



# Öröm, ha a számításokkal különös jelenségekre tudunk magyarázatot adni

Beszélgetés Szalay Péterrel, az ELTE Kémiai Intézetének egyetemi tanárával, az IAQMS frissen megválasztott tagjával

*Az International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS) tudományos intézményt 1967-ben Mentonban (Franciaország) alapították. Az Akadémiának 35 rendes tagja lehet 65 év korhatár alatt, és korlátlan számú tagja e kor fölött. A legutóbbi ülésen az Akadémia tagjának választottak, ami nagy kitüntetés számodra és egyben a magyar kémia számára is.*

*Hogyan kerültél kapcsolatba ezzel a tekintélyes szervezettel, és hogyan értesültél taggá választásodról?*

Ez a szervezet háromévente rendezi az International Conference of Quantum Chemistry konferenciát, ami szakterületünkön az egyik legnevesebb összejövetel. Ezen többször is részt vettem. Az Akadémia legtöbb tagját jól ismerem konferenciákról, cikkekből, néhányukkal közös projektjeink is voltak. A régebbi tagok közül sokak neve szerepel az elméleti kémiai alapkurzusomban. Bár többségük már nem él, mégis óriási megtiszteltetés most örökükbe lépni. Az Akadémia magyar tagja korábban Gáspár Rezső professzor volt. A mostani tagok között szerepel Pulay Péter professzor, aki az ELTE-s elméleti kémia egyik alapítója, de már közel 40 éve az Egyesült Államokban él. Egyszerűen a kvantumkémikusok között ez az Akadémia evidencia, a szakmai közösség csúcsa.

*Gáspár Rezső a Kossuth Lajos Tudományegyetem professzora volt 2001-ben bekövetkezett haláláig, Pulay Péter az Arkansasi Egyetem professzora és az MTA külső tagja. Te vagy ma az IAQMS egyetlen hazai tagja. Igazán szép elismerés!*

A kérdés második felére az a hivatalos válasz, hogy a választás estéjén az elnök asszony értesített e-mailben, és kérdezte, elfogadom-e a tagságot. A nem hivatalos változat szerint ennek a nyári napnak a délelőttjén kaptam egy SMS-t „Congratulation from Menton” szöveggel. Bár nem tudtam, hogy mikor van a közgyűlés, szemvillanás alatt leesett, miről lehet szó.

*Tudományos kutatásaid a kvantumkémiai számítások területére esnek. Az ELTE-n az elméleti kémia nagyon erősen művelt tudományterület. Több kiváló kutató foglalkozik a kémiai elméleti számítások művelésével nagyon magas szinten. Nemzetközileg elismert és jegyzett kutatói közegeben élsz. A Te munkád elsősorban kvantumkémiai számítási módszerfejlesztésekre koncentrál, amelyek – ha jól fogtam fel a munkáid áttekintéséből – az egyszerű molekulák energiaviszonyainak és spektrális tulajdonságainak leírásától a makromolekulás alkalmazások irányába is halad. Beszelnél munkád lényegéről olvasóinknak úgy, hogy egy kémiai közép fokú képzettséggel rendelkező olvasónk is megértse?*

A kérdés teljesen szakszerű. A molekulák kvantum-objektumok: ha meg akarjuk ezeket érteni, a kvantummechanika egyenleteit kell alkalmazni. A Schrödinger-egyenletet megoldva, elvben a molekuláról minden információ megszerezhető lenne. Bár ezt az egyenletet csak közelítőleg tudjuk megoldani, több különböző szintű megoldási módszer áll rendelkezésünkre. Sajnos, minél kevesebb közelítést használunk, annál drágább lesz a módszer, a pontosságot tehát számítógép-idővel kell megfizetni. Pályám első felében ilyen pontos módszerek kidolgozásával foglalkoztam. Az alkalmazások, követve az ELTE-s hagyományokat, a spektroszkópia köréből kerültek ki, főleg kisebb rendszerekre, ahol ezek a drága módszerek még alkalmazhatóak. Spektrumokat szimulálunk, szerkezetet határoztunk meg, élettartamot számoltunk. Az eredmények segítettek a kísérletek értelmezésben.

Kedvencem a HCCO-gyök esete, ahol számításaink nem erősítették meg egy indiai csoport kísérleteit. Ilyenkor mindig óvatos az elméleti ember, hiszen rengeteg dologtól függ a számítás megbízhatósága. De ez alkalommal nem láttunk kockázatot. A kéziratot a beküldéssel együtt elküldtük egy Berkeley-beli híres kísérleti csoportnak is, akikről tudtuk, hogy ezen a gyökön is dolgoznak. Kiderült, hogy hosszú ideje keresik a HCCO spektrumát, de nem találtak jelet az indiai kollégák által jósolt tartományban. Cikkünk hatására átállították a spektrométert az általunk jósolt tartományra, és ott volt a jel!

*Megnyugtató, amikor az elméleti számításokat a kísérleti adatok is igazolják. Mennyire gyakori ez az érdeklődési területeden?* Egyre gyakoribb, hiszen egyre pontosabban tudunk számolni, és ami még ennél is fontosabb, ma már jobban értjük a számítások korlátait. De hogy a kérdést egy kicsit pontosítsam: nem az az öröm, ha a mérés igazolja a számítást, hanem ha felhasználva a számításokat a kémia számára fontos eredmények születnek, vagy különös jelenségekre, váratlan mérési eredményekre tudunk magyarázatot adni.

Ez utóbbira is említek egy példát. Szimulációval sikerült bizonyítanunk, hogy az oxigénmolekula vörös kemilumineszcenciája két molekula ütközésekor történik, nem pedig úgy, hogy ezek egy gyenge komplexet képeznek. Ez merőben új, meglepő magyarázat, de a számítások ezt a modellt teljes mértékben alátámasztják.

A számítógépek teljesítményének növekedésével egyre nagyobb molekulákat tudunk pontosan számítani. Most az izgat



minket, hogy a DNS elektronikus tulajdonságait megértsük. Ez magában foglalja az építőelemek fotostabilitását, valamint a DNS-lánc vezetőképeségét. Mindkét esetben a kulcselem az elektrongerjesztett állapotok delokalizációja, amire a különböző módszerek nagyon különböző választ adnak. Keressük a módszert, ami elegendően megbízható eredményt produkál, és majd az ezzel végzett számítások fognak választ adni a feltett kérdésekre.

Nagy öröm, hogy az általam fejlesztett módszereket sokan használják, amit az ezekre kapott hivatkozások magas száma jelez. Véleményem szerint ennek köszönhető az Akadémiába való választásomat, hiszen ez a szervezet leginkább a szoros értelemben vett „elmélet”-et képviseli.

*Ezek a kutatások nem igényelnek nagy csoportot, viszont igénylik a területen dolgozó csoportokkal való rendszeres kapcsolattartást. Eddigi pályafutásod során sokat jártál külföldi egyetemeken, ahol életrajzodból kiolvashatóan nagyon hasznosan töltötted az idődet az ismereteid bővítését, a kutatási területeden való előrehaladást illetően.*

Igen, nagyon sok dolgot tanultam az utak alkalmával, és ezeket később meg is honosítottam. Emlékszem, fiatalon a speciális kollégiumaimra idősebb kollégáim is bejártak, hogy megértsék a magas szintű, úgynevezett korrelált módszerek elméletét. Ma már természetesen itthon is alkalmazhatók ezek a módszerek. Bécsben és Gainesville-ben (USA) tanultam őket. De például Reimsbe már azért hívtak, hogy én tanítsam meg nekik a használatukat.

*Munkáid kiváló nemzetközi fogadtatását jelzik kiemelkedő tudományometriai mutatóid, cikkeid olvasottsága igen jó. Ezt tükrözi előbb EuChemS-bizottsági tagságod, majd a mostani elismerésed. Visszatérve a kapcsolatok alakulására: a külföldi partnerekkel való kapcsolatok mennyire váltak és válnak kétoldaliúvá, azaz mennyire jönnek az ELTE-re partnereid – a fiatalok tanulni, az idősebbek tapasztalatcseréje?*

A EuChemS-divízióba delegálás útján kerültem be, de annak, hogy két éve elnökké választottak, nyilván a szakmai tekintély is oka volt. Szakmai partnereim gyakran látogatnak meg Budapesten, nem csak én járok hozzájuk. De hallgatóikat is küldték, többen részben itt végezték a doktori kutatásaikat. Azt, hogy az ELTE-s elméleti kémiai „iskola” mennyire része a nemzetközi vérkeringésnek, mi sem mutatja jobban, mint Kapuy-előadás-sorozatunk előadói listája. (Kapuy Ede, akiről ezt a sorozatot elneveztük, ugyan nem ELTE-s volt, de a „hard core” elmélet nemzetközileg is fontos alakja, akitől közvetve vagy közvetlenül nagyon sokat tanultunk.) A terület meghatározó emberei fordultak meg nálunk, ma már a listát megmutatva egyáltalán nem probléma bárkit megnyerni előadónak.

*A külföldi társadalmi tisztségek mellett a hazai tisztségek is megtalálhatók. Két ciklusban voltál az ELTE tudományos rektorhelyettese. Hogyan látod az egyetemek szerepét a tudományos kutatásban, a kutatásfinanszírozásban és ebben a kormányzati szerepvállalás mértékét?*

Rektorhelyettesként az elmúlt négy év alatt volt szerencsém megismerni sikeres nyugati egyetemek kutatási struktúráját, az ösztönzőket, az emögött álló támogató szervezeteket. Sokat kell még fejlődnünk, fejben is. Arra jutottam például, hogy a kutatás szabadsága nem abban áll, hogy mindenki a kedvenc témáján dolgozik (ha így lenne, ki mondaná meg, hogy hány ilyen „szeren-

csés” van). A finanszírozónak joga van megmondani, hogy mit szeretne. A kutatók szabadsága abban kell álljon, hogy megválaszthassák a célhoz vezető utat, a kutatási terveket a tapasztalataik alapján állítsák össze. Csak mérsékelt nyomás legyen a határidők tekintetében, és semmi a végkövetkeztetésre vonatkozóan. A sikerességet igenis számon kell kérni, figyelembe véve, hogy a kutatás természeténél fogva zsákutcába is vezethet. Itthonról nézve megdöbbentő, hogy a vezető nyugati egyetemeken a költségvetés 20–25%-át a rektor döntése alapján osztják ki, ő (persze nem egyedül) határozza meg azokat a kutatási fókuszpontokat,



**A Széchenyi-díj átadásakor 2017-ben (balról: Császár Attila, Fogarasi Géza, Szalay Péter)**

amelyek az egyeteme sikerességét hosszú távon is képesek fenntartani. A mi egyetemünk ennél sokkal demokratikusabban működnek, ami, úgy tűnik, nem elég hatékony.

*Nálunk az egyetemeknek tudomásom szerint már régóta nincsen kutatási költségvetése. Mindenki hazai és külföldi pályázatokon szedi össze kutatásai fedezésére a forrásokat.*

A kormányzat a kiválósági támogatásokkal (FIKP: Felsőoktatási Intézményi Kiválósági Program, TKP: Tématerületi Kiválósági Program) ebbe az irányba próbálta elmozdítani az egyetemeket. Hogy ez sikerül-e, a következő egy-két évben fog kiderülni.

*Részben egyet tudok érteni a kutatás eredményességének fokozását célzó gondolataiddal. Azért lenne hozzá megjegyzésem. Az általad említett, eredményesen kutató országokban mindenütt vannak olyan pályázati források, amelyek kreatív, innovatív alapkutatásokat, sőt az eredményesség szempontjából kockázatos kutatási terveket támogatnak. Ezeket a kormányzat jelentősen vissza kívánja fogni. Így nehéz lesz megőrizni jó hírünket a világ kutatóközösségében és megakadályozni legjobb fiatal kutatóink külföldre távozását.*

Az előbb említett két program erre lehetőséget ad. Az FIKP-ben nem az eredmények az indikátorok, hanem a kutatási kapacitás növekedése, ami például a kutatók számának növekedésében mérhető. Mi az ELTE-n igyekeztünk ebből a forrásból olyan fizetéseket adni, amelyekkel perspektivikus kollégákat tartottunk meg, sőt csábítottunk magunkhoz. Csak ismételnem tudom, kell néhány év, hogy lássuk, lesz-e ennek eredménye, és nem oldódik-e fel ez a jelentős összeg az egyenlőségben.

Az elmúlt hónapban leköszöntem a rektorhelyettesi posztról, így most újra teljes energiával a kutatásomra koncentrálnék. Bevallom, bármennyire lelkesen csináltam a megbízatással kapcsolatos feladatokat, sokkal jobban érzem magam most a kutatásban, hallgatóim körében.



## Családi körben

*Ezt meg tudom érteni. Nem leányálom ma egyetemi vezetőként helytállni és a felsőoktatással szemben támasztott társadalmi elvárásokért intézményi szinten cselekedni. Kevés a sikerélmény a befektetett munkához viszonyítva.*

*Belepillantva oktatómunkád hallgatói értékelésébe, látom, hogy a hallgatók elismerik oktatási tevékenységedet, bár nem tartanak laza oktatónak, nem tekintik tárgyadat könnyen vehető akadálynak. Ez a jó egyetemi hallgatóktól dicséretnek vehető. Milyennek látod a mai egyetemi hallgatók felkészültségét, ambícióit, tudásvágyát, az értelmiség-utánpótlást?*

Óráimat rektorhelyettesként is megtartottam, nekem az oktatás az elsődleges. Erkölcsi kérdés számomra, hogy átadjam a tudást, amit másoktól kaptam vagy továbbfejlesztettem. Az elméleti kémia oktatásán azonban jól lemérhető a felsőoktatás átalakulása: csökkenő óraszám, egyre kevesebb előismeretet feltételezve próbálok átadni a kvantumkémia felől azt, amire a hallgatóknak szüksége lesz vegyészként, kémiatanárként. De nemcsak a körülmények mások, az érdeklődés is. Míg régebben minden részlet megértése motiválta a hallgatókat, manapság a legjobb hallgatók is csak a sokkal nagyvonalúbb összefüggésekre fogékonyak. Ahogy régen még tudtunk rádiót építeni, ma csak az a fontos, hogy tudjuk, melyik gombot kell megnyomni, és annak mi a hatása. Másrészt viszont korábban sokkal több segítséget kellett adni a hallgatóknak a kvantumkémiai számítások elvégzéséhez, míg manapság a technikai akadályokat a hallgatók képesek maguk megoldani – nem azért, mert jobban ismerik a részleteket, hanem mert megtalálják az információt az interneten. Nehéz olyan hallgatókat találni, akiket az elmélet érdekel. Nem biztos, hogy ez baj, a világ változik, más körülmények között kell jónak lenni, más jelent, hogy valaki „jó”. Ehhez alkalmazkodnunk kell magunknak is.

*A Magyar Kémikusok Egyesületében is fontos feladatot látsz el. A harmadik ciklusban vagy a főtitkárhelyettesi funkció gazdája, és új gondolatokat vittél a feladatkör ellátásába. Összegeznéd röviden, miben látod az Egyesület jövőbeni lehetőségeit, hogy még inkább összetartó ereje lehessen a hazai kémikusközösségnek?*

Feladatköröm az Intézőbizottságban való részvétel mellett a Műszaki és Tudományos Bizottság vezetése. Rendszeres feladatunk a fiatalok utazási pályázatainak elbírálása, ezt a Bizottság minden tagja nagy lelkesedéssel és komolyan végzi. A szabályzat szerint rendszeresen áttekintjük a szakosztályok és szakcsoportok tudományos tevékenységét is. Úgy érzem viszont, hogy ennek a feladatnak csökkent a jelentősége. A tudományos munka sokkal erősebb az MTA bizottságaiban, a mi jól működő csoportjaink is

tipikusan közösen rendeznek eseményeket ezekkel. Nem vagyunk kémikusok olyan sokan, hogy kétfelé húzzunk, és legyenek „akadémiasok” és „egyesületiek”. Tehát úgy érzem, hogy az MKE tudományos szerepe csökkent, sokkal inkább a közösségépítés marad meg nekünk. Jól példázza ezt, hogy a kiadványaink közül az MKL most a fontosabb kiadvány, ami sokkal inkább magazin, mint tudományos szaklap. De ugyanezt mutatja az a kísérlet is, amely az MKE Vegyészkonferencia átalakítását szolgálja: inkább adni átfogó ismereteket és teret a kapcsolatokra, mint a tudomány legújabb eredményeivel versengeni. Erről az MKL hasábjain írtunk nemrégiben kollégáimmal. Ha már konferencia: ezek szervezése még az MKE égisze alatt történik leggyakrabban, köszönve a nagyszerű infrastruktúrának, ami rendelkezésünkre áll. Ezenfelül a nemzetközi szervezetekben való képviselés fontos feladat még, hiszen szervezetileg az MKE tud ilyenekben részt venni és nem az MTA.

*A szakmai és társadalmi elfoglaltságokon kívül mivel töltöd az idődet? Család, szabadidő – szabad érdeklődni?*

A tudomány mellett legfontosabb számomra a családom. A miénk nagy család, hiszen négy gyermekünk van, két fiú, két lány, 29 és 14 év között. A nagyobbak ugyan lassan-lassan kirepülnek, de a kisebbik fiú révén még egy darabig lesz „gyermekünk”. Feleségem szintén vegyész, aki szakmai pályája helyett a gyereknevelést választotta, ami a család szempontjából nagyon jó döntés volt. Szerencsére néhány éve sikerült visszatérnie a munka világába. Ha nem is vegyészként, de sikeres karriert fut be: jelenleg egy buda-



## Aktív kikapcsolódás közben

pesti egyetemen vezet az egyik kar dékáni hivatalát. Szeretünk utazni, a nyaralásokra a gyerekek is szívesen jönnek még velünk. Ami fontos, hogy mindig szakítottunk arra is időt, hogy feleségemmel kettesben menjünk el néhány napra. Talán a bécsi tartózkodás hatása, hogy imádjuk a szecessziót. Utazásaink során különös érdeklődéssel keresünk fel ilyen épületeket, kiállításokat.

*Akkor látogassatok gyakrabban Szegedre is. Gyönyörű szecessziós épületeink vannak.*

A sportolás életfontosságú számomra: a kirándulás, futás, biciklizés. Sajnos úszni ritkán jutok el, pedig ez volt gyerekkori sportágam. Éppen ma reggel futás közben határoztam el, hogy ezt is felelevenítem. Viszonylag gyakran járunk koncertekre is, a MÜPA és a Zeneakadémia két csodálatos helyszín ehhez, az utóbbi nem mellesleg szecessziós!

*Olvasóink nevében is kívánok jó munkát, további sikereket!*

**Kiss Tamás**