

Bírálat

Gulácsi Zsolt: Korrelált sokrészecske rendszerek rendezettségre való törekvésének leírása

című MTA doktori értekezéséről

A modern szilárdtest-fizika egyik központi problémája a kölcsönható részecske rendszerek alacsony hőmérsékleten mutatott tulajdonságainak vizsgálata, az itt megjelenő különböző (kvantummechanikai) fázisoknak és az azokat jellemző mennyiségeknek, rendparamétereknek feltárása. A hagyományos Landau-Ginzburg-Wilson-féle osztályozáson túlmenően különböző egzotikus tulajdonságú állapotokat és azok között változatos jellemzőjű (kvantum) fázisátalakulásokat azonosítottak az utóbbi néhány évtizedben. Egy dimenzióban néhány egzakt eredmény mellett térelméleti jóslatok és pontos numerikus eredmények ismeretesek. Ezen utóbbiak esetén a sűrűségmátrixos renormálási csoport módszert és a kvantum Monte Carlo szimulációkat lehet megemlíteni. Két és három dimenzió esetén, melyek a valóságos rendszerekhez állnak közel az ismert eredmények szinte kizárólag közelítő módszerekkel és viszonylag csekély pontosságú numerikus eljárásokkal lettek meghatározva. Ebben a témakörben jelenleg is intenzív kutatómunka folyik és további vizsgálatok várhatóak a jövőben is.

A fenti, meglehetősen tágan értelmezett témakörhöz kapcsolódnak Gulácsi Zsoltnak a PhD disszertáció megvédése után elkészült tudományos munkái is. Ezen csaknem harminc év tudományos terméséből választott ki 25 szakcikket és ezekre építette fel az MTA doktori címre benyújtott értekezését. A fenti cikkek nagyjából egyenletes időközönként jelentek meg, szinte minden évszámhoz tartozik egy-egy belőlük. A nagy időtartamra tekintettel a cikkek és a bennük szereplő vizsgálatok nem kapcsolódnak egy homogén témakörhöz, a vizsgált problémák és a tanulmányozásuknál alkalmazott módszerek igen sokrétűek, ezeket igazából a kutató személye fogja össze. A disszertációt magát is erős szubjektívizmus jellemzi, a szerző igyekezete elsődlegesen arra irányul, hogy az általa elért eredményeket kommentálja, magyarázza. Ez vonatkozik az előzményekre, ahol a cikkeket közvetlenül megelőző fejleményeket és a szerző személyes motivációit ismerteti; az alkalmazott módszerek meglehetősen részletes leírására, melyeket többnyire „saját fejlesztésűek”-nek ad meg; valamint a „következmények”-re, ahol a munkák utóéletét ismerteti.

A fentiek alapján megállapítható, hogy a jelen disszertáció több szempontból is különbözik a szokásos, az MTA doktora címért benyújtott disszertációktól. Ez egy szinte életmű hosszúságú kutatási periódus eredményeit összegzi, az egyes eredmények gyakran csak lazán kapcsolódnak egymáshoz. A prezentálás nagyon erősen fókuszál a saját eredmények bemutatására, az alkalmazott módszerek technikai problémáit általában erősen részletezve ismerteti. Mindezek következtében a disszertáció igen hosszú, a tartalomjegyzék és az irodalomjegyzék nélkül is 199 számozott oldalt tartalmaz. Nem könnyű olvasmány, a bírálótól igen kemény munkát igényel. A disszertáció magyarul íródott, a szöveg követését számos helyesírási hiba és a szakmai kifejezéseknek a magyar szokástól eltérő használata is nehezítette. Bizonyos pontokon nem fogalmaz egyértelműen a szerző, ami egy szakmai munka esetén problémákat okoz. A disszertációban szereplő hivatkozások általában közvetlenül kötődnek az abban ismertetett eredményekhez. Magam részéről hiányoltam több alapvető összefoglaló mű szerepeltetését, különösen hazai

szerzők tollából. Gondolok itt Sólyom Jenőnek az egydimenziós vezetőkről írt munkájára és a szilárdtestekről írt könyveire, vagy Fazekas Patriknak a mágnességről írt könyvére. Ami a disszertáció külalakját, kiállítását illeti az megfelelőnek mondható.

A részletes ismertetésre térve a disszertáció öt fő részre tagolódik. A bevezető rész a disszertáció szerkezetét taglalja és ezzel az olvasó segítségére kíván lenni az eligazodásban. A második fő rész az előzmények bemutatása címet viseli és abban az egyes vizsgálatokat megelőző az irodalomban fellelhető eredmények szerepelnek, melyek a szerzőnek motivációként szolgáltak a kutatások elkezdéséhez. A harmadik fő részben a kutatásnál használt módszereket ismerteti a szerző. Ez a mintegy nyolcvan oldal terjedelmű rész a disszertáció technikailag legrészletesebb fejezete. Számos olyan hosszú formulát is tartalmaz, melyek az eredeti cikkekben már szerepelnek és prezentálásuk a disszertáció megértését nem segíti elő. (Példaként említhetem a (125)-(133) közötti egyenleteket.) A zökkenőmentesebb olvasást inkább segítette volna, ha a feltétlenül szükséges levezési lépések és az azokhoz kapcsolódó egyenletek függelékekben szerepeltek volna. A negyedik fő rész adja a disszertáció tulajdonképpeni magvát, amelyben az elért eredmények szerepelnek mintegy kilencven oldal terjedelemben. Ezt a részt a szerző további két alrészre tagolja és a közelítéssel illetve a közelítés nélkül kapott eredmények szerepelnek bennük. Ezt a szétválasztást, mely egybeesik a kutatások időrendjével, bár formailag korrekt, mégis mesterkéltnek találom. Szerencsésebb lett volna a fizikai problémák szemszögéből szelektálni, az azoknál használatos vizsgálati módszereket maguk a problémák általában behatárolják. Az egyes alproblémák esetén, ezekből 12 szerepel a disszertációban azonos leírási módot követ a szerző. A körülmények rovatban igyekszik összefűzni a gyakran lazán kapcsolódó alproblémákat, itt gyakran ismétli a korábban, különösen az előzmények fő részben kifejtett gondolatokat. A modell és az eredmények leírása után a következmények rovatban ezek hivatkozottságáról is értesülünk és a további vizsgálatokról is információkat kapunk. Végül az ötödik fő rész az összefoglalást és a disszertáció téziseit tartalmazza.

Ami a disszertációban szereplő tudományos eredményeket illeti, ezek is igen sokrétűek és gyakran egy-egy időszak tudományos irányzataihoz kapcsolódnak. Ez különösen igaz az eredmények első alrészére, melyek különböző közelítő módszerekkel lettek származtatva. A klasszikus Green-függvényes módszer lett alkalmazva az (anizotróp) spin-sűrűség hullámok és a réteges szupravezetők vizsgálatánál, míg a Gutzwiller-féle variációs hullámfüggvénnyel a periodikus Anderson modellt és a kétdimenziós Hubbard modellt tanulmányozta a szerző. Ezen második problémánál a szokásos Gutzwiller-féle közelítés nélkül számolt és a Metzner és Vollhardt-féle diagramm-módszert magasabb dimenziók esetére általánosította. Elismerésre méltó számítási teljesítmény a diagrammok nyolcad-rendig történt meghatározása, viszont a nyert eredmény fizikai szempontból kissé csalódáskeltő. A Gutzwiller-féle hullámfüggvény a kétdimenziós modellben sem képes a fém-szigetelő átalakulás leírására. Valószínűleg ezen „negatív„ eredmény miatt az eljárás az irodalomban nem talált követőkre.

A közelítésmentes eljárásokat a szerző zömmel az ezredforduló után közölt cikkeiben alkalmazta. Kivételt képez a fonalszerű klasztereknek a klasszikus fizika szabályai szerinti növekedését tárgyaló modell megoldása a XI. fejezetben. Ez a klasszikus probléma tematikailag különösen távol áll a disszertációban szereplő kvantumos leírást igénylő elektronrendszerektől és ezért szerepeltetése a disszertációban nem volt szerencsés. A XII.-XVII. fejezetekben felsorolt egzakt eredmények mindegyike a pozitív szemidefinit Hamilton operátorok alapállapotainak meghatározásán alapulnak. A módszer régóta ismert volt a szakirodalomban, a konkrét problémák esetén történt alkalmazások azonban

a szerző érdeme. Az így elért eredmények közül említést érdemelnek a háromdimenziós periodikus Anderson modellben talált egzakt alapállapotok; a lokalizáció-delokalizáció átalakulás leírása rendezetlen és kölcsönható rendszerekben; a sakktábla-szerű és csíkos alapállapotú megoldások kétdimenzióban; a négyszöges- és ötszöges-cellájú Hubbard láncok egzakt alapállapotainak meghatározása; valamint a sávszigetelőre ható Hubbard-kölcsönhatás okozta delokalizált állapot kiszámítása. Ezen egzakt eredmények értékelésénél el kell mondani, hogy mint minden közelítés nélkül kapott eredmény fontos információval szolgálnak a rendszernek az adott paramétertartományban mutatott alapállapotának jellegéről. Ugyanakkor ezen megoldások csupán egy sokdimenziós paramétertér speciális pontjaira vonatkoznak, ezért az adott modellekre vonatkozó relevanciájuk kérdéses, és nem nyújtanak információkat a gerjesztések jellegéről és az egyes (kvantum) fázisátalakulások tulajdonságairól.

Ami a disszertációban szereplő tudományos eredmények összegzett értékelését illeti számos kritériumot ajánlatos figyelembe venni. A tudományos publikációk számát és azok összegzett impakt faktorát tekintve a kép igen pozitív: a 25 szakcikk mindegyike magasan jegyzett nemzetközi folyóiratban jelent meg, közülük 3 a Phys. Rev. Letters-ben, 13 pedig a Phys. Rev. B-ben. Az eredmények *menyisége* tehát kétség kívül adott, kérdés, hogy átcsap-e ez *minőségbe* is. Pontosabban fogalmazva, vannak-e olyan eredmények a disszertációban, melyeket a nemzetközi közvélemény nagyra értékelt és/vagy amelyek további vizsgálatok kiindulópontjaként szolgáltak? Ebből a szempontból a válasz kevésbé pozitív. Az [1] sorszámú összefoglaló művet leszámítva a többiek hivatkozottsága általában nem jelentős, különösen akkor, ha a megjelenéstől eltelt időt és a témakör hivatkozási szokásait is figyelembe vesszük. A kép különösen kedvezőtlen az utolsó öt év munkái vonatkozásában. A fenti két kritérium a disszertáció tudományos értékéről nem szolgál egyértelmű eligazítással, ezért további szempontokat is figyelembe kell venni. Egy ilyen kérdés, hogy vajon vannak-e a kevésbé hivatkozott cikkek között "Csipkerózsika álmodó", munkák, melyek értékeire későbbi vizsgálatok során fog fény derülni. Ilyen szempontból az egzakt eredmények alrészben szereplő problémák esetén elképzelhetőnek tartom, hogy ezek közül egyik-másik a későbbiekben alkalmazásra talál. Ezen vélekedésben a témában, a szűkebb szakterület neves művelőivel folytatott diszkussziók is megerősítettek.

A fentiek alapján hajlok annak elismerésére, hogy a disszertációban szereplő tudományos eredmények az MTA doktora címmel kapcsolatban támasztott követelményeket éppen elérik. Ami a disszertáció tézisszerű összefoglalását illeti, ezek megfogalmazása bizonyos kívánnivalókat hagy magután. Szerencsésebb lett volna a téziseket tömören, lényegretörően megfogalmazni, a bennük szereplő állításokat egyértelműen leírni. Így az A.1.-A.3. téziseknél az alkalmazott közelítő módszert is ismertetni kellett volna. Az A.4. pontnál a "megfelelő jellemzést biztosít", kitélt pontosabban kellett volna megfogalmazni, az A.5. pontot pedig tömören, az eredményre koncentrálva kellett volna összefoglalni. Hasonló módon kellett volna a B.1.-B.8. pontoknál is eljárni. A B.9. külön tézispontként történő szerepeltetését nem tartom indokoltnak.

Néhány megjegyzés a disszertációval kapcsolatban:

i) A II.B.3 pontban, a 19. lap tetején a rendezetlen és kvázi-periodikus rendszerek esetén "pont olyan viselkedés,-ről ír a szerző. Ez a megfogalmazás a legtöbb fizikai jellemzőre vonatkozóan szigorú értelemben nem igaz. Kérem, hogy fejtse ki pontosan és részletesebben az előző mondatban leírtakat.

- ii) A 19. lap második bekezdésében az "independens (független) elektron közelítésben,, a rendszer Hamilton operátorát csak kinetikus tagból állónak írja le. Ez így nem igaz, mivel van egy véletlen (vagy kvázi-periodikus) külső potenciál is a rendszerben.
- iii) A 24. lap (4) egyenletében a jobboldalon egy $1/2$ tényező hiányzik.
- iv) Az 56. lap 2.sorában a [101] helyett a [102] referencia szerepel. Továbbá nem tartom szerencsésnek, hogy egy Metzner-Vollhardt cikkről mint a "Vollhardt csoportja,, eredményről ír a szerző. Ilyen jellegű szóhasználat többhelyen is előfordul.
- v) A 104. lapon a (353) egyenlet felett a (4,5) referencia szerepel, ami nem látszik közvetlen kapcsolatban állni a fenti egyenlettel.
- vi) A 136. lapon a 23. Ábránál "abundencia,, szerepel, ami helyesen abundancia.
- vii) A 176. lapon a 39.a Ábra szerepel, ez helyesen a 40.a Ábra.
- viii) Több helyen, így a 193. lap 3. bekezdésében is "síkos felépítésű rendszerek,,-ről ír a szerző. Szerencsésebb lenne a réteges szerkezet kifejezést használni.

A disszertációval kapcsolatban a szerzőnek a következő kérdéseket teszem fel.

1. A disszertációban számos kvantummechanikai modellrendszer szerepel. Kérem, hogy írja fel összefoglalóan ezek Hamilton operátorát és adja meg ezek egymás közötti kapcsolatát! A közelítésmentes megoldások esetén ismertesse és szemléltesse a paraméterter azon részét, ahol az egzakt megoldások találhatóak!

2. A 188. lapon a 48. Ábrán véges 12×12 rácson lettek a korrelációk kiszámolva. Mi ennek az oka? Az alapállapotú egzakt megoldás érvényes-e véges és végtelen rácson is?

3. A XIII. fejezetben felsorolt eredmények esetén a rendezetlenség konkrét alakja, erőssége befolyásolhatja-e az átalakulás jellegét? Egyáltalán milyen típusú átalakulás várható?

4. A XIII. fejezetben ír arról, hogy a Griffiths-féle fázis fellépte valószínűtlen. Előfordul-e bizonyos minták esetén, hogy a rendszer lokálisan a nem-domináns fázisban tartózkodik?

5. Az [5] referenciában elért eredmények hogyan hozhatók kapcsolatba a sok-test lokalizáció (many-body localization) újabb vizsgálataival?

Összefoglalva, véleményem szerint a disszertációban szereplő tudományos eredmények marginálisan teljesítik az MTA doktora címmel kapcsolatban támasztott követelményeket. A tézisekben szereplő eredményeket - a megfogalmazásuk formáját érintő kritika mellett - a B.9. pont kivételével a szerző önálló tudományos eredményének ismerem el. Összességében az értekezés nyilvános vitára való kitűzését javaslom, az MTA doktora cím odaítéléséről a védés során tudok nyilatkozni.

Budapest, 2015. szeptember 7.

Iglói Ferenc
az MTA doktora