

Bírálat

Mucsi Zoltán „Szerves és fotokémiai reakciómechanizmusok kísérleti és elméleti vizsgálata” című MTA doktori dolgozatáról

A modern kémiában az elméleti módszerek egyenrangúvá váltak a kísérletekkel, és számos esetben a legérdekesebb eredmények az elmélet és a kísérlet együttműködéséből adódnak. A számítások gyakran mélyebb betekintést adnak a kémiai folyamatok atomi-szintű világába, mint a kísérleti módszerek, így az elmélet segíthet megmagyarázni, illetve kiegészíteni a mérési eredményeket. Mucsi Zoltán MTA doktori dolgozata is a kísérleti és elméleti vizsgálatok együttműködéséről szól szerves és fotokémiai reakciók mechanizmuskutatása során. Mind a kísérleti, mind az elméleti munka komoly szakértelmet kíván, ezért nagyon ritka, hogy egy kutató mindkét területen egyszerre aktív legyen. Az elméleti-kísérleti munkák általában különböző kutatócsoportok együttműködésén alapulnak, erre a saját pályafutásom során is számos példa található. Ezzel szemben Mucsi Zoltán egyszerre foglalkozik a különböző kémiai reakciók kísérleti megvalósításával és elméleti tanulmányozásával. A pályázó szintetikus vegyészként ipari környezetben kezdte munkáját, majd a folyamatok mélyebb megértésének igénye vezette az elméleti vizsgálatok felé. Ezt dicséretesnek tartom, viszont komoly kihívás is az elméleti és kísérleti munka egyszerre történő magas szintű művelése. Ez véleményem szerint maradéktalanul nem is sikerült a pályázónak, amire később még részletesebben kitérek. A dolgozat inkább az elméleti eredményekre fókuszál, de azért a kísérleti munkák is említésre kerülnek.

Mucsi Zoltán az MTMT szerint 129 cikket publikált nemzetközi folyóiratokban, ezekre összesen 2056 hivatkozás érkezett, amelyekből 1179 független (2026. február 27). 42 cikkében levelező szerző, H-indexe 26. A Google Scholar alapján az idézettsége a szokásos kb. 20%-al magasabb és a H-indexe 28. Az utóbbi években munkáira évente 160-220 hivatkozás érkezik a Google Scholar szerint. A fenti adatok egy 50 éves kutató esetében nem nevezhetők kiemelkedőnek, de azért jónak módhatóak és az MTA doktora cím publikációs követelményeit messze túltesítik.

A dolgozat 137 oldalas és a szövege alapján 35 közleményt dolgoz fel, viszont a hivatkozásjegyzék szerint 39 cikken alapul. Az utóbbi szám meghatározásához számolni is kell tudni, mert a szerző a dolgozat alapját képző publikációkat 1-től 25-ig számozza római számokkal, viszont bizonyos számokhoz több publikáció is tartozik a, b, c, stb. betűkkel jelölve. A tartalomjegyzék után a köszönetnyilvánítás következik, amit egy előszó követ, amelyből kiderül, hogy a PhD megszerzése után a pályázó az iparban kezdett el dolgozni, illetve dolgozik jelenleg is. Viszont kapcsolatot tart számos kutatóval az akadémiai szférából és a szintetikus vegyészet mellett elméleti számításokat is végez, amely során ötvözi az

alapkutatást és az ipari szemléletet. Az előszó után egy előzmény fejezet következik, amelyben leírja, hogy a jelen dolgozatot először 2018-ban nyújtotta be. A mostani 2024-es dolgozat több új eredményt tartalmaz a korábbi verzióhoz képest, amit az irodalomjegyzék is alátámaszt. Én bírálóként az eredeti dolgozatot nem láttam és a korábbi bírálatokat sem olvastam el a sajátom elkészítése előtt, így kizárólag a jelen dolgozat – illetve a pályázó publikációs teljesítménye – alapján fogalmazom meg a véleményemet. A fenti, talán nem szokványos bevezető fejezetek után következnek a dolgozat számozott fejezetei. Először a tudománytörténeti háttér és vízió kerül bemutatása, aztán a vizsgálati módszerek, ez elsősorban a kvantumkémia számítások elméleti alapjait foglalja össze. Sajnos ez a dolgozat szakmailag leggyengébb része. Számos hibás állítás, pontatlan megfogalmazás került az elméleti alapok leírásába, ami komoly probléma egy MTA doktori dolgozat esetén. A pályázó kifejti a dolgozatban, hogy saját kvantumkémiai munkásságára úgy tekint, mintha mérnökként alkalmazná a fizikát. Nekem kifejezetten tetszett ez az analógia, és dicséretesnek is tartom, ha egy szintetikus vegyész érdeklődik a kvantumkémia iránt, viszont ez nem mentesíti a pályázót azon vétség alól, hogy egy MTA doktori dolgozatba szakmailag inkorrekt állításokat ír. Ezek részletezésére később térek ki. A módszerek után a reakciókinetikai mérések és reakciómechanizmusok kísérleti és elméleti tanulmányozását tárgyalja egy fejezetben, majd a reaktivitási paramétereket és definíciójukat, valamint az utolsó nagy fejezetben az összetett folyamatok reakciómechanizmusait. Klasszikus hosszabb összefoglalást nem ír, helyette egy 8 soros zárszó olvasható, amit az irodalomjegyzék és a kötelező nyilatkozat követ. A dolgozat nyelvezete kicsit sajátos, néhol személyes, de ezt a stílust én személy szerint kedvelem. A dolgozat szerkesztése nem mondható igényesnek, a legfőbb probléma, hogy az egyenletek nem a tudományos szakirodalomban megszokott módon vannak beillesztve a szöveggörnyezetbe, azaz jelen esetben nincsenek beillesztve. A másik probléma, hogy az ábrák vegyesen tartalmaznak angol és magyar szöveget, néha egy ábrán belül is. A magyar fordítások pedig sokszor ékezetek nélkül jelennek meg. A fenti szerkesztési problémák még nem nevezhetők súlyosnak, ami viszont komoly gond, hogy a dolgozat és a téziszfüzet felháborítóan sok elírást és nyelvtani/ragozási hibát tartalmaz, ami sok esetben nehezíti a szöveg folyékony olvasását.

Mucsi Zoltán az eredményeit 15 tézispontban fogalmazta meg, amelyeket a következőképpen foglalhatunk röviden össze:

1. Felderítette a Meisenheimer-átrendeződés mechanizmusát.
2. Szerver funkciócsoportok szolvatációjának molekuladinamikai modellezése során kidolgozott egy általános módszert annak megállapítására, hogy a reagáló molekulák egyes funkció csoportjai átlagosan hány oldószermolekulához kötődnek az első szolvatációs héjon.

3. Felderítette foszfolén oxidok észterezési és amidálási mechanizmusát.
4. Felderítette és értelmezte a Hiaro reakció mechanizmusát.
5. Telítetlen funkcionális csoportok reaktivitásának definiálására úgynevezett „icitás” értékeket vezetett be.
6. Bemutatta, hogy az amidicitási paraméter alkalmasnak bizonyult a kutatásban és iparban is fontos szerepet játszó, ún. transzamidációs reakciók csoportosítására és karakterizálására.
7. Bemutatta az aromaticitások alkalmazását telítetlen négy- és ötagú gyűrűs foszforvegyületek tulajdonságainak értelmezésére.
8. Bemutatta, hogy a konjugativitás paramétereken alapuló „Systems Chemistry” koncepció mind az alaptudományokban, mind az alkalmazott kutatásban jól alkalmazható.
9. Egy új kalitkázott ingerületátvivő anyagot fejlesztett szintetikusan és tanulmányozott elméleti módszerekkel.
10. Elektronikusan gerjesztett állapotú szenzormolekulát fejlesztett és feltárta a rendszer fluoreszcenciájának kioltással járó mechanizmusait.
11. Értelmezte a NAD koenzim komplex működését.
12. Értelmezte a FAD koenzim komplex működését.
13. A penicillin részletes működésére egy új, kibővített magyarázatot talált, ami a molekula energiatárolása, reaktivitása mellett egy szenzoregységet is feltételez, ami megmagyarázza a penicillin változatos reaktivitását.
14. Kísérleti módszerekkel értelmezte a penicillin-G farmakológiai működését.
15. A penicillin molekula természetes konfigurációjának és a 3D szerkezetének vizsgálatával rámutatott, hogy miért a penicillin D konfigurációja szelektálódott ki a természetes L konfigurációval szemben.

A tézispontok száma talán lehetne kevesebb, de ettől függetlenül minden tézispontot elfogadok, azzal a megjegyzéssel, hogy a tézispontokhoz kapcsolódó irodalmat csak korlátozottan ismerem.

Alább kiemelném azokat a szövegrészeket/mondatokat (dőlt betűvel szedve), amelyeket hibásnak, pontatlannak gondolok:

„Ezt az egyenletet önmagában nem lehet megoldani, mivel a három paraméter közül két ismeretlen is van benne a Ψ és az E .”

Megjegyzés: A „paraméterek” számával magyarázni azt, hogy általában nincs analitikus megoldása a Schrödinger-egyenletnek hibás.

„A két egyenlet segítségével különböző magkoordináták mellett meghatározhatjuk a rendszer potenciális energiáját.”

Megjegyzés: A potenciálisenergia meghatározásához nem kell a magokra vonatkozó egyenlet.

„a szorzat formájában felírt hullámfüggvény nem tesz eleget a Pauli-elvnek, mivel ebben esetben megszabjuk az egyes elektronok pályáját. Ezért az elektronok számának és a pályák számának permutálhatónak kell lenni.”

Megjegyzés: Ez hibás magyarázat, a második mondat pedig még értelmetlen is.

„elektron térbeli hullámfüggvénye (φ) egy négydimenziós objektum”

Megjegyzés: A térbeli pályának a háromdimenziós függvényt hívják.

„egy adott orbitálon az α és β elektronok között nincs kölcsönhatás”

Megjegyzés: Ez nem igaz.

„amelyek a fém atomok mag-elektronjait implicit módon kezelik”

Megjegyzés: A mag-elektron helyesen törzs-elektron.

„Mivel a kémiában használt pályák kettős betöltöttségének koncepciója a hullámfüggvény konstrukciójában úgy jelentkezik, hogy két ellenkező spinű elektront helyezünk ugyanarra az atompályára anélkül, hogy figyelembe vennénk a „távolságukat” és az ebből adódó elektrosztatikus taszítást.”

Megjegyzés: Ez egy hibás állítás.

„Az elektronkorreláció az elektronpár koncepció következménye, amelyeket a HF módszer egyszerűsített megközelítése elhanyagol.”

Megjegyzés: Az állítás első fele nem igaz.

„Kísérleti módszerekkel csak a reakció kinetikáját lehet meghatározni, de magát a pontos mechanizmust nem.”

Megjegyzés: Vannak olyan kísérleti módszerek amelyekkel a reakciók mechanizmusát is lehet vizsgálni.

„Az időfüggő egyenlet megoldása (eq. 6) azonban kémiai, szerves kémiai rendszerek leírására esetén szükségtelen”

Megjegyzés: Egy reakció kvantumdinamikájának tanulmányozásához szükséges lehet az időfüggő Schrödinger-egyenlet numerikus megoldására is.

„bázisfüggvények nagyságától”

Megjegyzés: A bázisnak van mérete, a függvényeknek száma van.

„valenciaelektronokon túlmenően a belsőbb rétegek korrelációjára is kiterjeszthetők”

Megjegyzés: A „valencia” magyarul vegyérték, illetve a „belsőbb rétegek” nem a legjobb szakkifejezés itt.

„Ezt a nem kedvező tendenciát csak a jelen témában is alkalmazott, mély szerkezet-hatás összefüggések felderítése és módosítása, majd ezek alapján az új antibiotikumokat fejlesztésével lehet csak megfordítani [121].”

Megjegyzés: Vannak még egyéb lehetőségek is.

A fenti hibák és pontatlanságok nem egyformán súlyosak, de talán jól reprezentálják a dolgozat minőségét.

A megjegyzéseim mellett a dolgozathoz kapcsolódóan a következő érdeklődő kérdéseim vannak:

1. A dolgozatban szerepel, hogy „Második (esetleg harmadik) szerzőként akkor szerepeltem legtöbbször, mikor az általam témavezetett diákok kerültek az első helyre. Utolsó szerző voltam, amikor a kutatás szakmai irányítása volt a feladatom.” Miért nem lett utolsó szerző, amikor a témavezetett diákok kerültek az első helyre?
2. Azt írja, hogy „Tapasztalatom szerint egy tudományosan megalapozott eredményt a számításos és kísérleti módszerek együttes, kombinált alkalmazásával érhetjük el.” Nem gondolja, hogy az elmélet önállóan is megállhatja a helyét és tudományosan megalapozott eredményt adhat?
3. A 2.3. ábrán amikor a különböző ab initio módszerek konvergenciáját mutatja a valós rendszer energiájához, akkor a 100%-ot, azaz a valós rendszer energiáját nem érjük el a Dirac-egyenlet pontos megoldásával sem. Ezt hogyan magyarázza?
4. Kevés szó esik arról a dolgozatban, hogy a kapott számítási eredmények hogyan függenek az elméleti szinttől, illetve az alkalmazott szimulációs módszerektől. Kifejtené ezt részletesebben?
5. Valóban a Gaussian a leghatékonyabb szoftver a dolgozatban bemutatott számításokhoz? Milyen más programcsomagokkal kapcsolatban van még tapasztalata?
6. Mennyire terjedt el a munkáiban javasolt „icitás” paraméterek használata az irodalomban?

A pályázó nehéz helyzetbe hozta a bírálót a végső javaslat meghozatalával kapcsolatban. A dolgozatban szereplő hibák és pontatlanságok nem felelnek meg az MTA doktora cím elnyeréséhez szükséges szintnek. Ez különösen bosszantó, hiszen ez a dolgozat nem először kerül benyújtásra, illetve a nyelvtani hibák és elírások jó részét egy gondos átolvasás után javítani lehetett volna. Viszont véleményem szerint azt is figyelembe kell vennünk, hogy Mucsi Zoltán munkássága több mint 100 cikket, valamint több mint 1000 független hivatkozást

eredményezett, illetve számos munkájában meghatározó szerepe volt, azaz a pályázó tudományos eredményei alapján az MTA doktori címet megérdemli. Én ezen utóbbi megállapítás miatt javasolom a nyilvános vita kiírását, amely során jobban meggyőződhetünk a pályázó szakmai felkészültségéről is.

Szeged, 2026. február 27.



Czakó Gábor

egyetemi tanár, az MTA doktora