



KÜLHONI MAGYAR TUDÓSPORTRÉK



Pulay Péter

(Veszprém, 1941. szeptember 20.)

*a Magyar Tudományos Akadémia
külső tagja*



Peter Pulay was born in Veszprém on 20 September 1941. He was allowed to finish the 8-year elementary school in 7 years, according to his language teacher “this kid is interested in nothing – except sciences”, and his father built him a laboratory bench on the open veranda of their flat in Budapest. He attended the Petőfi Grammar School, he was an active competitor of the High School Mathematical Gazette, joined the Chemistry Club and attended the discussions of the High School Mathematical Society. Although he had scored high in the national high-school math competition, he was admitted to the Eötvös Loránd University as chemistry major in 1958, from where he received his MA diploma in 1963 and his PhD in

Pulay Péter Veszprémben született 1941. szeptember 20-án. A nyolcéves általános iskolát hét év alatt végezte el, nyelvtanára szerint „ezt a kölyköt semmi sem érdekli, kivéve a tudományt”, édesapja budapesti lakásuk nyitott verandáján berendezett neki egy laboratóriumot. A Petőfi Gimnáziumba járt, aktív versenyzője volt a Középiskolai Matematikai Lapoknak, belépett a Kémikusok Klubjába, és látogatta a Középiskolai Matematikai Társaság előadásait. Előkelő helyezést ért el az országos középiskolai matematikai tanulmányi versenyen, 1958-ban mégis kémia szakra jelentkezett az Eötvös Loránd Tudományegyetemre, MA diplomáját 1963-ban vette át. PhD fokozatot 1970-ben szerzett a Stuttgarti Egyetemen.

KÜLHONI MAGYAR TUDÓSPORTRÉK

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA MAGYAR TUDOMÁNYOSSÁG KÜLFÖLDÖN ELNÖKI BIZOTTSÁG

HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES HUNGARIAN SCIENCE ABROAD PRESIDENTIAL COMMITTEE

12. oldal

theoretical inorganic chemistry from the University of Stuttgart in 1970.

In 1963-74 he worked in the Research Group for Inorganic Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, in 1975-77 he was Senior Research Fellow, in 1977-80 associate professor at the Eötvös Loránd University. In the 1970's he was visiting scientist and professor in several universities in the US, in 1980 he did not return to Hungary and since 1982 he has been professor at the University of Arkansas, Fayetteville, in 1983 he became Roger B. Bost Distinguished Professor, and in 2005 Mildred B. Cooper Chair in Bioinformatics and Computational Research. Now he is professor emeritus. Between 1970 and 1979 he directed eight theses and dissertations in Budapest, later several PhD's, post-docs and undergraduate students up to now.

He is the author/co-author of more than 280 publications. In 1979 the Journal of the American Chemical Society listed him among the most cited authors (No. 64), see <http://pubs.acs.org/journals/jacsat/125promotion/articles.html>

His main fields of research are Theoretical Chemistry and Vibrational Spectroscopy; Ab Initio Gradient Methods; Molecular Potential Surfaces; Calculation of Magnetic Properties, Molecular Electronic Structure Calculations, Geometry Optimization and Dynamics in Large Molecules, Parallel Computation of Electronic Structure.

1963-től 1974-ig az MTA Szervetlenkémiai Kutatócsoportjában dolgozott, 1975-től 1977-ig tudományos főmunkatárs, 1977-től 1980-ig docens volt az ELTE-n. Az 1970-es években többször volt vendégkutató és professzor különböző amerikai egyetemeken, 1980-ban nem tért vissza Magyarországra. 1982-ben lett az Arkansas Egyetem, Fayetteville professzora, 1983-ban Roger B. Bost professzor, 2005-ben a Bioinformatikai és Számítástechnikai Kutatóintézet Mildred B. Cooper vezetője lett. Jelenleg professor emeritus.

1970 és 1979 között nyolc dolgozat és disszertáció témavezetője volt Budapesten, később számos hallgató, PhD és posztdoktori hallgató mentora volt.

280-nál is több publikáció szerzője és/vagy társszerzője. 1979-ben az Amerikai Kémiai Társaság feltüntette a legtöbbet idézett szerzők listáján (No. 64.) Lásd.: <http://pubs.acs.org/journals/jacsat/125promotion/articles.html>

Fő kutatási területei: elméleti kémia és vibrációs spektroszkópia, Ab initio gradiens módszerek, molekulaszervezetek, mágneses tulajdonságok kiszámítása, molekulák elektronszerkezetének kiszámítása, nagy molekulák geometriai optimalizációja és dinamikája, elektronszerkezet parallel kiszámítása. „Kevés kvantumkémikus gyakorolt olyan nagy hatást a kémiára, mint Pulay Péter. Mindenki arról álmodik, hogy legyen egy felségterülete, neki pedig négy van: az analitikai gradiens módszer,



KÜLHONI MAGYAR TUDÓSPORTRÉK

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA MAGYAR TUDOMÁNYOSSÁG KÜLFÖLDÖN ELNÖKI BIZOTTSÁG

HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES HUNGARIAN SCIENCE ABROAD PRESIDENTIAL COMMITTEE

13. oldal

“Few quantum chemists have made a greater impact on chemistry than Peter Pulay. While everyone dreams of hitting one ‘home run,’ Pulay has four: analytical gradient method, NMR parameter calculation, local correlation, and direct inversion in iterative subspace (DIIS). These are household terms in the field and part of nearly all quantum chemistry programs used by countless chemists.” – his colleagues say. Pulay’s research has paved the way for Nobel Prize winners, including John Pople, who won the Nobel Prize in 1998 for his calculation “of these derivatives based on earlier developments by Peter Pulay.” See: <http://www.nobel.se/chemistry/laureates/1998/chemback98.pdf>

The Pulay Stress (named for Peter Pulay) is an error that occurs in the stress tensor obtained from plane-wave density functional theory calculations due to the incompleteness of the basis set. He is member of the American Chemical Society, fellow of the World Association of Theoretical Organic Chemists, chairman of the University of Arkansas Section of the ACS (1989), elected member of the International Academy of Quantum Molecular Sciences (1990), member of the Board of Directors of the International Society for Theoretical Chemical Physics (1994), doctor honoris causa of the Eötvös Loránd University (2001), fellow of the American Association for the Advancement of Science (2005), He is/was member of

az NMR paraméter kiszámítása, a lokális korreláció és a közvetlen inverzió iteratív alterekben (DIIS). Ezek alapfogalmak, és szinte minden, számtalan kémikus által használt kvantumkémiai program részét képezik” – mondják munkatársai. Pulay kutatómunkája kövezte ki az utat több Nobel-díjas, köztük John Pople számára, aki 1998-ban kapott Nobel-díjat „a Pulay Péter által korábban kidolgozott derivatívok kiszámításáért.” Lásd: <http://www.nobel.se/chemistry/laureates/1998/chemback98.pdf>

A (Pulay Péterről elnevezett) Pulay-feszültség olyan hiba, amelyik a síkhullám sűrűség funkcionális elméleti számításokból kapott feszültség tensorban fordul elő a bázis szet pontatlansága okán. Tagja az Amerikai Kémiai Társaságnak (ACS), az Elméleti Szerveskémikusok Világszövetségének, elnöke volt az ACS Arkansas Egyetemi Szekciójának (1989), választott tagja a Kvantum Molekuláris Tudományok Nemzetközi Akadémiájának (1994), a Nemzetközi Elméleti Kémiai Fizikai Társaság igazgatótanácsi tagja (1994), az ELTE tiszteletbeli doktora (2001), tagja az Amerikai Társaság a Tudomány Hala-dásáért-nak (2005). Szerkesztőbizottsági tagja (volt) a Theochem-nek (1981-88), a Journal of Computational Chemistry-nek (1985-től), az International Journal of Quantum Chemistry-nek (1990-97), a Biosym Industries tudományos tanácsadó testületi tagja (1992-97), elnöke a Parallel Quantum Solutions LLC-nak (1997).



KÜLHONI MAGYAR TUDÓSPORTRÉK

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA MAGYAR TUDOMÁNYOSSÁG KÜLFÖLDÖN ELNÖKI BIZOTTSÁG

HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES HUNGARIAN SCIENCE ABROAD PRESIDENTIAL COMMITTEE

14. oldal

the following Editorial Boards: Theochem (1981-88), Journal of Computational Chemistry (1985-present), International Journal of Quantum Chemistry (1990-97), member of the Scientific Advisory Board of the Biosym Industries (1992-1997) and President of the Parallel Quantum Solutions, LLC (1997).

His honors include the Award of the Hungarian Academy of Sciences (1979), Medal of the International Academy of Quantum Molecular Sciences (1982), Citation Classic, Current Contents (May 2, 1988), Haliburton Research Award, University of Arkansas (1990), Creativity Award of the National Science Foundation, (1991, 1993-97), Alexander Von Humboldt Senior Scientist Award (1995), The 2003 Schrödinger Medal of WATOC (World Association of Theoretically Oriented Chemists), ACS Award in Theoretical Chemistry (2017).

In 2007 an international conference with 300 participant, organized by H. F. Schaefer and A. Csaszar, was held honoring P. Pulay's research contributions: "Molecular Quantum Mechanics: Analytical Gradients and Beyond" in Budapest. His selected papers were published in book form "Molecular Quantum Mechanics: Analytical Gradients and Beyond", ed. A. G. Csaszar, G. Fogarasi, H. F. Schaefer, P. G. Szalay, ISBN 978-963-463-916-9.

Elismerései között szerepel a Magyar Tudományos Akadémia Díja (1979), a Kvantum Molekuláris Tudományok Nemzetközi Akadémiájának érme (1982), Citation Classic, Current Contents (May 2, 1988), Haliburton Research Award, University of Arkansas (1990), Creativity Award of the National Science Foundation, (1991, 1993-97), Alexander Von Humboldt Senior Scientist Award (1995), the 2003 Schrödinger Medal of WATOC (World Association of Theoretically Oriented Chemists), ACS Award in Theoretical Chemistry (2017).

2007-ben tiszteletére H. F. Schaefer és Császár Attila 300 fő részvételével nemzetközi konferenciát szervezett Budapesten Molekuláris kvantummechanika: Analitikus gradiensek és azokon túl címmel. Pulay Péter válogatott írásaiból kötet készült Molecular Quantum Mechanics: Analytical Gradients and Beyond, ed. A. G. Csaszar, G. Fogarasi, H. F. Schaefer, P. G. Szalay, ISBN 978-963-463-916-9.

A The Journal of Molecular Physics, An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics különszámot adott ki Pulay Péter tiszteletére / A Special Issue in Honour of Professor Pēter Pulay (Volume 105, 2007 – Issue 19-22).

1993-ban a Magyar Tudományos Akadémia külső tagjává választották a Kémiai Tudományok Osztályában.



KÜLHONI MAGYAR TUDÓSPORTRÉK

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA MAGYAR TUDOMÁNYOSSÁG KÜLFÖLDÖN ELNÖKI BIZOTTSÁG

HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES HUNGARIAN SCIENCE ABROAD PRESIDENTIAL COMMITTEE

15. oldal

The Journal of Molecular Physics, An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics published A Special Issue in Honour of Professor Péter Pulay (Volume 105, 2007 - Issue 19-22).

In 1993 he was elected external member of the Hungarian Academy of Sciences in the Section of Chemical Sciences.

Contact

University of Arkansas
Department of Chemistry and
Biochemistry
AR 72701-1201 Fayetteville,
Tel.: 479-575-6612
E-mail: pulay@uark.edu.de

Kapcsolat

University of Arkansas
Department of Chemistry and
Biochemistry
AR 72701-1201 Fayetteville,
Tel.: 479-575-6612
E-mail: pulay@uark.edu.de

