

**Szakmai beszámoló az „Energia sűrűségfüggvények és deriváltak
az alapállapotú és az időfüggő sűrűségfüggvény elméletben”
OTKA posztdoktori kutatási programról**

Posztdoktori ösztöndíjam három éve alatt kilenc cikkem született, főként matematikai fizikai jellegűek; ebből hét már megjelent [1-7], egy megjelenése rövid időn belül várható [8], egy további –preprintként online részben már közölt– munkámon [9] pedig a beküldés előtti végső finomításokat végzem. Ezen munkáim nagyrészt [3-6,9] az ösztöndíjam kezdésekor felállított munkatervem harmadik programpontjába illeszkednek, amelyben a funkcionális deriválás fizikai (megmaradási) kényszerek folytán történő módosulásának vizsgálatát, illetve ezen "megszorított" funkcionális deriváltak hatásának elemzését tűztem ki célul. Három munkámban [2,7,8] a különböző energiakomponensek sűrűségfüggvényként való előállításával foglalkoztam az általam egy korábbi cikkemben felállított "homogén N-részecskés sűrűségfüggvény" séma mentén, ami előzetes munkatervem első programpontját adja. Végezetül [1]-es munkám –munkatervem második pontjához kapcsolódóan– a normamegőrző időfüggő sűrűségfüggvény deriváltakra vonatkozó feltétel új sűrűségfüggvény formulák előállításában történő alkalmazásának a lehetőségével foglalkozik. Eredményeimet a publikációk mellett négy nemzetközi konferencián is ismerttettem, előadás (1,3,4) illetve poszter (1,2,3) formájában.

A munkaterv 1. programpontjához kapcsolódó eredmények:

A homogén sűrűségfüggvények kérdéskörével foglalkozó cikkeimben egyrészt kimutattam az elsőfokú homogén alakú sűrűségfüggvények előnyét a Schrödinger egyenlet formájából következően [7]. Megmutattam, hogy az egyrészecskés Weizsäcker sűrűségfüggvény koncepciója hogyan általánosítható több elektron esetére.

Egy további munkámban [2] az egyrészecskés rendszerek kinetikus energiája jól ismert Weizsäcker formulájának egy –szintén elsőfokú homogén– alternatíváját vezettem le, ami a több részecskés rendszerek kinetikus energiája sűrűségfüggvényként való előállításának nehéz feladatában nyújthat segítséget. Ezen új formula a hagyományostól lényegesen eltérő alakú: többek között a kinetikus energia sűrűség előállítása (határozatlan) integrálást is tartalmaz – szemben a Weizsäcker formulával.

Végül a sűrűségfukcionálok homogenitásának kérdését a kicserélődési energiára nézve elemeztem [8]. Továbbá a kicserélődési energiát a Hartree-Fock és a Kohn-Sham módszer ötvözésével kezelő sűrűségfukcionál-elméleti megközelítések új, egységes tárgyalását adtam.

A munkaterv 2. programpontjához kapcsolódó eredmények:

Megmutattam [1], hogy a normamegőrző funkcionális deriváltak önmagukban nem vezetnek el az időfüggő sűrűségfukcionál elmélet oksági problémájának megoldásához, annak ellenére, hogy bizonyos alakban elrontják a második deriváltak szokásos szimmetriáját, ami alapvető szempont a hatás sűrűségfukcionál második deriváltjának szimmetriájából eredő oksági probléma megoldásához. Ebből következően a normamegőrző időfüggő sűrűségfukcionál deriváltakra vonatkozó feltétel nem alkalmazható nemadiabatikus, "memóriával" rendelkező időfüggő sűrűségfukcionálok kifejlesztésére. Ugyanakkor megmutattam, hogy a normamegőrző deriválás a másodrendű időfüggő sűrűségfukcionál deriváltak határozatlan (időfüggő) konstansainak megfelelő kezelését nyújtja.

A munkaterv 3. programpontjához kapcsolódó eredmények:

A kényszerek által megszorított funkcionális deriválással foglalkozó cikkeimben először is tisztáztam ezen deriválás néhány elméleti aspektusát [3]. Megmutattam, hogy két alapvető követelményből hogyan származtathatók a megszorított deriválás formulái, továbbá hogy nemlineáris kényszerek esetén a megszorított deriváltak deformált Gâteaux deriváltaként is eredeztethetők.

[4]-ben kidolgoztam a megszorított deriváltak egyidejű kényszerek esetére történő általánosítását, ami elengedhetetlen a fizikai alkalmazások szempontjából, ahol rendszerint több megmaradási kényszer van jelen – mint például a különböző statisztikus átlagok szimultán megmaradása a statisztikus fizikában.

Módszert adtam olyan esetekre, amikor többváltozós funkcionálok használatánál a fizikai kényszerek csatolják az adott funkcionál különböző változóit [5], és egy folyadék-dinamikai alkalmazáson elemeztem az ilyen típusú megszorított deriválások sajátosságait. E munkámban továbbá rámutattam, hogyan vezet el fizikai mozgásegyenletek bizonyos invariancia tulajdonsága a megszorított deriváltak szükségszerű megjelenéséhez.

[9]-es munkámban megadtam a magasabb rendű megszorított deriváltak megfelelő definícióját, és megmutattam a megszorított második deriváltak alapvető fontosságát az egyensúlyi állapotok stabilitásának elemzésében megmaradási kényszerek mellett. A kifejtett elmélet felhasználásával levezettem egy tetszőleges kétkomponensű folyadék homogén egyensúlyi állapotának stabilitási feltételeit, amelynek különös fontossága lehet a vékonyfilmek fizikája terén, ahol a gyakorlatban rendszerint több komponensből álló filmek instabilitásainak megfelelő kezelése alapvető jelentőségű.

Végül a sűrűségfukcionál elmélet egy, a spin-sűrűségfukcionálok deriválásával kapcsolatos –az elmélet alapjait érintő– problémájának a megoldását adtam a normamegőrző funkcionális deriválás felhasználásával [6].

Az ösztöndíj három éve alatt elkészült cikkek:

- [1] *On the role of second number-conserving functional derivatives*, T. Gál,
Phys. Lett. A **355**, 148 (2006).
- [2] *A new expression for the one-particle kinetic energy as a density functional*, T. Gál,
J. Phys. B **40**, 111 (2006).
- [3] *The mathematics of functional differentiation under conservation constraint*, T. Gál,
J. Math. Chem. **42**, 661 (2007).
- [4] *Functional differentiation under simultaneous conservation constraints*, T. Gál,
J. Phys. A **40**, 2045 (2007).
- [5] *Differentiation of functionals with variables coupled by constraints: Analysis through a fluid-dynamical model*, T. Gál,
J. Math. Phys. **48**, 053520 (2007).
- [6] *Differentiability of energy functionals in spin-density-functional theory*, T. Gál,
Phys. Rev. B **75**, 235119 (2007).
- [7] *The N-particle wave function as a homogeneous functional of the density*, T. Gál,
Int. J. Quantum Chem. **107**, 2586 (2007).
- [8] *Treatments of the exchange energy in density-functional theory*, T. Gál,
Int. J. Mod. Phys. B, in press (2008).
- [9] *Stability of equilibrium under constraints*, T. Gál,
arXiv:0708.1694 (to be submitted).

Konferencia-részvételek:

- (1) *On the wavefunction–density relationship in density-functional theory* (talk), T. Gál,
A new exact one-particle density functional (poster), T. Gál, 10th European Workshop
on Quantum Systems in Chemistry and Physics (Carthage, Tunis, September, 2005)
- (2) *A new exact one-particle density functional* (poster), T. Gál,
11th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in
Chemistry and Physics (Geneve, Switzerland, September, 2005)
- (3) *Functional differentiation under conservation constraints* (talk), T. Gál,
Functional differentiation under simultaneous conservation constraints (poster), T. Gál,
11th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics
(St. Petersburg, Russia, August, 2006)
- (4) *Stability of equilibrium under constraints* (talk), T. Gál,
12th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics
(Windsor, UK, August, 2007)