Általános megjegyzések

A pályázatban kölcsönható Fermi- és Bose-rendszerek matematikai vizsgálatát vállaltam . Az elvégzett munka zöme (5 cikk) végülis Bose-rendszerekre vonatkozik. A helyzet úgy alakult, hogy a pályázat három évében Fermi-rendszerekkel nem foglalkoztam. Írtam még egy cikket klasszikus párkölcsönhatások kristályos alapállapotáról – ezt a munkát a Bose-rendszereken végzett kutatásom motiválta – és további három cikket együttműködésben. Az egyik az egydimenziós diszkrét Schrödinger egyenlet elméletéhez kapcsolódik, és így nem teljesen idegen a pályázat témájától . A két másik cikk egy 2002-ben Oszlányi Gáborral kezdett és mindmáig fennálló együttműködés terméke, tartalma pedig egy röntgendiffrakciós adatokból kiinduló *ab initio* szerkezetmeghatározó algoritmus. Az ezzel összefüggő munka végzésekor még nem voltam résztvevője Oszlányi erre vonatkozó OTKA-pályázatának. Így e két cikkben részemről a jelen pályázat száma van feltüntetve, és alább erről az eredményről is írok.

Részletes beszámoló

A továbbiakban cikkenként ismertetem a kutatás eredményeit.

Thermodynamic limit and proof of condensation for trapped bosons

A 90-es évek közepének kísérleti szenzációja volt az alkáli atomok gőzében extrém alacsony hőmérsékleten észlelt Bose-Einstein kondenzáció. A jelenség az elmélet szempontjából is érdekes kérdéseket vetett fel, melyek tanulmányozásába néhány más matematikai fizikus (Lieb, Yngvason, Zagrebnov, Verbeure,...) mellett én is bekapcsolódtam. Kölcsönható Bose gázban a Bose-Einstein kondenzáció matematikailag szigorú bizonyítása mindmáig megoldhatatlanul nehéz probléma. Fizikai szempontból a nehézség abban áll, hogy a kondenzáció tisztán a Bose statisztika következménye. A kölcsönhatás zavaró körülmény, mert képes eltüntetni a kondenzációt azáltal, hogy más tipusú rendeződést preferál. Valóban, az erős rövidtávú taszítás miatt nagy sűrűség mellett a legtöbb anyag alapállapota kristályos, tehát tiszta Bose kondenzációra csak ritka gázban és/vagy gyenge kölcsönhatás mellett számíthatunk. (Évtizedeken át folyt a spekuláció arra nézve, vajon létezhet-e együtt diagonális és nemdiagonális hosszútávú rend, tehát lehet-e egy anyag egyszerre kristály és Bose-kondenzátum (vagy, pontosabban, szuperfolyadék). Ma, Kim és Chan (Nature **427,** 225, 2004) kísérleti eredményét követően, ez eldöntött kérdés, de az elméleti magyarázat még fenomenologikus szinten is kezdetleges). Matematikailag az áthidalhatatlan nehézség úgy jelentkezik, hogy a szabad gáz gerjesztési spektrumában az energiarés nullához tart a növő térfogattal. Ezért kontrollált eredményt (pl. perturbációszámítással) csak úgy lehet kapni, ha a kölcsönhatás erősségét a növekvő részecskeszámmal ill. térfogattal megfelelően „skálázzuk", magyarul, gyengítjük. Viszonylag könnyen belátható, hogy homogén rendszerben (itt a „homogén" az eltolásinvariáns elrendezésre utal) ezzel a skálázással csak triviális eredményt lehet kapni, tehát a végtelen rendszer határesetében a kölcsönhatás minden nyoma eltűnik. Nem így a csapdázott gázokban! A csapda matematikailag egy külső potenciállal vehető figyelembe, amely a centrumtól távolodva elég gyorsan (kísérletileg négyzetesen) nő. Egy ilyen potenciálban az egyrészecske operátor sajátértékei olyan gyorsan nőnek, hogy – az energiát a legkisebb sajátértéktől mérve – a kölcsönhatásmentes gáz állapotösszege (!) egy véges értékhez tart, midőn a részecskék száma divergál. Ez a csaknem triviális, de mégis igen különös eredmény minden véges hőmérsékleten igaz, és azt vonja maga után, hogy majdnem minden részecske az egyrészecske-alapállapotban telepszik le. Ha a részecskék kölcsönhatnak, és a kölcsönhatást alkalmasan skálázzuk, nevezetesen, a párkölcsönhatást osztjuk a részecskék N számával, akkor a kondenzáció ténye még bizonyítható: az alacsonyan fekvő egyrészecske-állapotok makroszkopikusan vannak betöltve. Mivel a teljes kölcsönhatási energia alapállapoti várható értéke N-nel arányosan nő, az eredmény nem triviális; például kiterjed a fizikailag releváns Gross-Pitaevskii skálázásra, mely szerint az *s* hullám szóráshossza három dimenzióban 1/N rendben nullához tart.

Normal and generalized Bose condensation in traps: One dimensional examples

Az előző munka nyomán természetesen vetődik fel a kérdés, hogy erősebb kölcsönhatás esetén bizonyítható-e bármi a kondenzációval kapcsolatban. A második cikk erre a kérdésre próbált választ adni. Mint a cím is jelzi, ez a tanulmány főként egy dimenzióra korlátozódott. Eredményként az adódott, hogy az általam alkalmazott viszonylag egyszerű analitikus eszközökkel csak általánosított Bose kondenzációt lehet bizonyítani. Tehát egyetlen nívó N-nel arányos betöltöttsége helyett csak o(N) számú nívó együttes, N-nel arányos betöltöttségét tudtam megmutatni. Ez minden hőmérsékletre igaz, harmonikusnál gyorsabban növő külső potenciáltérben skálázatlan kölcsönhatásokra (melyek teljes energiája N-nel négyzetesen nő), harmonikus potenciálban pedig N négyzeténél lassabban növő kölcsönhatási energiákra.
A csapdázott gázokbeli kondenzáció különlegessége, hogy – legalábbis elméletileg – minden hőmérsékleten végbemegy. Ezt a tényt a fizikusok úgy szokták megfogalmazni, hogy a kritikus hőmérséklet N-függő és N-nel végtelenhez tart. Ha a kondenzációt fázisátmenetként akarjuk megkapni, akkor nemcsak a kölcsönhatást, hanem a csapdapotenciált is skálázni kell, nevezetesen, növekvő N-nel a csapdát fokozatosan „ki kell nyitni”. Ezt a problémát részletesen tanulmányoztam a harmonikus csapda esetében. A csapda kinyitása ekvivalens az ω oszcillátorfrekvencia csökkentésével. Az adódott (már korábban a Ketterle, van Druten szerzőpárosnak is), hogy a skálázott frekvencia ωlnN/N kell legyen. Ekkor a szabad Bose gáz kritikus hőmérséklete ħω/k_B. A szabad gázban az egyrészecske-alapállapot betöltési számának eloszlását részletesen leírtam. Azt is megmutattam, hogy minden hőmérsékleten végbemegy egy teljes általánosított Bose kondenzáció is, amely tehát a kritikus hőmérséklet alatt szuperponálódik az alapállapotra való közönséges Bose kondenzációra. A kölcsönható esetben, mint feljebb említettem, csak az általánosított kondenzáció túlélését tudtam bizonyítani.

Correlation inequalities for noninteracting Bose gases

Az előző cikk néhány eredményének bizonyításához szükségem volt olyan egyenlőtlenségekre, melyek kölcsönhatásmentes Bose rendszerekbeli egyrészecske nívók betöltési számai között állnak fenn. Ezek az egyenlőtlenségek, bármilyen hihetőek voltak is, levezetést igényeltek. Ebből született ez a közlemény. Az állítások – szavakban – a következők:

1. Minden egyes nívó átlagos betöltési száma szigorúan nő N-nel.
2. Tetszőleges két nívó betöltési számai negatívan korreláltak.
3. A legalacsonyabb nívó átlagos betöltési száma szigorúan csökken a növekvő hőmérséklettel.
4. Adott N mellett, ha az egyrészecske-spekrumhoz egy új nívót adunk hozzá, minden egyes régi nívó átlagos betöltési száma szigorúan csökken.

Bose-Einstein condensation and symmetry breaking

A kérdés, amelyet ebben és a következő cikkben vizsgáltam, mintegy 50 éves, talán Bogoliubov 1947-es munkájára vezethető vissza. A Bose kondenzáció homogén rendszerben a k=0 síkhullám-állapot makroszkopikus betöltöttségét jelenti. Ez könnyen belátható módon ekvivalens az ún. nemdiagonális hosszútávú renddel, egyfajta hosszútávú korrelációval, de vajon ekvivalens-e a mértékinvariancia spontán sérülésével? Ez utóbbin azt értjük, hogy a Hamilton-operátorhoz hozzáadunk egy, a mértékinvarianciát sértő tagot, kikényszerítve a k=0 állapot makroszkopikus (pozitív sűrűségű) betöltöttségét, amely fennmarad, amikor a termodinamikai limesz vétele *után* ezt a tagot nullává tesszük. Az analóg probléma a spinmodellekben, például az Ising modellben is felvetődött: a teljes spin abszolút értékének makroszkopikus átlaga ekvivalens a hosszútávú korrelációk meglétével. Viszont külön bizonyítást igényelt (többek között Griffiths és Ruelle foglalkozott ezzel a 70-es években), hogy előbbiek szimultán jelennek meg a fel-le szimmetria spontán sérülésével. Itt a fel-le szimmetriát sértő külső teret kellett az energiafüggvényhez hozzáadni, majd ezt a termodinamikai limesz vétele után eltüntetni.
Megjegyzendő, hogy Hohenbergnek a két dimenziós Bose gázra vonatkozó klasszikus eredménye nem a Bose kondenzációt, hanem a spontán szimmetriasértést zárta ki. A két fogalom ekvivalenciájának megválaszolatlan kérdése sokáig feledésbe merült; hosszú idő után ez a cikk foglalkozott vele először és adott rá választ egyszerűsített, tisztán diagonális kölcsönhatás esetében. A Hamilton-operátort a síkhullám-állapotokhoz tartozó keltő és eltüntető operátorokkal felírva, a hamiltoni diagonális része a pusztán a betöltési számokkal felírható tagok együttese. A szimmetriasértő tagot a diagonális részhez hozzáadva, az egyszerűsített Hamilton operátor mátrixa egy szalagmátrix lesz (Jacobi mátrix). A Jacobi mátrixok spektrálelméletének néhány alapvető tényét felhasználva be tudtam bizonyítani a címbeli két fogalom ekvivalenciáját.

Equivalence of Bose-Einstein condensation and symmetry breaking

Kevéssel a előző cikk beküldése után rájöttem, hogy az ekvivalenciát általános kölcsönhatásra is be tudom bizonyítani. A kulcs Ginibre egy 1968-ban megjelent kitűnő cikkében volt elrejtve. Ginibre matematikailag igazolta a Bogoliubov-közelítés - a k=0 síkhullám-állapothoz tartozó keltő és eltüntető operátorok komplex számmal való optimális helyettesítése - helyességét. Az optimális helyettesítés azt jelenti, hogy minden véges térfogatban a helyettesítéssel kapható nyomás a lehető legközelebb van a valódihoz. Ha így járunk el, akkor a végtelen rendszer határesetében a közelítő nyomás egybeesik az igazival. Ebből kiindulva, egyszerű konvexitási egyenlőtlenségek kombinálásával tudtam megkapni a címben említett ekvivalenciát. A közlésben versenyt futottam a Lieb-Seiringer-Yngvason trojkával. Az előző cikkemet ismerték, és ők is gyorsan észrevették, hogy az általános eset is megoldható. Az eredmény döntetlen volt (mindannyian nyertünk).

Crystalline ground states for classical particles

Korábban említettem, hogy kölcsönható Bose rendszerekben a Bose kondenzáció bizonyítása azért különösen nehéz, mert a sűrű rendszer alapállapota többnyire kristályos hosszútávú rendet mutat. Ezt kísérleti tényként fogadhatjuk el; matematikai szigorú bizonyítása ennek az állításnak éppúgy nem létezik, mint a Bose kondenzációnak. Aki ezen a problémán kezd el gondolkodni, hamar szembesül azzal a ténnyel, hogy a kristályos rendre a klasszikus esetben sincs bizonyítás. Pontosabban: 20-30 évvel ezelőtt, egy dimenzióban, a párkölcsönhatások egy elég tág osztályára bizonyították a periódikus alapállapotok létét. Két dimenzióban egyetlen ilyen eredményt ismerek 2005-ből, három dimenzióban pedig, tudomásom szerint, ez a cikk szolgáltatta az első példát alapállapoti periódikus rendeződésre. A kölcsönhatások, amelyekre eredményt kaptam, a Fourier-transzformáltjukkal vannak definiálva: ez nemnegatív és eltűnik egy adott hullámszám fölött. A párkölcsönhatás emiatt oszcillálva cseng le. A vizsgálatból kiderült, hogy egy kritikus sűrűség fölött az alapállapot folytonosan degenerált, periódikus és aperiódikus elrendezések egy kontinuuma mutatja az alapállapot két jellegzetes vonását: a minimális fajlagos energiát és a stabilitást korlátos perturbációkkal szemben. Magán a kritikus sűrűségen az alapállapot egyértelmű és minden dimenzióban explicit módon megadható: egy dimenzióban a pontok ekvidisztáns lánca, két dimenzióban a háromszögrács, három dimenzióban a tércentrált köbös rács. A cikk nem tartalmaz eredményt a kritikusnál kisebb sűrűségre. Ennek a tartománynak a vizsgálatához más módszerre van szükség.

Power-law bounds on transfer matrices and quantum dynamics in one dimension. II

Ez a munka egy, a társszerzőim által írt cikk folytatása. Pár helyen erősebbé teszi az első cikk állításait és példákkal egészíti ki őket. Az én hozzájárulásom főként a hierarchikus modellről szóló 5. paragrafus. A probléma a következő: az egy dimenziós diszkrét Schrödinger egyenlet vizsgálatának jól ismert eszköze a transzfer mátrix. Ennek két alapvető paramétere a hossz, amelyen át transzferál és az energia. Abból, hogy a transzfer mátrixok sorozata normában hogyan nő (vagy nem nő) egy adott energián, eldönthető, hogy az energia pontja-e a spektrumnak, és információ szűrhető le a spektrum természetére vonatkozóan is. Társszerzőim szép eredménye, hogy kvantumdinamikai becslés is nyerhető ílymódon: ha egyetlen energiára igaz, hogy a transzfer mátrix normája nem nő gyorsabban, mint a hossz egy hatványa, akkor egy kezdetben lokalizált hullámcsomag adott idő alatt az idő egy alulról pontosan becsülhető hatványával arányos hosszon terül szét. Ez nyilván fontos információ, mutatja, hogy a részecske mozgása diffúzív, ballisztikus vagy ezektől eltérő-e. A transzfer mátrixok növekedésének becslése nem könnyű, elsősorban ebben játszottam én szerepet.

Ab initio structure solution by charge flipping
Ab initio structure solution by charge flipping II. Use of weak reflections

2002 nyarán Oszlányi Gábor kollegám megkeresett egy ötletével. Ennek kidolgozásából született a fenti két cikk.
Egykristályokon végzett röntgendiffrakciós mérések gyakran szolgáltatnak kellően jó (pl. 0.8 Angström) felbontásban adatokat. Az adatkészlet az elektronsűrűség Fourier transzformáltjának abszolút értéke; természetesen, a reflexiók indexelése is rendelkezésre áll, mint a kísérletből közvetlenül leszűrt adat. A szerkezet meghatározása a hiányzó fázisok előállításán keresztül történik. Erre az irodalomban számos módszer található. Ezek többnyire igen bonyolultak és felhasználnak egyéb, nem kristallográfiai információkat is, például a kémiai összetételt. Ugyanakkor tudni lehet, hogy jó felbontás esetén a diffrakciós adatok kellően redundánsak ahhoz, hogy egymagukban hordozzák a szükséges fázisinformációt. Közel 80 éve létezik az erre a redundanciára építő algebrai fázismeghatározó módszer, amely azonban tízatomos szerkezetnél nagyobbak esetén használhatatlan, a fellépő számítástechnikai nehézségek miatt. Az általunk javasolt eljárás egy iteratív algoritmus, amely Fourier és inverz Fourier transzformációk és a valós és reciproktérbeli adatmódosítások sorozatából áll. Kezdeti lépésként a kísérleti abszolút értékekhez véletlen fázisokat választunk. Az inverz Fourier transzformációval kapott valós térbeli függvény a jó fázisokkal nemnegatív lenne, a véletlen fázisokkal viszont helyenként negatív. Ennek a függvénynek egy kis pozitív küszöb alatti – pozitív vagy negatív – értékeit előjelben megváltoztatjuk. Az eredmény egy olyan függvény, amely mindenütt egy kis negatív szint fölött van. Ezt Fourier transzformáljuk, helyreállítjuk a kísérleti abszolút értékeket, de megtartjuk a fázisokat. Ezután visszatérünk a valós térbe, és így tovább... Az algoritmust sok szerkezeten próbáltuk ki sikerrel, majd az első cikkben publikáltuk. A második cikk az eljárás egy igen hatékony továbbfejlesztését írja le. Észrevettük, hogy a gyenge reflexiók esetében előnyösebb nem ragaszkodni a kísérleti eredményhez, hanem hagyni az abszolút értéket szabadon fejlődni és egyidejűleg egy 90 fokos eltolást alkalmazni a fázisra. Ez a reciproktérbeli „perturbáció” esetenként tízszeresére gyorsította a konvergenciát és megoldhatóvá tett az eredeti algoritmus számára kezelhetetlen szerkezeteket.
A módszer, úgy tűnik, elnyerte a szakma rokonszenvét; legalábbis erre utal néhány gyors alkalmazás, melyek közül a legérdekesebb modulált szerkezetek négy dimenziós periódikus szerkezetként való megoldása.