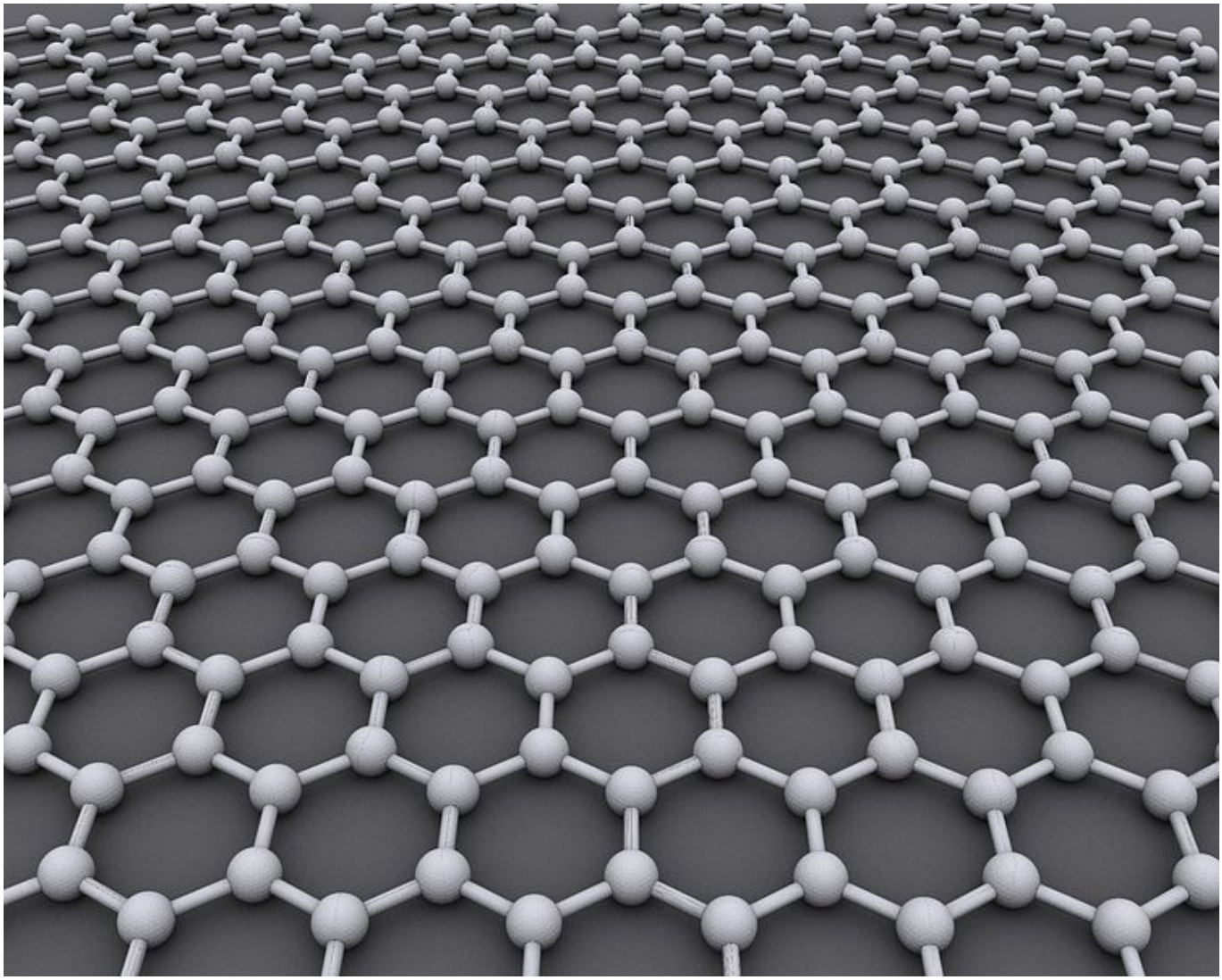
Fouriertransformaties (4): roosters en fononen

In het vierde en laatste deel van zijn serie over fouriertransformaties beschrijft Lieuwe Bakker hoe zulke transformaties erg nuttig kunnen zijn voor het beschrijven natuurverschijnselen die van nature periodiek zijn, zoals de posities van atomen in een kristalrooster.



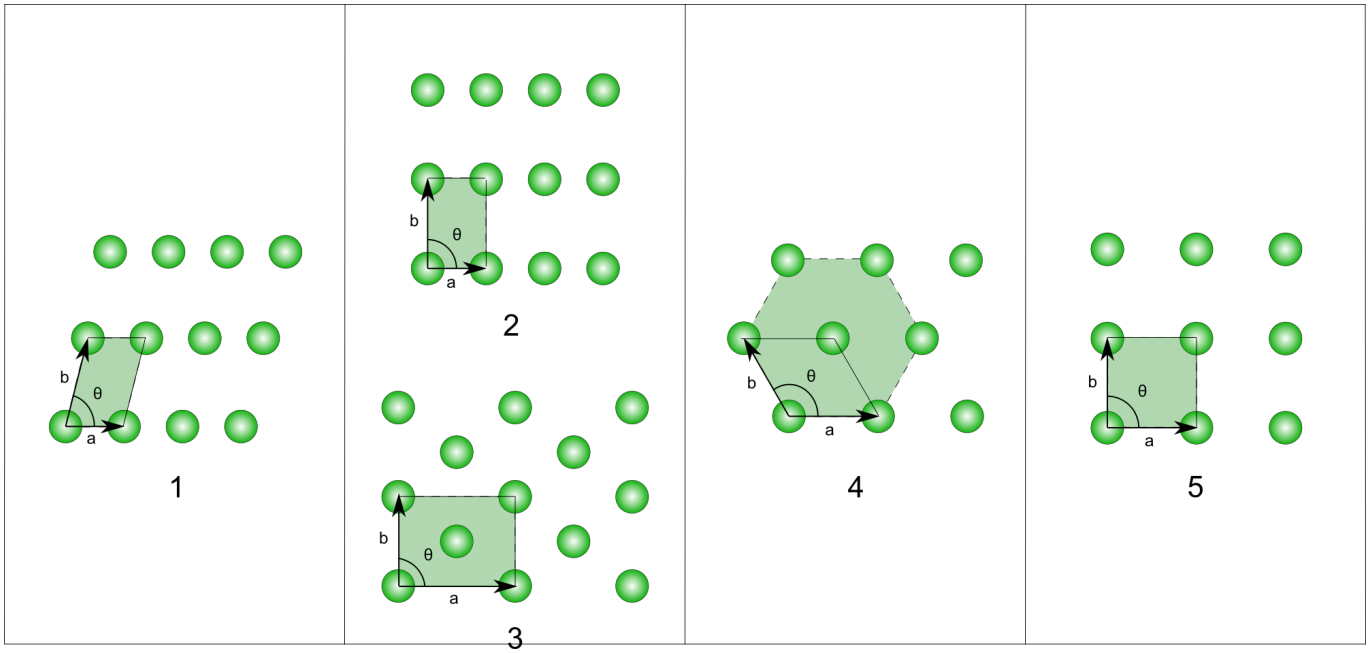
Afbeelding 1. Grafeen. Grafeen is een voorbeeld van een materiaal waarin atomen periodiek gerangschikt zijn. Juist voor het beschrijven van zulke materialen zijn fouriertransformaties erg geschikt. Afbeelding: AlexanderAIUS.

In de vorige delen van deze serie zijn al enkele voorbeelden en toepassingen van fouriertransformaties in de natuur behandeld. In onze klassieke wereld spelen fouriertransformaties een belangrijke rol bij tal van technische toepassingen: van signaal-analyses tot warmtegeleiding. In de quantummechanica spelen Fouriertransformaties een hoofdrol bij het oplossen van de Schrödingervergelijking en blijken ze sterk verbonden met Heisenbergs onzekerheidsrelatie. In dit artikel wil ik de lezer kennis laten maken met een toepassing van Fouriertransformaties in mijn favoriete vakgebied, dat van de gecondenseerde materie, en vertel ik hoe deze Fouriertransformaties daar gebruikt kunnen worden om bepaalde problemen op te lossen.

Roosters

De natuurkunde van de gecondenseerde materie gaat eigenlijk over alle stoffen die ‘vaste’ vorm aannemen. Een exacte definitie van het vakgebied bestaat waarschijnlijk niet, maar ik denk dat de meeste natuurkundigen het erover eens zullen zijn dat het onderwerp van gecondenseerde materie feitelijk de natuurwetten beschrijft van *systemen van atomen,* zoals kristallen en metaalroosters, maar ook ultrakoude gassen. (Ook al is gas geen ‘vaste stof’ in de klassieke zin, de materie bestaat wel uit een groot aantal atomen bij elkaar en valt dus onder dezelfde noemer.) Nu is het extreem complex om een volledige theoretische beschrijving te geven van een grote groep atomen bij elkaar. De complexiteit van de Schrödingervergelijking, die daarin een belangrijke rol speelt, is al vaker benoemd op deze website: hoe meer atomen we tegelijkertijd willen beschrijven, hoe meer parameters we nodig hebben. Dit probleem lijkt in de eerste instantie onoverkomelijk.

Desondanks zijn er systemen die we wél kunnen beschrijven. Dit zijn dan wel systemen die niet echt bestaan, maar die hooguit *lijken* op een echt bestaand systeem. Een klassiek voorbeeld hiervan is het voorbeeld van een atoomrooster. We stellen ons voor dat we een groot aantal atomen hebben, die zich prachtig hebben verdeeld over een bepaald rooster, zoals aangegeven in afbeelding 2. Het voordeel van zo’n rangschikking is dat we elk atoom een label kunnen geven dat zijn positie ten opzichte van de andere atomen representeert. Zo’n label is eigenlijk een soort coördinaat van de plaats van het atoom. Deze benadering is in sommige gevallen zelfs bijna exact, zoals het geval is bij metalen en kristallen, waar atoomkernen zich inderdaad rangschikken op bepaalde manieren in een rooster.



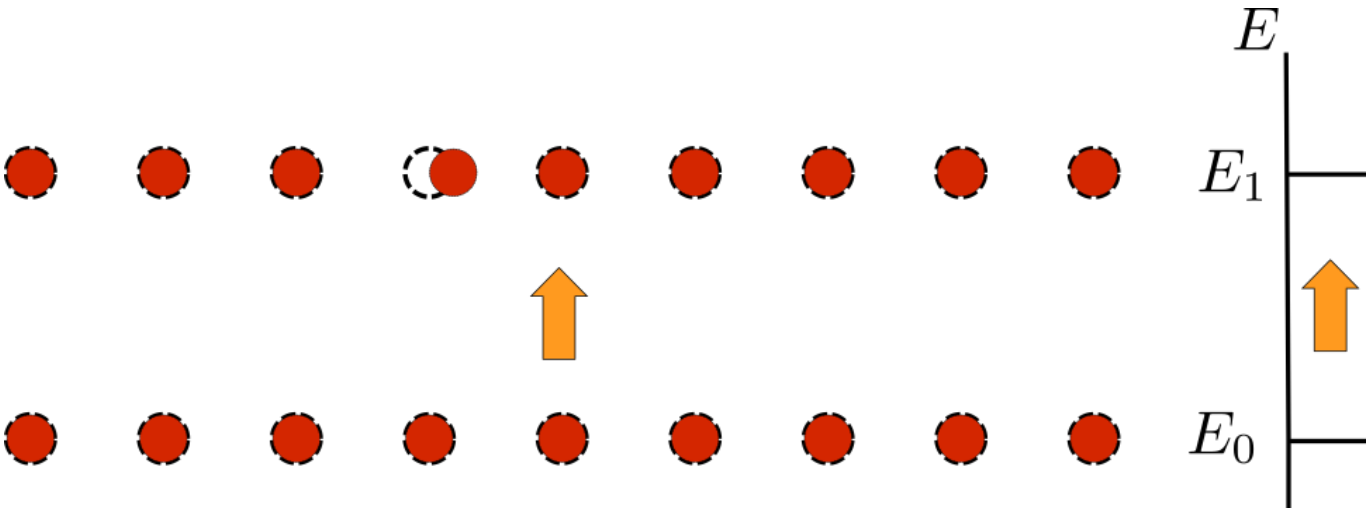
Afbeelding 2. Voorbeelden van een rooster van atomen. In deze afbeelding zien we enkele voorbeelden van tweedimensionale atoom-roosters. Een rooster van hexagonen (rooster 4) is bijvoorbeeld hoe grafeen zoals in afbeelding 1 eruit ziet. Afbeelding: Prolineserver.

Vind de golffunctie

Ons uiteindelijke doel blijft natuurlijk hetzelfde: vind de golffunctie die dit systeem van atomen beschrijft. Om dit te bewerkstelligen moeten we tal van simplificaties maken. Pas dan kunnen we een ‘exacte’ oplossing geven. Zo doen we bijvoorbeeld alsof de ‘atomen’ in ons model precies stilstaan. Maar de echt grote vereenvoudigingen moeten nog komen: zo bedenken we *zelf* de regels waaraan dit systeem moet voldoen. Voor het gemak bekijken we een voorbeeld van een systeem van atomen die op een lijn zitten. Vanuit het beeld van de atomen leven deze in slechts één dimensie: hun wereld loopt van van links naar rechts. In de natuur vindt je dit soort systemen natuurlijk niet. Daar komen atomen altijd voor in complexere configuraties, in alle drie de ruimtelijke dimensies (en wellicht nog vele andere dimensies). Desondanks is het voor ons begrip best nuttig om dit soort fictieve systemen te bestuderen. Als we zeggen dat de atomen op de lijn niet kunnen bewegen, en hun buren überhaupt niet kunnen ‘zien’ (ze beïnvloeden elkaar niet), dan kunnen we de golffunctie van dit systeem onmiddellijk opschrijven: die blijkt niets anders te zijn dan een product van de golffuncties van elk individueel atoom.

In een andere versimpeling die we kunnen maken zijn de atomen zijn een soort ‘bollen’ die

graag rondom hun toegewezen plek willen blijven. Als twee atomen iets naar elkaar toe of van elkaar af bewegen (weg van hun ideale toegewezen plek), dan kost dat een beetje energie.



Afbeelding 3. Een excitatie. Een verplaatsing van een atoom zorg ervoor dat de energie van het systeem iets groter wordt. Met andere woorden: men moet energie in het systeem stoppen om deze ‘excitatie’ te bewerkstelligen.

Uiteraard zijn de atomen in de praktijk geen ‘bollen’. Het zijn een golfpakketjes, met een goed gedefinieerde energie. Niet meer, niet minder. Voor onze inbeelding is het echter prima om de atomen als een soort bol-deeltjes te beschouwen.

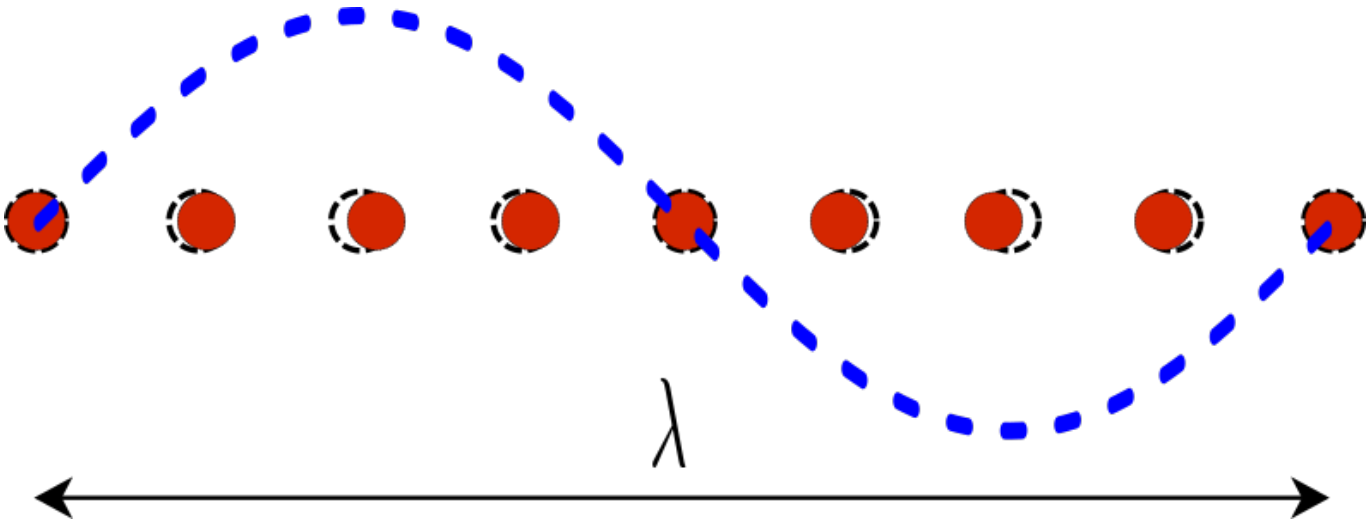
De energetisch gunstigste toestand (ook wel de ‘grondtoestand’ van een systeem genaamd) is eenvoudig te beschrijven: als alle atomen precies op hun evenwichtspositie staan, dan is er de minste hoeveelheid energie in het systeem aanwezig. De golffunctie van deze keten van atomen kennen we dus ook: die golffunctie is simpelweg een product van de golffuncties van alle individuele atomen, net als hierboven, maar natuurlijk met iets andere ‘individuele’ golffuncties. Immers, de atomen ‘zien’ elkaar netto nog steeds niet. Wat als er nu iets meer energie in het systeem aanwezig is? Bijvoorbeeld omdat iemand met een hamer op de keten heeft geslagen?

Voor wie geïnteresseerd in in een meer wiskundige beschrijving: in formulevorm ziet de Hamiltoniaan van het systeem er als volgt uit:

$$\hat{H} = \sum_j \frac{\hat{P}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \left(\hat{X}_j - \hat{X}_{j+1}\right)^2 .$$

Ter herinnering: de Hamiltoniaan speelt een grote rol in de Schrödingervergelijking – het is de operator die de tijdsevolutie van een quantummechanisch deeltje induceert. De uitdrukking is opgebouwd uit twee elementen: een term die de *kinetische energie* bepaalt, te herkennen aan ofwel een 'p^2', ofwel een afgeleide, en de *potentiele energie* van het systeem – die samengevat kan worden als 'alles wat geen kinetische energie is'.

De eerste term in de som hierboven is de gebruikelijke expressie voor bewegingsenergie. De tweede term herkent de wiskundig onderbouwde lezer wellicht als een expressie voor veerenergie: alleen als de atomen afwijken van hun evenwichtspositie brengt dit energie met zich mee, gekarakteriseerd door hoe sterk de atomen afwijken van hun evenwicht en door parameters m en ω_0 die verdere eigenschappen van het systeem beschrijven. Dit zijn uiteraard allemaal technische details; het volgende plaatje geeft wellicht wat meer intuïtie voor onze keten:

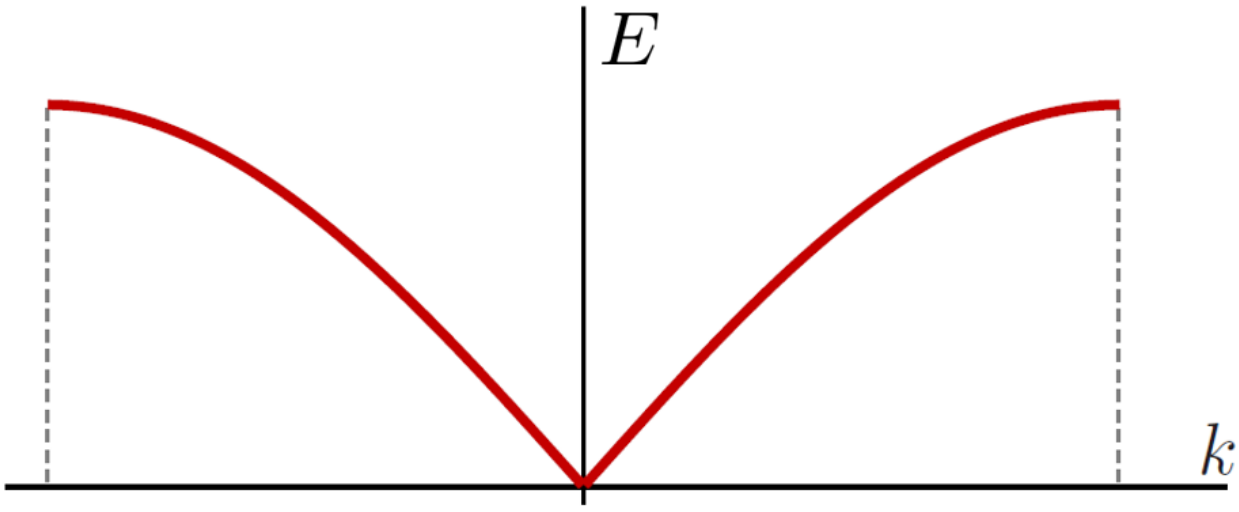


Afbeelding 4. Een golf in het model. De voorkeurs-oriëntatie van de bollen is aangegeven met de zwarte gestreepte cirkels. De rode stippen geven aan waar de atomen zich echt bevinden. Deze afwijkingen van de evenwichtspositie kunnen samen een golfbeweging bewerkstelligen, zoals hier expliciet aangegeven is met de blauwe gestreepte lijn. (Die golf is voor de duidelijkheid in de verticale richting getekend: 'omhoog' in de golf betekent dus 'naar rechts in het rooster.) De golflengte van deze expliciete golf is aangegeven als λ.

Het oplossen van de Schrödingervergelijking

Waar komt dan nu de fouriertransformatie om de hoek kijken? Welnu; onze Hamiltoniaan is een ingewikkeld beest, die we ook nog eens moeten invullen in de Schrödingervergelijking om vervolgens wiskundig de golfvergelijking van dit systeem van deeltjes te bepalen. Om dit te kunnen doen is er een truc: we merken op dat de vibraties van ieder atoom bijdragen aan een groter geheel van vibraties van alle atomen. Als we naar het grotere geheel kijken, betekent dit niets anders dan dat we een soort golf zien waarin de trillingen van ieder afzonderlijk atoom hun eigen bijdrage leveren aan dit totale golfverschijnsel.

Door onze Hamiltoniaan te fouriertransformeren, zijn we nu in staat om deze op te schrijven in een vorm waaruit we heel makkelijk de golffuncties van het systeem en de bijbehorende energieën kunnen bepalen. De ‘golven’ waar we het hier over hebben zijn eigenlijk helemaal niet zo gek: als we hier zouden praten over ‘klassieke deeltjes’ die bewegen in een medium dan zouden we praten over geluidsgolven! In de quantummechanische zin is er één groot verschil: de mogelijke golflengtes die deze golven kunnen aannemen zijn niet willekeurig, maar zijn *gequantiseerd*: alleen heel specifieke waarden van die golflengte zijn mogelijk. Om de analogie met onze bekende klassieke wereld extra te benadrukken worden deze quantummechanische ‘geluidsgolven’ ook wel *fononen* genoemd.

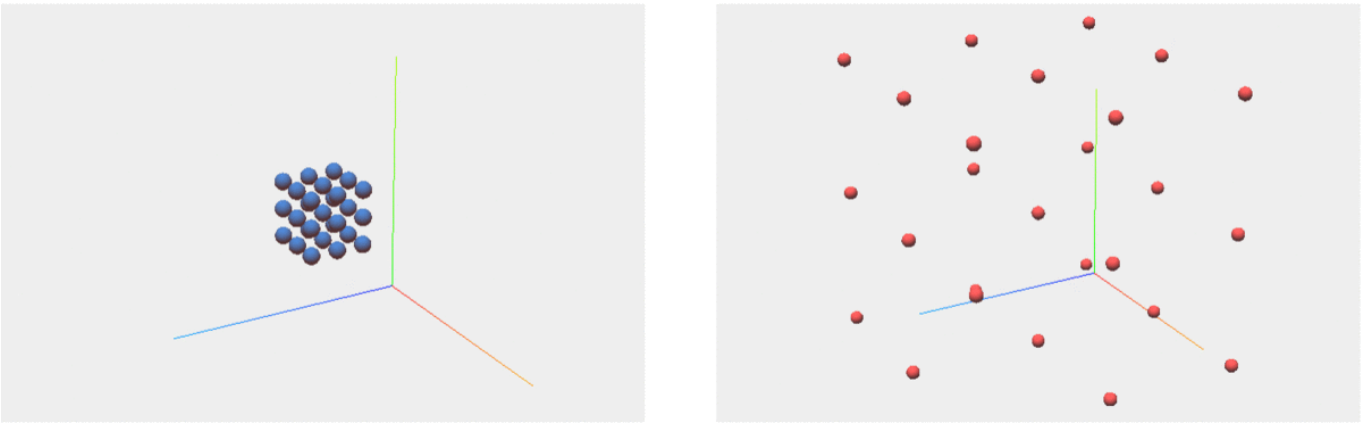


Afbeelding 5. De energie in een grafiek. De energie die hoort bij elk fonon, zoals die weergegeven door de blauwe lijn in afbeelding 4. Deze energie is een functie van de impuls

k, die groter wordt naarmate de golflengte kleiner wordt. Het lijkt hier alsof de energie een continu getal is, maar in dat opzicht is de afbeelding misleidend: eigenlijk zijn de toegestane energieën discrete punten op de lijn. Als de afstand tussen twee opeenvolgende punten in het rooster heel klein is, bestaat ook de bovenstaande lijn uit enorm veel punten, waardoor het lijkt alsof de energie continu is.

Slimmere coördinaten

In de alinea's hierboven hebben we het gehad over het fouriertransformeren van de Hamiltoniaan. Je zou je kunnen afvragen wat we hier nu eigenlijk mee bedoelen. Het idee is enigszins vanzelfsprekend, als je je herinnert wat een fouriertransformatie ook alweer inhield: een transformatie waarbij we een golf die beschreven is met plaats- en tijdcoördinaten, ontbinden in de individuele 'basisgolven' waaruit deze bestaat. We bekijken dus niet hoe de golf eruit ziet in de 'echte ruimte', maar hoe deze opgebouwd is uit zijn individuele componenten. Je zou het kunnen vergelijken met een systeem dat je niet beschrijft met zijn plaatscoördinaten, maar met zijn snelheidscoördinaten: we hebben in beide gevallen precies evenveel informatie, maar wellicht is het ene coördinatenstelsel handiger dan het andere.



Afbeelding 5. Het reciproke rooster. Ook in snelheidscoördinaten vormen de mogelijke toestanden van de atomen weer een rooster – het zogenaamde 'reciproke rooster'. Hier zie je een gifje waarin het reciproke rooster geanimeerd wordt. Links zien we de coördinaten in onze 'normale' ruimte. Rechts zien we de bijbehorende coördinaten in de fouriergetransformeerde ruimte. Merk bijvoorbeeld op dat, hoe dichter de punten op elkaar zitten in reële ruimte, hoe verder ze van elkaar af staan in de getransformeerde ruimte. Dit fenomeen hebben we ook al eerder gezien in deel 2 van deze serie waar de relatie tussen plaats en impuls en snelheid expliciet werd geïllustreerd. Afbeelding gemaakt met behulp van de Direct and Reciprocal Lattice Visualizer.

En inderdaad: als we te maken hebben met vibraties van atomen, of andere bewegingen met een periodiek karakter, dan is het altijd verstandig om te wisselen van coördinatenstelsel. In plaats van het systeem te beschrijven met coördinaten in onze ‘echte’ ruimte, beschrijven we het met coördinaten uit de ‘golfruimte’. Vaak kunnen we zo met behulp van fouriertransformaties direct zien welke golven bijdragen aan de quantummechanische golffunctie, en wat de bijbehorende energieën zijn. Probleem opgelost!