A GRAVITÁCIÓS ENERGIA-IMPULZUSRÓL

Szabados B. László
Wigner Fizikai Kutatóközpont, RMI Elméleti Osztály

A fizikai mennyiségek között a megmaradó mennyiségek különleges szerepet játszanak, mert általuk csökken a megoldandó mozgásegyenletek száma, vagy segítségükkel a fizikai rendszerek néhány kvalitatív tulajdonsága a mozgásegyenletek megoldása nélkül is megjósolható. Például eldönthető, hogy a rendszer adott kezdőállapotból mely állapotokba *nem* fejlődik; vagy ismert módon a fizikai rendszerek stabilitási tulajdonságainak vizsgálata az energiafunkcionál globális tulajdonságain alapul. Épp ezért meglepő, hogy a nemgravitációs fizika majd minden területén oly alapvető fontosságú energia-impulzus *sűrűség* az általános relativitáselméletben nem jól definiált, illetve a teljes gravitációs energia-impulzus számos furcsasággal rendelkezik. Például, minden gravitációs energia-impulzus sűrűség *lényegi módon* függ attól a koordinátarendszertől, amelyben a számolásainkat végezzük [1]; és jól definiált gravitációs energia-impulzus csupán a téridő *kiterjedt* tartományaihoz rendelhető. Ráadásul ez utóbbi nem is egy háromdimenziós térfogati, hanem csupán egy *kétdimenziós zárt felületi integrál* alakját ölti.

A gravitációs energia-impulzus e furcsaságainak oka a gravitáció *univerzális jellege,* azaz a Galilei–Eötvös-kísérletek tanulságait összefoglaló *ekvivalenciaelv.* De a Galilei–Eötvös-kísérletek a gravitációs *jelenségekről* szólnak, függetlenül attól, hogy e jelenségekről relativisztikus vagy nem relativisztikus elmélet keretében kívánunk számot adni. Így a gravitációs energiával kapcsolatos nehézségek már a Newton-elméletben is jelentkeznek, feltéve, hogy a Galilei–Eötvös-kísérletek tanulságait következetesen vesszük figyelembe. Mivel a Newton-elmélet technikailag sokkal egyszerűbb mint az általános relativitáselmélet, ezért várhatóan a problémák gyökere, fizikai oka is sokkal világosabban látszódik, mint az általános relativitáselméletben.

Jelen cikk célja a gravitációs energia-impulzus fenti furcsaságainak, és e furcsaságok okának bemutatása. Így az írás első felében a gravitáció Newton-féle elméletében vizsgáljuk a gravitációs energiával kapcsolatos problémákat, és az általános relativitáselmélet teljes gravitációs energia-impulzusát csupán a dolgozat második részében diszkutáljuk.

Az MTA Fizikai Osztálya 2018. május 10-i rendezvényén *Gravitáció és megmaradási tételek* címen elhangzott előadás kissé bővített, írott változata.

Szabados B. László fizikus, az MTA doktora, az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Részecske és Magfizikai Intézet, Elméleti Osztály (Térelméleti Kutatócsoport) tudományos tanácsadója. Kutatási területe az általános relativitáselmélet.

A newtoni gravitációelmélet

A Newton-féle gravitációelmélet szerint egy adott inerciarendszerben (x^i, i =1, 2, 3, Descartes-koordinátákkal) a gravitációs erőteret egy ϕ skalárfüggvénnyel írjuk le, és ennek gradiense, pontosabban $-\partial_i\phi$, a gravitációs térerősség. Így ha egy m_t tehetetlen és m_g gravitációs tömegű pontrészecskét helyezünk ezen erőtérbe, akkor Newton második axiómája értelmében a tömegpont mozgásegyenlete:

$$m_t \ddot{x}^i = -m_g \partial^i \phi, \tag{1}$$

ahol a pont idő szerinti deriválást jelöl. (Emlékeztetőül megjegyezzük, hogy e két tömegfogalom a tömegpontok/testek elvben két teljesen független tulajdonságát jellemzi: míg a *tehetetlen tömeg* azon tulajdonság mértéke, hogy a tömegpont/test a rá ható adott erő során *az erő jellegétől függetlenül* milyen nehezen gyorsítható; a *gravitációs tömeg* annak mértéke, hogy a tömegpont/test milyen „erősen reagál” – azaz mekkora erőt „érez” – egy adott *gravitációs erőtérben,* illetve – a 3. Newton-axióma és Newton tömegvonzási formulája miatt – milyen erős gravitációs erőteret hoz létre. m_g tehát az elektromosan töltött pontrészecske töltésével analóg.)

A ϕ térváltozóra vonatkozó téregyenlet a jól ismert Poisson-egyenlet,

$$\partial^i \partial_i \phi = 4\pi G \rho_g, \tag{2}$$

ahol ρ_g a forrás gravitációstömeg-sűrűsége és G a Newton-féle gravitációs állandó. (2) a ϕ-t *lokálisan* csak egy

$$\phi(x) \to \phi(x) + C_i x^i + \phi_0$$

ambiguitás erejéig határozza meg egyértelműen, ahol C_i és ϕ_0 tetszőleges valós konstansok. *Ha* a $-\partial_i\phi$ gravitációs térerősségnek jól definiált *fizikai jelentése* van, akkor nyilván $C_i = 0$. Legyen $D \subset \mathbb{R}^3$ egy tartomány a háromdimenziós térben. Ekkor a gravitációs forrás gravitációs tömegének D-be eső része a (2) Poisson-egyenlet miatt még az

$$M_D := \int_D \rho_g \, \mathrm{d}^3 x = \frac{1}{4\pi G} \oint_{\partial D} v^i (\partial_i \phi) \, \mathrm{d}S \tag{3}$$

alakba is írható, ahol a jobb oldali kifejezés a D tartomány ∂D határára (mint kétdimenziós *zárt felületre*) vett integrál. Itt v^i a ∂D felület kifelé irányított egységnormálisa. A (3) természetesen invariáns a potenciál $\phi(x) \to \phi(x) + C_i x^i + \phi_0$ alakú transzformációira nézve, hiszen egy konstans C_i vektormező tetszőleges zárt felületre vett integrálja zérus.

A (3) tehát hasonló az elektrosztatika Gauss-tételéhez, ahol a D tartományban levő elektromos töltést megadhatjuk az elektromostérerősség-fluxus D határára vett integráljaként is. Ezen analógia az alapja annak a sokszor hallható állításnak, hogy a newtoni gravitációelmélet mind formalizmusát, mind tartalmát illetően lényegében az elektrosztatikával azonos, így annak oktatásával nem kell külön foglalkozni. Látni fogjuk azonban, hogy ez a vélekedés alapvetően hibás: a gravitáció a kölcsönhatások között kivételes jellegű, és ennek oka a Galilei–Eötvös-kísérleteken alapuló ekvivalenciaelv.

Mielőtt rátérnénk e kísérletek tanulságainak diszkutálására – az elektrosztatikai analógiát követve –, vezessük be a gravitációs erőtér *energiasűrűségét* az

$$\mathscr{E} := -\frac{1}{8\pi G}\left(\partial_i \phi\right)\left(\partial^i \phi\right) \tag{4}$$

definícióval. A negatív előjel fizikai jelentése az, hogy a gravitációs tömeg nemnegativitása (és így a gravitáció vonzó jellege) miatt a Newton-elméletben a gravitációs energia *kötési energia*. Valóban, egyszerű számolás mutatja, hogy ha például egy adott R sugarú, gömbszimmetrikus, homogén tömegeloszlású golyót akarunk felépíteni olyan pontrészecskékből, amelyeket a végtelenből szállítunk a felépülőfélben lévő $r < R$ sugarú golyó felszínére, akkor a gravitációs erőtér által a pontrészecskéinken végzett összes munka éppen a $-\mathscr{E}$ teljes háromdimenziós térre vett integrálja.

A (4) kifejezés a Poisson-egyenlet fundamentális megoldásával azonban a Newton-elmélet által leírt anyag + gravitáció rendszerek *belső instabilitását* mutatja. Valóban, a (2) tipikus megoldása $1/r$ alakú, így $\mathscr{E} \sim 1/r^4$, aminek a teljes térre vett

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathscr{E}\, \mathrm{d}^3 x$$

integrálja *alulról nem korlátos*. Tehát a Newton-elmélettel leírt anyag + gravitáció csatolt rendszerből elvben tetszőlegesen nagy energia vonható ki a gravitációs kötési energia minden határon túl való növelése, azaz a forrás anyagának egyre kisebb és kisebb térrészbe zsúfolása árán. Látni fogjuk, hogy az általános relativitáselmélet orvosolja ezt a nehézséget, mert az általános relativitáselméletben a teljes energia *nem negatív.*

Jól ismert a Galilei–Eötvös-kísérletek eredménye, azaz bármely anyag/részecske gravitációs tömege arányos annak tehetetlen tömegével, és ez az arányossági tényező független a test anyagi minőségétől, illetve a részecske típusától. Másként fogalmazva, az m_g/m_t „fajlagos gravitációs tömeg” minden anyagra és részecskére azonos. Így megfelelő egységválasztással $m_g = m_t$ elérhető (és így a g és t indexek elhagyhatók). Ez tehát nem *a priori* igazság, hanem *kísérleti tény*. Ekkor azonban az (1) mozgásegyenlet a tömegpontra vonatkozó semmilyen specifikus tulajdonságot sem tartalmaz: minden tömegpont adott gravitációs térben azonos módon mozog. Ez a *szabadesés univerzalitásának* elve.

Most tegyük fel, hogy az (1) mozgásegyenletben a $-\partial_i \phi$ gravitációs térerősség egy *konstans vektormező.* Ekkor a mozgásegyenlet épp olyan alakú, mintha egy *egyenletesen gyorsuló* vonatkoztatási rendszerből nézve írnánk le egy szabadon mozgó tömegpont mozgását. Tehát a homogén gravitációs erőtereket semmilyen *mechanikai kísérlettel* sem tudjuk megkülönböztetni az egyenletesen gyorsuló tehetetlenségi erőterektől. Ezt a kísérleti tényt emelte *Albert Einstein elv* rangjára, mondván, hogy nem csak mechanikai, de *semmilyen* kísérlettel sem tudunk e két erőtér között különbséget tenni. Ez az *ekvivalencia elve.* Most – röviden – ezen elv három egyszerű következményét diszkutáljuk.

Először, mivel a homogén gravitációs és az egyenletes gyorsulású tehetetlenségi erőtereket elvben sem tudjuk megkülönböztetni, ezért a gravitációs térerősségben megjelenik egy $\partial_i \phi \to \partial_i \phi + C_i$ ambiguitás, ahol C_i egy tetszőleges, konstans vektormező; épp az, mint amit a Poisson-egyenlet megoldása kapcsán fent már említettünk. Ez az ambiguitás egyúttal az inerciarendszerek meghatározásában is jelentkezik.

Másodszor, a gravitációs erőtér ambiguitásmentes tartalmát a ϕ térváltozó $\partial_i \partial_j \phi$ *második* deriváltja jeleníti meg. Ezt *árapályerőnek* is nevezzük, mert ez a mennyiség bukkan fel a Hold által a Föld óceánjaiban keltett árapályjelenség számolásában. Valóban, ha $x_0^i(t)$ és $x^i(t)$ két egymás közelében mozgó tömegpont pályája, akkor (1) miatt ezek

$$\ddot{\xi}^i(t) := \ddot{x}^i(t) - \ddot{x}_0^i(t)$$

relatív gyorsulására adódik, hogy

$$\ddot{\xi}^i = -\left(\partial^i \phi\right)(x) + \left(\partial^i \phi\right)(x_0) \simeq -\left(\partial^i \partial_j \phi\right)(x_0)\, \xi^j.$$

$\partial_i \partial_j \phi$-t spúrra és spúrmentes részre felbontva és felhasználva (2)-t, kapjuk, hogy

$$\partial_i \partial_j \phi = \frac{4\pi}{3} \rho\, \delta_{ij} + \left(\partial_i \partial_j \phi - \frac{1}{3}\delta_{ij} \partial_k \partial^k \phi\right). \tag{5}$$

A spúr tehát a testekben *izotróp,* míg a spúrmentes rész *nyíró deformációt* eredményez. A gravitáció tehát egy *tenzoriális, kvadrupól* jellegű kölcsönhatás; ellentétben az elektrodinamika *vektoriális, dipól* jellegével.

Talán érdemes megjegyezni, hogy az általános relativitáselmélet newtoni (gyenge tér) közelítésében a metrikus tenzor nem triviális része a ϕ térmennyiségre, a (nem tenzoriális) Christoffel-szimbólumok a $\partial_i \phi$ térerősségre és a görbületi tenzor komponensei a $\partial_i \partial_j \phi$ árapályerőre redukálódnak.

Végül, bár a gravitációs forrás (3) által adott M_D tömege a $\partial_i\phi \to \partial_i\phi + C_i$ ambiguitás ellenére jól definiált, sem az $\mathscr{E}$ gravitációsenergia-sűrűség sem az

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathscr{E}\,\mathrm{d}^3 x$$

integrállal értelmezett teljes energiafunkcionál nem jól definiált. Valóban, ha p a háromdimenziós tér adott, tetszőleges pontja, akkor mindig található olyan *egyenletesen gyorsuló* vonatkoztatási rendszer, hogy ebből a rendszerből nézve a p pontban a gravitációs térerősség, és ezzel együtt az $\mathscr{E}$ gravitációsenergia-sűrűség is zérus; vagy akármilyen nagy érték (egy másik megfelelő gyorsuló rendszerből nézve). A gravitációsenergia-sűrűség nem jól definiált, a *gravitációs energia nem lokalizálható pontra.*

Newtoni gravitációelmélet speciális relativisztikus korrekciókkal

A speciális relativitáselmélet szerint a testek tehetetlen tömege függ az energiatartalmuktól, azaz bármely energiához, illetve energiaeloszláshoz tartozik egy tehetetlen tömeg, illetve tömegeloszlás. Ekkor azonban a tehetetlen és gravitációs tömeg azonossága miatt minden energia a gravitációs erőtér forrása. Például egy forró vasgolyó erősebb gravitációs erőteret hoz létre, mint ugyanaz a vasgolyó alacsonyabb hőmérsékleten, hiszen a magasabb hőmérsékletű test belső energiája nagyobb az alacsonyabb hőmérsékletűénél. Hasonlóan, a gravitációs erőtér energiája magának a gravitációs erőtérnek is forrása – pontosabban, a (4) *negatív definit* jellege miatt ez *csökkenti* a newtoni gravitációs erőteret. Így e tagokat relativisztikus korrekcióként hozzá kell adni a (2) jobb oldali forrástagjához:

$$\partial^i \partial_i \phi = 4\pi G\left[\rho + \frac{1}{c^2}\left(u + \mathscr{E}\right)\right], \qquad (6)$$

ahol u a forrás belső energiájának sűrűsége. Az $\mathscr{E}$ (4) által adott alakját beírva, kapjuk, hogy ez ϕ-re egy *nemlineáris* Poisson-egyenlet. Érdemes megjegyezni, hogy – két további relativisztikus korrekcióval együtt – (6) egzakt egyenletként megkapható a sztatikus gravitációs terekre felírt Einstein-egyenletekből is [2].

Végül számoljuk ki a $D \subset \mathbb{R}^3$ tartományban az anyag + gravitáció csatolt rendszer energiáját a (6) által definiált elméletben. Ez nem más, mint a (6) jobb oldali forrástagjának térfogati integrálja:

$$\begin{aligned} E_D &:= \int_D \left(c^2\rho + u + \mathscr{E}\right)\mathrm{d}^3 x = \\ &= \frac{c^2}{4\pi G}\oint_{\partial D} v^i\left(\partial_i\phi\right)\mathrm{d}S. \end{aligned} \qquad (7)$$

Azonban bármely konstans vektormező fluxusának zárt felületre vett integrálja zérus, ezért a gravitációs térerősségben meglévő $\partial_i\phi \to \partial_i\phi + C_i$ ambiguitás ellenére ez az E_D úgynevezett *kvázilokális* energia már jól definiált, s azt *kétdimenziós, zárt felületi integrál* alakjában kaptuk meg.

Összefoglalva: a (7) jól definiáltságát (a $\partial_i\phi \to \partial_i\phi + C_i$ ambiguitás ellenére) az a három feltevés eredményezte, hogy 1) figyelembe vettük a gravitációs forrás $\mathscr{E}/c^2$ *relativisztikus korrekcióját;* 2) nem csupán a gravitációs erőtér, hanem az *anyag + gravitáció csatolt rendszer* energiáját számoltuk; 3) nem sűrűség jellegű, hanem *integrális kifejezést* kerestünk. E három feltevés már meghatározza azt a stratégiát, amelyet követve az általános relativitáselméletben jól definiált (teljes) energia-impulzus kifejezést határozhatunk meg.

Energiasűrűség az általános relativitáselméletben

Az általános relativitáselméletben a ϕ függvény – mint a gravitációs erőtér állapothatározója – szerepét a négydimenziós g_{ab} metrikus tenzor veszi át; és az ekvivalenciaelv alapján megmutatható [3], hogy bármilyen, a téridő-geometria operatív meghatározására irányuló kísérlet a g_{ab} által definiált téridő-geometriát eredményezi. A metrikus tenzor tehát *kettős szerepet* játszik: az a gravitációs térváltozó és egyben a téridő-geometriát is definiálja. Az általános relativitáselméletben nincsenek olyan, a dinamikai változóktól független és *metrikus jelentéssel is bíró* koordináták, mint amilyenek a Descartes-koordináták a Minkowski-téridőben. A metrika e kettős szerepe a forrása számos nehézségnek, és speciálisan a gravitációs energia-impulzus nem lokalizálhatóságának is.

Formálisan – kiindulva például az elmélet Einstein által adott Lagrange-függvényéből – egy olyan kifejezést konstruálhatunk, ami analóg az anyag energia-impulzus tenzorával. Ez a Christoffel-szimbólumok egy homogén kvadratikus kifejezése. Viszont a differenciálgeometriából ismert, hogy bármely nem zárt görbe egy környezetében mindig be tudunk vezetni egy olyan koordinátarendszert, hogy ebben a Christoffel-szimbólumok mindegyike zérus a görbe pontjaiban. Így a fenti kifejezés nem lehet egy jól definiált fizikai mennyiség, ugyanis a görbét egy megfigyelő világvonalának választva azt kapnánk, hogy a gravitációs energia-impulzus sűrűséget a megfigyelő zérusnak vagy nem zérusnak méri attól függően, hogy milyen koordinátarendszert használ. Természetesen egy jól definiált energia-impulzus sűrűség *komponenseinek értéke* függ a választott vonatkoztatási (és ezzel a megfelelő koordináta) rendszertől, de az energia-impulzus sűrűség *összes komponensének eltűnése vagy nem eltűnése* már nem. A fenti kifejezés tehát *lényegi* módon függ a számolások végigviteléhez szükséges koordinátarendszertől, így az csupán egy úgynevezett *pszeudotenzoriális* mennyiség.

Az elmélet hamiltoni megfogalmazásában ugyanez a nehézség egy másik alakban jelentkezik: az Einstein-elmélet teljes Hamilton-függvénye a téregyenletek teljesedése esetén csupán egy (végtelenbe kinyúló) térszerű hiperfelület végtelenbeli határára vett *kétdimenziós, zárt felületi integrálra* redukálódik. A Hamilton-függvénynek nincs peremintegrálra át nem alakítható térfogati integrál része, aminek integrandusát jól definiált gravitációs energia-impulzus sűrűségként azonosíthatnánk. *A gravitációs energia-impulzus nem lokalizálható pontra, az jól definiált fizikai mennyiségként csak a téridő kiterjedt tartományaihoz rendelhető.*

A teljes energia-impulzus az általános relativitáselméletben

A $\Lambda = 0$ eset

Hogy világosan lássuk, hogy a teljes gravitációs energia-impulzust miért úgy definiáljuk ahogy, nézzünk egy lokalizált gravitációs forrást. Ha az Einstein-egyenletekben a Λ kozmológiai állandó zérus, akkor a forrástól (illetve a téridőben annak világcsövétől mind térszerű, mind fényszerű irányokban) távolodva a téridő görbületi tenzora minden határon túl csökken, zérushoz tart. A téridő tehát a forrástól nagy távolságokra a Minkowski-téridőhöz válik hasonlatossá (*1. ábra*). Megengedjük, hogy a forrás valamely, a végtelenbe kifutó N_1 fényszerű hiperfelülettel definiált u_1 retardált időpillanat után gravitációs hullámokat emittáljon, és ez az emisszió egy későbbi, N_2 hiperfelülettel definiált u_2 retardált időpillanat után megszűnjön. A gravitációs sugárzás fényszerű irányokban távolodva fut ki a végtelenbe. A fizikai probléma tehát analóg az elektrodinamikából jól ismert Hertz-dipól problémával; és ez az analógia segít a gravitációs teljes energiakifejezések mögötti fizikai kép megértésében is.

Zérus kozmológiai állandó mellett az általános relativitáselmélet standard teljes energiakifejezése az

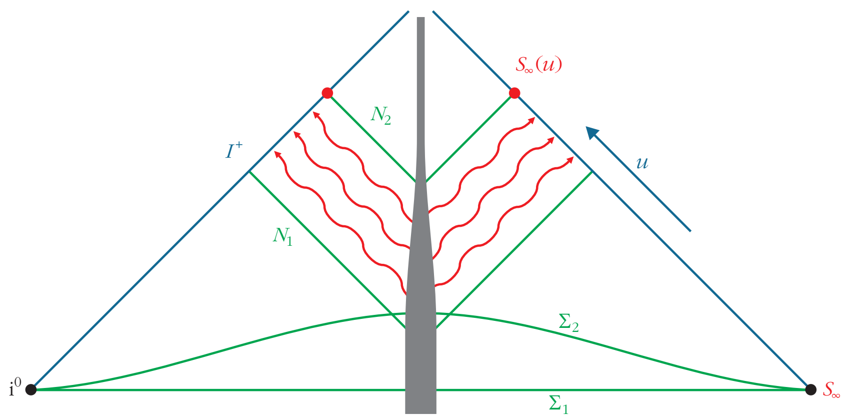
$$E := \oint_{S_\infty} B \, \mathrm{d}S \tag{8}$$

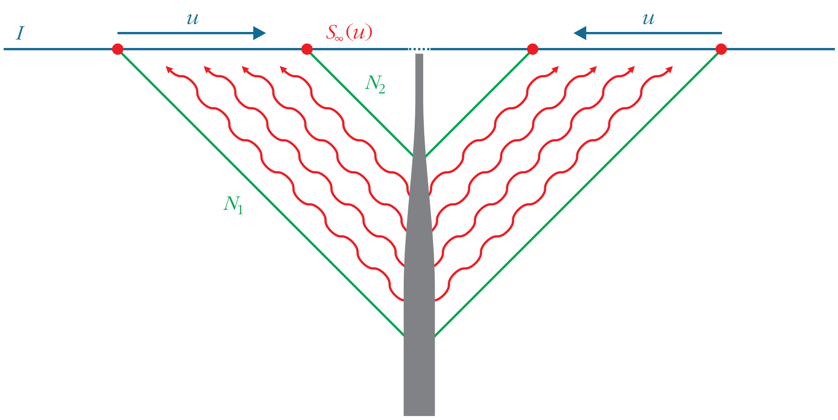
alakot ölti. Kérdés, hogy mi az integrációs tartomány, és hogy hogyan válasszuk meg az integrandust. Az *Arnowitt, Deser* és *Misner* (ADM) [4] által javasolt energiaintegrálban S_∞ a téridő (megfelelő jól definiált értelemben vett) aszimptotikusan sík *térszerű* Σ hiperfelületének végtelenbeli pereme, míg az integrandus az e hiperfelületen indukált háromdimenziós (térbeli) metrika aszimptotikus Descartes-koordinátáiban vett komponenseinek az $1/r$ szerinti sorfejtésében megjelenő vezető kifejtési együtthatók, mint (θ, ϕ) függvények egy kombinációja. A Minkowski-téridő t = constans hipersíkjai, amelyek segítségével a Hertz-dipól problémában a teljes megmaradó energiát értelmezzük, ilyen hiperfelületek. Az ADM-energia nem triviális tulajdonsága, hogy az *megmaradó* abban az értelemben, hogy a számolást egy másik, de szintén aszimptotikusan sík (és az előzőhöz képest aszimptotikusan nem busztolt) térszerű hiperfelületre megismételve, az energia előbbi értékét kapjuk.

Az ADM-energiánál azonban talán még érdekesebb az úgynevezett Bondi-energia [5], ami a rendszer dinamikáját is jellemzi. Ez is (8) alakú, de az integrációs tartomány most a kifutó, fényszerű N hiperfelületek végtelenbeli $S_\infty(u)$ pereme, míg az integrandus a metrika aszimptotikusan fényszerű koordinátákban megadott komponenseinek az $1/r$ szerinti kifejtési együtthatóiból épül föl. Ez a kifejezés tehát függ az u retardált időtől, és a Bondi-energia nem triviális tulajdonsága, hogy az az u-nak *monoton csökkenő* függvénye. Az $E_B(u)$ Bondi-energia u-függésének, illetve monoton csökkenő jellegének jelentése az, hogy valamely u_1 és $u_2 > u_1$ retardált időpillanatokhoz tartozó Bondi-energiák $E_B(u_1) - E_B(u_2)$ különbsége a lokalizált rendszerből a sugárzás által elvitt energiát méri, illetve a monotonitás miatt a sugárzás által a rendszerből elvitt energia *pozitív*.

De vajon maguk az E_{ADM} és $E_B(u)$ teljes energiák is pozitívak? Ezt a kérdést válaszolja meg a *pozitív energiatétel* [6]: *ha az anyag lokális energiasűrűségét minden megfigyelő nemnegatívnak méri és lokális energiaáramát kauzális vektornak látja (azaz a $T^a_b V^b$ kontrakció jövőirányított kauzális vektor minden jövőirányított időszerű V^a vektorra), akkor* E_{ADM}, $E_B(u) \geq 0$. $E_{ADM} = 0$ *vagy* $E_B(u) = 0$ *bármelyike ekvivalens a téridő lokális Minkowski-jellegével.* Ez a tétel a fekete lyukakat tartalmazó téridőkre is igaz. Ez a modern relativitáselmélet egyik legfontosabb eredménye, amin nagyon sok eredmény alapul. Ezek közül csak egyet említünk meg: az Einstein-elmélet *alapállapota* (zérus kozmológiai állandó és „normál” anyag mellett) a Minkowski-téridő, és (a tétel második, úgynevezett rigiditási része miatt) ez *lokálisan stabil alapállapot* is. A Newton-elmélettel ellentétben tehát egyetlen fizikai rendszerből sem vonható ki korlátlanul nagy energia a gravitációs kötési energia minden határon túli növelése árán.

1. ábra. $\Lambda = 0$ mellett egy lokalizált gravitációs forrás terének a sematikus téridődiagramja. A téridő aszimptotikusan sík. Σ_1 és Σ_2 két aszimptotikusan sík, a *térszerű* végtelenbe (i^0) kifutó térszerű hiperfelület. A forrás a *jövő fényszerű* végtelenbe (I^+) kifutó N_1 és N_2 fényszerű hiperfelületekkel definiált u_1, illetve u_2 retardált időpillanatok között gravitációsan sugároz. E sugárzás fényszerű irányokban távolodik a forrás világcsövétől.





2. ábra. Ha $\Lambda > 0$, akkor a téridő aszimptotikusan állandó pozitív görbületű. A téridő I konformis végtelenje, ahova a gravitációs sugárzás kifut, most *térszerű.*

Bár a Newton-elméletben az energia önmagában egy jól definiált fizikai mennyiség, a relativitáselméletben az csupán egy négyesvektor egyetlen komponense. Valóban, mind az ADM-, mind a Bondi-energia csupán az időkomponense egy-egy energia-impulzus négyesvektornak, és e vektorok térbeli impulzusrésze az előző fejezetben említett hamiltoni, illetve pszeudotenzoriális módszerek felhasználásával is megkonstruálható. E vektorokkal átfogalmazva a pozitív energiatétel azt állítja, hogy e vektorok jövőirányítottak és időszerűek; az eltűnésük pedig a téridő lokális Minkowski-jellegével ekvivalens.

Az ADM és Bondi-féle energia-impulzus két különböző szituációra vonatkozik, és teljesen más módszerrel lett bevezetve. Ez felveti azt a kérdést, hogy nincs-e a háttérben egy olyan univerzális konstrukció, amelynek speciális eseteként mind az ADM, mind a Bondi-féle energia-impulzus megkapható? *Horowitz* és *Tod* [7] kétkomponensű spinorok felhasználásával megmutatta, hogy ilyen konstrukció létezik, és az

$$P^{\underline{a}}\, \sigma_{\underline{a}}^{\underline{A}\underline{B}'}\, \lambda_{\underline{A}}\, \bar{\lambda}_{\underline{B}'} = \oint_S u(\lambda, \bar{\lambda})\, \mathrm{d}S \qquad (9)$$

alakú. Az integrandus a λ_A Weyl-spinormező és komplex konjugáltja első deriváltjának egy kifejezése. λ_A-t az S (= S_∞ vagy $S_\infty(u)$) felület pontjaiban a téridő aszimptotikus transzlációi spinorösszetevőinek választva e spinormezők egy kétdimenziós komplex vektorteret alkotnak. E térben egy bázist rögzítve a spinormező *konstans* $\lambda_{\underline{A}}$, $\underline{A}$ =0, 1, komponensekkel is megadható. Ekkor a négyesimpulzus $P^{\underline{a}}$, $\underline{a}$ =0, …, 3, komponenseit (9) definiálja, ahol $\sigma_{\underline{a}}^{\underline{A}\underline{B}'}$ a négy $SL(2,\mathbb{C})$ Pauli-mátrixot jelöli.

A $\Lambda > 0$ eset

Távoli Ia típusú szupernóvák luminozitás-vöröseltolódás diagramjának analízise alapján két független asztrofizikus csoport is arra a következtetésre jutott, hogy az Univerzum *gyorsulva tágul* [8]. E jelenség legegyszerűbb magyarázata az, hogy az Einstein egyenletekben van egy nagyon kicsi, de pozitív Λ kozmológiai állandó. Habár ez a kozmológiai állandó sok számolásban (például egy csillag gravitációs összeomlásának számolásában) elhanyagolható, kozmológiai skálán, vagy olyan problémákban, amelyekben a téridő aszimptotikus szerkezete szerepet játszik, a Λ pozitív voltának jelentősége van. Ilyen a gravitációs energia-impulzus értelmezése és tulajdonságainak a tisztázása is.

Valóban, ha $\Lambda > 0$, akkor egy lokalizált forrás gravitációs tere már nem aszimptotikusan sík, hanem egy aszimptotikusan *állandó pozitív görbületű,* úgynevezett aszimptotikusan de Sitter-téridővel írható le, amelynek aszimptotikus szimmetriacsoportja a *félegyszerű* $SO(1,4)$ de Sitter-csoport. Így az ilyen téridőkben *nem létezik* természetes módon kiválasztható *aszimptotikus transzláció.* Ráadásul a téridő I konformis végtelenje, ami $\Lambda = 0$ esetben *fényszerű* volt, most *térszerű* (*2. ábra*). Mivel az aszimptotikus szimmetriák I-t önmagába kell vigyék, a végtelen közelében *minden aszimptotikus szimmetria térszerű kell legyen.* De, ha az aszimptotikusan de Sitter-téridőkben nincs semmilyen természetes módon definiált aszimptotikus (idő-) transzláció, akkor például egy Bondi-típusú energia-impulzust hogyan lehet értelmezni?

Láttuk, hogy a $\Lambda = 0$ esetben az ADM és Bondi energia-impulzust sikerült *egységes alakban,* az $u(\lambda, \bar{\lambda})$ integráljaként (de a spinormezők és az integrációs tartományok más-más megválasztása mellett) megkapni. Ezért most is ebből az univerzális alakból célszerű kiindulni [9]. Mivel a Bondi energia-impulzus megfelelőjét keressük, az integrációs tartomány most is egy, a végtelenbe kifutó fényszerű hiperfelület végtelenbeli pereme. De az aszimptotikusan de Sitter-téridőkben nincsenek természetes módon meghatározott aszimptotikus transzlációk, így a λ_A spinormezőt nem tudjuk *a priori* előírni. A vizsgálataink során az egyetlen kritériumunk *a formalizmus matematikai önkonzisztenciája* (például az integrál végességének a követelménye) lehet. Meglepő módon, a formalizmus maga meghatározza a λ_A spinormezőt: az *ki kell elégítse Penrose 2-felületi twisztoregyenletét.* Ez egy lineáris elliptikus parciális differenciálegyenlet, megoldásai egy négydimenziós, komplex vektorteret alkotnak. Így ha a λ_A megoldás által meghatározott twisztort Z_α jelöli, akkor a

$$H^{\alpha\beta'} Z_\alpha \bar{Z}_{\beta'} = \oint_{S_\infty(u)} u(\lambda, \bar{\lambda})\, \mathrm{d}S \qquad (10)$$

előírással egy 4×4-es $H^{\alpha\beta'}$ komplex mátrixot értelmezhetünk. Megmutatható, hogy ez

$$H^{\alpha\beta'} = \begin{pmatrix} P & Q \\ -\bar{Q} & P \end{pmatrix} \qquad (11)$$

szerkezetű, ahol P egy 2×2-es hermitikus és Q egy antiszimmetrikus komplex mátrix. Így $H^{\alpha\beta'}$ maga is hermitikus. Talán érdemes megemlíteni, hogy a fenti általános analízist a $\Lambda = 0$ esetben megismételve azt kapjuk, hogy a twisztoregyenlet megoldásai épp az aszimptotikusan sík téridők aszimptotikus transzlációinak spinorösszetevőit adják; (11)-ben $Q = 0$, míg P épp a Bondi-féle négyesimpulzus spinoralakja lesz. A $\Lambda > 0$ esetben tehát az aszimptotikus transzlációk helyébe a 2-felületi twisztorok, a valós energia-impulzus négyesvektor helyébe pedig a $H^{\alpha\beta'}$ hermitikus mátrix lép.

De rendelkezik-e a $H^{\alpha\beta'}$ valamilyen nem triviális, „hasznos” tulajdonsággal is? Bizonyítható, hogy $H^{\alpha\beta'}$-ra ugyanaz a pozitivitási és rigiditási tulajdonság igaz, mint a teljes energia-impulzusokra a $\Lambda = 0$ esetben: *a pozitív energiatétel feltételei mellett $H^{\alpha\beta'}$ pozitív definit, és $H^{\alpha\beta'} = 0$ akkor és csakis akkor, ha a téridő lokálisan de Sitter-féle.* E tétel azt a régi sejtést támasztja alá, hogy pozitív kozmológiai állandó mellett az Einstein-elmélet alapállapota a de Sitter-téridő, és az lokálisan stabil.

Irodalom

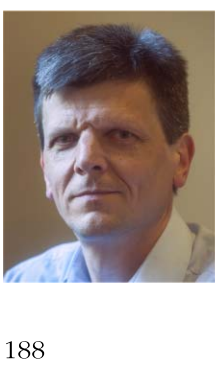
1. C. Misner, K. Thorne, J. A. Wheeler: *Gravitation.* Freeman, San Francisco, 1973.
2. J. Frauendiener, L. B. Szabados: A note on the post-Newtonian limit of quasi-local energy expressions. *Class. Quantum Grav. 28* (2011) 235009, arXiv: 1102.1867 [gr-qc]
3. J. Stewart: *Advanced General Relativity.* Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
4. R. Arnowitt, S. Deser, C. W. Misner: The dynamics of general relativity. in *Gravitation: An Introduction to Current Research.* (ed.: L. Witten) Wiley, New York, London, 1962, 227–265, arXiv: gr-qc/0405109
5. H. Bondi, M. G. J. van der Burg, A. W. K. Metzner: Gravitational waves in general relativity. VII. Waves from axi-symmetric isolated systems. *Proc. R. Soc. London, Ser. A 269* (1962) 21–52.
6. R. Schoen, S.-T. Yau: Proof of the positive mass theorem, II. *Commun. Math. Phys. 79* (1981) 231–260.
   E. Witten: A new proof of the positive energy theorem. *Commun. Math. Phys. 80* (1981) 381–402.
7. G. Horowitz, K. P. Tod: A relation between local and total energy in general relativity. *Commun. Math. Phys. 85* (1982) 429–447.
8. A. G. Riess et al.: Observational evidence from supernovae for an accelerating Universe and a cosmological constant. *Astron. J. 116* (1998) 1009–1038, arXiv: astro-ph/9805201
   S. Perlmutter et al.: Measurements of Omega and Lambda from 42 high-redshift supernovae. *Astrophys. J. 517* (1999) 565–586, arXiv: astro-ph/9812133
9. L. B. Szabados, P. Tod: A positive Bondi-type mass in asymptotically de Sitter spacetimes. *Class. Quantum Grav. 32* (2015) 205011 (pp 51), arXiv: 1505.06637 [gr-qc]

ANYAGTUDOMÁNY SZÁMÍTÓGÉPPEL – 1. rész

Pusztai Tamás
Wigner Fizikai Kutatóközpont, SZFI Kísérleti Szilárdtestfizikai Osztály

A mostani és a következő számban megjelenő kétrészes cikk témája a számítógépes anyagtudomány. Itt, az első részben általános áttekintést szeretnék adni az anyagtudomány helyzetéről, különösen az új anyagok minél gyorsabb kifejlesztésének igénye kapcsán felmerülő kihívásokról és kezdeményezésekről, amelyben a számítógépes anyagtudománynak fontos szerepe van. A második részben pedig bemutatok néhány olyan, csoportunk által végzett munkát, amelyek azt illusztrálják, hogy a számítógépekkel végzett szimulációk miként segíthetik az anyagtudományi folyamatok megértését és miként kapcsolódhatnak valós, gyakorlati problémák megoldásához.

Az MTA Fizikai Osztálya 2018. május 10-i tudományos ülésén azonos címmel elhangzott előadás bővített, írott változata.



Pusztai Tamás (45) az MTA doktora, az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos tanácsadója. Kutatásait a számítógépes anyagtudomány területén végzi, azon belül is elsősorban a megszilárdulás során kialakuló növekedési formák fázismezőmodellel történő leírásával foglalkozik.

Az anyagtudomány fejlődése

Történelme során az emberiség egyre több tárggyal és eszközzel vette és veszi körbe magát. Ezeket túlnyomó részt speciálisan valamilyen feladatra – például saját védelmére, élelmének megszerzésére vagy előállítására, helyváltoztatásának elősegítésére stb. – készíti. A múlt század derekáig úgy gondolták, hogy az emberi fajt éppen ez a céltudatos eszközkészítésre való képessége emeli ki az állatvilágból. Ezt a széles körben elfogadott vélekedést borította fel *Jane Godall* 1960-ban tett megfigyelése, aki a tanzániai Gombe Nemzeti Parkban – lényegében a csimpánzok közé költözve – közvetlen közelről tanulmányozta egy csoport életét. Az egyik megfigyelt példány nem csak egy fűszálat termeszvárba dugva majd azt lenyalogatva „horgászott” termeszeket, hanem vékonyabb ágakat letörve, a rajta levő leveleket letépve e feladatra készített célszerszámot [1]. A megfigyelésre érkezett *Louis Leakey*-től, a kor egyik vezető paleoantropológusától a következő, híressé vált mondat: „Mostantól vagy újra kell definiálnunk az eszköz fogalmát, vagy az ember fogalmát, vagy embernek kell elfogadnunk a csimpánzt.” [1]. Az azóta eltelt időben más fajokról is kimutatták, hogy képesek eszközöket előállítani. Nem közismert, hogy ilyen téren egyes madarak, például a varjak is meglehetősen intelligensnek számítanak.