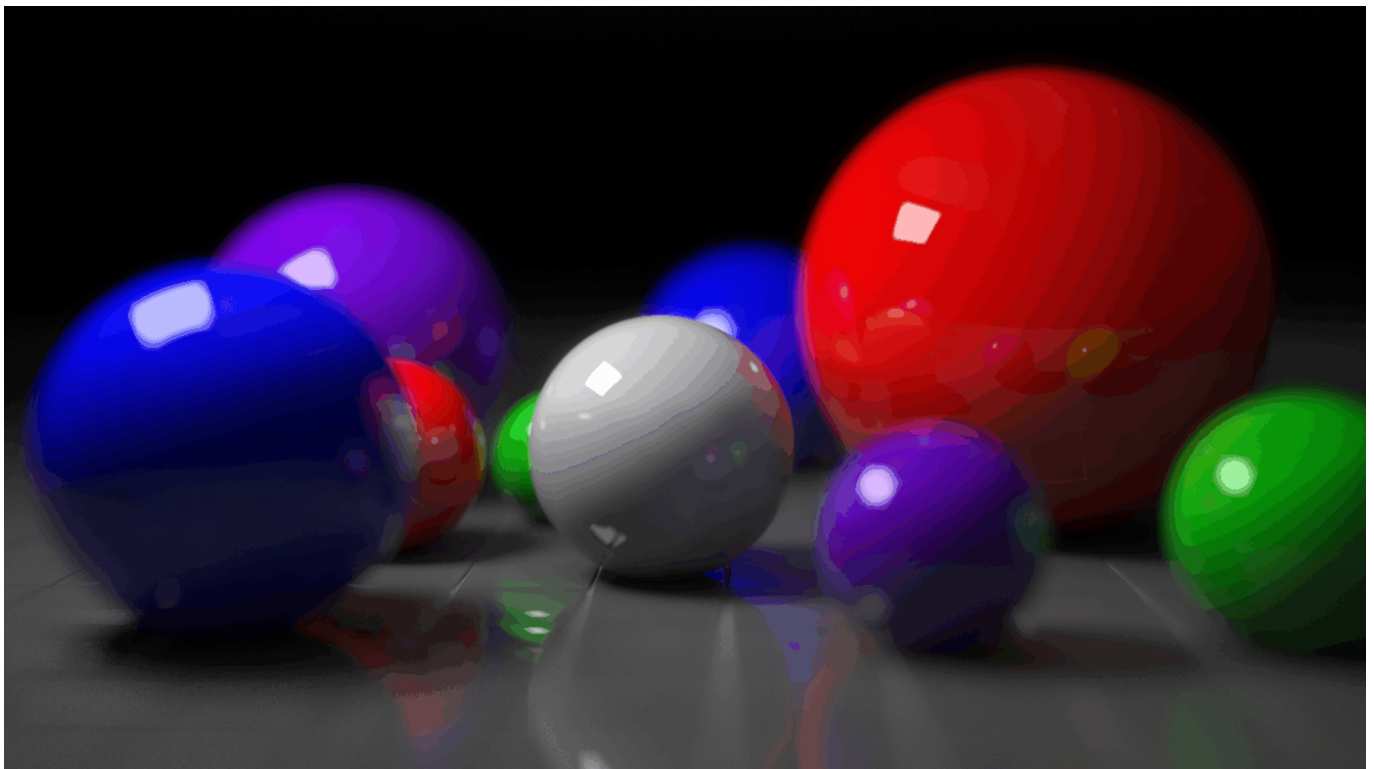


Golven, eikonalen en de quantumwereld

Golven nemen in de geschiedenis van de natuurkunde een centrale plaats in. In de twintigste eeuw begon de opbouw van de quantummechanica met het besef (als eerste door Louis de Broglie geformuleerd) dat golven en deeltjes twee kanten van hetzelfde verschijnsel zijn. Daarna is dit idee in een reeks onderwerpen met toenemende ingewikkeldheid succesvol toegepast en verder uitgebreid, met als resultaat dat het nu een echte hoeksteen van de theoretische natuurkunde vormt.



Ray tracing. Met behulp van de eikonaalvergelijking die in dit artikel besproken wordt kan ook aan straal-optica worden gedaan. Bron: [Wikimedia Commons](#).

Vroeger waren golven echter niet per se abstracte of wiskundige ideeën. Natuurkundigen hielden zich bezig met allerlei soorten golven, waartussen door de jaren heen langzaam

verbanden bleken te bestaan. Vooral de optica stond centraal, een wetenschap zo oud als de vroegste Griekse filosofen, waarvan een wetenschapper als Isaac Newton een groot deel van zijn leven de geheimen probeerde te ontrafelen. Deze pogingen en hun resultaten leidden in de twintigste eeuw tot volkomen onverwachte gevolgen.

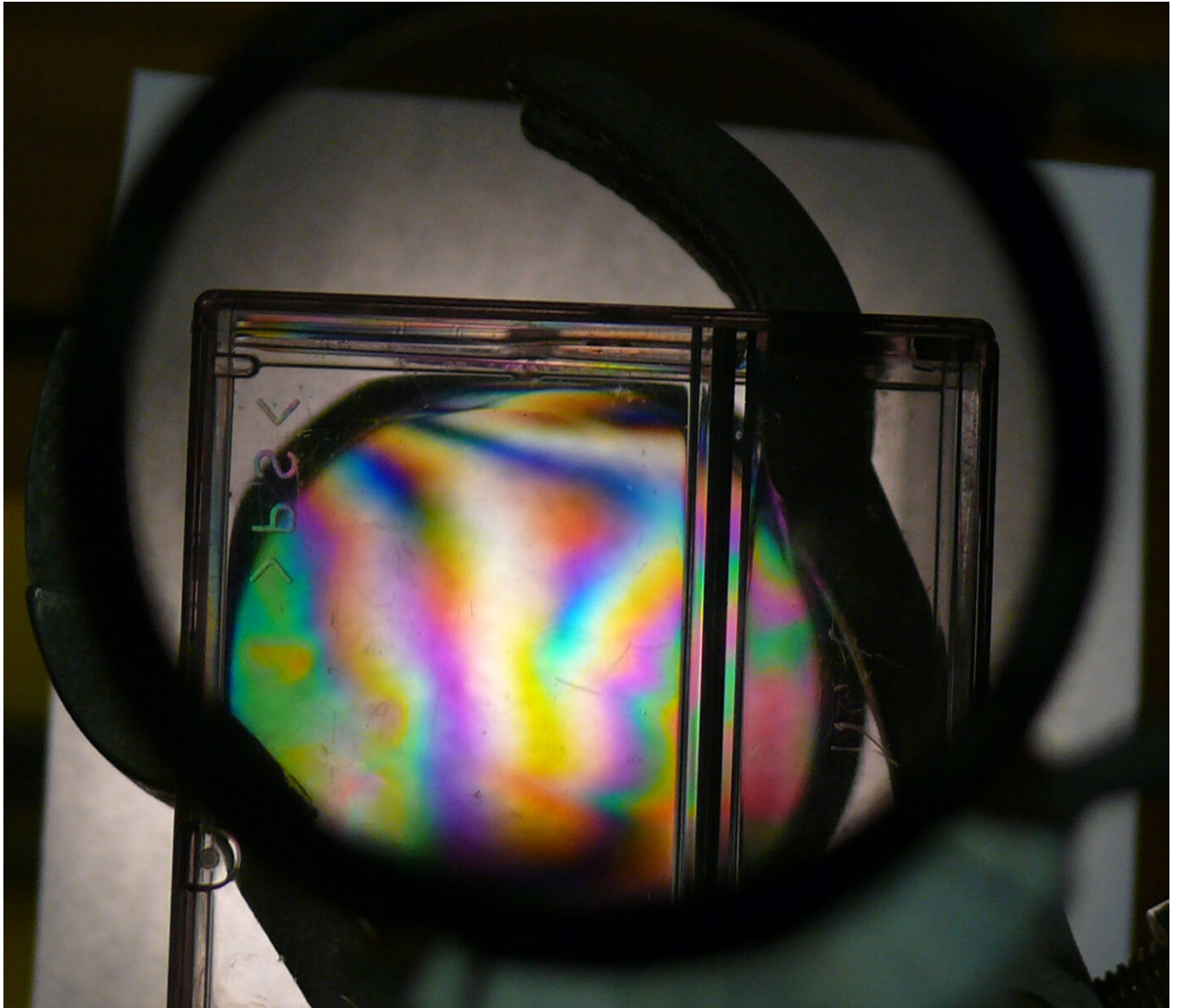
De eikonaalvergelijking

Golven voldoen in het algemeen aan een karakteristieke vergelijking, waardoor hun gedrag helemaal bepaald is. We kunnen die als volgt schrijven:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{c^2}{n^2(\textbf{r}, t)} \nabla^2 \phi,$$

waarin ϕ de uitwijking van de golf op tijdstip t en positie $\textbf{r}$ beschrijft. Centraal in deze golfvergelijking staat de relatie tussen de ruimte en de tijd. Aan de linkerkant staan twee afgeleiden naar de tijd, en aan de rechterkant twee naar de positie (door ∇ aangegeven). Deze zijn verbonden door de snelheid van de golf; voor licht schrijven we die snelheid in vacuüm als c . De echte snelheid hangt af van het materiaal waar het licht doorheen beweegt, en in de optica noemen we de relevante grootheid de brekingsindex, weergegeven als de n die je in de formule ziet.

Vaak wordt deze vergelijking in termen van een vaste frequentie of golflengte geschreven, alsof de brekingsindex altijd constant is, maar het hoeft niet zo eenvoudig te zijn! In meerdere gevallen die vooral voor natuurkundigen interessant zijn, kunnen materialen een ingewikkelde brekingsindex hebben die op verschillende posities of tijden varieert. Zo'n materiaal noemen we *dubbelbrekend* (Engels: *birefringent*), en het licht erin kan allerlei gedrag vertonen.



Een dubbelbrekend materiaal. Bron: [Wikimedia Commons](#).

Als we aannemen dat de brekingsindex langzaam varieert, kunnen we oplossingen van de golfvergelijking proberen te vinden die trillingen zijn. Die zien er dus zo uit¹:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t\}.$$

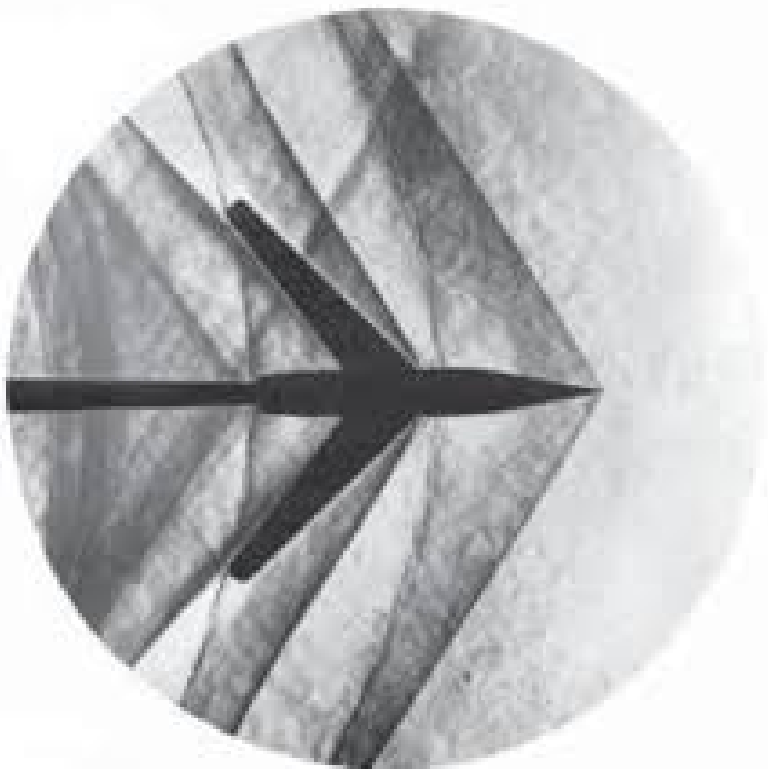
In dit geval is de golf dus helemaal bepaald door ψ , de *fase*, waarin al de afhankelijkheid van ruimte of tijd zit. Die fase heet de eikonaal (een woord van Griekse herkomst, met dezelfde oorsprong als 'icoon/icon' in het Nederlands of Engels), en vertelt hoe oscillaties afhankelijk van de brekingsindex veranderen.

Alles wat dus nodig is om de eikonaalvergelijking af te leiden is deze oplossing in de

algemene golfvergelijking weer in te vullen². Vaak varieert bovendien de brekingsindex niet in de loop van de tijd, met als gevolg dat de golven in de loop van de tijd als eenvoudige sinusgolven trillen. Dat zien we als we de tijd uit de vergelijking scheiden – een techniek die ook in andere contexten vaak gebruikt wordt. Daarom verandert de fase van deze golven – de eikonaal – in de loop van de tijd lineair. Het draait dus alleen om de afhankelijkheid van de eikonaal van de ruimte. In de meest bekende vorm van de eikonaalvergelijking is dat als volgt geschreven:

$$|\nabla u(\textbf{r})|^2 = n^2(x).$$

Zo'n eenvoudige vergelijking lijkt in eerste instantie misschien niet per se diepgaand. Toch kunnen we al verschillende contexten zien waaruit de eikonaalvergelijking kan ontstaan. Zelfs als we nog niets over quantummechanica wisten, konden we nog heel veel met alleen deze vergelijking bereiken. In de vloeistofdynamica kan je er bijvoorbeeld de reistijden van schokgolven mee beschrijven. Ray-tracing (zie de afbeelding boven dit artikel), een essentieel onderdeel van moderne computergraphics, wordt ook vaak via deze benadering gedaan. Algemener: wanneer er golven bij een verschijnsel betrokken zijn, kan de eikonaalvergelijking bijna altijd nuttig zijn.



De schokgolven van een supersonisch voorwerp.

Bron: NASA, via [Wikimedia Commons](#).

De Hamilton-Jacobivergelijking

Laten we nu een andere richting bekijken. [Acties](#) zijn misschien de meeste-gebruikte hulpmiddelen van de moderne natuurkundige. Ze onthullen nog altijd geheimen die moderne problemen kunnen verhelderen. Een prachtig voorbeeld is de *Hamilton-Jacobivergelijking*, waarven het belang en de diepe toepassingen in de quantummechanica nog altijd onderwerp van onderzoek zijn. Het idee hoort binnen het bredere onderwerp van de [variatierekening](#).

Twee vaak geziene formuleringen van die variatierekening zijn de Lagrangiaanse (die helemaal over posities gaat) en de Hamiltoniaanse (die ze met impulsen mengt, met veel voordelen). Vanuit de tweede, Hamiltoniaanse formulering kan echter nog een derde formulering ontstaan, als we de variatie van een actie S in de loop van de tijd berekenen. Het resultaat staat bekend als de Hamilton-Jacobivergelijking:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right).$$

Hierin is p de impuls van het systeem dat we bestuderen, en q de positie. De *Hamiltoniaan* H die centraal staat in Hamiltons beschrijving van de variatierekening komt ook hier voor, en die kun je weer in termen van de *Lagrangiaan* $\mathcal{L}$ schrijven, die in het Lagrange-formalisme centraal staat, als

$$H(q,p,t) = p \cdot \dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}, t).$$

Het grootste verschil met de andere formuleringen van de variatierekening is dat we nu een vergelijking (met afgeleiden van de eerste orde) hebben, waarin de actie nog onbekend is, terwijl de Hamiltoniaan wel gegeven is. Dit is niet de gebruikelijke volgorde! Een voordeel van deze formulering is dat behouden grootheden in deze context soms makkelijker te vinden zijn.

Het principe van Fermat

Andere artikelen op de QU-website ([1](#), [2](#)) hebben het Fermat-principe in detail besproken. Het is een formulering afkomstig uit de optica, waarin de bewegingen van lichtstralen ook weer

door een actie bepaald worden: een grootte die stationair moet blijven. Dit leidt tot een elegante kijk op de optica, waarin lichtstralen een zodanig pad (van A naar B) volgen dat ze er een minimale tijd over doen. Die tijd wordt ook hier bepaald door de brekingsindex van het materiaal:

$$\int_A^B n \cdot ds$$

Hierin betekent ds dat we langs het pad integreren dat de lichtstraal aflegt. Wat volgt er als we van dit nieuwe uitzicht gebruik maken om optica beter te begrijpen? In de eerste plaats is het relatief eenvoudig vast te stellen dat de *actie* in dit geval eigenlijk niets anders is dan de eikonaal. Als je daarna de Hamilton-Jacobivergelijking van zo'n actie schrijft, vinden we niets anders terug dan de eikonaalvergelijking!

Hier kun je even pauzeren en een belangrijke vraag stellen: waarom zou een nogal specifieke reeks aannames die vroeger tot de eikonaal-vergelijking hebben geleid, nu hetzelfde resultaat geven als een algemene benadering met de Fermat-actie? We hadden in het bovenstaande zeker geen aannames nodig over de snelheid van trillingen.

Dit is een essentieel punt. De Fermat-actie geeft ook een benaderende beschrijving van lichtstralen, die geen rekening houdt met golfverschijnselen. Deze beschrijving heet *straaloptica* – het is hoe je op de middelbare school aan lenzen leert rekenen. De straaloptica is slechts een limit van de volledige golfbeschrijving van het licht. Die benadering laat zien dat lichtstralen een dualiteit met golffronten hebben, want het Fermat-principe kan het een in het ander omrekenen. Maar de straaloptica is een benadering: die formulering legt niet alles vast. We zullen straks zien dat dit parallel loopt met de relatie tussen klassieke en quantum-natuurkunde.

De geschiedenis van de Schrödingervergelijking

Aan het begin van de jaren 1920 wilde Erwin Schrödinger, zoals de meeste natuurkundigen die toen op de stroom van de quantumrevolutie meedreven, iets bijdragen aan het groeiende begrip van golven en deeltjes. Inmiddels wisten wetenschappers, dankzij De Broglie, Bohr en Einstein, dat golven veel 'quantum'-gedrag hadden, en zich dus soms als deeltjes gedroegen. Vervolgens waren ze op zoek naar het omgekeerde: een beschrijving van deeltjes met een golfvergelijking. Vooral vanwege Einstein, die net zijn [theorieën van de relativiteit](#) had

gepubliceerd en daardoor een geheel nieuwe wereld van verschijnselen had ontdekt, dachten velen dat de juiste vergelijking relativistisch moest zijn.



Einstein en Bohr. Foto door Paul Ehrenfest in 1925, via [Wikimedia Commons](#).

Schrödinger kon zo'n *ansatz* (natuurkundigers gebruiken dit Duitse woord om een wiskundige uitdrukking aan te duiden die de basis vormt om een vergelijking of probleem op te lossen), wel opstellen. Maar als hij daarmee probeerde de energie-niveaus van waterstof te voorspellen – destijds de eerste en belangrijkste experimentele test voor iedere nieuwe theorie – gingen zijn berekeningen ineens de fout in³. Na experimenteren en besprekingen, keerde hij terug naar de bescheiden klassieke optica van lichtstralen, en daarmee kwam hij uiteindelijk tot een inzicht dat een van de belangrijkste hoekstenen van de natuurkunde zou worden.

Eerder gingen we vanaf een golfvergelijking naar een eikonaalvergelijking, maar nu gaan we in de tegenovergestelde richting. Het belangrijke inzicht van Schrödinger – hoewel we moeten opmerken dat hij de juiste vergelijking al eerder had opgeschreven, en dat zijn nieuwe manier van denken diende om de vergelijking te rechtvaardigen – was dat de klassieke Hamilton-Jacobivergelijking van een deeltje geïnterpreteerd kon worden als een eikonaalvergelijking voor zijn golffunctie. In formulevorm:

$$\left(\frac{1}{2m} |\nabla S(\textbf{r},t)|^2 + U(\textbf{r}) \right) = - \frac{\partial S(\textbf{r},t)}{\partial t} = E$$

Hierin is $U(\textbf{r})$ de potentiële energie, en E de totale energie van het deeltje. Toen hij zich de natuurlijke golfachtige ansatz voor een deeltje voorstelde, kon Schrödinger verder gaan naar de juiste vraag, namelijk: *Welke golfvergelijking zou een deeltje volgen zodat zijn eikonaalvergelijking eruitziet als de beschrijving van een klassiek deeltje?*

Een nauwkeurige, maar wel korte, berekening toont dat wat volgt leidt tot een bijbehorende eikonaal die precies een bewegend deeltje beschrijft⁴!

Ten slotte kijken we daarom naar [Schrödingers beroemde vergelijking](#), waarvan we het hierboven over de *semiklassieke limiet (of WKB-limiet)* hadden:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\textbf{r}) \right) \psi(\textbf{r},t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\textbf{r},t)}{\partial t}$$

Voordat we de betekenis van deze vergelijking beseften zouden we misschien (in het vrije geval, zonder potentiële energie) hierin alleen maar een versie van de *diffusie*-vergelijking hebben gezien: aan een kant staat een (niet twee!) afgeleide naar ruimte, aan de andere kant twee afgeleiden twee naar tijd, precies als in een diffusievergelijking. Dit gezichtspunt is in een aantal gevallen zeker nuttig en levert prachtige resultaten op, maar de aanwezigheid van het complexe getal i verandert – en verrijkt – de wiskunde die met de Schrödingervergelijking is geassocieerd. (Je kan zelfs zeggen dat een groot deel van de vreemdheid van de quantummechanica in die i zit.) De *semiklassieke* limiet die ik hier heb besproken – waarin $\hbar$ naar nul gaat – is in de meeste gevallen handiger dan de benadering als diffusievergelijking; bijvoorbeeld in de halfgeleiderfysica en de quantumoptica.

Een klein stukje interpersoonlijke geschiedenis eindigt dit verhaal. Schrödingers collega, Paul Debye, was enigszins verward toen hij naar Schrödingers ideeën luisterde. Debye wilde weten – misschien, zou ik denken, net zoals de meeste bachelor-studenten bij de eerste keer dat ze tegen de quantummechanica aanlopen – wat die golven in zijn collega's gedachten daadwerkelijk waren, en wat ze beschreven. Daarop moest Schrödinger reageren, en daarom moest hij al deze berekeningen bedenken. Soms zijn dus de makkelijkste vragen de belangrijkste!

Ten slotte wil ik opmerken dat, toen ik dit verhaal voor het eerst tegenkwam, me de manier waarop een achterwaartse blik vooruit kon kijken bijzonder opviel. Tegenwoordig is het heel makkelijk om naar moderne theoretische natuurkundige problemen te kijken als raadsels ver van ons bed, gescheiden van de realiteit en veel te abstract en wiskundig om met de illustere geschiedenis van ons onderwerp verbonden te zijn. Door dit verhaal kan ik me herinneren (en hopelijk jij ook!) dat bijna alles in ons dagelijkse onderzoek gebaseerd is op ontzettend mooie *empirische* ideeën, die nog altijd iedereen kunnen inspireren.

[1] Vaak schrijven we trillingen als sinussen en cosinussen, maar in termen van [complexe getallen](#) kun je ze ook schrijven als complexe e-macht met het imaginaire getal i in de macht.

[2] Je kunt hierbij de tweede afgeleide negeren vanwege onze aanname over de langzame variatie van de brekingsindex.

[3] Eigenlijk verscheen deze 'foute' vergelijking eerder al ergens anders in de theoretische natuurkunde, namelijk als de 'Klein-Gordonvergelijking' die elke student die het vak quantumveldentheorie volgt al snel tegenkomt – maar het belang daarvan kende Schrödinger destijds zeker nog niet!

[4] Om geen fouten te maken, moeten we aan het eind van deze berekening ook nog de 'klassieke limiet' nemen, waarin Plancks constante gelijk aan nul wordt gesteld. Daarbij verdwijnt een term.