



Antropikus tudatosság

(Csaba Szántay, Jr. (ed): *Anthropic Awareness. The Human Aspects of Scientific Thinking in NMR Spectroscopy and Mass Spectrometry*, Elsevier, 2015.)

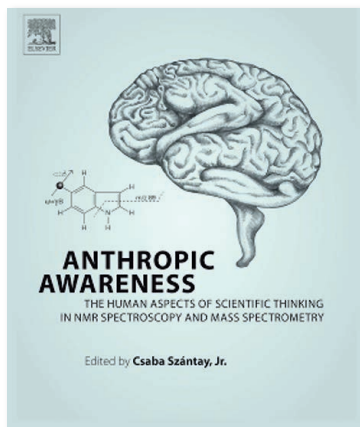
A kötet címe magyarul így fordítható: Antropikus tudatosság, avagy a tudományos gondolkodás emberi tényezői az NMR-spektroszkópiában és a tömegspektrometriában.

A 442 oldalas könyv ötletgazdája, szerkesztője, öt fejezet szerzője, továbbá egy fejezet társszerzője ifj. Dr. Szántay Csaba, a Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási osztályának vezetője. A könyv összesen 15 fejezetből áll, ezek további szerzői egy kivételtől eltekintve a Szerkezetkutatási osztály jelen és volt munkatársai: dr. Béni Zoltán, dr. Demeter Ádám, dr. Dékány Miklós, dr. Dubrovay Zsófia, dr. Háda Viktor, Kóti János, dr. Sánta Zsuzsanna és dr. Szakács Zoltán.

A kivétel egy dán fizikus, dr. Lars Hanson, aki az egyik elméleti fejezet írója.

A cím már önmagában is különösnek tűnhet, nem beszélve a címlapon szereplő grafikáról, ami egy összekucorodó embert formáló emberi agyat ábrázol. A cím felvetheti a kérdést: vajon mi újat lehet mondani a mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópiáról és a tömegspektrometriáról (MS), legyen az akár e módszerek fizikai elmélete, akár alkalmazásuk például a szerkezetvizsgálatok terén? E módszerek elméleti alapjai látszólag szilárdak, és már vagy hatvan éve lefektették őket, továbbá széles körben ismertek és elfogadottak tankönyvi szinten is. A szerkezetvizsgálati alkalmazásokat tekintve pedig mérhetetlen mennyiségű, kiválóbbnál kiválóbb tudományos cikket találhatunk a szakirodalomban. A megfajtás ezekre a kérdésekre a címben említett „emberi tényezőben” rejlik. Ugyanis a könyv, egészen eredeti módon, az emberi gondolkodás inherensen sérülékeny, mondhatni fallibilista szemszögéből tekint ezekre a kérdésekre, megkérdőjelezve alapvető paradigmákat és rámutatva téves értelmezési mítoszokra az elmélet terén, valamint elemezve azt, hogy mennyire könnyű hibás következtetésekre jutni a szerkezetvizsgálatokban. A kémiai szakirodalom meglepően jelentős százalékban tartalmaz ilyen okokból hibásan meghatározott molekulaszervezeteket. Ezeknek a tévedéseknek a hátterében olyan „meggondolatlanságok” állnak, amit a szerzők „szakértői hibának” neveznek. A szakértői hiba koncepciója arra utal, hogy a szóban forgó tévedések nem a kutató képzettségének, tudásának vagy tapasztalatának a hiányosságából adódnak, hanem a gondolkodásunkat alapvetően és rejtett módon befolyásoló „mentális csapdák” miatt. A mentális csapdák mi-mbenlétének a megértése elvezet az „Antropikusan tudatos” gondolkodás fogalmához, amelynek lényege, hogy a következtetéseink, döntéseink, feltételezéseink során mindig tudatosan számoljunk gondolataink *emberi* mivoltával (ezt szimbolizálja az előlap grafikája), és ebből adódóan a csapdák rejtett hatásával. Ez a fajta tudatosság lehetővé teszi a szakértői hibák meglétének vagy lehetőségének felismerését és elkerülését.

Az emberi tévedésekkel való szembesülés kényes téma, különösen a tudományban. A könyv azonban rendkívül pozitív attitűddel, bátorsággal, őszinteséggel, sőt néhol provokatív módon nyúl



ehhez a kérdéshez, egész kis filozófiát és pszichológiai értelmezést rendelve hozzá. Az „Antropikus tudatosság” egyik fő üzenete, hogy az ilyen tévedéseket okozó mentális csapdák gondolkodásunk természetes velejárói, ezért nem félünk kell tőlük, hanem megértenünk őket! A hiba a tudomány fejlődésének szerves része: egy új tudományos eredmény sokszor nemcsak annak felfedezéséről szól, hogy a dolgok hogyan *vannak*, hanem arról (is), hogy hogyan *nincsenek* – azaz miért gondoltuk őket eddig rosszul.

A könyv három nagyobb részt tartalmaz. Az első rész egyetlen 87 oldalas fejezetből áll (Szántay Csaba), ami tárgyalja az antropikusan tu-

datos (tudományos és nemcsak tudományos) gondolkodás filozófiáját és pszichológiáját, ezen belül pedig 45 olyan, mélyen az emberi mivoltunkból adódó mentális csapdát, ami a könyv további részeiben is visszaköszön. A fejezet alapvető tézispontjai között említendő az a megközelítés, hogy a tudományos igazságok nem abszolút kategóriák, hanem rengeteg olyan, szubjektív értelmezésnek teret adó „szürke zónát” tartalmazhatnak, amiről nem szívesen veszünk tudomást. A kutatók gondolkodása a valóságban közel sem annyira tisztán racionális és objektív, mint azt szeretnénk hinni, hanem átszövik olyan érzelmi vagy érzelmi-jellegű faktorok, amik egyrészt nélkülözhetetlenek egy tudományos probléma feltárása és az elméletek kidolgozása során, másrészt viszont komoly hibaforrások is lehetnek abból a szempontból, ahogyan ezeket az elméleteket értelmezzük, vagy ahogyan kísérleti adatokból tényszerű következtetéseket vonunk le. A fejezet felvet olyan koncepciókat is, mint például a megértés illúziója, a valóság és a tudományos modellek viszonya, a gondolkodásunk alapvetően metaforikus jellege, a paradigmák szerepe és veszélye stb. A tárgyalást igen eredeti grafikák (Szirmai Nóra szobrászművész munkái) is illusztrálják. A fejezet pozitív kicsengése az, hogy a mentális csapdák megértése és tudatossá tétele olyan „kihegyezett” tudatállapotot eredményez, aminek birtokában könnyen tetten érhetjük az emberi tényezőket, érzelmi faktorok hatását mind a saját, mind pedig mások gondolkodásában, a tudományos életben és a mindennapi életünkben egyaránt.

A könyv további két nagyobb részében a szerzők az első fejezet gondolatiságát ültetik át a gyakorlatba.

A második rész négy olyan fejezetből áll (a 2-estől az 5-ös fejezetig), amelyek az NMR-elméletének fundamentumaihoz nyúlnak vissza „antropikus” szemmel. Ez a rész több, a szakmában általánosan konszolidáltnak tekintett fizikai magyarázatot új, vagy újszerű értelmezésben tálal, illetve rámutat néhány széles körben elterjedt félreértésre az NMR alapjelenségét tekintve. Ennek szellemében a 2. fejezet (Szántay Csaba) erősen modell-centrikus felfogásban tárgyalja az NMR-alapjelenség klasszikus fizikai értelmezését. E fejezet sajátosságai közé tartozik például a rezonancia merettest-dinamikai értelmezése és a relaxáció statisztikus fizikai leírása. A 3. fejezet (Lars Hanson) az NMR-alapjelenség kvantum-



mechanikai értelmezését taglalja, több helyen rádöbbenve az olvasót arra, hogy eddig valószínűleg mennyire illuzórikus volt az ezzel kapcsolatos megértése. Erre egy példa a feles spinű magok esetében az NMR-rel összefüggésben szinte már ikonikussá vált kétkónusz-modell félrevezető voltának az elemzése. A 2. és 3. fejezet egymással szoros összefüggésben van, és az itt lefektetett koncepciók egy része megalapozza a 7. fejezetben leírtakat is (lásd alább). A 4. fejezet (Szántay Csaba) azt a problémát járja körbe, hogy értelmezhető-e a rádiófrekvenciás (RF) NMR-pulzus ún. „off-rezonancia” hatása a Heisenberg-féle bizonytalansági elv segítségével (ez az értelmezés tipikus az irodalomban). Ezzel összefüggésben a fejezet újszerű módon kezeli a Fourier-transzformáció matematikáját, és rámutat több széles körű félreértésre, ami a Fourier-transzformáció matematikai, illetve fizikai lényegét érinti. Az 5. fejezet (Szántay Csaba) a gerjesztő RF-besugárzás mibenléte körüli mítoszokat elemzi, részletesen tárgyalva azt, hogy a matematikai fogalmak fizikai értelemmel való reflexszerű „felruházása” hogyan vezethet a megértés illúziójához, és ezen keresztül téves értelmezésekhez. A fejezet egy ezzel kapcsolatos közeli analógiaként tárgyalja az optikai forgatás jelenségének értelmezési problémáit is.

A harmadik rész 10 olyan fejezetet tartalmaz (a 6-ostól a 15-ös fejezetig), amelyek témája az NMR és az MS alkalmazása a kismolekulás szerkezetkutatásban. Itt fontos megemlíteni, hogy a szerzők világszínvonalú csúcsműszereken dolgozó főállású NMR- és MS-spektroszkópusok, akik több mint 25 év szerkezetkutatási tapasztalatát sűrítették ezekbe a fejezetekbe mind szakmai, mind emberi szempontból. Ez a tapasztalat egy olyan gyógyszeripari közegben született, ahol az NMR és MS között napi szinten tudatos és közeli együttműködés valósul meg, továbbá szoros határidők mellett kell nagyszámú mintáról erősen minőségi szemlélet orientált módon, a lehető legmagasabb konfidenciaszintű, valamint publikációs igényességgel jellemezhető szerkezetmeghatározást végezni.

Minderre a különleges tapasztalatra alapozva, a 6. fejezet (Szántay Csaba) egy „antropikusan tudatos” szemlélet mentén áttekintést ad a kismolekulás szerkezetvizsgálatok tényleges mibenlétéről, rámutatva a kémikusi társadalomban ezzel kapcsolatban uralkodó számos közhiedelemre és félreértésre. Ez a fejezet olyan hasznos tanácsokkal van megfűszerezve, amelyek nem elsősorban a szerkezetvizsgálatok technikáját, hanem a pszichológiáját tárgyalják, elemezve azt a problémát, hogy milyen könnyű tévedni még a legprofesszionálisabb emberi és műszeres tudás mellett is, és ajánlást adva arra, hogy milyen működési protokollt célszerű megvalósítani az ilyen hibák elkerülése érdekében.

A 7. fejezet (Szakács Zoltán és Sánta Zsuzsanna), valamint a 8. fejezet (Háda Viktor és Dékány Miklós) áttekintést nyújt azokról a legfontosabb modern NMR- és MS-technikákról, amiket a kismolekulás szerkezetvizsgálatok módszertanában alkalmazunk, ugyancsak építve az első fejezet gondolatiságára. Ez a két fejezet önmagában és technikai tartalmát tekintve is rendkívül hasznos lehet bárkinek, aki szerkezetvizsgálattal foglalkozik, vagy többet szeretne annak módszertanáról megtudni. A 7. és 8. fejezet célja egyúttal az is, hogy felvázolja mindazt a műszaki ismeretet, ami szükséges a további hét fejezet megértéséhez.

A 9. fejezet (Béni Zoltán, Szakács Zoltán, Sánta Zsuzsanna) azt a fontos problémakört analizálja, hogy a számítógépes spektrumértékelő szoftverek ki tudják-e kerülni az adat-interpretáció során fellépő humán tényezőket, ezzel biztos szerkezeteket generálva. A tömör válasz az, hogy igen is meg nem is, az adott problémától és a kísérleti adatok minőségétől függően; ebben a kon-

textusban a mentális csapdák ismeretének birtokában érthetjük meg igazán az ilyen szoftverek használatának jelentőségét és korlátait is.

A 10–15. fejezetek néhány konkrét és kifejezetten izgalmas szakmai detektívmunkát igénylő szerkezetkutatási problémán keresztül illusztrálják azt, hogy a sikeres szerkezetvizsgálatokhoz milyen kritikusan fontos az emberi tényezők tudatos kezelése mind saját magunkon belül, mind a szakmai együttműködéseinkben. Ezeknek a fejezeteknek egy része korábban már nívós szakmai lapokban közlésre került, azonban – a publikációs szokásoknak és elvárásoknak megfelelően – csak a tényekre szorítkozó formális és „steril” tálalásban. Ezzel szemben a könyvben ezek a szerkezetvizsgálatok, igen tanulságos módon, a való életnek megfelelő történetiséggel és a detektívmunka során felbukkanó mentális csapdák őszinte tálalásával vannak tárgyalva, az ebből a szempontból lényegtelen technikai részletek mellőzésével. A 10. fejezet (Béni Zoltán) az uliprisztál-acetát nevű hatóanyagtól kromatográfiásan elválogatott és ezért látszólag nyomszennyezőként jelentkező természetes deutérium izotopológus szerkezetét paradigma-váltásokat igénylő szerkezetfelderítési folyamatát írja le. A 11. fejezet (Dubrovay Zsófia és Háda Viktor) egy új vinkrisztin nyomszennyező kalandos azonosítását elemzi; ennek során az NMR és MS között olyan szakmai pingpong-meccs játszódott le, amelynek minden lépésénél könnyen (de tévesen) hihető lett volna, hogy a szerkezet már meg van fejtve. A 12. fejezet (Szakács Zoltán és Kóti János) a ziprazidon hatóanyag egy bomlástermékének igen komoly kihívásokat tartogató szerkezetvizsgálatát taglalja. A 13. fejezet (Sánta Zsuzsanna és Háda Viktor) egy olyan esetet tárgyal, ahol az elsődleges NMR- és MS-adatok megfelelni látszólag a szintetikus előállított molekula kémiaiag várt szerkezetének, azonban egy meglepő eseményt követő mélyebb vizsgálatok kiderítették, hogy a tényleges szerkezet megdöbbentő módon eltért ettől az előzetes konklúziótól. A 14. fejezet (Szántay Csaba és Demeter Ádám) annak felfedezését mutatja be, hogy egy, a kémiai kontextus és az NMR-spektrumban mutatkozó jelkettőződés alapján diasztereomer keveréknek vélt mintában a kettőződést valójában az enantiomer-önfelismerés különös, kevéssé ismert, és nem várt mértékű jelensége okozza. E fejezet egyik további érdekessége, hogy elsőként fekteti le (didaktikus módon) ennek a jelenségnek az elméleti alapjait. A 15. fejezet (Demeter Ádám) egy olyan ismeretlen vegyület azonosítását írja le, ahol a szerkezet megfejtésének kulcsa abban a meglepő és kutatói bátorságot is igénylő felismerésben volt, hogy a vegyületben levő pirimidingyűrű a szénen protonálódott.

Kiknek ajánlható a könyv? Tekintettel az üzenetek széles spektrumára, egy hasonlóan széles spektrumú szakmaiságot képviselő olvasótábor számára lehetnek fontosak ezek az üzenetek. A szerkezetkutatás filozófiáját, valamint ennek gyakorlatát bemutató fejezetek szemléletileg is újszerűek és a gyakorlatban is fontosak és hasznosak szintetikus kémikusoknak és analitikusoknak egyaránt. Ezeknek a fejezeteknek a megértése nem igényel különösebb NMR- vagy MS-előismereteket. Az elméleti részek inkább azok számára lesznek érdekesek, akik több vonzalmat éreznek a fizika és a matematika iránt, azonban számukra ezek a fejezetek „szemfelynyítő” élményt fognak jelenteni. Az első fejezet mindenkinek ajánlható, aki a természettudományokban érintett, beleértve a pszichológusokat is. Összességében a könyv izgalmas és új szemléletet, gondolkodási módot tükröz, amely minden olvasójának át fogja alakítani a világlátását és a gondolkodását – mind a tudományban, mind pedig a mindennapi életben.

Kövér Katalin