De onzekerheidsrelatie en golfpakketjes

In het eerste deel van deze serie heb ik het concept van fouriertransformaties geïntroduceerd. Het idee van Joseph Fourier was: elke functie (zolang die aan enkele niet heel beperkende voorwaarden voldoet) is te schrijven als een som van sinussen en cosinussen. We hebben enkele voorbeelden gezien van situaties waar fourieranalyse in ons dagelijks leven een belangrijke rol kan spelen. Voorbeelden hiervan waren bijvoorbeeld geluidsmodulatie, getijdevoorspellingen en beeldbewerkingen zoals in datacompressiealgoritmes. In dit artikel wil ik een andere opmerkelijke verschijning van fouriertransformaties de revue laten passeren: fouriertransformaties in de quantummechanica.

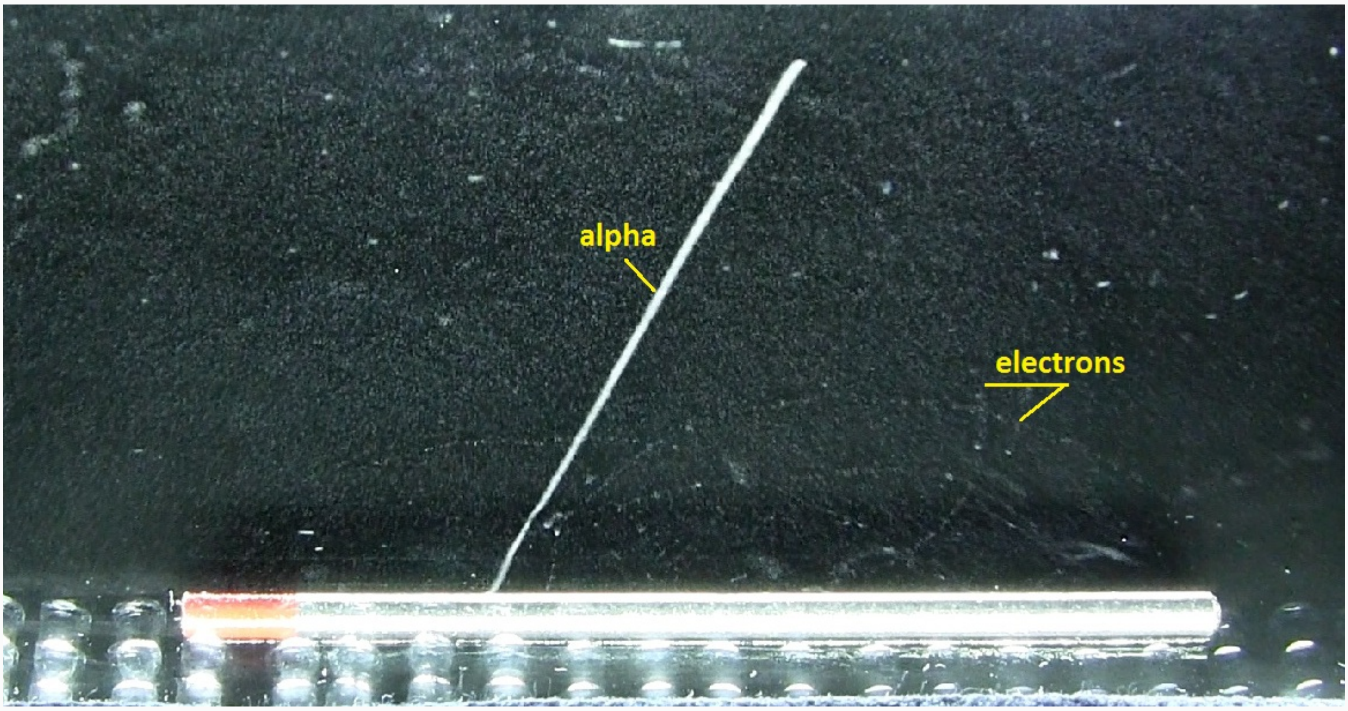
De onzekerheidsrelatie

Om een duidelijk beeld te geven van het doel van dit artikel moet ik eerst een klein stapje terug in de tijd doen naar het begin van de 20^{e} eeuw. De grondleggers van de quantummechanica zoals Einstein, Dirac, Bohr en Schrödinger hadden aan de hand van bepaalde experimenten het volgende gemerkt: van een heel klein deeltje (een quantum) is het niet mogelijk om tegelijkertijd exact te bepalen wat de positie en de snelheid is. Als je heel nauwkeurig probeert te meten waar het deeltje is, dan is zijn snelheid totaal onduidelijk, en vice-versa. (Overigens wordt in plaats van de snelheid meestal de *impuls* van een deeltje gebruikt: zijn snelheid maal zijn massa.) Dit fenomeen werd door Werner Heisenberg in precieze wiskunde gegoten, en staat dan ook bekend onder de naam ‘Heisenbergs onzekerheidsprincipe’. De beroemde formule die Heisenberg afleidde zie je hieronder.

\(\Delta x \; \Delta p = \frac{\hbar}{2}\)

Afbeelding 1. Heisenbergs onzekerheidsprincipe. Het principe stelt dat de onzekerheid van een meting van een positie van een quantum (*Δx*) gerelateerd is aan de onzekerheid in een meting van de impuls (*Δp*). Deze relatie vertelt dus dat het niet mogelijk is om beide eigenschappen tegelijkertijd te meten met een nauwkeurigheid die beter is dan de gereduceerde constante van Planck ($\hbar$) gedeeld door 2.

In de praktijk is dit fenomeen eenvoudig te zien aan de hand van de condensatie van druppels in een Wilsonvat: een afgesloten bad met een mengsel van water- en alcoholdamp. Als een atomair deeltje door de wand van het bad heen beweegt en vervolgens interactie heeft met het gasmengsel, laat het een streep van condens na. Hieruit kunnen we een mooi 'pad' zien dat doorlopen is door het quantumdeeltje, waar de snelheid en dus de impuls ook vrij nauwkeurig te meten is. Als we echter zouden proberen in te zoomen en de positie van het deeltje op meerdere tijdstippen zouden meten, dan zouden we niet een mooie gladde lijn zien, maar een soort discontinue verdeling van de plaats van het deeltje.



Afbeelding 2. Een Wilsonvat. In de afbeelding is het pad zichtbaar dat een alfadeeltje (de kern van een heliumatoom) aflegt. Ook zien we, veel zwakker, de paden van enkele elektronen. De witte strepen zijn 'sporen' waar een deeltje een interactie is aangegaan met het omliggende gas. Hoe sterker die interactie, hoe duidelijker het spoor. Het alfadeeltje is vele malen zwaarder dan de elektronen, dus het heeft een hogere ioneserende werking: er zijn meer interacties met het gas. Zoals te zien is het pad een mooie rechte lijn, waaruit de impuls duidelijk af te lezen is. De plaats van het deeltje op

een bepaald punt in het pad is echter veel onduidelijker: de lijn is behoorlijk dik. We weten dus niet heel precies waar het deeltje door het gas heen heeft bewogen. Afbeelding: Cloudylabs.

Deze observatie leidde ertoe dat het klassieke begrip van een faseruimte, waarin plaats- en snelheidscoördinaten van deeltjes worden samengenomen, niet meer voldeed. In plaats daarvan moet er zoiets als een golffunctie worden opgesteld. Het begrip golffunctie is al vaker genoemd op deze website; hier volstaat het om te weten dat een golffunctie een functie is die alle mogelijke informatie kan geven van een quantum. Belangrijk is dat er meerder manieren zijn om deze golffunctie te beschrijven. We zouden ervoor kunnen kiezen om de golffunctie te schrijven in termen van posities (in onze notatie ‘*x*’) of in termen van momenta (in onze notatie ‘*p*’). Eén van die twee blijkt voldoende te zijn: het is mogelijk om, als je eenmaal een golffunctie hebt in termen van bijvoorbeeld ‘*x*’, die om te schrijven in termen van het andere coördinatenstelsel, hier ‘*p*’.

Het ontdekken van deze relatie, een van de grondbeginselen van de quantummechanica, was beslist niet eenvoudig. Toen de relatie eenmaal gevonden was, en men ging ‘spelen met golffuncties’, viel gelijk een interessant verband op tussen golffuncties beschreven in termen van plaats en in termen van impuls: ze zijn elkaars fouriergetransformeerde! De manier om een golffunctie om te schrijven van ‘*x*’- naar ‘*p*’-coördinaten is niets anders dan een fouriertransformatie. Het is dit verband waaruit, onder andere, Heisenbergs onzekerheidsrelatie valt af te leiden. Als je namelijk een golffunctie maakt die heel erg ‘gepiekt’ is op een bepaalde plaats, zal zijn fouriergetransformeerde automatisch heel ‘breed’ zijn: de impuls is dan slecht bepaald. Op de een of andere manier is de theorie van quantummechanica bekend met Fourier’s ideeën!

Gaussische golfpakketjes

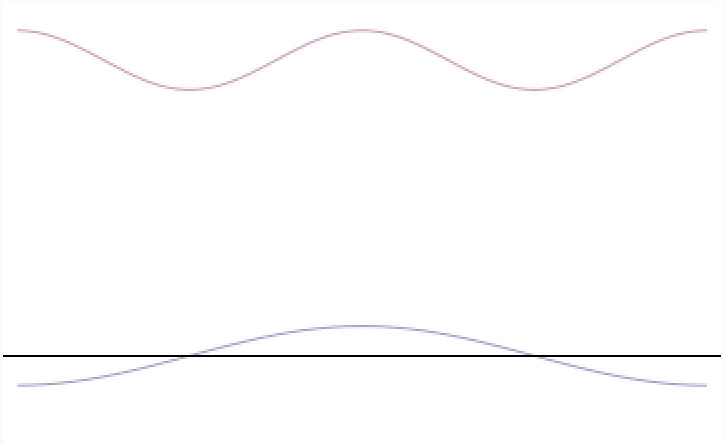
De vorige alinea was wellicht tamelijk abstract; het zal niet voor iedereen direct duidelijk zijn wat er nu precies bedoeld wordt met ‘de golffuncties voor plaats en impuls zijn elkaars fouriergetransformeerde’. Daarom nemen we een concreet voorbeeld om dit wat inzichtelijker te maken: Gaussische golfpakketjes. In de quantummechanica zijn de golffuncties waar we in geïnteresseerd zijn diegene die een oplossing zijn van de Schrödingervergelijking, een ingewikkelde wiskundige vergelijking die we voor de liefhebbers weergeven in afbeelding 3 hieronder.

$$i \hbar \frac{d}{dt} \Psi(x,t) = \left(- \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \right) \Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t=0) \propto e^{-\frac{x^2}{2a}}$$

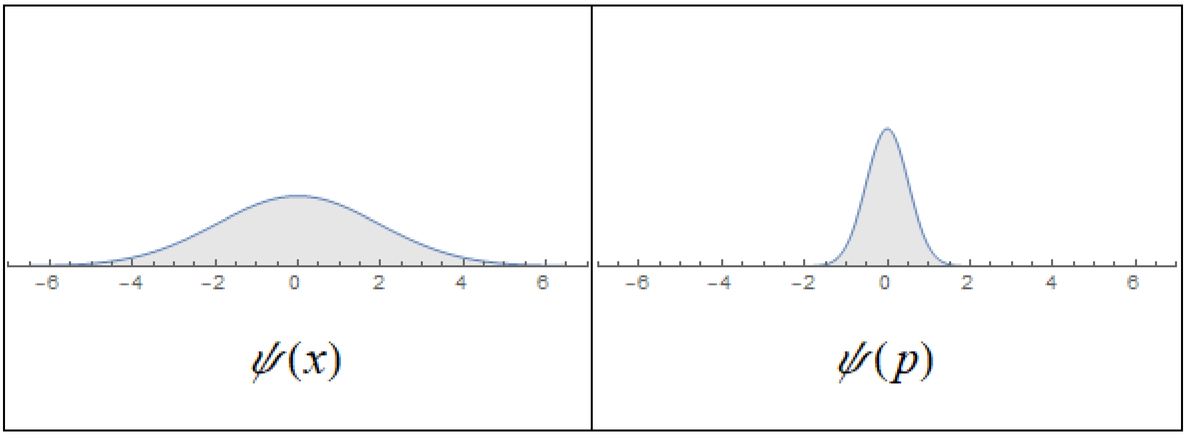
Afbeelding 3. De Schrödingervergelijking en een oplossing. De bovenste vergelijking is de Schrödingervergelijking. De tijdsafgelijde van een golffunctie (links) wordt bepaald door de impuls van het quantum (de p^2-term) en de potentiële energie (de *V(x)*-term). De onderste vergelijking geeft de Gaussische oplossing op tijdstip $t = 0$.

Het blijkt zo te zijn dat, als er geen krachten op een deeltje werken (*V(x)=0* in de bovenstaande afbeelding), een golffunctie op elk tijdstip de vorm van een zogeheten *Gaussische functie* kan hebben: een 'gladde piek' die, zoals ook weergegeven in afbeelding 3, een heel specifieke wiskundige beschrijving heeft. De naam komt van het feit dat deze golf een zelfde vorm heeft als Gauss' bel-curve die we ook kennen van bijvoorbeeld de normaalverdeling in de statistiek. Een golf als deze wordt ook wel een 'golfpakket' genoemd, en in die term ligt precies het verband met de fouriertransformatie: het blijkt heel nuttig te zijn om een quantummechanische golf te zien als een optelsom (een pakketje) van sinusvormige golven – een fourierreeks, dus! In afbeelding 4 is een voorbeeld te zien van hoe een Gaussisch golfpakketje opgebouwd is als een (oneindige) som van sinusvormigegolven.



Afbeelding 4. Gaussisch golfpakketje als oplossing voor de Schrödingervergelijking. Deze illustratie laat zien hoe verschillende staande golven bij elkaar opgeteld kunnen worden om als resultaat een golf te creëren in de vorm van een bel-curve. Afbeelding: Teply.

In afbeelding 4 hebben we langs de horizontale as nog geen eenheid geschreven. De afbeelding geldt dan ook in twee situaties: de golfpakketjes in die afbeelding kun je zien als golven in één van de twee coördinatenstelsels, ‘*x*’ of ‘*p*’. Wat gebeurt er nu als we dit golfpakketje gaan ‘vertalen’ naar het andere coördinatenstelsel? Dan moeten we dus weergeven uit welke sinusvormen het golfpakketje precies bestaat – het antwoord is de fouriergetransformeerde. Het antwoord voor het Gaussische golfpakketje zie je in afbeelding 5. Je kunt nu kiezen welke golffunctie je gebruikt om het deeltje te beschrijven: beide bel-curves in figuur 5 geven steeds *precies dezelfde golffunctie* weer. Het enige verschil tussen de twee is in welk coördinatenstelsel we het deeltje beschrijven, maar dit is een arbitraire keuze van degene die de functie opschrijft.



Afbeelding 5. Fouriertransformatie van een stilstaand golfpakketje. De fouriertransformatie van een stilstaand golfpakketje (dat wil zeggen, op tijdstip t = 0). Links is de golffunctie weergeven in het ‘x’-coordinatenstelsel. Rechts is dezelfde golffunctie getekend, maar dan in het fouriergetransformeerde ‘p’-coordinatenstelsel. Let op: de tijd is hier dus niet weergegeven; we zien links en rechts de verschillende vormen die een golfpakketje op één tijdstip kan hebben. Het is duidelijk te zien dat als de ene golffunctie erg gelocaliseerd is (dus een scherpe piek heeft, wat betekent dat het deeltje zich in een heel klein bereik rondom die piek moet bevinden), de spreiding in de impuls heel groot wordt (de piek in de rechter functie wordt heel erg breed, wat betekent dat de impuls van het deeltje een heel groot bereik heeft).Afbeelding 5. Fourier transformatie van een stilstaand golfpakketje (dat wil zeggen, op tijdstip t = 0). Links is de golffunctie weergeven in het ‘x’-coordinatenstelsel. Rechts is dezelfde golffunctie getekend, maar dan in het fouriergetransformeerde ‘p’-coordinatenstelsel. Let op: de tijd is hier dus niet weergegeven; we zien links en rechts de verschillende vormen die een golfpakketje op één tijdstip kan hebben. Het is duidelijk te zien dat als de ene golffunctie erg gelocaliseerd is (dus een scherpe piek heeft, wat betekent dat het deeltje zich in een heel klein bereik rondom die piek moet bevinden), de spreiding in de impuls heel groot wordt (de piek in de rechter functie wordt heel erg breed, wat betekent dat de impuls van het deeltje een heel groot bereik heeft).

In afbeelding 5 wordt het idee van het onzekerheidsprincipe goed zichtbaar. Het bijzondere is namelijk: ook in de impulscoördinaten vinden we wederom een Gaussische vorm voor het golfpakketje. Toch is de vorm niet precies hetzelfde: de golffunctie rechts wordt smaller als de golffunctie links breder wordt, en omgekeerd. Er blijkt hier sprake van een algemeen verband: hoe scherper de piek in de plaats wordt (oftewel; hoe beter we de plaats van het deeltje kunnen meten), hoe breder de overeenkomstige impulsverdeling wordt. Maken we de linkerpiek dus smaller en hoger, dan wordt de rechterpiek automatisch breder en lager – precies zoals Heisenbergs onzekerheidsrelatie voorspelt.

Meer fouriertransformaties

Fouriertransformaties zijn dus niet alleen van belang in onze klassieke wereld met al zijn golfverschijnselen. Ze spelen ook een fascinerende rol in de quantummechanica. In dit artikel heb ik dit geïllustreerd aan de hand van Heisenbergs onzekerheidsprincipe, dat je kunt bewijzen met behulp van fouriertransformaties. Dit is echter niet waar de toepassingen van fouriertransformaties eindigen. In het volgende artikel in deze serie artikelen gaan we een kijkje nemen bij toepassingen van fouriertransformaties in de quantummechanische beschrijving van heel veel deeltjes bij elkaar, en zien we nog enkele andere spannende toepassingen van Fouriers baanbrekende ideeën over golven.