

Dr. Mayer István

Mayer István fizikus, a kémiai tudomány doktora (1987), közel négy évtizede a kvantumkémia és molekulafizika kiemelkedő és elismert kutatója hazánkban és a nagyvilágban.

1943-ban született Budapesten; 1967-ben szerzett kitüntetéses rádiófizikusi diplomát a Harkovi Egyetemen. Kutatói pályafutása az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetéhez, ill. Kémiai Kutatóközpontjához kötődik: külföldi tanulmányutaktól eltekintve itt dolgozik 1968 óta, jelenleg tudományos tanácsadói besorolásban. Tudományos érdeklődése 1970 óta a kvantumkémiai problémák felé fordult, ahol nemzetközileg igen jelentős eredményeket ért el. *Fő kutatási területe* a kémiai kötés fizikai természetének leírása és az intermolekuláris kölcsönhatások elméleti vizsgálata.

Aktivitása az 1980-as évek elejétől a kötésrend- és vegyérték-indexek kifejlesztésére irányult, ahol számos jelentős újítást vezetett be. Ezeknek az indexeknek a jelentősége abban rejlik, hogy fontos koncepcionális kapcsolatot teremtenek a molekulák (mint elektron- és atommagrendszerek) *fizikai leírása* és a kötésekkel összekapcsolt atomok által alkotott molekulák *kémiai elképzelése* között. Segítségükkel rendszerezhető és értelmezhető a kvantumkémiai számítások eredményei, mert olyan információt nyújtanak, amelyek *kémiai jelentéssel* bírnak.

A kötésrend és vegyérték-indexek elődeit a szemempirikus kvantumkémiai módszerek idején vezették be; ezek *ab initio* szintű megfelelőjének kifejlesztése Mayer István munkásságának köszönhető: az *ab initio* kötésrend-index az általa 1983-ban kidolgozott „*kémiai Hamilton-operátor közelítés*” keretében jelent meg. Erre a közleményére eddig több, mint 700 hivatkozást kapott, ami az utóbbi évben közel százszal gyarapodott: ez egyértelműen jelzi, hogy a módszer alkalmazása egyre szélesebb körben terjed. A Mayer-féle kötésrendszámítási módszer mára már beépült a standard kvantumkémiai programcsomagokba.

A továbbiakban Mayer I. (munkatársaival együtt) különféle energia-dekompizációs eljárások kidolgozásával bevezette és jellemezte az *ab initio* energiakomponenseket, később a “3D-analízis” keretében a 3-dimenziós fizikai térben is értelmezhető kötésrendeket, vegyértékeket és energiakomponenseket. Aktuális kutatásainak célja továbbra is új sémák keresése a kémiai információ *a posteriori* kinyerésére a kvantumkémiai számítások eredményeiből. (Nemrég pl. bevezette az effektív minimál bázis fogalmát, amely összeköti a modern számítások módszertanát a klasszikus kémiai gondolkodással.)

Mayer István tudományos kutatói teljesítményével három alkalommal érdemelte ki az MTA Kémiai Kutatóközpont (ill. elődje) Intézeti Díját; 1998-ban pedig Akadémiai Díjat kapott.

Az ELTE TTK címzetes egyetemi tanára. Évtizedek óta tart *haladó kvantumkémiai speciálkollégiumot* az egyetem diákjai és PhD hallgatói számára. 2 magyar és 2 spanyol diáknak volt PhD témavezetője.

Eddigi pályafutása alatt 168 tudományos közleményt jelentetett meg, amelyekre összesen több, mint 3000 hivatkozást kapott.

2003-ban jelent meg angol nyelvű monográfiája (haladó szintű tankönyv kvantumkémikusok számára) – az első olyan könyv, amelyben kivétel nélkül minden kvantumkémiai tétel és állítás bizonyítva van. (I. Mayer: *Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry*, Kluwer/Plenum: New York, 2003. - A könyv 2005-ben orosz fordításban is megjelent.)