Kareljan Schoutens
Instituut voor Theoretische Fysica (ITFA)
Universiteit van Amsterdam
Valckenierstraat 65, 1018 XE Amsterdam
kjs@science.uva.nl

World Year of Physics 2005

Dure ijsjes, strijd met het oneindige en de kunst van het tellen

In 1905 verbaasde Einstein de wereld met drie doorbraken in de natuurkunde: de speciale relativiteitstheorie, de theorie van de Brownse beweging (diffusie) en, in de voetsporen van Planck, de quantumtheorie van licht aan de hand van het foto-elektrisch effect. Nu, honderd jaar later, wordt dit herdacht met een wereldwijd natuurkundejaar, het World Year of Physics 2005. Dit WYP2005 biedt een goede aanleiding eens stil te staan bij het samenspel van wiskunde en natuurkunde in recente tijden. Kareljan Schoutens is hoogleraar theoretische fysica aan de Universiteit van Amsterdam. Hij verricht onderzoek op het gebied van de quantumtheoretische beschrijving van gecondenseerde materie.

Een wiskundige en een natuurkundige lopen elkaar in het *NEMO* tegen het lijf en besluiten een ijsje te nemen. Zegt de wiskundige: 'Hé wat gek, we hebben allebei hetzelfde ijsje en moeten samen € 4,75 betalen.' Waarop de natuurkundige: 'Tja, ijsjes zijn duur in het *NEMO*.' Grapjes van dit soort (er zijn er wel meer) schetsen een karikatuur van de mate waarin wiskundigen en natuurkundigen verschillen in hun manier van denken. Voor de één is de wiskunde een doel, voor de ander een middel. Waar de wiskundige tevreden is als het formalisme staat en de verbanden bewezen zijn, wil de natuurkundige getallen die zich laten vergelijken met waarnemingen van de natuur.

Toch is er sprake van een boeiend tweerichtingsverkeer tussen de beide wetenschappen. De wiskunde maakt deel uit van de taal waarin natuurkundigen wetten en wetmatigheden in de natuur formuleren. Wiskundige modellen geven een nauwkeurige beschrijving van wat er in de natuur gebeurt en wiskundige eenvoud en raffinement spelen vaak een rol in de speurtocht naar de fundamentele natuurwetten.

Verrassender, wellicht, is de 'tegenprestatie' van de natuurkunde: het blijkt vaak dat, wanneer een stuk wiskunde 'tot leven komt' in een concrete context in de natuurkunde, dit aanleiding geeft tot een verrijking van de wiskunde zelf. Deze boeiende thematiek gaat ver terug in de geschiedenis (op zijn minst tot Archimedes) en er is veel over gezegd en geschreven. Wigner repte over *The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences* [1]; een titel die door Dijkgraaf later luchtigjes werd omgedraaid [2].

Het standaardmodel voor de wisselwerking tussen wis- en natuurkunde werkt ongeveer als volgt. In de natuurkunde wordt een categorie natuurverschijnselen gevangen in een aantal fundamentele vergelijkingen (veelal: differentiaalvergelijkingen). De wiskunde biedt vervolgens het gereedschap waarmee de stap van natuurwet naar concreet verschijnsel gemaakt kan worden. Waar die wiskunde nog onvolledig is wordt, naar aanleiding van de concrete toepassing, een aantal puntjes op de i gezet.

And there was light

Een voorbeeld: Maxwells theorie voor elektromagnetisme laat zich samenvatten in vier gekoppelde partiële differentiaalvergelijkingen, die met gemak passen op een T-shirt (en dan liefst met de tekst: God said: '...' and there was light!). De oplossingen van deze vergelijkingen beschrijven elektriciteit, magnetisme en licht, maar ook radiogolven, microgolven and Röntgenstraling, kortom: de halve wereld. In deze situatie leggen 'harde' stellingen uit de wiskunde beperkingen op aan wat er in de natuurkunde kan gebeuren. Het is bijvoorbeeld onmogelijk (stelling van Wing, 1984) een zodanige configuratie van stromen en magneten te hebben dat ergens in de ruimte het magnetisch veld een locaal maximum heeft. Dit betekent dat het niet mogelijk is een 'magnetische val' te bouwen voor atomen met een positief dipoolmoment, die een kracht ondervinden in de richting van een toenemend magneetveld. (Een minimum kan wél; magnetische vallen voor atomen met een negatief dipoolmoment zijn daadwerkelijk gebouwd en gebruikt in de realisatie, in 1995, van een Bose-Einstein condensaat van ultrakoude atomen.)

Dat het niet altijd gemakkelijk is wiskundige stellingen juist toe te passen bewijst de geschiedenis van magnetische levitatie. Op grond van de stelling van Earnshaw (1842) werd het lange tijd voor onmogelijk gehouden een magneetje vrij te laten zweven in een magnetisch veld.

Pas in 1983 zag uitvinder Harrigan in dat voor een *roterend* magneetje deze stelling omzeild kan worden; hij bouwde vervolgens een prototype van wat nu bekend staat als het 'Levitron'. De aanhoudende verwarring over de werking van dit vernuftige apparaat is uiteindelijk weggenomen door Berry [3].

Figuur 1 Het *Levitron*: levitatie van een draaiend magneetje in een magnetisch veld

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	-1	1	3	1	-1	1	3	1	-1	1	3	1	-1	1	3
3	1	1	4	1	1	4	1	1	4	1	1	4	1	1	4	1
4	1	3	1	7	1	3	1	7	1	3	1	7	1	3	1	7
5	1	1	1	1	-9	1	1	1	1	11	1	1	1	1	-9	1
6	1	-1	4	3	1	14	1	3	4	-1	1	18	1	-1	4	3
7	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-27	1	1
8	1	3	1	7	1	3	1	7	1	43	1	7	1	3	1	7
9	1	1	4	1	1	4	1	1	40	1	1	4	1	1	4	1
10	1	-1	1	3	11	-1	1	43	1	9	1	3	1	69	11	43

Tabel 1 Witten index W_G voor een vierkant rooster met $M \leq 10, N \leq 16$. Een aantal vermoedens dringt zich op, bijvoorbeeld dat $W_G = 1$ zodra M en N geen gemeenschappelijke deler hebben.

Het natuurkundige halfduister

Er zijn veel meer voorbeelden te geven waarin het samenspel tussen wis- en natuurkunde in grote lijnen verloopt volgens het geschetste standaardmodel, maar vaak ook gaat het heel anders. Veel fysische systemen zijn zodanig complex dat directe berekeningen – ook numeriek – totaal onmogelijk zijn. Het is dan nodig benaderingen en effectieve beschrijvingen te ontwikkelen, die duidelijk maken wat het fysische gedrag is en die het mogelijk maken fysische grootheden te berekenen. In andere gevallen is de formulering van de fundamentele fysische theorie wiskundig gezien problematisch of onvolledig en is het zaak te roeien met de riemen die men heeft. Het interessante is dat juist in dit soort gevallen, waarin natuurkundigen in het halfduister proberen hun weg te vinden, paden worden ingeslagen die ook voor de wiskunde leiden tot vernieuwing.

Divergentie

Deze zaken spelen in hun volle omvang in moderne theorieën waarin quantummechanica wordt toegepast in de deeltjesfysica (quantumveldentheorie en snaartheorie) en in de gecondenseerde materie (quantum veel-deeltjestheorie). Op zichzelf is de formulering van quantummechanica vanuit de wiskunde niet problematisch. Er is een precies formalisme, waarin toestanden van een systeem corresponderen met vectoren in een lineaire ruimte en waarin waarneembare grootheden worden voorgesteld door lineaire operatoren. De eigenwaarden bepalen de mogelijke uitkomsten van een meting. De problemen ontstaan wanneer, zoals in een quantumveldentheorie, de quantumtheorie betrekking heeft op continue velden (zoals een stralingsveld), zodat het aantal vrijheidsgraden formeel oneindig groot is.

Vanwege de onzekerheidsrelatie van Heisenberg geeft elke vrijheidsgraad een positieve 'nulpuntsenergie' en het optellen van al die bijdragen leidt onherroepelijk tot divergenties. Anders gezegd: je probeert een fysische grootheid uit te rekenen, zoals de totale energie van het systeem, en je vindt oneindig.

Laten we om dit concreet te maken kijken naar de quantumtheorie voor een eenvoudig continu systeem: een trillende snaar. De hierboven genoemde vrijheidsgraden zijn in de dit geval de trillingswijzen (boventonen) van de snaar, die we kunnen aftellen met label n. De nulpuntsenergie van de n-de boventoon is evenredig met n en we vinden dus al meteen een totale energie evenredig met

$$1 + 2 + 3 + 4 + \ldots$$

De manier om met deze divergentie om te gaan is: we vervangen de som door ... $-\frac{1}{12}$. Deze mededeling is dubbel verrassend: allereerst gooien we een oneindig grote bijdrage weg en vervolgens laten we een welbepaald 'eindig deel' staan! Getaltheoretici hebben wellicht al herkend dat dit eindige deel overeenkomt met een 'ζ-functie voorschrift': de analytische functie

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}$$

heeft waarde $-\frac{1}{12}$ als $s \to -1$. In het natuurkundige verhaal is door andere argumenten bevestigd dat er sprake is van een goed gedefinieerde, eindige energie en dat $-\frac{1}{12}$ de juiste waarde is. De conclusie is dan ook dat 'quantum snaartheorie' in principe consistent geformuleerd kan worden!

De theorie van 'renormalisatie', het consistent wegpoetsen van oneindigheden, vormt het hart van de moderne quantumveldentheorie. Pas nadat 't Hooft en Veltman hadden laten zien hoe de theorie van elektrozwakke interacties gerenormaliseerd kan worden,kon die theorie gebruikt worden om fysische voorspellingen te doen. Ondanks de grote successen die geboekt zijn blijft de wiskundige formulering van quantumveldentheorie en, meer recent, snaartheorie, een zorgenkindje, onder andere omdat het in veel gevallen nodig is te werken met een storingsreeks die niet rigoureus onder controle is. Toch is dit bij uitstek een gebied waar fysische methoden, zoals het gebruik van de padintegraal, grote-N expansies, supersymmetrie, niet-commutatieve meetkunde, et cetera, tot belangrijke resultaten in de wiskunde hebben geleid.

Quantumtheorie in één dimensie

Bij de behandeling van quantum veel-deeltjessystemen ligt de wiskundige problematiek ietwat anders. Hier gaat het om quantumsystemen met een groot aantal deeltjes (bijvoorbeeld elektronen in een vaste stof), waarvoor de fundamentele vergelijkingen volledig bekend zijn. (Meestal zijn dat gekoppelde Schrödingervergelijkingen voor elk van de deeltjes.) Het probleem is dan om relevante meetbare grootheden (elektrische weerstand, soortelijke warmte, etc.) te berekenen. In zijn algemeenheid is dit probleem volstrekt ondoenlijk en zelfs als allerhande vereenvoudigingen worden gemaakt is het bijzonder lastig zinnige resultaten uit de theorie te distilleren. Dit vakgebied kent een geschiedenis van een kleine honderd jaar, maar nog steeds staat een groot aantal problemen wagenwijd open, en nog steeds worden fysici bij tijd en wijlen verrast door verschijnselen die 'niemand had zien komen', zoals het fractionele quantum Halleffect (1982) en supergeleiding bij 'hoge' temperatuur (1986).

Dit wil niet zeggen dat er geen resultaten geboekt zijn. Fysici hebben geleerd om met een combinatie van benaderende methodes, computerkracht en een gezonde dosis fysische intuïßtie vorderingen te boeken en er is een tamelijk verfijnd, maar onvolledig, begrip van het fysische gedrag dat in allerhande situaties verwacht wordt. Bovendien zijn er exacte resultaten. Al in 1931 formuleerde Bethe, die eerder dit jaar overleed, een methode, nu bekend als de *Bethe Ansatz*, waarmee specifieke quantummodellen in één ruimtelijke dimensie (zogenaamde quantumketens en quantumdraden) kunnen worden opgelost [4]. Er is een beperkt aantal exacte resultaten in hogere dimensies.

Het werk aan quantum veel-deeltjessystemen heeft een groot aantal belangwekkende ééntweetjes met de wiskunde opgeleverd. De Bethe Ansatz is nauw verbonden met een veelheid aan algebraïsche structuren, quantumgroepen met name. Meer in het algemeen geeft quantumfysica in één dimensie aanleiding tot uitbundige symmetriestructuren, zoals oneindig dimensionale affiene (Kac-Moody) Lie-algebras. Een specifieke categorie, die van de zogenaamde W-algebras, is door fysici ontwikkeld en pas later door wiskundigen bestudeerd. Al met al behoort de theorie voor oplosbare roostermodellen en veldentheorieën in één ruimtelijke dimensie tot de best ontwikkelde wiskundige formalismes in de theoretische natuurkunde. Het feit dat resultaten van deze theorieën van direct belang zijn voor een groot aantal experimentele systemen, zoals spin-ketens en nanobuisjes, houdt dit veld springlevend!

Mooie identiteiten

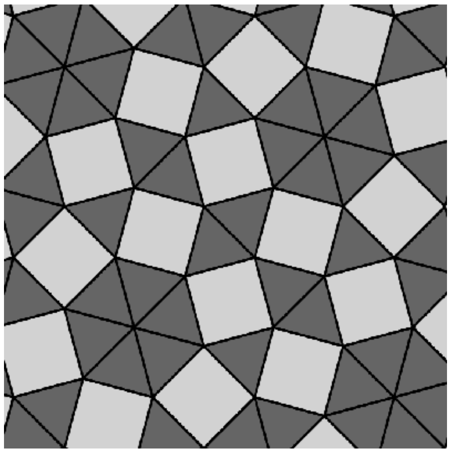
Bij de analyse van een fysisch systeem is er vaak meer dan één manier om tegen de dingen aan te kijken. Doorvertaald naar de wiskundige beschrijving kan dit leiden tot verrassende resultaten. Als voorbeeld de volgende identiteit, in 1894 voor het eerst bewezen door Rogers en soms aangeduid als één van de 'Rogers-Ramanujan identiteiten',

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n^2}}{(q)_n} = \frac{\sum_{n=-\infty}^{\infty}[q^{n(10n+1)} - q^{(5n+2)(2n+1)}]}{(q)_\infty},$$

waarin

$$(q)_n = \prod_{k=1}^{n}(1-q^k).$$

Bijna honderd jaar na dato kwam deze identiteit te voorschijn in de context van een specifieke quantumveldentheorie. Kort gezegd is de betreffende q-serie daar een voortbrengende functie voor het spectrum, dat wil zeggen de som over alle toestanden van q^{E_i}, met E_i de energie van de toestand met label i. De identiteit ontstaat nu door het spectrum op twee manieren te interpreteren; in het jargon is er sprake van een 'fermionische' formulering (het linkerlid) en een 'bosonische' formulering (het rechterlid). Het aardige is dat, toen dit verband eenmaal duidelijk was geworden, een groot aantal vergelijkbare identiteiten kon worden opgesteld, simpelweg door de redenering te herhalen voor andere maar gelijksoortige veldentheorieën [5].



Figuur 2 Voor een vierkant-driehoekbetegeling is een twaalfvoudige rotatiesymmetrie mogelijk (figuur: B. Nienhuis)

Combinatoriek en supersymmetrie

Aan het einde van dit stukje een paar woorden over de meest elementaire vorm van wiskunde: combinatoriek oftewel de kunst van het tellen. Bij de behandeling van een (klassiek of quantummechanisch) veel-deeltjesprobleem in de natuurkunde is een eerste stap vaak het aftellen van de mogelijke toestanden. Zodra deeltjes de ruimte om zich heen voor een deel afsluiten voor andere deeltjes wordt het tellen van alle mogelijke configuraties een ingewikkelde zaak, met interessante combinatorische aspecten.

Een klassiek voorbeeld is dat van *dimeren* op een graaf G met n punten. We schrijven $N_G(r)$ voor het aantal manieren om r dimeren te plaatsen op G (anders gezegd: om r lijnen van G te markeren zonder dat twee gemarkeerde lijnen in één punt bij elkaar mogen komen). De getallen $N_G(r)$ worden gecombineerd in het zogenaamde matching polynoom

$$P_G(x) = \sum_r (-1)^r N_G(r) x^{n-2r}.$$

In de natuurkunde is men vooral geïnteresseerd in gevallen waarin G een rooster is in $D = 1,2$ of 3 dimensies. Zodra $D > 1$ zijn de berekeningen uiterst lastig. Een klassiek resultaat is dat van Kasteleyn uit 1962 [6] die voor een vierkant rooster het aantal dimeeroverdekkingen (met de hoogst mogelijke waarde van r) exact berekende. Hij gebruikte hiervoor een 'fysische' methode, waarin fermionen (deeltjes die voldoen aan het Pauli uitsluitingsprincipe) een belangrijke rol spelen. Een iets algemenere grootheid is

$$Q_G(x) = \sum_r (-1)^r M_G(r) x^{n-r},$$

waarin $M_G(r)$ het aantal manieren is om r punten van G te markeren zonder dat twee gemarkeerde punten door een lijn van G verbonden worden. De waarde voor $x = 1$,

$$W_G = Q_G(1) = \sum_r (-1)^r M_G(r),$$

heeft een interpretatie als Witten index voor een supersymmetrische quantumtheorie. Deze theorie beschrijft fermionen die op G kunnen bewegen en elkaar daarbij afstoten. Numeriek werk [7] heeft geleid tot een aantal opmerkelijke vermoedens voor de Witten index op een vierkant rooster van M bij N roosterpunten met periodieke randvoorwaarden, (zie tabel 1). Van een wiskundig bewijs ontbreekt elk spoor.

Andere interessante telproblemen duiken op in de analyse van wanordelijke betegelingen. Voor welbepaalde sets van tegels (bijvoorbeeld een vierkant en een gelijkzijdige driehoek met gelijke zijde) zijn er velerlei manieren om een deel van het vlak te betegelen. Het is dan interessant het aantal manieren te berekenen en zo de 'entropie' (per oppervlak) van de betegelingen te bepalen. In een aantal gevallen (zoals dat van vierkant/driehoek) is het mogelijk gebleken deze berekening exact te doen door gebruik te maken van de *Bethe Ansatz* [8]. Deze berekeningen zijn nauw gerelateerd aan de analyse van quasi-kristallen die met dezelfde tegels gevormd kunnen worden. Voor de vierkant/driehoektegels is hierbij een twaalfvoudige rotatiesymmetrie mogelijk, een symmetrie die in de klassieke kristallografie verboden is!

De moraal

De voorbeelden die hier de revue passeerden zijn enigszins willekeurig gekozen en inwisselbaar voor andere. De grote lijn van het stuk is dat echter niet. Zonder de wiskunde valt de natuurkunde stil en omgekeerd biedt de concrete context van natuurkundige systemen de wiskunde steeds weer nieuwe aanknopingspunten. *An eternal golden braid.*

Referenties

1 E.P. Wigner, *The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences*, in Comm. in Pure and Applied Math., vol. 13, No. I (February 1960).

2 R.H. Dijkgraaf, *De onredelijke effectiviteit van de fysica in de moderne wiskunde*, Ned. Tijd. v. Nat. 62/11 (1996) 255.

3 M.V. Berry, *The Levitron: an adiabatic trap for spins*, Proc. Roy. Soc. Lond. 452 (1996) 1207.

4 H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, Z. Phys. 71 (1931) 205.

5 R. Kedem, B.M. McCoy and E. Melzer, *The sums of Rogers, Schur and Ramanujan and the Bose-Fermi correspondence in $1+1$-dimensional quantum field theory*, in Recent Progress in Statistical Mechanics and Quantum Field Theory, ed. P. Bouwknegt *et al.*, World Scientific, (Singapore 1995) 195.

6 P.W. Kasteleyn, *Dimer Statistics and Phase Transitions*, Jour. Math. Phys. 4 (1963) 287.

7 P. Fendley, K. Schoutens and H. van Eerten, *Hard squares at negative activity*, Jour. Phys. A: Math. Gen. 38 (2005) 315.

8 zie bijvoorbeeld: J. de Gier and B. Nienhuis, *Integrability of the square-triangle random tiling model*, Phys. Rev. E 55 (1997) 3926; ibid., *The exact solution of an octagonal rectangle-triangle random tiling*, Jour. Stat. Phys. 87 (1997) 415.