

Dr. Mátyus Edit
ELTE, Kémiai Intézet
Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.

Prof. Dr. Stirling András

Természettudományi Kutatóközpont
Elméleti Kémiai Kutatócsoport
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

Válaszok Prof. Dr. Stirling András bírálatára

From Molecular Spectroscopy to Molecular Physics MTA doktori értekezés

Tisztelt Professzor Úr!

Hálás köszönettel olvastam a Magyar Tudományos Akadémia Doktori Titkárságának benyújtott értekezésemhez írt bírálatát. Úgy érzem, hogy nem tudom eléggé megköszönni az idejét, amelyet az anyag, valamint a csatolt közlemények áttanulmányozásával, majd a bírálat megfogalmazásával töltött. Ebben a levélben szeretnék válaszolni a bírálatában megfogalmazott kérdésekre és észrevételekre: idézem a Bíráló kérdését, majd az idézet alatt válaszolok a kérdésre.

“A címlapon a szerző az értekezés címét követően azt írja, hogy "submitted in partial fulfillment of the requirements for the Doctor of the Hungarian Academy of Sciences title". Kérdésem, hogy mire utal itt Mátyus Edit, miért érezte szükségesnek ezt a kijelentést?”

- Valóban, nem szükséges a címlapra írni ezt a szöveget. Az anyag összeállításakor éppen egy amerikai (PhD) disszertációt forgattam sokat, amelyen szerepelt egy hasonló kifejezés, ezért juthatott eszembe ráírni. Arra gondoltam, hogy ez a dokumentum a teljes MTA doktori anyagnak csak egy része, de természetesen nagyon fontos része.

“A disszertáció vezérfonala a molekuláspektroszkópia, ezt két, egymással érintkező területen folytatott kutatásokban foglalja össze az értekezés. Magának az értekezésnek a formája (Az MTA Kémiai Tudományok Osztályának doktori követelményrendszere alapján) nem volt egyértelmű: a publikációk csatolása az értekezéshez és a kb. 50 oldalnyi szöveg az ún. rövid értekezés formát jelzik, de maga az értekezés távolról sem volt rövid: a sorok száma jóval több a szokásosnak, ráadásul a szokásosnál több karakteresek a sorok, ami azt jelenti, hogy ha más adja be ezt az értekezést, akkor az tipikusan mintegy 100 oldalt is meghaladó lesz, azaz a klasszikus Értekezés szövegmennyiséggel állunk szemben.

Ugyanakkor ennek a formának a kritériumait nem teljesíti az értekezés, mert nem "minden tekintetben komplett és önmagában (a mögötte álló cikkek áttanulmányozása nélkül) értelmezhető és értékelhető munka. Tartalmaz alapos célkitűzést, részletes, tételes irodalmi előzményeket, megadja az alkalmazott módszereket és értékelési eljárásokat, az eredmények elemző tárgyalását, további kutatási ajánlásokat, és természetesen a saját és a felhasznált irodalom jegyzékét. Az érdemi leíró rész terjedelme 70-150 A4-es oldal." (idézet a fenti követelményrendszer 1a pontjából). Kérdésem: Mátyus Edit melyik értekezés formát választotta?"

- A rövid értekezés formát választottam, amely egy review-szerű áttekintést ad a kutatásokról.

"Egy másik probléma tartalmi. A 2. és 3. fejezet elhanyagolható kivételtől eltekintve szó szerinti másolata a korábban említett egy-egy összefoglaló közleménynek. Ezeket a közleményeket társszerzőkkel írta Mátyus Edit. Ezért meglepetés, hogy szinte teljes egészükben, változtatás nélkül jelennek itt meg az egyszerezős értekezésben. Természetesen nem vitatom, hogy mindegyik munkában meghatározó jelentőségű Mátyus Edit részvétele, hogy ő az, aki a felkéréseket kapta, és emiatt születtek meg ezek a kiváló minőségű összefoglaló művek. Arról nincs tudomásom, hogy van-e, vagy nincs-e konkrét szabályzás azzal kapcsolatban, hogy lehet-e közös munkákat saját név alatt futó értekezésbe ilyen terjedelemben szó szerint átvenni. Viszont nem tartom követendő példának ezt a stratégiát. Kérem Mátyus Editet, hogy fejtse ki ezzel kapcsolatban az álláspontját!"

- Valóban, a téziszüzetben dokumentálva van, amit a Bíráló itt kiemel. Képként beszúrom ide a megfelelő részt (a pirossal megjelölt szöveg linkelve szerepelt az online elérhető anyagra):

V. A DOKTORI ÉRTEKEZÉS ALAPJÁUL SZOLGÁLÓ SAJÁT KÖZLEMÉNYEK

Az értekezés összeállítására folyamán meghívást kaptam az American Chemical Society (ACS) és a Royal Society of Chemistry (RSC) folyóirataitól, hogy írjak összefoglaló-kitekintő cikkeket a kutatócsoportom elmúlt években elért kutatási eredményeiről. Ezen meghívásoknak eleget téve az értekezés 2. és 3. fejezetei elbírálás, illetve a pályázat hivatalos benyújtásának idején (2022.12.08-án) megjelenés alatt állnak:

- Exact quantum dynamics developments for floppy molecular systems and complexes, E. Mátyus*, A. Martín Santa Daría, and G. Avila, *Chem. Comm.* (in press). [invited Feature Article, közlésre elfogadva: 2022.11.23-án] (selected as 2022 HOT Chemical Communications article & inside Front Cover of the journal)
- The Bethe-Salpeter QED wave equation for bound-state computations of atoms and molecules, E. Mátyus*, D. Ferenc, P. Jeszenszki, and Á. Margócsy, *ACS Phys. Chem. Au* (under review) [arXiv:2211.02389](https://arxiv.org/abs/2211.02389) [invited Review-Perpective Article]

A cikkek társszerzői kutatócsoportom tagjai, és nagy segítségemre voltak az ábrák elkészítésében, a hivatkozási listák kibővítésében, az egyenletek ellenőrzésében, valamint a teljes gondolatmenet és prezentáció megvitatásában. A bemutatott eredmények nem lezárt kutatások, hanem a kutatócsoport napi tevékenységének szerves részei, tudásunk és eszköztárunk folyamatosan alakul. Ennek megfelelően ma már bizonyos dolgokat kicsit másként írnék, fél év múlva pedig biztosan sokkal előrébb fogunk járni az elméleti vonatkozások jobb megértésében és az algoritmikus fejlesztésekben. Az anyagban maradt esetleges hibákért, pontatlanságokért természetesen minden felelősség engem terhel. Az áttekintő, összefoglaló munkákhoz tartozó eredeti kutatások bemutatása az alább felsorolt cikkekben olvasható.

Az MTA Doktori anyag nyomtatásakor még bírálat alatt volt a két cikk. Mire az MTA Doktori Titkárság által a teljes anyag hiánytalanul befogadásra került, az egyik cikket már elfogadta

a Chemical Communications. Néhány héttel később pedig a másik cikk is el lett fogadva az ACS Physical Chemistry Au folyóiratban.

Mindkét cikknek én vagyok az első és levelező szerzője, és 2022 tavaszán kaptam a meghívást a Chemical Communications, illetve az ACS Physical Chemistry Au újságok főszerkesztőitől egy-egy Feature / Perspective / Review Article beküldésére. A nagyon különböző lehetőségek és elvárások teljesítésére azt gondoltam, hogy ez az eljárás szolgálja leginkább a 'haladást' a 'maradás' helyett.

“Egy másik, szerintem alapvető probléma, hogy az értekezést nem a Kémiai Osztálynak, hanem a Fizikai Osztálynak kellett volna küldeni, és a Kémiai Osztály részéről hiba volt az értekezést befogadni. Az értekezésben felvonultatott tématerületek, azok módszerei, azok előzményei és kísérleti aspektusai, valamint a jövőbeli fejlesztések iránt várhatóan érdeklődő tudományos közösség tudományterületei számomra egyértelműen kijelölik, hogy ez az értekezés fizika és nem kémia. Természetesen van benne átfedés olyan területekkel, amelyek ma már a kémiához is tartoznak, de a teljes mű és az abban összefoglalt anyag nagyságrendekkel inkább a fizikus közösségre tartozik. Ugyanakkor kijelenthetem, hogy a bemutatott tudományos teljesítmény alapján Mátyus Editnek nincs szüksége arra, hogy ne a témához leginkább hozzáértő tudományos közösség bírálja el az értekezését. Kérdéseim: miért választotta mégis a Kémiai Osztályt? Minek alapján gondolja, hogy az értekezés anyaga inkább kémia, mint fizika?”

- Kétségtelen, hogy a szakterület a kémia és a fizika határterületén található, és hozzá kell tenni, hogy matematikai és számítástechnikai eszközöket, eredményeket is használunk. Három érvet gyűjtöttem össze a kémiai szakterületen történő besorolás mellett:
 - (1) Jelenleg az érintett szakterületet művelő nemzetközi közösség nagyon nagy része (Fizikai) Kémiai Intézet / Laboratórium professzora, de valóban vannak fizika, matematika, numerikus matematika professzor 'ismerősök' is.
 - (2) A fent említett Chemical Communications és az ACS Physical Chemistry Au folyóiratok inkább a (fizikai) kémia, mint a fizika, szakterülethez tartoznak.
 - (3) Professor Brian Sutcliffe, akinek 2005-ben Szent-Györgyi vendégprofesszori látogatása során volt lehetőségem hallgatni az előadásait az ELTE-n, azt mondta egyszer: 'aki molekulákkal foglalkozik, bizonyára kémikus'.

“Egy másik aspektusból is releváns az, hogy melyik tudományterülethez kell sorolni egy adott értekezést, vagy akár kutatási vagy ösztöndíjpályázatot: az egyes tudományterületekhez rendelt limitált erőforrásokat az adott tudományterületen belül lenne ideális elosztani. Azzal, hogy ilyen, sokkal inkább fizikához tartozó téma a kémia tudományterülethez rendelt anyagi és humán erőforrásokat használja,

egy csapással rontjuk a kémia és a kémia tudományterületen dolgozó kollégák versenyképességét és erősítünk egy konkurens tudományterületet kétféleképpen is: úgy is, hogy a kémia tudományhoz rendelt adófizetői pénzből más tudományterületet támogatunk; és úgy is, hogy emiatt ott várhatóan egy kevésbé érdemes pályázat is támogatáshoz jut. Kérem Mátyus Editet, hogy ezzel kapcsolatban is fejtse ki véleményét!”

- Azt gondolom, hogy napjainkban nagyon sok izgalmas természettudományos kutatás a hagyományosan kialakult tudományterületek határán/határain történik, és az interdiszciplináris megközelítés szükségzerű.

Tudományfinanszírozási és tudománypolitikai kérdésekben nincs elegendő tapasztalatom és rálátásom, ezért a kérdésnek erre a részére nem tudok érdemben válaszolni. Talán csak annyit fűznék hozzá, hogy tavaly hallottam egy EU-s pályázatokról szóló fórumon, hogy az MSCA és ERC támogatások odaítélésénél majdnem kötelező szempont, hogy a javasolt projekt valamilyen mértékben interdiszciplináris legyen.

“GENIUSH, QUANTEN programcsomagokat fejlesztettek a kutatásaik során. Kérdésem, hogy miért nem teszik ezeket a programcsomagokat nyilvánosan elérhetővé (pl. Githubon, vagy a saját honlapon keresztül), hogy a kutatói közösség is bármikor kipróbálhassa? A cikkekben semmi biztatót nem találtam azzal kapcsolatban, hogy ezek a programok rendelkezésre állnának mások számára: így elvileg független visszajelzést sem kaphatnak esetleges, a programcsomagokban eddig nem felderített problémákról, hiszen csak a bennfentesek és a program fejlesztői érhetik el a kódokat.”

- A kutatásaim jelentős része az egyenletek meg- és átfogalmazására, egy jól automatizálható algoritmus kidolgozására irányul. Ezek az elméleti, algoritmikus megfontolások a kutatási cikkekben részletesen szerepelnek. Az alkalmazások éppen csak az algoritmus használhatóságának demonstrálására szolgálnak. Ezek nem professzionális programok, éppen csak az ötletek kipróbálására szolgálnak.

Mindazonáltal nyilvánosságra lehetne (kellene) hozni a programok némely verzióját (például éves rendszerességgel), hozzáátéve, hogy részletes dokumentációra, verziókövetésre, user support-ra biztosan nem jutna kapacitásom.

Az én kutatói közösségeimben ugyanakkor (sajnos) nem szokás nyilvánosságra hozni ezeket az ‘in-house’ fejlesztett programokat. Sőt, azt tapasztalom, hogy az Open Data elvek is gyakran sérülnek (amely ellen bírálóként igyekszem fellépni, egyelőre kevés sikerrel). Véleményem szerint ez óriási probléma, és jelentősen hátráltatja a szakterület fejlődését, új csoportok bekapcsolódását. De mint tehetek én az ELTE docenseként? Hogyan tudom megváltoztatni egy nemzetközi közösség (esetleg rossz) kollektív viselkedését? (Azon

kívül, hogy 'irigykedve' figyelem a rokon szakterület gyakorlatát, amely szerint egy cikk megjelenését követő fél éven belül mindenki 'push'-olja a git-re a forráskódot?!) A saját eredmények nyílt hozzáférését illetően eddig úgy jártam el, hogy minden kéziratunk elérhető az arXiv preprint szerveren, és minden számítás – minimális számításos (energia) erőforrásokat igénylő – reprodukálásához szükséges adatot biztosítunk (Supplementary Material-ként, de nagyobb adatmennyiségekhez használnám a Zenodo adattárat).

Egyelőre a kutatócsoportom humán erőforrása lehetővé tette kutatási együttműködéssel kapcsolatos megkeresések teljesítését (pl. University of Göttingen, Weizmann Institute of Science), amely a meglévő programjainkban történő kisebb fejlesztési feladatok és a kapcsolódó számítások elvégzését jelentette a másik kutatócsoporttal közösen.

Köszönöm szépen a gondolatébresztő kérdéseket, valamint az anyag összességében kedvező értékelését.

Budapest, 2024. január 16.

Tisztelettel,



Mátyus Edit