

ELHUNYT MAYER ISTVÁN

2020 január 11-én meghalt Mayer István kvantumkémikus.

A 40-es évek elején született, nehéz időkben. Édesapját elvesztvén édesanyja és nagynénje nevelte, mégpedig szigorú szellemi munkára, kemény tanulásra. Az elvetett mag kicsírázott: Mayer Istvánból igazi szellemi óriás vált.

Egyetemi tanulmányait Harkovban végezte rádiófizikus szakon. Diplomázóként egy kristály ESR spektrumának orientációs átlagolását kellett elvégeznie, ami elliptikus integrálokra vezető nehéz matematikai feladat. Ehelyett porrá törte a kristályt, és felvette a már izotrop spektrumot...

Magyarországra visszajővén a KKKI-ban az ESR csoportba került, majd hamarosan Ladik János elméleti csoportjába igazolt át, ahol igen hamar komoly eredményeket mutatott fel. Egy korai ilyen eredmény a következő. Azt a feladatot kapta, hogy bővítse kvantumkémiai tudását. Egyik nap jelezte, hogy szerinte a Hartree-Fock módszer tankönyvi levezetése hibás.

– Mi a baj vele? – kérdezte a főnöke.

– Csak az, hogy a pályák ortogonalitását nem szabad kihasználni a levezetés során, pedig mindenki abból az energiaformulából indul ki, ami csak ortogonális pályákra érvényes!

– Akkor csinálj jobbat! – így Ladik. Mert azt mindenki tudta, hogy végeredmény persze jó.

És Mayer István megtette, és publikálta is angolul. Nem a standard úton járt, ami a nemortogonális energiaképletből indult volna ki, hanem egy frappánsan egyszerűbben: a variációs elvből megkapta Brillouin tételt, majd abból a Hartree-Fock egyenleteket... Utána kimutatta, hogy a tankönyvi levezetés azért ad jó eredményt, mert a hibás funkcionálnak véletlenül ugyanott van a minimuma.

Következő nagy horderejű eredménye a spin-projektált UHF egyenletek levezetése volt, amit nyaralásra utazva a vonaton hajtott végre. Erre P-O. Löwdin, a Nobel-díj bizottság tagja azonnal felfigyelt, hiszen egy fejezetet zárt le a kvantumkémiaiában. Barátság és tudományos együttműködés alakult ki köztük.

Karrierje második felében a kvantumkémiai hullámfüggvények interpretálásával foglalkozott. Bevezette a vegyérték- és a kötésrend indexeket (ezeket a játszótéren vetette papírra, míg gyerekeire vigyázott). Ezek a korábban intuitív fogalmak most szigorúan származtathatók lettek bonyolult hullámfüggvényekből is. Új eljárást adott a báziskiterjesztési hiba figyelembevételére, és megalkotta az „effektív minimális bázis” fogalmát.

Mayer István minden sikere mellett tökéletesen tisztában volt korlátaival is. Tudta, hogy figyelme (matematikai levezetéseket kivéve) szétszórt. Ezért azután nem vezetett autót, nem volt jogosítványa sem.

A fenti és sok más itt nem részletezett eredmények következtében vagy 200 publikációjára mintegy 6000 független idézetet kapott, h-indexe 41. Külön érdemes kiemelni magyar- és angol nyelvű monográfiáit, amelyeken kvantumkémikusok generációi nevelkedtek.

Mayer István fizikusi végzettséggel, fizikusi szemlélettel, kémikus körökben, kémiai problémák megoldásával foglalkozott. Olyan tekintélyt szerzett magának, hogy nyugdíjba vonulása előtti években főigazgatója kijelentette, hogy „István az egyetlen az Intézetben, aki azt kutat, amit akar...”

Nagyon fog nekünk hiányozni.

Requiescat in pacem.

Budapest, 2020 január 31.

Surján Péter
egyetemi tanár, ELTE