



Kvantumeffektusok ppb pontossággal

Beszélgetés Máttyus Edittel, az ELTE TTK Kémiai Intézetében működő Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport vezetőjével

Mi a csoport kutatásának témája, milyen aktuális tudományos kérdéshez kapcsolódik ez?

Gyermekkorom óta két dolog érdekelt leginkább: a) a hétköznapi anyag, ami bennünket körülvesz; és b) a miért? miért? miért? ... – a miérttek „végtelen” sorozata... Ez az érdeklődés viszonylag természetes módon vezetett el a kémia és a fizika határterületére, és végül is a molekuláris anyag legalapvetőbb elméletéhez. Szakkifejezésekkel élve a csoportom kutatási témája a molekuláris kvantumdinamika, a molekulaspektroszkópia és a molekulafizika területére esik.

Melyek voltak tudományos fejlődésének fontosabb állomásai?

Egyrészt mérnök szüleim természettudományos érdeklődése meghatározó volt. Másrészt pedig a kiváló komplex általános iskolai oktatás-nevelés, és az erős gimnáziumi (Apáczai) szakismeretek után az egyetemen (ELTE) bőven volt terem arra, hogy a kíváncsiságomat „kövessem”. Nagyon bátorító és támogató csoportba kerültem a doktori éveim alatt (ELTE, Császár Attila), ahonnan sok sikerélménnyel és stabil szakmai alapokkal felvértezve vágtam neki a világnak a PhD fokozatom megszerzése után. Posztdoktori kutatómunkát folytattam (kutatással és egy kevés oktatással) 2–2 éven át az ETH Zürichen és a Cambridge-i Egyetemen. A sok-sok évnyi tanulás és világjárás után, 33 évesen, Cambridge-ből hazatérve, svájci támogatással kezdtem el önálló kutatói pályafutásomat az ELTE-n 2016 nyarán.

Kérem, kicsit részletesebben is beszéljen olvasóinknak egyik kedvenc kutatási témájáról!

Jelenlegi kedvenc kutatási témám a relativisztikus kvantummechanika.

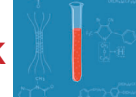
Az ETH Zürichen Markus Reiher professzor mellett voltam asszisztens (számolási gyakorlatokat vezettem), és észrevettem pár ellentmondást a tananyagban. Ez a relativisztikus kvantumkémiai alkalmazásokat (átmenetifémek és nehéz elemek kémiája) – amelyről a tantárgy szólt – nem igazán befolyásolta, de engem nagyon zavartak ezek az apró ellentmondások. Elkezdttem ilyen témájú szakkönyveket keresni és olvasni, és ennek hatására csak még jobban összezavarodtam. Az ELTE-ről nagyon erős elméleti alapokkal mentem tovább, megbízható iránytűket vittem magammal, és minden arra utalt, hogy itt valami nem teljesen stimmel. Eközben kétféle irányról hallottam: az egyik, hogy oldjuk meg variációsán a Dirac-egyenletet atomokra és molekulák-



A csoporttal

ra, ahogyan – félig-meddig empirikusan – a relativisztikus kvantumkémiaiában szokás (itt villogott a piros lámpa a fejemben, hogy valami nem stimmel), a másik – amiről egy kísérleti, precíziós spektroszkópiai csoporttól hallottam –, hogy dolgozzunk perturbatíván (akármit is jelentsen most ez pontosan). Az utóbbi irány numerikus eredményei szinte tökéletes egyezést mutattak a világon elérhető legjobb, legnagyobb felbontású mérésekkel, de az irodalom borzasztóan komplikált, nehezen tanulható/olvasható volt. Csak nagyon speciális rendszerekre alkalmazták ezt a perturbatív elméletet (pl. hidrogénatom), és sehogy sem lehetett összehozni a nehézelemek vegyületeire végzett számításokkal (relativisztikus kvantumkémia), amelyek egész jó egyezést mutattak (a sokkal kisebb „felbontású”) kémiai tapasztalatokkal. Frusztrálóak voltak ezek az ellentmondások, és bár nagyon érdekelt a téma, nem volt olyan jól megalapozott, kutatható kérdés-irány, amelynek mentén, évi 1-2 cikket publikálva tudtam volna előre haladni. (Manapság az az általánosan elfogadott – és szerintem életszerű – tudományos módszertan, hogy évi egy-két(-néhány) szakkikben megjelentetjük a legfrissebb kutatásaink eredményét. A szakkikk a tudományos kommunikáció hivatalos, maradandó formája.)

Lassan 12 éve, hogy először szembesültem ezekkel az ellentmondásokkal, azóta viszem magammal a témát a hátizsákomban, és időről időre előveszem. Időközben kiderült, hogy nemcsak én



nem találtam meg az egyértelmű válaszokat a kérdéseimre, hanem ezek a válaszok nem is léteztek. Évek teltek el, mire erre az egyszerű felismerésre rájöttem! A következő években meg tudtam fogalmazni konkrét kutatási kérdéseket és feladatokat.

Ma ott tartok a kutatócsoportommal, hogy már fogást találunk a felismert gubancokon, és kezdjük megérteni, hogyan lehet elvileg is helyes számításokat végezni, amelyek a nagy felbontású precíziós spektroszkópiái (az atomi-molekuláris tartományra végezhető legpontosabb!) mérésekkel összevethetőek lesznek, és helytállóak lehetnek mind a könnyű, mind a nehéz elemekre.

Felszabadító érzés, hogy lassacskán, de sikerül megoldani egy (számomra) évtizedes problémát, ami kezdettől fogva nagyon érdekelt, és ami kísér, kísért, sőt: kísért, de legalábbis kísértETT. Nem láthattam előre, hogyan alakul ez a történet. Benne volt a pakliban, hogy semmit sem tudok kezdeni az ellentmondással. Még most is csak valahol félúton tartok a munkatársaimmal, és az is lehet, hogy elakadunk valahol a további alkalmazások során. De ha így lenne, akkor legalább azt szeretném majd megérteni, hogy „miért?”.

Mennyire láthatóak eredményei nemzetközi téren?

Erről a nemzetközi tér művelőit kellene megkérdezni (bár ez jó sok időbe telne, mert jó nagy ez a tér). Pillanatnyilag arról tudok beszámolni, hogy van néhány személyes ismerősöm a világ néhány nagy egyetemén, mostanában sokfelé hívnak előadni, és eddigi pályafutásom során két egyetemen voltam vendégprofesszor (ETH Zürich – 2019, Georg-August Universität, Göttingen – 2022/2023). Nagy megtiszteltetés, hogy 2021-ben az elméleti és számítási kémikusok világszervezete (World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC) nekem ítélte a(z) évente egy 40 év alatti kutatónak adható Dirac-medált.

(A tudománymetriai mérőszámokat szeretném elkerülni ebben az interjúban, mert azt gondolom, hogy az emberi megértést, „meglátást” és kreativitást lehetetlen egyetlen vagy akár csak néhány mérőszámmal jellemezni. Ezeket a mérőszámokat sok helyen használják, sok helyen részlegesen használják, sok helyen pedig egyáltalán nem használják tudományfinanszírozási döntések meghozatalában.)

Ön szerint mi kell ahhoz, hogy az itthoni kutatások is fel tudják kelteni a nemzetközi szakmai közösség érdeklődését?

Sosem a nemzetközi szakmai közösség érdeklődésének felkeltése volt az elsődleges célom, hanem alapvető fontosságú tudományos kérdések megértése és megoldása. Eddigi munkám során jellemzően nem a *mainstreamet* követtem. Mindig is szerettem olyan, látszólag „kis” dolgokkal foglalkozni, amelyekről úgy éreztem, hogy valamilyen értelemben alapvető fontosságúak. Nagyon szeretem azt a Max Planckról szóló, ismert történetet, amely szerint a 19. század végén a tehetséges, ifjú Planckot a tanárai eltanácsolták a fizika tanulásától, mondván, hogy az már egy majdnem lezárt tudományterület – egy-két „apróságtól” eltekintve. (Planck szerencsére a saját feje után ment...)

Kérem, mutassa be a csoportot!

Kezdetben (2016) attól tartottam, hogy majd én leszek az egyetemű csoport, ezért a ma általam vezetett Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport hivatalos „bejegyeztetésére” is csak kicsit később került sor (2017) az ELTE Kémiai Intézetében. Laboratóriumnak pedig végképp vakmerőségnek éreztem volna nevezni a kezdeményezést... Csodálatos módon alakult az elmúlt néhány év (fél évtized), és pillanatnyilag egészen fantasztikus

csoport van körülöttem. A jövőt illetően szeretném, ha több kiváló doktorandusz csatlakozna hozzánk.

Hogyan lehet idehaza megteremteni egy ilyen nagy csoport működési feltételeit? Mekkora a szerepe ebben az intézmény támogatásának és mennyi a csoportvezető pályázati képességének?

A Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport elmúlt 6 éves kiépülése és működtetése szinte teljes mértékben külföldi (European Research Council és Swiss National Science Foundation) finanszírozásnak köszönhető. Azt gondolom, hogy a kutatócsoport az elmúlt 6 év során már bizonyított, ezért a jövőt illetően szeretnék intézményi (ELTE) és hazai (magyar, például MTA és NKFIH) támogatást látni a finanszírozásban.

Milyen szerepe van a sikeres kutatásban a nemzetközi kapcsolatoknak?

Azt gondolom, hogy a tudomány „lényege” személyes kapcsolatokon keresztül működik, és az a szép a dologban, hogy nagyon különböző, akár a világ bármely pontjáról érkező emberek tudnak egy-egy tudományos témán együtt dolgozni. Sokszor inspirálóan hat egy-egy ilyen együttműködés. Ugyanakkor versenyben is vagyunk más kutatóhelyekkel, ezért azt gondolom, hogy fontos megbecsülni a helyben kifejlesztett („saját”) eredményeket.

Mennyire tartja hivatásának az oktatást a kutatás mellett?

Általános iskolás koromban (fizika-francia szakos) tanár szerettem volna lenni. Előfordult, hogy az osztálytársaim azt kérték a tanárainktól, hogy én magyarázhasam el nekik a tananyagot: teljes természetességgel kimentem a táblához és elmagyaráztam. (Gyermekfejjel nem is jutott eszembe, hogy ez micsoda nagy megtiszteltetés az osztálytársaim és micsoda gáláns gesztus a tanáraink részéről!) Azt hiszem, hogy ez a „tanári-tanítói” képességem sokat romlott az évek során. Legfőképpen azért, mert előbb a tanulmányi versenyeken, majd a nagyon kemény tudományos versenyben muszáj volt másra (a „saját eredményekre”) összpontosítani.

Marad kapacitása tudomány-népszerűsítésre, egyáltalán feladatának érzi ezt is?

Kevés időm marad tudomány-népszerűsítésre. Ezt nem bánom, mert azt gondolom, hogy vannak, akik ügyesebbek ebben, és úgy érzem, én jelenleg többet tudok tenni az MSc–PhD-hallgatók szintjétől kezdődően a szakmai témavezetés területén.

Hogyan tudja összeegyeztetni a munkáját a családdal?

Nőként és anyaként úgy érzem, hogy ez nagyon nehéz, tulajdonképpen lehetetlen vállalkozás. Olyan értelemben lehetetlen, hogy

A gyerekekkel





nincsen jó megoldása. De valamilyen megoldása azért van. Egy természettudományos lapban mondhatom, hogy kicsit olyan, mint egy túlhatározott egyenletrendszer. Az én életem így alakult. Mindenesetre nagyon hálás és büszke vagyok, hogy van egy szép családom.

Milyen érveket tudna mondani egy, még Önnél is fiatalabb kollégának a pályán maradás mellett?

Nem próbálnám meggyőzni. Ellenkezőleg, arról próbálnám meggyőzni őt, hogy ne mondjon le a családról (én kaptam olyan – különben őszinte és „jó szándékú” – tanácsot, hogy ha már itt tartok a pályámon, akkor felejtsem el a családalapítást...). De ha mégis úgy döntene, hogy maradna a pályán, akkor nagyon drukkolnék neki, és legfőképpen „csodálnám” az erejéért és a bátorságáért.

Évtizedes távlatban helytállni mind a tudományban, mind a családban egy nő számára nagyon nehéz, sokszor hálátlan és kockázatos út. Szerencsére a modern technológia (közlekedés, kommunikáció, mobil és háztartási eszközök, modern anyagok stb.) segít ebben – a kisgyermekemmel én már csak egy gondolat-íróra vágytam. Egy ponton túl azonban a technológia már nem tud segíteni, az emberre van szükség. Egy anyát sok mindenben lehetetlen helyettesíteni, sok mindenben viszont lehet. Ezekben a kezdeti, kihívást jelentő években a férjem és az édesanyám voltak a legnagyobb segítségemre.

Ezenkívül pedig inspirálóan hatottak – a reménytelen pillanatokban – az ismert, családós kutatóknak megszólalásai: Mildred Dresselhaus (MIT, 4 gyermek), Ursula Keller (ETH Zürich, 2 gyermek), és például egy közelmúltbeli személyes benyomás: Clo-tilde Fermanian (Université de Paris-Est Créteil, 4 gyermek).

Mivel tud a kutatóhely, a kollégák, a társadalom segíteni ebben?

Három dolgot gyűjtöttem össze:

1) A tudományban alapvető elvárás a mobilitás. Ha egy nő évekig külföldön, az EU-n kívül kutat, majd hazatér, gyermeke születik, akkor nem jogosult érdemi juttatásokra (TGYÁS, GYED): az ösztöndíjak kiírásakor gondolni kellene erre a „lyukra” is.

2) Óriási szükség van bölcsődékre, óvodákra az egyetemek és kutatóintézetek közvetlen közelében.

3) Szükséges támogatást (legalább részleges visszatérítést) biztosítani szakmai utazásokkal kapcsolatban felmerülő pluszkiadásokra kisgyermekes anyák részére (több külföldi egyetemen létezik ilyen, például „Returning Carers Scheme” néven).

Ebből az interjúból már kiderült, hogy Ön ízig-vérig elméleti kutató. Hogyan látja ebből a perspektívából a kísérlet és elmélet kapcsolatát?

Engem mindig a molekuláris anyag kvantitatív tulajdonságai, jellemzése érdekelt. Nem trendek vagy nagyságrendek, hanem a pontos mérés és számítás. Lenyűgözőnek találom, hogy fantasztikus pontossággal lehetséges időt mérni, időt lehet a legpontosabban mérni. Ezenkívül olyan mennyiségeket lehet nagyon pontosan mérni, amelyeket valahogyan az idő mérésével kapcsolatba lehet hozni. Egy pontos mérésből adódik egy valahány értékes jegyre meghatározott szám, ami a 0,1,2,...,9 számjegyek valamilyen sorozata. Azon kívül, hogy egy mérés bizonytalanságának egyre nagyobb leszorítása óriási intellektuális és műszaki-tervezettudományos teljesítmény, egy ilyen számsorozattal önmagában nem lehet mit kezdeni. Ahhoz, hogy értelmezni tudjuk ezt a számsorozatot, kell egy jó elmélet vagy legalább egy modell, amivel egy hasonló számot kapunk. Ha a modellünk sok rendszerre jól teljesít, konzisztens, és még néhány további elvárásnak meg-

felel, akkor jó elméletnek gondolhatjuk. Egy jó elmélet tartalmat, tudást, megértést, rendszert tehet a mérési adatsorok mögé. És fordítva, az egyre pontosabb mérési adatsorok készítenek bennünket arra, hogy tökéletesítsük a modelljeinket és az elméleteinket. A kvantitatív elméleteinkben olykor szerepel néhány fizikai állandó. A kémia számára alapvető fontosságú fizikai állandó az elektron töltése, valamint az elektron és a proton tömegének aránya. Ezeket a mennyiségeket a legpontosabb mérések és a legjobbnak gondolt elméletek alapján határozzák meg (nagyon leegyszerűsítve: az „állandók” különféle értékeit behelyettesítik az elmélet egyenleteibe, és megnézik, hogy mely értékkel adódik a legjobb egyezés az aktuálisan legjobbnak gondolt mérési eredményekkel). Rendszeresen finomhangolják ezeket az „állandókat”. Néhány éves távlatban ennek a finomhangolásnak a legtöbb alkalmazás szempontjából kicsi a jelentősége. Az így meghatáro-



Sikeres négyévnvi doktori kutatómunka megünneplése a WATOC-on, Vancouverben, Alberto Martin Santa Dariával (balra) és Ferenc Dáviddal (jobbra) 2022 júliusában

zott „állandók” az anyag modellezésének egy széles tartományán használhatók, és a számításokból akár előre jelezhetünk eredményeket a mérések számára (például, hogy hol keressük a mérési adatsorban a jelet) vagy akár mérések helyett (mert túl költséges vagy akár lehetetlen lenne elvégezni a mérést a jelenleg rendelkezésre álló laboratóriumi körülmények között).

Röviden: mérés nélkül az elmélet csak fantáziálás, elmélet nélkül a mérés csak adathalmaz.

A kutatás nemzetközisége miatt sok fiatal kutató szembesül az „ittthon vagy külföldön” dilemmával. Hozott már ilyen döntést életében? Ha igen, mi volt az érv az itthonmaradás mellett?

Ebben a tekintetben szuperponált állapotban vagyok. Állandóan elvágódom (sok konferencia- és szemináriumi meghívást, két vendégprofesszori meghívást is elfogadtam már), közben pedig úgy érzem, hogy minden, az otthon szeretetétől távol töltött perc veszteség – szakmai szempontból is. A legjobb ötletek (kreativitás), a „na, ezt most kipróbálom, és lehet, hogy zsákutca” attitűd (bátorság) abból a szeretetből és biztonságból táplálkoznak, amely az ismert, szeretett környezettől származik. A rendszeres repülőutakat mégis azért szeretem, mert olyankor hosszan, zavartalanul lehet olvasni, gondolkodni. Eddig minden természetesen alakult. Kíváncsian várom a folytatást.

Mi pedig szívből szurkolunk ehhez! Sok sikert kívánunk a további kutatásokhoz és sok örömet a család körében!

Szalay Péter