

## Válasz Czako Gabor professzor ur biralatara

### Tisztelt Biralo!

Ezuton fejezem ki halas koszonetemet, hogy akademiai doktori értekezésemet részletesen áttanulmányozta, és arról alapos, szakmailag igényes bírálatot készített. Külön köszönöm, hogy tudományos munkásságomat, publikációs teljesítményemet és eredményeimet elismerően értékelt, és ezek alapján a nyilvános vita kiírását támogatta. Nagyra értékelem azt is, hogy bírálatában nemcsak az értekezés erősségeire, hanem a gyengébb pontjaira is határozottan rámutatott.

Bírálatának azon részét, amely az értekezésben előforduló szakmai pontatlanságokat, elírásokat és nyelvi hibákat kifogásolja, összességében hálával veszem tudomásul és elfogadom. Egyetértek azzal, hogy egy MTA doktori értekezés esetében a formai, terminológiai és szakmai pontosság alapvető követelmény, bár formai előírásra csupán néhány szempontot kap a pályázó a pályázati feltételek között. Ugyanakkor fontosnak tartom megjegyezni, hogy az értekezés kvantumkémiai elméleti alapjait összefoglaló bevezető rész mindössze 13 oldal terjedelmű, tehát nyilvánvalóan nem vállalkozhat arra, hogy a témát egy több száz oldalas tankönyv részletességével, matematikailag teljes szigorral fejtse ki és ezt a célt magam sem tűztem ki. E fejezet célja elsősorban nem egy teljes elméleti-módszertani monográfia megírása volt, hanem azon fogalmi és módszertani háttér néhány mondatos és sillabuszos felvázolása, amely a később bemutatott saját eredmények értelmezéséhez használtam. Ebből következően a szöveg bizonyos pontokon szükségszerűen tömörítő és leegyszerűsítő jellegű lett. Mindazonáltal ez nem mentesíthet a pontos fogalmazás követelménye alól, ezért a kifogásokat ebben a tekintetben is komolyan veszem, és elfogadom, hogy több helyen szerencsésebb, precízebb megfogalmazásra lett volna szükség. Sajnos a tisztelt Bíráló sok esetben nem adott eligazítást vagy támpontot, hogy egyes pontokban mi lenne a helyes mondatszerkezet, gondolok itt például az antibiotikum kutatásra tett kiegészítésekre.

Bírálóm idézi azon megfogalmazásomat, hogy kvantumkémiai munkásságomra úgy tekintek, mint amikor egy mérnök a fizikát alkalmazza. Ezt ma is vállalható önmeghatározásnak tartom. Megítélésem szerint egy kutató legitim módon helyezheti el saját tevékenységét a tudományon belül úgy, hogy nem az adott terület formális alapjainak fejlesztőjeként, hanem annak problémamegoldó alkalmazójaként lép fel. Saját munkámat is így értelmezem. Szintetikus vegyészként a kvantumkémiai eszköztárat kémiai rendszerek értelmezésére és reakciómechanizmusok vizsgálatára használtam. Ezzel együtt természetesen szembenézek azzal a megítéléssel, hogy egy MTA doktori értekezésben az ilyen alkalmazói szemlélet nem feltétlenül pártfogolt.

Hitvallásom, hogy fontosnak tartom a tudományterületek közötti átjárhatóságot és a kölcsönös nyitottságot. Ugyanilyen természetesnek tartottam azt is, amikor elméleti

kutatók szerves kémiai problémák megoldásába kapcsolódnak be és ismerkedtek a területtel. Ezt mindenkor ösztönzendő, nem pedig korlátozandó szakmai együttműködésnek tekintetem.

Végül, az ábrák nyelvi vegyességére és az ékezetek hiányára vonatkozó bírálói észrevételt részben elfogadom. Általános törekvésem az volt, hogy az értekezés ábraanyaga magyar nyelvű legyen, illetve ahol lehetséges, a korábbi közlemények angol nyelvű ábráit is magyar terminológiára alakítsam át. Egy-egy esetben azonban az eredeti szerkeszthető ábra már nem állt rendelkezésemre, illetve egyes alkalmazott programok a magyar ékezetes karakterek kezelését sem tették lehetővé megfelelően. Emiatt az egységes nyelvi és tipográfiai korrekció nem mindenütt valósult meg, amit a Bíráló érthetően formai hiányosságnak tekint és egy tankönyv esetében ez nem lehetne kifogás.

Köszönöm, hogy ezekre felhívta a figyelmemet; a megjegyzések számomra is tanulságosak, és a jövőben figyelembe fogom venni őket és megerősíti bennem, hogy egy alaposabb végső ellenőrzés megérdemelt volna ebben a rohanó világban.

Ugyanakkor bírálatában szerepel néhány olyan szakmai észrevétel is, amelyekkel részben nem értek egyet. Ezeknél engedje meg, hogy álláspontomat röviden kifejtsem.

### **1. A reakciómechanizmusok kísérleti vizsgálhatóságáról**

A dolgozatban azt írtam, hogy *„kísérleti módszerekkel csak a reakció kinetikáját lehet meghatározni, de magát a pontos mechanizmust nem”*,

amelyre a Bíráló megjegyezte, hogy léteznek olyan kísérleti módszerek, amelyekkel a reakciók mechanizmusa is vizsgálható.

Ezzel a megjegyzéssel általános formában nem tudok teljes mértékben egyetérteni. Pontosabb megfogalmazásban értekezésemben azt kívántam volna hangsúlyozni, hogy a laboratóriumi gyakorlatban széles körben elérhető eszközök, így például az IR-, NMR-, Raman-, UV-Vis- és fluoreszcenciaspektroszkópia, valamint a kromatográfiás módszerek tipikusan csupán közvetett kinetikai információt adnak, és önmagukban ritkán teszik lehetővé egy reakció teljes, egyértelmű mechanizmusának meghatározását. Ezekkel a módszerekkel elsősorban kinetikai adatok, intermedierekre utaló jelek, szerkezeti információk vagy termékeloszlások nyerhetők. Egyes kis mennyiségben megjelenő intermedierek azonosítására nincs igazi lehetőség és ha van is, akkor annak a mechanizmusban betöltött szerepe kérdéses. Ezzel párhuzamosan azt is vallom, hogy a reakciómechanizmusokra vonatkozó megállapítások mindig az adott kor technikai színvonalát tükrözik, és idővel fokozatosan konvergálnak a valóság minél pontosabb leírásához.

Természetesen léteznek speciális és ritka nagyműszeres módszerek, például az időfelbontásos spektroszkópai technikák; femtoszekundumos reakciódinamika, időfelbontásos elektrondiffrakció, amelyek bizonyos egyszerűbb reakciók esetén valóban mélyebb betekintést adhatnak a mechanizmusba. Ide sorolható, de szintén indirekt módszer az intermedierek csapdázása és közvetlen azonosítása. Ugyanakkor ezek alkalmazhatósága szintén rendszerfüggő, hozzáférhetőségük korlátozott, és ezekből az eredményekből sem minden esetben vezethető le teljes bizonyossággal a „pontos mechanizmus”. Ismét szeretném hangsúlyozni, hogy nem egy mindent átfogó tankönyv megírása volt a céлом, hanem a munkám során szerzett tapasztalatok összegzése. Ezért fenntartom azt az álláspontomat, hogy a reakciómechanizmusok megbízható feltárása a legtöbb esetben kísérleti és elméleti módszerek kombinációját igényli, és a kizárólag kísérleti úton megállapított mechanizmusok néhány kivételtől eltekintve gyakran hiányosak és leegyszerűsítőek.

## **2. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet szerepe szerves kémiai rendszerek leírásában**

A bíráló kifogásolja azt a dolgozatban leírt megfogalmazásomat, hogy az időfüggő egyenlet megoldása szerves kémiai rendszerek leírásában szükségtelen. Ezzel kapcsolatban pontosítani szeretném álláspontomat. Nem azt kívántam állítani, hogy az időfüggő Schrödinger-egyenletnek nincs értelme a kémiában, hanem azt, hogy a szerves kémiai reakciók döntő többségének értelmezéséhez a gyakorlatban a statikus, potenciálisenergia-felületeken alapuló megközelítés elegendő és ez az általánosan elfogadott gyakorlat. A legtöbb szerkezet, reakcióút, átmeneti állapot, aktiválási szabadentalpia és reakcióenergia meghatározása ilyen módon történik, és ez a megközelítés az oldatfázisú, nem fotokémiai szerves reakciómechanizmusok túlnyomó részében megfelelő leírást ad. Ez a magas impaktú publikációk esetében is így van.

Egyetértek azzal, hogy reakció-dinamikai vagy kvantumdinamikai jelenségek, valamint egyes fotokémiai folyamatok esetében az időfüggő leírás kiemelt jelentőségű lehet. Ugyanakkor a dolgozatban szereplő rendszerek és az általános szerves kémiai gyakorlat szempontjából továbbra is úgy gondolom, hogy a statikus megközelítés elsődleges, míg az időfüggő kezelés speciális esetekre korlátozódik. Ezek azonban komoly szakértelmet kívánó módszerek, amelyek messze túllőnek a rutin kutatás keretein.

Ha a megfogalmazásom kategorikusnak hatott, azt pontosítandónak tartom, de a tartalmi állításomat a laboratóriumi gyakorlat szempontjából ebben az értelemben fenntartom.

### **3. A potenciális energia meghatározása és a Born–Oppenheimer-közelítés**

A bíráló szerint az állításom helyesbítésre szorul, azaz a potenciális energia meghatározásához nem szükséges a magokra vonatkozó egyenlet. E pontban részben terminológiai, részben szemléleti különbséget látok. Abban természetesen egyetértek, hogy egy adott, rögzített maggeometriához tartozó elektronikus energia meghatározásához közvetlenül az elektronokra vonatkozó egyenlet megoldása szükséges. Ugyanakkor a molekuláris potenciálisenergia-felület fogalma a Born–Oppenheimer-közelítés teljes matematikai keretében értelmezhető, ahol a magkoordináták paraméterként szerepelnek, és a rendszer viselkedésének leírása végső soron a leválasztott (úgymond lassú) magmozgás figyelembevételével válik teljessé. Ebben az értelemben megítélésem szerint indokolt volt a két egyenlet együttes említése.

#### **Az alábbiakban tisztelettel válaszolok Bíráló konkrét kérdéseire.**

##### **1. kérdés: Miért nem lettem utolsó szerző, amikor az általam témavezetett diákok kerültek az első helyre?**

A szerzőségi sorrend meghatározása az egyes kutatásokban több tényező együttes mérlegelése alapján történt, és nem minden esetben követte a szigorú tudományetikai a logikát. Amikor a témavezetett diák került első szerzőként feltüntetésre, sok esetben a kutatásban jelen volt egy további, formálisan vagy intézményesen vezető szerepet betöltő senior kutató is, aki nem is feltétlenül vett szakmailag részt a projektben, ezért az utolsó szerzői pozíció nem automatikusan engem illetett meg. Ez egy hatalmi pozícióból történő szabályozás, és szerintem mindenki a kutatói világból találkozott ezzel az szituációval. Illetve hozzáfűzném, hogy ebbe a kutatók által űzött tudománymetriai versenyben vagy „játékban” nem kívánok teljes szívvel részt venni, főleg nem úgy, hogy mások kárára saját karrierérdem helyezem előtérbe.

Több közleményben a második vagy harmadik szerzői helyzetem azt tükrözte, hogy a tudományos irányításban, a koncepcióalkotásban és az eredmények értelmezésében én voltam a témavezető, de a teljes projekt formális, munkahelyi vezetője nem én voltam. A szerzői sorrend tehát nem kizárólag a tényleges tudományos vagy témavezetői szerepet, hanem az adott kutatócsoport belső működését és megállapodásait is tükrözte.

##### **2. kérdés: Nem gondolom-e, hogy az elmélet önállóan is megállhatja a helyét, és tudományosan megalapozott eredményt adhat?**

Úgy gondolom, hogy egy tudományos elmélet természetesen önállóan is képes rendkívül értékes, mély, koherens és új tudományos eredmények létrehozására. Ezen kijelentésem nem az elméleti munka értékének csökkentésére irányult, hanem arra a tudományfilozófiai tapasztalatra, hogy minden elméleti modell közelítéseken, feltevéseken és érvényességi tartományokon alapul. A történelemben számos olyan

elméleti konstrukció vagy modell volt, például a Föld központú ptolemaioszi világbkép vagy később a newtoni mechanika bizonyos határterületeken, amely hosszú ideig jól működött, majd pontosabb kísérleti megfigyelések hatására korrekcióra szorult. A ptolemaioszi világbkép ráadásul diktátumként ezeröttszáz évig leuralta a csillagászatot. Ebben az értelemben a kísérlet nem csupán illusztrálja, bizonyítja, hanem próbára is teszi az elméletet. Ez az alapja a Karl Popper filozófus által megalkotott falszifikáció fogalmának.

Álláspontom szerint az elmélet önmagában is tudományosan megalapozott lehet, de kísérleti ellenőrzés nélkül mindig magában hordozza saját közelítéseinek korlátait. Ez nem gyengesége, hanem természetes sajátossága minden modellalapú tudományos megközelítésnek. Éppen ezért a számításos és kísérleti módszerek együttes alkalmazását továbbra is a legbiztosabb útnak tartom a kémiai folyamatok mélyebb megértésében.

### **3. kérdés: Miért nem érjük el a 2.3. ábrán a 100%-ot, vagyis a valós rendszer energiáját a Dirac-egyenlet pontos megoldásával sem?**

Ennek oka, hogy a Dirac-egyenlet pontos megoldása sem azonos a teljes molekuláris probléma egzakt megoldásával. A gyakorlatban ugyanis a Dirac-formalizmus is rendszerint csak az elektronikus szabadsági fokok leírására szolgál, többnyire a hagyományos rögzített magok BO-közelítésében. Így még ennek egzakt megoldása is csak a relativisztikus elektronikus energia pontos értékét adja meg az adott modell keretein belül, de nem tartalmazza a teljes valós rendszer valamennyi, pl magok hozzájárulását. A valódi molekuláris energia leírásához ugyanis a magmozgások, a BO-közelítésen túli elektron-mag csatolások, valamint szigorú értelemben további finom korrekciók is hozzátartoznak. Ennek megfelelően a 2.3. ábrán szereplő 100% nem pusztán a relativisztikus elektronikus egyenlet egzakt megoldását jelenti, hanem a teljes fizikai rendszer ideális, teljes energiáját. Ezért azt szemléltettem, hogy ezt a szintet a Dirac-egyenlet pontos elektronikus megoldásával sem érjük el.

### **4. kérdés: Hogyan függenek a kapott számítási eredmények az elméleti szinttől és az alkalmazott szimulációs módszerektől?**

Ez a kérdés nagyon lényeges, és egyetértek azzal, hogy az értekezés főszövegében ezt bizonyos helyeken részletesebben is ki lehetett volna fejteni. Ugyanakkor a bemutatott munkák nagy részében kifejezetten vizsgáltam a módszerfüggést: több esetben DFT- és ab initio-szintek összehasonlítása is megtörtént, valamint a báziskészletek és oldószermodellek hatását is ellenőriztem. Számos publikációban a bírálók is megkövetelték az ilyen összehasonlításokat, ezért ezek rendszeresen bekerültek a Supplementary Information anyagába. A dolgozat terjedelmi és szerkesztési okokból ezeket nem minden esetben tárgyalta részletesen a főszövegben, de a mögöttes vizsgálatok jelentős részben rendelkezésre álltak, és az eredmények megbízhatóságának megítélésében fontos szerepet játszottak.

**5. kérdés: Valóban a Gaussian a leghatékonyabb szoftver a dolgozatban bemutatott számításokhoz? Milyen más programcsomagokkal kapcsolatban van tapasztalatom?**

A Gaussian használatát elsősorban az indokolta, hogy a dolgozatban szereplő számítások jelentős részéhez stabil, széles körben validált és számomra jól bejártott eszközt jelentett. Ez azonban nem jelenti azt, hogy minden feladatra vagy minden szempontból a Gaussian lenne a legjobb választás. Tapasztalatom van több más programcsomaggal is, többek között az ORCA, a HyperChem, a Jaguar és a Dalton rendszerekkel. Ezek mindegyike rendelkezik olyan területekkel, ahol különösen előnyös lehet, pl a Jaguar az automatizálásban, így a szoftverválasztás mindig az adott probléma, az elérhető módszerek és a gyakorlati szempontok függvénye. Munkám során a Dalton használtam még kollégáimmal együtt a kétfoton keresztmetszet meghatározásához. Molekuladinamikai modellezés során használtam a HyperChem és a Gromacs szoftvert is, már ezek csupán molekulamechanikai elméleti szinten kerültek alkalmazásra.

**6. kérdés: Mennyire terjedt el az irodalomban a munkáimban javasolt „icitás” paraméterek használata?**

Az „icitás” paraméterek használata korlátozott mértékben terjedt el. Ennek egyik oka véleményem szerint, hogy élethelyzeti és pályaszervezési okok miatt ezt az irányt nem tudtam olyan intenzitással tovább vinni és következetesen építeni, mint amennyire szükséges lett volna egy akadémiai karrierben és a nemzetközi szférában ahhoz, hogy szélesebb körű iskolává vagy önálló, nagyobb hatású irányzattá váljon. Ugyanakkor továbbra is úgy gondolom, hogy ezek a paraméterek hasznos gondolati és összehasonlító keretet kínálnak bizonyos szerkezet-hatás összefüggések értelmezésére.

Még egyszer tisztelettel köszönöm Bírálóm részletes, kritikus és egyben előremutató bírálatát. Észrevételei számomra nemcsak az értekezés pontosabb megítéléséhez, hanem saját munkám korlátainak és erősségeinek tisztább megértéséhez is hozzájárultak.

**Tisztelettel és nagyrabecsüléssel:**

Budapest, 2026 április 7.



Mucsi Zoltán