amelyeket a disszertációban felsorakoztatott cikkek tárgyalnak, - különösen a korábbi munkák - az alkalmazott módszerek és számítástechnikai kapacitások határait feszegették. Az újdonságok közül még kiemelném a konformációs analízis munkákat, azokon belül is a Ramachandran plotok úttörő számítását, valamint a számítástechnikai kémia alkalmazását heterogén katalízis problémákra.

A tézises fejezetre bontás olvashatóssá teszi a disszertációt, az egyes tézisek megfelelő kritériumok az eredmények tagolására. Míg 7 tézis az eredményeket mutatja be, a 8. tézisben a szerző a jövőképét és terveit vázolja fel. Itt találjuk a legszorosabb értelemben vett tézist is: *erős paradigmaváltással meg kell alkotni a jövő kémiájának a koncepcióját: át kell állni a reagenskémia-ról a katalitikus kémiára; a jövő kémiájában szinte minden lehetséges szerves vegyületet (a polimerekhez szükséges monomerektől a gyógyszer-molekuláig) elő lehet állítani katalitikus elektrokémiai reakcióval, ha a szintézist redoxireakcióvá lehet alakítani* (nem szó szerint vett idézet). Ez az előretételezés igen merész és ahogy a leírásból is kiderül, az odavezető út csak nagy vonalakban ismert. Elektrokémiai szintetikus stratégiák már ma is igen aktívan jelen vannak a szerves szintetikus kémiában, például elektrokémiai gyökös stratégiák, vagy elektrokémiai C-H aktiválás, mindez kombinálva katalízissel. Mindazonáltal vannak az alkalmazásokban korlátok és éppen ezért szívesen hallanék arról, hogy ez az új paradigma, a katalitikus elektrokémiai szintézis hogyan kíván a fellépő mellékreakciók tömegével megbirkózni, hogyan lehet majd a várható mellékreakciók reakciók visszaszorítását elérni, hogyan kívánja a szelektivitási (kemo- regio- és sztereoszelektivitási) kérdéseket kezelni és a szerteágazó, de releváns közgazdasági aspektusokat számításba venni.

Összefoglalóan megállapítom, hogy Csizmadia G. Imre munkája minden tekintetben megfelel az MTA doktori kritériumoknak; minden tézist elfogadok új tudományos eredményként és feltétel nélkül javaslom a cím odaítélését. Ezek alapján természetesen a doktori művet nyilvános vitára is alkalmasnak tartom.



Stirling András

Budapest, 2022. február 21.