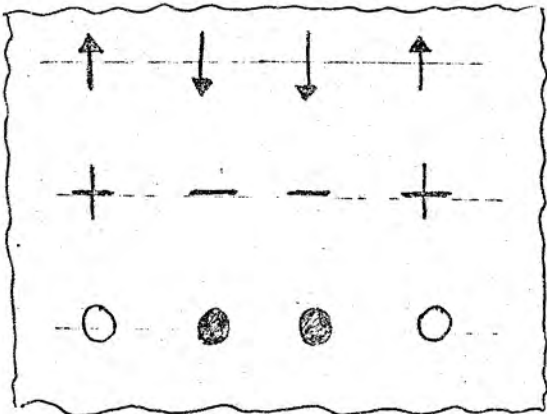


en één-dimensionale

Quantumsystemen



scriptie

J.H.H. Perk

(1974)

INHOUDSOPGAVE

Algemene inleiding	1
Hoofdstuk I. Bose-gas met delta-repulsie	6
§ 1 Definitie van het probleem	6
§ 2 Speciale gevallen	7
§ 3 Het probleem voor eindige c	10
§ 4 Oplossing m.b.v. de Bethe-Ansatz	12
§ 5 Spectrale karakterisering van de oplossingen	16
Hoofdstuk II. Heisenberg-keten en quantumroostergas als randwaardeproblemen	27
§ 1 Inleiding	27
§ 2 Heisenberg-keten	28
§ 3 Het quantumroostergas	38
Hoofdstuk III. Oplossing van het Heisenberg- en quantumroostergas- probleem m.b.v. de Bethe-Ansatz	45
§ 1 De Bethe-Ansatz	45
§ 2 Het spectrum van k -waarden	47
§ 3 Het speciale geval $\Delta = 0$	48
§ 4 Volledigheid van de Bethe-Ansatzoplossingen voor $\Delta \neq 0$	52
§ 5 Eigenschappen van de grondtoestand voor $\Delta \neq 0$	54
§ 6 De grondtoestand voor een oneindige keten	56
§ 7 De verschilkern-transformatie	61
§ 8 De oplossing van het algemene geval	68
§ 9 Analytische eigenschappen van de energie	74
Hoofdstuk IV. Thermodynamica van het Bose-gas met delta-interactie	80
§ 1 Inleiding	80
§ 2 Coarse graining en dichtheidsfuncties	81
§ 3 Thermodynamica	91
Appendix	102
Literatuur	104

BETHE-ANSATZ EN EEN-DIMENSIONALE QUANTUMSYSTEMEN

Algemene inleiding.

a) Exact oplosbare modellen.

In het algemeen kan men in de statistische mechanica, uitgaande van een model voor een veeldeeltjessysteem, alleen resultaten krijgen door grove benaderingen. Het is dan zelfs nog een open vraag of de resultaten, al is het maar kwalitatief, met de werkelijkheid overeenstemmen.

Om de benaderingen op hun juistheid te toetsen en om algemene, vaak kwalitatieve, uitspraken te kunnen doen, is het zinvol om exact oplosbare modellen te onderzoeken. Zo heeft de exacte oplossing van het twee-dimensionale Isingmodel door Onsager in 1944 [1] pas geleerd dat alle tot dan toe gebruikte benaderingsmethoden een kwalitatief onjuist beeld gaven in de directe omgeving van de faseovergang.

Naast modellen zonder interactie en modellen met interactie via een gemiddeld veld, heeft men nog slechts voor enkele modellen exacte oplossingen gevonden. Deze modellen zijn vrijwel alle discrete roostersystemen met "naaste buur-interactie".

Het standaardvoorbeeld is het reeds genoemde Isingmodel, dat een systeem is van magneetjes op een rooster die zich in twee toestanden kunnen bevinden, n.l. spin up of spin down. De energiebijdragen van paren nabuurmagneetjes zijn $-J$ resp. $+J$, al naar gelang de magneetjes parallel of antiparallel gericht zijn. Dit model heeft een groot aantal vertalingen en generalisaties die op één- en twee-dimensionale roosters exact zijn te behandelen. Wij noemen hier slechts het ijsmodel van Lieb uit 1967 [2]. De geijkte methode om de partitiefunctie te berekenen is, om het systeem op te delen in rijen en de partitiefunctie uit te drukken in de zogenaamde transfermatrix, die de overgangswaarschijnlijkheid geeft tussen de toestanden die in twee opeenvolgende rijen van het rooster gespecificeerd zijn. Omdat de partitiefunctie het spoor is van een hoge macht van die transfermatrix, hoeven wij dan

slechts de grootste eigenwaarde van deze matrix te bepalen.

Naast het klassieke Isingmodel vormen de één-dimensionale quantumsystemen met nabuurinteractie een belangrijke klasse van exact oplosbare modellen. Het meest bekende model van dit type is het één-dimensionale Heisenberg-model [3]. Dit is een quantum-analoon van het één-dimensionale Ising-model, waarbij de spins nu het karakter van vectoroperatoren hebben, met niet-commuterende componenten. Het berekenen van de grondtoestand van het één-dimensionale quantumstelsel is van dezelfde moeilijkheidsgraad als het berekenen van de maximale eigenwaarde van de transfermatrix van een twee-dimensionaal klassiek probleem. Er zijn hier zelfs vertalingen gegeven [4] van twee-dimensionale klassieke systemen naar één-dimensionale quantumsystemen, hoewel deze nog niet volledig begrepen zijn.

b) Motivatie en doelstellingen van deze scriptie.

De scriptie die hier voor u ligt gaat over een bepaalde methode waarmee exacte oplossingen van veeldeeltjesproblemen gevonden zijn, n.l. de zgn. Bethe-Ansatz. Deze methode berust op het postuleren voor de betreffende eigenwaardeproblemen van een bepaalde vorm voor de eigenvectoren en het aanpassen van een aantal vrije parameters die in deze eigenvectoren voorkomen. Op één van de twee categorieën modellen waarvoor deze methode werkt, n.l. op de toepassingen in 2-dimensionale klassieke modellen, zullen wij hier niet ingaan aangezien deze zijn behandeld in de scriptie van A. Gaaff [5]. Het doel van deze scriptie is inzicht te krijgen, hoe en waarom de Bethe-Ansatz werkt in de één-dimensionale quantummodellen met nabuurinteractie.

Er zijn twee soorten resultaten die men kan verkrijgen door toepassing van de Bethe-Ansatz op deze modellen, n.l.:

- 1^o De eigenschappen die kunnen worden afgeleid uit de eigenvector en de bijbehorende eigenwaarde van de grondtoestand en
- 2^o De thermodynamische eigenschappen van het model bij een eindige temperatuur,

$T > 0$. Deze laatste eigenschappen hangen niet slechts van de grondtoestand, maar van het complexe spectrum van toestanden af.

Voor modellen die met de Bethe-Ansatz oplosbaar zijn worden alle eigen-toestanden gekarakteriseerd door een set van één-deeltjes-golfvectors. Hierdoor wordt het mogelijk de thermodynamische eigenschappen uit te drukken in een dichtheidsfunctie die het aantal "quasideeltjes-toestanden" met een bepaald impuls weergeeft.

Historisch gezien is de "Bethe-Ansatz" het eerste gebruikt als trial golf-functie in het Heisenberg-model door Bloch in 1930 [6]. Bethe heeft in 1931 [7] ingezien dat de Ansatz-golffunctie in het één-dimensionale geval de exacte oplossing van het Schrödingerprobleem geeft. Zijn resultaat is hierna door verscheidene schrijvers gegeneraliseerd [8], waarbij vooral de artikelen van Yang en Yang [9] genoemd moeten worden die Lieb [2] inspireerden tot de oplossing van het klassieke twee-dimensionale ijsprobleem.

Wij zullen in hoofdstuk I beginnen met het één-dimensionale continue Bose-gas met een paar-interactie, gegeven door een delta-functie-potentiaal ter sterkte C . Dit model, dat is ingevoerd door Lieb en Liniger [10], is namelijk intuïtief iets gemakkelijker te begrijpen dan het Heisenberg-model; bovendien blijven in dit model alle grootheden reëel.

De Bethe-Ansatz kunnen wij nu als volgt begrijpen. De deeltjes zijn bijna overal vrij, dus de golffunctie bestaat in eerste instantie uit een vlakke golf, die het product is van één-deeltjes vlakke golven. Vanwege de delta-repulsie kunnen de deeltjes elastische puntbotsingen uitvoeren, waarbij dan de impulsen van de twee betreffende deeltjes worden uitgewisseld. De totale golffunctie moet dus een lineaire combinatie zijn van al die meer-deeltjes vlakke golven die ontstaan door de golfgetallen op alle mogelijke manieren te permuteren over de deeltjes. Deze vorm van de golffuncties noemt men de Bethe-Ansatz.

Dit zou suggereren dat wij het probleem het beste kunnen oplossen door Fourier-transformatie. Dit is echter niet het geval, omdat wij ook nog de Bose-

symmetrie moeten opleggen. Het blijkt dat de coëfficiënten in de Bethe-Ansatz een sprong mogen maken zodra twee deeltjescoördinaten gelijk worden. Om de coëfficiënten volledig vast te leggen gaan wij ons dan ook beperken tot dat gebied in de coördinatenruimte, waarbij de deeltjes in het vat geordend zijn in een vaste volgorde. Ons Schrödinger-probleem gaat door deze beperking over in een vrije Schrödinger-vergelijking met aansluitvoorwaarden voor de situaties waar twee deeltjescoördinaten samenvallen. Hierbij wordt de rol van de interactie overgenomen door de aansluitcondities. De golfgetallen die als vrije parameters optreden in de golf functie worden bepaald door het opleggen van periodieke randcondities.

In hoofdstuk II zullen wij het Heisenberg-model en het daarmee equivalente quantumroostergas vertalen in een analoog randwaardenprobleem. Het genoemde Bose-gas met delta-interactie blijkt te kunnen worden opgevat als een speciaal geval van de continuüm limiet van een quantumroostergas. Het quantumroostergas is een model voor een Bose-gas met nabuur-interactie op een discreet rooster. Bij het gewone klassieke roostergas beperkt men zich tot configuratieve energiebijdragen. In het quantumroostergas neemt men, rekening houdend met de onzekerheidsrelaties van Heisenberg, ook een kinetische energiebijdrage op in de Hamiltoniaan n.l. een term evenredig met de som van tweede differentiequotiënten van de golf functie. Het belang van dit model ligt vooral hierin, dat het een link legt tussen Bose-gassen enerzijds en magnetische systemen anderzijds. Verder is het discretiseren een belangrijk startpunt bij numerieke berekeningen.

In hoofdstuk III behandelen wij de grondtoestand van het quantumroostergas in de thermodynamische limiet gebruikmakend van de methode van Yang en Yang [9]. De niet-analyticiteiten van de energie als functie van de interactiesterkeparameter Δ zijn vooral interessant, omdat zij eenduidig corresponderen met het optreden van faseovergangen in het Ising-model. Op dit punt wordt nader ingegaan in de scriptie van Gaaff [5].

Tenslotte bestuderen wij in hoofdstuk IV de thermodynamische eigenschappen van het Bose-gas met delta-repulsie, die voor het eerst is gegeven door Yang en

Yang [11]. Uitgangspunt van de ^{te}behandeling is een conclusie gevonden in hoofdstuk I, n.l. dat bij variëren van de interactiesterkte C van een Bose-gas met delta-interactie van 0 naar ∞ , de eigenfuncties van het systeem overgaan van die voor een ideaal Bose-gas naar een set functies die in feite de vorm hebben van de eigentoestanden van een ideaal Fermi-gas (met $c = 0$). Hiervan gebruikmakend kunnen wij voor alle waarden van de interactiesterkte c de toestanden karakteriseren met een set ééndeeltjes-golfgetallen, die het zelfde waardenbereik hebben als die van een ideaal Fermi-gas. Uitgaande van een beschrijving van de toestanden van het systeem d.m.v. de bezettingsgetallen van deze "ééndeeltjes Fermion niveaus", kunnen wij de grote partitiefunctie van het Bose-gas met delta-interactie uitdrukken als een functionele integraal over alle mogelijke dichtheidsfuncties. Deze integraal kan dan in zadelpuntsapproximatie uitgerekend worden, wat leidt tot de toestandsvergelijking. Men vindt weliswaar in dit model geen faseovergang, maar de methode is zonder meer toepasbaar op andere modellen waarop de Bethe-Ansatz van toepassing is en biedt als zodanig een goede illustratie van het quasi-deeltjes-beeld van Landau [12].

Een aantal vergelijkingen uit dit hoofdstuk lijken te suggereren dat m.b.v. generalisatie van de Bethe-Ansatz-methode mogelijk een grotere klasse van modellen zal kunnen worden opgelost (zie b.v. [13]). Hier èn in het verband tussen de één- en twee-dimensionale modellen liggen punten voor verder onderzoek.

Hoofdstuk I. Bose-gas met delta-repulsie.

§ 1. Definitie van het probleem.

We beschouwen nu het één-dimensionale Schrödinger-probleem voor n Bose-deeltjes met coördinaten x_1, x_2, \dots, x_n in een domein:

$$D = \{ 0 \leq x_i \leq L ; i = 1, \dots, n \} \quad (1)$$

met periodieke randcondities ($0 \equiv L$), wisselwerkend via een repulsieve delta-potentiaal:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + 2\gamma \sum_{1 \leq i < j \leq n} \delta(x_i - x_j) \cdot f(x_1, \dots, x_n) = E f(x_1, \dots, x_n) \quad (2)$$

$$\gamma = \frac{\hbar^2}{2m} c \geq 0.$$

De toegestane golf functies zijn continue, periodieke, symmetrische functies die voldoen aan het eigenwaardeprobleem (2) en aan de eis

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_{P(1)}, x_{P(2)}, \dots, x_{P(n)}) \quad (3)$$

waar

$$P \equiv \{ P(1), P(2), \dots, P(n) \} \quad (4)$$

een permutatie van de nummers van de n deeltjes voorstelt. We leggen als randcondities op de eis

$$f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n + L) = f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n) \quad (5)$$

We beperken ons tot het repulsieve geval, want in het attractieve geval - met negatieve γ - zouden de deeltjes het liefst op dezelfde plaats zitten, zodat dan bijvoorbeeld de grondtoestandsenergie kwadratisch met het deeltjesaantal zou veranderen:

$$E_0(n) \sim -n^2 \quad (\text{voor } n \rightarrow \infty, \gamma < 0)$$

We krijgen dan geen stabiel systeem, omdat de deeltjes dan bij eindige temperaturen niet over het gehele vat verspreid zullen zijn.

We merken op dat het probleem (2) vereenvoudigd wordt door de schaaltransformatie:

$$\left. \begin{aligned} x'_i &= \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \cdot x_i \\ E' &= \frac{\hbar^2}{2m\gamma^2} \cdot E \\ L' &= \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \cdot L \\ f'(x'_1, \dots, x'_n) &= \left(\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\right)^{-\frac{n}{2}} \cdot f(x_1, \dots, x_n) \\ \delta(x') &= \delta(cx) = \frac{\hbar^2}{2m\gamma} \delta(x) \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Het is dus handiger i.p.v. met γ te werken met $c = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}$ (2a)

We zien dan dat voor eindige c het probleem zich herleidt tot een geschaald probleem met $c = 1$. Er zijn dus eigenlijk slechts drie gevallen te onderscheiden: $c = 0$, $0 < c < \infty$ en $c = \infty$.

§ 2. Speciale gevallen.

a. Het geval $c = 0$.

Het eenvoudigste is het geval $c = 0$. We hebben dan vrije bosonen, dus we kunnen een volledige set genormeerde toestanden krijgen door producten van één-deeltjesgolffuncties te symmetrizeren en dan te normeren

$$f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_P \exp\left[i \sum_{j=1}^n k_j x_{P(j)}\right] = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_P (+1)^P \exp\left[i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x_j\right] \quad (7)$$

In (5) zijn alle golfgetallen k_j veelvouden van $\frac{2\pi}{L}$ (onderling gelijke golfgetallen zijn toegestaan). De energie-eigenwaarde is:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n k_j^2 \quad (8)$$

b. Het geval $c = \infty$.

Voor waarden van $c \neq 0$ moeten de tweede afgeleiden van de golffunctie f in verg. (2) zich gedragen als delpieken, vermenigvuldigd met eindige coëfficiënten c_{ij} , als twee coördinaten x_i en x_j gelijk worden. De eerste afgeleiden mogen namelijk alleen sprongen van eindige grootte c_{ij} bevatten, als gevolg van de eis dat de waarschijnlijkheidsdichtheid en de waarschijnlijkheidsstroomdichtheid eenwaardig en eindig moeten zijn en maar geleidelijk mogen veranderen.

We beschouwen nu eerst ons Schrödinger-probleem voor $c = \infty$. Dan zien we dat de potentiële energie-termen alleen kunnen worden gecompenseerd door de kinetische energitermen, wanneer de golffunctie nul is zodra twee coördinaten x_i en x_j gelijk worden. *) In dit geval is ons probleem nauw verwant met het Schrödinger-probleem voor n vrije fermionen. Immers, daar we in één dimensie werken, kunnen we een deelgebied van D beschouwen:

$$D_0 = \{ 0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq L \} \quad (9)$$

geheel begrensd door randen waar twee of meer coördinaten gelijk zijn. De golffunctie f in het gehele domein D is dan bepaald door zijn waarden in het gebied D_0 , plus de symmetrie-eigenschap:

$$f(x_{p(1)}, x_{p(2)}, \dots, x_{p(n)}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (3)$$

waar $0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq L$ een punt is in het domein (7) en P een willekeurige permutatie, zodat:

*) $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} \sim \frac{\partial^2 f}{\partial x_j^2} \sim c_{ij} \cdot \delta(x_i - x_j)$ Dus uit (2): $-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot 2c_{ij} \cdot \delta(x_i - x_j) + 2 \frac{\hbar^2}{2m} \cdot c \delta(x_i - x_j) \cdot f(x_1, \dots, x_n) \sim 0$
 (als $x_i \sim x_j$) \uparrow \uparrow \uparrow
 eindig $=$ ∞ * 0 ($x_i = x_j$)

$$P \{x_i\} = \{x_{P(i)}\} \quad (4)$$

We kunnen ook een fermiongolffunctie g definiëren volgens:

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \text{voor } \{x_i\} \in D_0 \quad (10a)$$

$$\begin{aligned} \text{en } g(x_{P(1)}, x_{P(2)}, \dots, x_{P(n)}) &= (-1)^P \cdot g(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &= (-1)^P \cdot f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \text{voor } P \{x_i\} \notin D_0 \\ &\quad (\{x_i\} \in D_0) \end{aligned} \quad (10b)$$

Dit kan dankzij het feit dat f bij gelijkheid van twee of meer coördinaten nul wordt. De symmetrische knikken die de functie $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ had in de punten waar twee coördinaten gelijk zijn, zijn in de functie $g(x_1, x_2, \dots, x_n)$ volledig geëlimineerd. We behoeven nu nog slechts een continu differentieerbare volledig antisymmetrische golffunctie g te zoeken, die voldoet aan de vrije vergelijking:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 g}{\partial x_i^2} = E \cdot g(x_1, \dots, x_n) \quad \text{voor } (x_1, x_2, \dots, x_n) \in D \quad (11)$$

Als volledige set oplossingen vinden we de determinant-golffuncties die we uit één-deeltjes vlakke golven kunnen samenstellen:

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_P (-1)^P \exp \left[i \sum_{j=1}^n k_j x_{P(j)} \right] = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_P (-1)^P \exp \left[i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x_j \right] \quad (12)$$

met golfgetallen k_j die uit de periodieke randcondities volgen, n.l. even of oneven veelvouden van $\frac{\pi}{L}$ al naar gelang n oneven of even is. De oplossingen (12) zijn alleen zinvol als alle golfgetallen onderling ongelijk zijn. De energie wordt weer gegeven door (6). We vinden dus dat de golffunctie voor het Boson-systeem met delta-interactie van sterkte $c = \infty$ gegeven wordt door de vrije Fermion golffunctie (12) op het gebied D_0 , dus $f(x_1, x_2, \dots, x_n) = g(x_1, x_2, \dots, x_n)$

met daarbuiten symmetrische en continue uitbreiding tot in het gehele domein D .

§ 3. Het probleem voor eindige c .

We willen nu ook voor willekeurige eindige positieve c het eigenwaardeprobleem (2) oplossen. We proberen hiertoe een interpolatie tussen de oplossingen (5) en (12), d.w.z. een lineaire combinatie van producten van vlakke golven die via permutatie van de golfgetallen uit elkaar ontstaan. Hierbij laten we de coëfficiënten en de golfgetallen in eerste instantie volledig vrij. Dit is de Bethe-Ansatz:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_P a(P) \cdot \exp \left[i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x_j \right] \quad (13)$$

op D_0

We nemen dit in eerste instantie aan in het gebied D_0 . De volledige golffunctie op het gehele gebied D volgt weer door continue symmetrische uitbreiding m.b.v. (8). We willen allereerst de coëfficiënten $a(P)$ in de golfgetallen uitdrukken en deze vervolgens uit de periodieke randcondities bepalen. Hiertoe gaan we - net zoals al is aangeduid voor het geval $c = \infty$ - de Schrödinger-vergelijking met delta-interactie op het gehele domein D vervangen door de vrije Schrödinger-vergelijking:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} = E \cdot f(x_1, \dots, x_n) \quad (14)$$

op het beperkte domein D_0 gedefinieerd door (7). Hierbij wordt de delta-interactie vervangen door geschikt gekozen aansluitcondities voor f op de rand van D_0 . Deze condities kunnen wij vinden door de Schrödinger-vergelijking (2) eenmaal te integreren naar het verschil van twee coördinaten. Om dit gemakkelijker te kunnen doen transformeren we naar de nieuwe variabelen:

$$\begin{cases} \xi = x_i - x_j \\ \eta = x_i + x_j \\ \text{overige } x_k \text{ onveranderd, notatie } \{x^{n-2}\}. \end{cases}$$

We kunnen dan de golffunctie in de nieuwe coördinaten schrijven als:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \tilde{f}(\xi, \eta, \{x^{n-2}\})$$

Na substitutie vindt men direct:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x_j^2} = 2 \cdot \left[\frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial \eta^2} \right]$$

Als we nu de situatie beschouwen dat $x_i \rightarrow x_j$, d.w.z. $\xi \rightarrow 0, \eta \rightarrow 2x_i$ en alle overige x_k 's onderling verschillend, dan is de enige potentiële energieterm die bijdraagt $2c \cdot \delta(x_i - x_j) = 2c \cdot \delta(\xi)$. Deze deltapijk moet gecompenseerd worden door de kinetische-energietermen die ξ -differentiatie bevatten. De overige tweede afgeleides moeten regulier blijven wil f een nette functie zijn die alleen maar een knik vertoont langs de grens $x_i = x_j$. Passen we nu op (2) toe de operatie:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} d\xi$$

dan vinden we:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ 2 \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=+0} - 2 \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=-0} \right\} = 2 \cdot \gamma \tilde{f} \Big|_{\xi=0} = 2 \frac{\hbar^2}{2m} c \cdot \tilde{f} \Big|_{\xi=0}$$

Op grond van de symmetrie blijkt:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(-\xi, \eta, \{x^{n-2}\}) &= f(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots) = f(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) \\ &= \tilde{f}(\xi, \eta, \{x^{n-2}\}) \end{aligned}$$

en dus:

$$2 \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=+0} = -2 \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=-0} = c \tilde{f} \Big|_{\xi=0}$$

Als wij opnieuw de coördinaten x_i en x_j invoeren, vinden wij in het bijzonder als we $i = j+1$ nemen om een voorwaarde binnen het gebied D_0 te krijgen:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_{j+1}} - \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \Big|_{x_{j+1} \downarrow x_j} = c \cdot f(x_1, \dots, x_n) \Big|_{x_{j+1} = x_j} \quad \text{voor } j = 1, 2, \dots, n-1. \quad (15)$$

We hebben dit afgeleid voor het geval dat slechts twee coördinaten gelijk worden. Echter, (15) blijft gelden voor alle situaties met meer gelijke coördinaten.

We hebben nu ons probleem (2) in het gehele gebied (1) dus vertaald in een probleem op het beperkte gebied (7); n.l. de golfvergelijking (14) met de aansluitcondities (15). Behalve aan deze condities moet de oplossing ook voldoen aan de randcondities (3) van het oorspronkelijke probleem die beperkt tot het domein D_0 uit (7) resulteren in de voorwaarden:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) \Big|_{x \downarrow 0} = f(x_2, \dots, x_n, L) \quad (16a)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x_1, x_2, \dots, x_n) \Big|_{x \downarrow 0} = \frac{\partial}{\partial x} f(x_2, \dots, x_n, x) \Big|_{x=L} \quad (16b)$$

4. Oplossing m.b.v. de Bethe-Ansatz.

We vullen nu in (14), (15) en (16) de Bethe-Ansatz (13) in. Aan de Schrödinger-vergelijking (14) is nu op triviale wijze voldaan, mits:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n k_j^2 \quad (17)$$

We onderscheiden de volgende gevallen:

a) $n = 1$

Als we nu eerst het geval met één deeltje beschouwen ($n = 1$), dan is ook direct aan (15) voldaan. We hebben dan één vrij deeltje:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad (18a)$$

met vanwege (16):

$$k = m \cdot \frac{2\pi}{L} \quad , m \text{ geheel} \quad (18b)$$

$$\text{en dus: } E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = m^2 \cdot \frac{4\pi^2}{L^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \quad (18c)$$

b) n = 2

De kenmerkende eigenschappen komen pas naar voren bij het geval van twee deeltjes. Er zijn dan twee permutaties: de identieke permutatie I en de verwisseling V. De Bethe-Ansatz luidt in dit geval:

$$f(x,y) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left[a(I) e^{i(px+qy)} + a(V) e^{i(qx+py)} \right] \quad (19a)$$

$0 < x < y \leq L$

en de energie is:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (p^2 + q^2) \quad (19b)$$

De conditie (15) wordt:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial x} \right) \Big|_{y \downarrow x} = c \cdot f(x,x)$$

ofwel:

$$\left[a(I) \cdot (iq) + a(V) \cdot (ip) - a(I) \cdot (ip) - a(V) \cdot (iq) \right] e^{i(px+qx)} = c \cdot [a(I) + a(V)] e^{i(px+qx)}$$

waaruit volgt:

$$\frac{a(I)}{a(V)} = - \frac{c + i(q-p)}{c - i(q-p)} \quad (19c)$$

Hiermee zijn de coëfficiënten in de golfgetallen uitgedrukt. Ze hebben alle dezelfde absolute waarden. De waarden van de golfgetallen zelf volgen uit de periodieke randcondities (16):

$$[a(I) e^{iqY} + a(V) e^{ipY}] = [a(I) e^{i(pY+qL)} + a(V) e^{i(qY+PL)}]$$

Aangezien dit moet gelden identiek in y vinden we twee voorwaarden, n.l.:

$$\begin{cases} a(I) e^{iqY} = a(V) e^{i(qY+PL)} \\ a(V) e^{ipY} = a(I) e^{i(pY+qL)} \end{cases}$$

dus:

$$\left. \begin{aligned} \frac{a(I)}{a(V)} &= e^{ipL} \stackrel{(19c)}{=} - \frac{c + i(q-p)}{c - i(q-p)} \\ \text{en } \frac{a(I)}{a(V)} &= e^{-iqL} = - \frac{c + i(q-p)}{c - i(q-p)} \end{aligned} \right\} \quad (19d)$$

Dit stelsel bepaalt de oplossingen van ons Schrödinger-probleem. We merken nog op dat als $c \neq 0$, noodzakelijk verschillende golfgetallen genomen moeten worden, omdat volgens (19c) bij gelijke golfgetallen $a(V) = -a(I)$ en dus dan de golf functie identiek nul zou zijn.

c) willekeurige n

We gaan nu het probleem aanpakken bij willekeurige n . De eigenwaarde is nu gegeven door (17). Vullen we nu de Bethe-Ansatz in de aansluitconditie (15) in, dan vinden we de eis:

$$\sum_P \left\{ ik_{P(j+1)} - ik_{P(j)} \right\} a(P) e^{i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x_j} \Big|_{x_{j+1}=x_j} = c \cdot \sum_P a(P) e^{i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x_j} \Big|_{x_{j+1}=x_j}$$

voor $j = 1, 2, \dots, n-1$. We gaan nu weer de coëfficiënten van gelijke e -machten gelijkstellen. Dan vinden wij:

$$\{ik_{P(j+1)} - ik_{P(j)}\}a(P) + \{ik_{P^*(j+1)} - ik_{P^*(j)}\}a(P^*) = c \{a(P) + a(P^*)\}$$

alle P ; $j=1,2,\dots,n-1$

waarbij we bij elke permutatie P een permutatie P^* gedefinieerd hebben zodanig dat:

$$\begin{cases} P(j) = P^*(j+1) \\ P(j+1) = P^*(j) \\ P(k) = P^*(k) \quad \text{als } k \neq j, j+1 \end{cases} \quad (20)$$

Verder korten wij af:

$$\begin{cases} k_{P(j)} = k_{P^*(j+1)} = p \\ k_{P(j+1)} = k_{P^*(j)} = q \end{cases} \quad (21)$$

We komen dan tot:

$$\frac{a(P)}{a(P^*)} = - \frac{c + i(q-p)}{c - i(q-p)} \stackrel{\text{def}}{=} - \exp\{-i \Theta(p,q)\} \quad (22)$$

waarbij is ingevoerd:

$$\boxed{\Theta(p,q) \equiv \theta(q-p) = -2 \arctg\left(\frac{q-p}{c}\right)} \quad (23a)$$

Aangezien het rechterlid een meerwaardige functie is moeten wij de functie θ nog nader vastleggen. Wij doen dit door te eisen:

$$-\pi \leq \theta \leq \pi \quad \text{als } p \text{ en } q \text{ reëel} \quad (23b)$$

Omdat nu (20) t/m (23) moeten gelden voor $j = 1, \dots, n-1$ en omdat iedere permutatie uit transposities van naburige indices kan worden opgebouwd, zijn de coëfficiënten $a(P)$ alle tot op een gemeenschappelijke constante factor na bepaald.

Als we uitgaan van de coëfficiënt van de eenheidspermutatie, vinden we met (22), na geschikte keuze van de constante factor:

$$a(P) = (-1)^P \prod_{i < j} \exp \left[-\frac{i}{2} \Theta(k_{P(i)}, k_{P(j)}) \right] \quad (24)$$

Dit kunnen we als volgt inzien: met P en P^* gekozen volgens (20), volgt uit (24):

$$\frac{a(P)}{a(P^*)} = \frac{(-1)^P \cdot \exp \left[-\frac{i}{2} \Theta(k_{P(j)}, k_{P(j+1)}) \right]}{(-1)^{P^*} \cdot \exp \left[-\frac{i}{2} \Theta(k_{P^*(j)}, k_{P^*(j+1)}) \right]} = \exp \left[-i \Theta(k_{P(j)}, k_{P(j+1)}) \right]$$

Dit is inderdaad in overeenstemming met (22).

§ 5. Spectrale karakterisering van de oplossingen.

a) Vergelijking voor de k-waarden.

We gaan nu nog vergelijkingen voor de golfgetallen afleiden. Hiertoe vullen we de Bethe-Ansatz (13) in de periodieke randcondities (16) in. Hierdoor vinden wij de voorwaarden:

$$\begin{aligned} \sum_P a(P) \cdot (ik_{P(1)})^\alpha \cdot \exp \left[i \sum_{j=2}^n k_{P(j)} x_j \right] &= \\ &= \sum_P a(P) \cdot (ik_{P(n)})^\alpha \cdot \exp \left[i \left(\sum_{j=1}^{n-1} k_{P(j)} x_{j+1} + k_{P(n)} L \right) \right] \end{aligned}$$

waarbij $\alpha = 0$ correspondeert met (16a) en $\alpha = 1$ met (16b). Nu passen we in het rechterlid een cyclische doorschuiving toe: laat P_{C_n} een zodanige permutatie zijn, dat:

$$P_{C_n}(j) = j+1 \quad \text{voor } j=1,2,\dots,n-1, \text{ en } P_{C_n}(n) = 1 \quad (25)$$

d.w.z. in cykelnotatie: $P_{C_n} \equiv (1, 2, 3, \dots, n)$

en we definiëren bij iedere permutatie P een nieuwe permutatie P' , zodanig dat:

$$P(j) = P'(j+1) \quad , \text{(voor } j=1,2,\dots,n-1) \quad , \text{en } P(n) = P'(1)$$

m.a.w. $P = P' P_{c_n}$.

Hiermee vinden wij:

$$\sum_P a(P) \cdot (ik_{P(1)})^\alpha \cdot \exp\left[i \sum_{j=2}^n k_{P(j)} x_j\right] = \sum_{P'} a(P' P_{c_n}) (ik_{P'(1)})^\alpha \cdot \exp\left[i \sum_{j=2}^n k_{P'(j)} x_j + ik_{P'(1)} L\right]$$

Gelijkstelling van coëfficiënten van gelijke e-machten geeft nu (zowel voor $\alpha = 0$ als voor $\alpha = 1$):

$$a(P) = a(P P_{c_n}) \cdot \exp\{ik_{P(1)} L\} \tag{26}$$

We kunnen nu schrijven:

$$\begin{aligned} \frac{a(P P_c)}{a(P)} &= \frac{a(P P_{c_n})}{a(P P_{c_{n-1}})} \cdot \frac{a(P P_{c_{n-1}})}{a(P P_{c_{n-2}})} \cdot \dots \cdot \frac{a(P P_{c_2})}{a(P)} \\ &= \prod_{l=2}^n \frac{a(P P_{c_l})}{a(P P_{c_{l-1}})} \end{aligned} \tag{26a}$$

waarbij de opeenvolgende permutaties:

$$\begin{aligned} P &= \{ P(1), P(2), P(3), P(4), \dots, P(l-2), P(l-1), P(l), \dots, P(n-1), P(n) \} \\ P P_{c_2} &= \{ \underline{P(2)}, \underline{P(1)}, P(3), P(4), \dots, P(l-2), P(l-1), P(l), \dots, P(n-1), P(n) \} \\ P P_{c_3} &= \{ P(2), \underline{P(3)}, \underline{P(1)}, P(4), \dots, P(l-2), P(l-1), P(l), \dots, P(n-1), P(n) \} \\ &\vdots \\ P P_{c_{l-1}} &= \{ P(2), P(3), P(4), P(5), \dots, \underline{P(l-1)}, \underline{P(1)}, P(l), \dots, P(n-1), P(n) \} \\ P P_{c_l} &= \{ P(2), P(3), P(4), P(5), \dots, P(l-1), \underline{P(l)}, \underline{P(1)}, \dots, P(n-1), P(n) \} \\ &\vdots \\ P P_{c_n} &= \{ P(2), P(3), P(4), P(5), \dots, P(l-1), P(l), P(l+1), \dots, \underline{P(n)}, \underline{P(1)} \} \end{aligned}$$

slechts verschillen in de verwisseling van twee golfgetallen, n.l.:

$$k_{P(l)} \stackrel{\text{def}}{=} p_l \iff k_{P(1)} \stackrel{\text{def}}{=} q_l \quad \text{voor } PP_{c_{l-1}} \text{ en } PP_{c_l} .$$

Door herhaald toepassen van (22) op de factoren van (26a), kunnen wij dus (26a) schrijven in de vorm:

$$\frac{a(PP_c)}{a(P)} = \prod_{l=2}^n \left\{ -e^{-i \Theta(k_{P(l)}, k_{P(1)})} \right\}$$

Men vindt op deze wijze uit (26) de voorwaarde,

$$\exp(i k_{P(1)} L) = (-1)^{n-1} \cdot \exp \left[i \sum_{l=2}^n \Theta(k_{P(l)}, k_{P(1)}) \right] \quad (27)$$

Nemen we nu een permutatie P , met $P(1) = j$, dan vinden we met (23):

$$\exp(i k_j L) = (-1)^{n-1} \cdot \exp \left[i \sum_{l=1}^n \Theta(k_j - k_l) \right] \quad (28)$$

voor $j = 1, 2, \dots, n$

Tenslotte kunnen wij van (28) de logaritme nemen:

$$k_j = \frac{2\pi I_j}{L} + \frac{1}{L} \sum_{l=1}^n \Theta(k_j - k_l) \quad , \quad j = 1, 2, \dots, n$$

met I_j geheel als n oneven
halftallig als n even.

(29)

Hierin is de functie $\Theta(k_j - k_l)$ gegeven door (23a):

$$\Theta(k_j - k_l) = -2 \operatorname{arctg} \frac{k_j - k_l}{c} \quad (23a)$$

Wij zullen aantonen dat de oplossingen van verg. (29) uniek zijn en met toenemende waarde van c variëren van

$$k_j = \frac{2\pi I_j - 2\pi j + (n+1)\pi}{L} \quad \text{voor } c = 0 \quad (29a)$$

tot
$$k_j = \frac{2\pi I_j}{L} \quad \text{voor } c = \infty \quad (29b)$$

b) Uniciteit van de oplossingen.

De getallen I_j leggen de tak van de logaritme vast. We bewijzen nu dat dit goede quantumgetallen zijn:

Stelling: Voor elke set reële getallen $\{I_1, \dots, I_n\}$ heeft (29) precies één oplossing $\{k_1, \dots, k_n\}$ van reële golfgetallen.

Bewijs: Voer in de functie:

$$B(k_1, \dots, k_n) = \frac{1}{2} L \sum_{j=1}^n k_j^2 - 2\pi \sum_{j=1}^n I_j k_j - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{\ell=1}^n \int_0^{k_j - k_\ell} \theta(k) dk \quad (30)$$

Dan is (29) equivalent met de stationariteitsconditie van de vorm (30), ofwel het nul zijn van:

$$\frac{\partial B}{\partial k_j} = L k_j - 2\pi I_j - \sum_{\ell=1}^n \theta(k_j - k_\ell) \quad (31)$$

De matrix van tweede afgeleiden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 B}{\partial k_i \partial k_j} &= L \delta_{ij} + \theta'(k_j - k_i) - \sum_{\ell=1}^n \theta'(k_j - k_\ell) \delta_{ij} \\ &\stackrel{(23)}{=} L \delta_{ij} - \frac{2c}{c^2 + (k_j - k_i)^2} + \sum_{\ell=1}^n \frac{2c}{c^2 + (k_j - k_\ell)^2} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (32)$$

is positief definit, omdat deze is opgebouwd uit een positief definitie matrix $L \mathbb{1}$ en een aantal positief semidefinitie matrices van de vorm:

$$\frac{2c}{c^2 + (k_j - k_i)^2} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \rightarrow i\text{-de} \\ \rightarrow j\text{-de} \\ \downarrow i\text{-de} \\ \downarrow j\text{-de} \end{matrix}$$

De functie B heeft dus hooguit één extreem. Verder zien wij met (23) en (30) dat B zich voor grote waarden van $\sum k_j^2$ gedraagt als:

$$B \approx \frac{1}{2} L \sum_{j=1}^n k_j^2 \quad (33)$$

B moet dus een minimum hebben voor eindige reële k 's. Dit is dan het enige extreem waardoor (29) dus maar één oplossing heeft. Hiermee is de stelling bewezen.

c) Analyticiteit van de oplossing in c . Volledigheid.

We kunnen verder nog aantonen dat de golfgetallen, en daarmee de hele Bethe-Ansatzoplossing, bij gegeven quantumgetallen $\{I_j\}$ analytisch zijn in $\frac{1}{c}$ voor $0 < c \leq \infty$ en continu in c voor $c = 0$. De golfgetallen k_j zijn namelijk impliciet gedefinieerd door het nul worden van de uitdrukkingen (31). De functies (31) zijn echter analytisch in $\frac{1}{c}$ en in de k_j 's in een gebied dat $0 < c \leq \infty$ bevat. Ook is de matrix van afgeleiden naar de k 's (32) in dat gebied positief definitief en dus niet singulier. De functies $k_j(c)$ zijn dus ook analytisch.

Voor het bewijs van de continuïteit in $c = 0$ moeten we eerst de functie θ beter vastleggen. Vergelijken we de oplossing (5) voor het geval $c = 0$ met de Bethe-Ansatz (13) voor het algemene geval dan vinden we $\lim_{c \rightarrow 0} a(P) \equiv \pm 1$. Dit betekent volgens de definities (22) en (23) dat nu:

$$\lim_{c \rightarrow 0} \theta(k_j - k_l) = \pm \pi \quad \text{als } l \neq j. \quad (34)$$

Om in deze uitdrukking het teken nader vast te leggen beginnen we met op te merken dat voor positieve c alle golfgetallen k_j verschillend moeten zijn. Want, waren twee golfgetallen gelijk, dan zou wegens (22) gelden:

$$\frac{a(P)}{a(P^*)} = -1 \quad \text{ofwel} \quad a(P^*) = -a(P)$$

voor elk paar permutaties (P, P^*) die alleen verschillen in hun werking op de nummers van deze twee golfgetallen. De termen in de golf functie (13) zouden dan paarsgewijze gelijk en tegengesteld zijn, zodat de golf functie f identiek gelijk nul zou zijn, wat niet toegestaan is. We mogen dus aannemen dat de golfgetallen $\{k_j\}$ allen onderling verschillend zijn en ze zodanig hernummeren dat:

$$k_1 < k_2 < \dots < k_n \quad \text{voor} \quad c > 0. \quad (35)$$

Om (23), (34) en (35) in de limiet $c \rightarrow 0$ met elkaar in overeenstemming te brengen moeten we voor $c = 0$ het teken van (34) zodanig kiezen dat:

$$\Theta(k_l, k_j) = -\pi \cdot \text{sign}(j-l) = \begin{cases} \pi & \text{als } l > j \\ 0 & \text{als } l = j \\ -\pi & \text{als } l < j \end{cases} \quad (36)$$

Vullen we dit in in de vergelijking voor de golfgetallen (29) dan vinden we direct:

$$\lim_{c \rightarrow 0} k_j = \frac{2\pi I_j - 2\pi j + (n+1)\pi}{L} = \frac{2\pi m_j}{L} \quad (37)$$

waarbij zijn ingevoerd de nieuwe quantumgetallen:

$$m_j = I_j - j + \frac{1}{2}(n+1) \quad (38)$$

die wegens (29) altijd geheel moeten zijn en met het oog op (35) moeten voldoen aan:

$$m_1 \leq m_2 \leq \dots \leq m_n \quad (39)$$

In het bijzonder volgt uit de vergelijking voor de energie (6) dat voor de grondtoestand moet gelden

$$k_j^{(0)} \equiv m_j^{(0)} \equiv 0, \text{ ofwel } I_j^{(0)} = j - \frac{1}{2}(n+1) \text{ voor } j = 1, 2, \dots, n \quad (40)$$

en $c = 0$.

Hieruit zien wij dat, terwijl de $\{k_j\}$ de rol spelen van de echte golfvectoren van het Bosonengas zelf, de grootheden

$$h_j \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi I_j}{L} \stackrel{(29)}{=} k_j - \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^n \theta(k_j - k_\ell) \quad (\text{alle } c)$$

$$= k_j + \frac{2\pi j}{L} - \frac{(n+1)\pi}{L} \quad (c=0) \quad (29a)$$

zich in het geval $c = 0$ gedragen als de golfvectoren van een hypothetisch Fermionengas, waarvan in de grondtoestand alle niveaus tot aan een "Fermi-grens", $|h_j|_{\max} = \frac{\pi}{L}(n-1)$, zijn opgevuld.

In het geval $c = \infty$ naderen de $\{h_j\}$ tot de golfvectoren van het Bosonengas (met $c = \infty$)

$$h_j = \frac{2\pi I_j}{L} = k_j \quad (c = \infty) \quad (29b)$$

Tussen deze twee gevallen vindt een geleidelijke overgang plaats.

Om ook de omgeving van $c = 0$ nader te bestuderen voeren we in de functie:

$$\psi(k_j, k_\ell) = \begin{cases} \theta(k_j - k_\ell) - \pi & \text{als } k_j < k_\ell \text{ of } j < \ell \\ \theta(k_j - k_\ell) + \pi & \text{als } k_j > k_\ell \text{ of } j > \ell \end{cases} \quad (41)$$

m.a.w.:

$$\psi(k_j, k_\ell) = \Theta(k_j, k_\ell) + \pi \cdot \text{sign}(j - \ell) \stackrel{(23)}{=} 2 \arctg \frac{c}{k_j - k_\ell}$$

$$-\pi \leq \psi \leq \pi$$

Met behulp van (41) en (38) gaat de golfgetalvergelijking (29) dan over in:

$$k_j L = 2\pi m_j + \sum_{\ell \neq j} \psi(k_j, k_\ell) = 2\pi m_j + \sum_{\ell \neq j} 2 \arctg \frac{c}{k_j - k_\ell}, \quad j = 1, \dots, n \quad (42)$$

Als wij bijvoorbeeld naar de grondtoestand (40) kijken voor kleine c en dus ook kleine golfgetallen gaat (42) asymptotisch over in:

$$k_j L \approx \sum_{l \neq j} \frac{2c}{k_j - k_l} \quad (42a)$$

Om deze set vergelijkingen op te lossen substitueren wij:

$$k_j = \sqrt{\frac{2c}{L}} q_j \quad (43)$$

waardoor (42a) overgaat in:

$$q_j = \sum_{l \neq j} \frac{1}{q_j - q_l} \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (44)$$

We voeren nu een polynoom in:

$$f(q) = A \prod_{j=1}^n (q - q_j) \quad (45)$$

dat als enkelvoudige nulpunten juist de getallen q_j heeft. Hiervan is de logaritmische afgeleide

$$\frac{f'(q)}{f(q)} = \sum_{l=1}^n \frac{1}{q - q_l} \quad (46a)$$

Uit de Laurentontwikkeling van deze functie om het punt q_j

$$\frac{f'(q)}{f(q)} = \frac{f'(q_j) + f''(q_j)(q - q_j) + \dots}{f'(q_j)(q - q_j) + \frac{1}{2}f''(q_j)(q - q_j)^2 + \dots} = \frac{1}{q - q_j} + \frac{f''(q_j)}{2f'(q_j)}(q - q_j) \quad (46b)$$

volgt door combineren met (46a) onder gebruikmaking van (44) dat

$$\frac{f''(q_j)}{2f'(q_j)} = \sum_{l \neq j} \frac{1}{q_j - q_l} \stackrel{(44)}{=} q_j \quad (47)$$

Aan de verg. (44) is dus voldaan door de nulpunten van de functie $f(q)$ als deze voldoet aan de differentiaalvergelijking van Hermite:

$$f''(q) - 2q \cdot f'(q) + 2n \cdot f(q) = 0. \quad (48)$$

(Immers bij een nulpunt is de laatste term nul.) De $\{q_j\}$ van (43) zijn dus de nulpunten van het Hermitepolynoom $H_n(q)$.

Voor andere toestanden dan de grondtoestand kunnen we de vergelijking (42) met willekeurige quantumgetallen $m_j \neq 0$ voor kleine c oplossen door substitutie van de reeksontwikkeling:

$$k_j = \frac{2\pi m_j}{L} + a_j \sqrt{c} + b_j c + \dots \quad (49)$$

De golfgetallen zijn in de buurt van $c = 0$ continue functies van c . Zij kunnen een vertakkingspunt hebben ($a_j \neq 0$ etc.), zodra een paar quantumgetallen gelijk is: $m_j = m_l$.

Uit de analytische eigenschappen en uit de volledigheid van de oplossing voor $c = 0$ concluderen wij dat voor elke $c \gg 0$ een volledige set golf functies gegeven wordt door de vergelijkingen (13), (23), (24) en (29) waarbij iedere functie gekarakteriseerd wordt door een set quantumgetallen $\{m_j\}$ volgens (39) of door de equivalente set:

$$I_1 < I_2 < \dots < I_n \quad (50)$$

willekeurig geheel of halftallig te kiezen naar gelang n oneven of even is.

De met deze quantumgetallen verbonden grootheden

$$h_1 = \frac{2\pi I_1}{L}, \quad h_2 = \frac{2\pi I_2}{L}, \quad \dots, \quad h_n = \frac{2\pi I_n}{L}$$

spelen - zoals wij gezien hebben - de rol van "golfvectoren" van een hypothetisch vrij Fermionengas, die de echte golfvectoren $\{k_j\}$ van het Bosonengas bepalen via de vergelijkingen (29). Deze vergelijkingen hangen af van de interactiesterkte c , via de functie $\theta(k_j - k_\ell)$. Wanneer c varieert van $c = 0$ tot $c = \infty$, varieert de oplossing geleidelijk van de waarden (29a) tot de waarden (29b).

d) Het spectrum voor grote aantallen deeltjes.

Voor de limiet van een oneindig systeem, de thermodynamische limiet, wordt het bijzonder belangrijk te weten hoe de golfgetallen k liggen. Daarom volgen nu twee a priori schattingen. Hieruit zal het plausibel worden dat we kunnen gaan werken met continue verdelingsfuncties van k 's. Allereerst blijft het bereik van de golfgetallen beperkt:

$$\frac{2\pi I_1}{L} \leq k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_n \leq \frac{2\pi I_n}{L} \quad (51)$$

met overal $<$ zodra $c \neq 0$ en $c \neq \infty$. De ondergrens in (51) volgt uit (29):

$$k_1 = \frac{2\pi I_1}{L} + \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^n \theta(k_1 - k_\ell) = \frac{2\pi I_1}{L} - \frac{2}{L} \sum_{\ell=1}^n \arctg\left(\frac{k_1 - k_\ell}{c}\right) \geq \frac{2\pi I_1}{L}$$

wegens $\arctg\left(\frac{k_1 - k_\ell}{c}\right) \leq 0$ voor alle ℓ , wat volgt uit (35). Op analoge wijze volgt de 2e schatting in (51): $k_n \leq \frac{2\pi I_n}{L}$. Tenslotte verdichten de golfgetallen zich als $c \neq 0$ hooguit evenredig met L . Immers uit (29) volgt:

$$L(k_j - k_\ell) + 2 \sum_{m=1}^n \left[\arctg\left(\frac{k_j - k_m}{c}\right) - \arctg\left(\frac{k_\ell - k_m}{c}\right) \right] = 2\pi I_j - 2\pi I_\ell$$

Gebruiken we nu: $|\arctg x - \arctg y| \leq |x - y|$ dan vinden we:

$$|L(k_j - k_\ell) - 2\pi(I_j - I_\ell)| = 2 \left| \sum_{m=1}^n \arctg\left(\frac{k_j - k_m}{c}\right) - \arctg\left(\frac{k_\ell - k_m}{c}\right) \right| \leq \frac{2n}{c} |k_j - k_\ell|$$

Toepassing van de driehoeksongelijkheid geeft:

$$2\pi |I_j - I_\ell| - L |k_j - k_\ell| \leq \frac{2n}{c} |k_j - k_\ell|$$

ofwel:

$$|k_j - k_\ell| \geq \frac{\frac{2\pi}{L}}{1 + \frac{2n}{cL}} \cdot |I_j - I_\ell| \underset{(50)}{\geq} \frac{\frac{2\pi}{L}}{1 + \frac{2n}{cL}} \sim \frac{1}{L} \quad (52)$$

(als $c \neq 0$ en $n \sim L$) .

Hoofdstuk II. Heisenberg-keten en quantumroostergas als randwaardeprobleem.

§ 1. Inleiding

We hebben in het vorige hoofdstuk het één-dimensionale Bose-gas met delta-repulsie geïntroduceerd. We hebben hierna het Schrödinger-probleem omgezet in een randwaardeprobleem, n.l. een vrije golfvergelijking op een beperkt gebied met als aansluitcondities lineaire differentiaalbetrekkingen. Hierbij is essentiëel gebruik gemaakt van de één-dimensionaliteit van het probleem, met name van het feit dat de coördinaten op unieke wijze naar grootte kunnen worden geordend. We konden toen de eigentoestanden bepalen m.b.v. de Bethe-Ansatz en vonden toen dat eigentoestanden afhankelijk van de interactiesterkte overgingen van die van het ideale Bose-gas (5) naar die van het ideale Fermi-gas (12) (op het beperkte domein D_0), alhoewel de deeltjes steeds Bose-statistiek blijven gehoorzamen. Dit komt zo, omdat een oneindige delta-potentiaal in wezen het Pauli-Verbot introduceert. In meer-dimensionale systemen kunnen de deeltjes elkaar ook buitenom passeren, dus dan is de situatie wezenlijk anders. Desondanks heeft dit één-dimensionale model een grote didactische waarde, omdat het al de belangrijkste trekken vertoont van twee interessante discrete varianten van een quanteus één-dimensionaal roosterprobleem, n.l. Het Heisenberg-model en het quantumroostergas. Het continue model is echter veel eenvoudiger te behandelen, met name wat betreft de nog te bespreken thermodynamica. De genoemde discrete modellen zijn interessant omdat hun Hamiltonmatrices nauw verwant zijn met de transfermatrices uit klassieke twee-dimensionale Ising-achtige modellen. Met name hangt de grootste eigenwaarde van de transfermatrix van deze modellen die de thermodynamica bepaalt samen met de grondtoestandsenergie van het één-dimensionale Heisenberg-model (resp. quantumroostergas).

We beschouwen in dit hoofdstuk een cyclische keten met N plaatsen, waarop zich in het geval van het Heisenberg-model spin- $\frac{1}{2}$ -deeltjes bevinden en in het geval van het quantumroostergas Bose-deeltjes of lege roosterplaatsen ("gaten"). Wij zetten het met dit model verbonden eigenwaardeprobleem weer in een randwaarde-

probleem om, d.w.z. in een vrije 2^N orde differentievergelijking met lineaire aansluitcondities, waarin de naaste nabuurinteractie verdisconteerd wordt. De samenhang met het continue Bose-gas is dan duidelijk. We kunnen dus weer de Bethe-
 Ansatz maken om de golffuncties te vinden. Met name zullen we in het volgende hoofdstuk de grondtoestand onderzoeken.

§ 2. De Heisenberg-keten.

a) Algemeen.

We beschouwen het lineaire Heisenberg-model, een keten van N spin- $\frac{1}{2}$ -deeltjes. Het is gebruikelijk om spintoestanden te beschrijven met een spinor, i.e. een kolomvector en de operatoren die op deze spinoren werken met Kronecker-producten van de één-spin-matrices. Voor de spinoperator werkend op de i -de spin neemt men:

$$\underline{\underline{\vec{\sigma}}}^{(i)} = \mathbb{1}_{2 \times 2} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ i\text{-de plaats}}}{\vec{\sigma}} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \quad (1)$$

waarbij men voor $\vec{\sigma}$ een van de Pauli-matrices invult:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Men gebruikt voor het gemak cyclische randcondities:

$$\underline{\underline{\sigma}}^{(N+1)} \equiv \underline{\underline{\sigma}}^{(1)} \quad (3)$$

De operator voor de gemiddelde magnetisatie per spin wordt in deze notatie:

$$\underline{\underline{M}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \underline{\underline{\sigma}}_z^{(i)} \quad (4)$$

Als basistoestanden gebruiken wij de set

$$|x_1, x_2, \dots, x_n\rangle = \binom{1}{0} \otimes \binom{0}{1} \otimes \dots \otimes \binom{1}{0} \otimes \binom{0}{1} \dots \otimes \binom{0}{1} \otimes \binom{1}{0} \otimes \binom{1}{0} \quad (5)$$

\downarrow positie x_1 \downarrow x_k \downarrow x_n

d.w.z. toestanden met n downspins op n gegeven plaatsen,

$$1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq N \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

Deze toestanden zijn eigentoestanden van de magnetisatie \underline{m} met eigenwaarden:

$$m = \frac{N-2n}{N} = 1 - \frac{2n}{N} \quad , \quad \text{d.w.z.} \quad n = \frac{N}{2}(1-m) \quad (7)$$

De spin-operatoren voldoen aan de bekende commutatierelaties:

$$[\underline{\sigma}_k^{(i)}, \underline{\sigma}_l^{(j)}] = 2i \varepsilon_{klm} \delta_{ij} \underline{\sigma}_m^{(i)} \quad , \quad \text{d.w.z.} \quad (8)$$

operatoren werkend op verschillende spins commuteren onderling en operatoren werkend op dezelfde spin anticommuteren.

Met Heisenberg en Frenkel [14] nemen we voor de hamiltoniaan van de spins een kwadratische functie in de spinoperatoren maar met i.h.a. verschillende koppelingsconstanten voor de x , y en z componenten. We definiëren de volledig anisotrope Heisenberg hamiltoniaan [15] als:

$$\underline{\mathcal{H}}(\underline{J}_x, \underline{J}_y, \underline{J}_z) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \{ \underline{J}_x \underline{\sigma}_x^{(i)} \underline{\sigma}_x^{(i+1)} + \underline{J}_y \underline{\sigma}_y^{(i)} \underline{\sigma}_y^{(i+1)} + \underline{J}_z \underline{\sigma}_z^{(i)} \underline{\sigma}_z^{(i+1)} \} \quad (9)$$

Willen we de methoden uit het vorige hoofdstuk kunnen toepassen dan is vereist dat we kunnen ontwikkelen naar toestanden van een gegeven aantal deeltjes op bepaalde plaatsen. De toestanden (5) kunnen geïnterpreteerd worden als toestanden met deeltjes op de plaatsen (6) als wij de "deeltjes" identificeren met "down-spins". We eisen

daarom dat het totale aantal down-spins n , gegeven door (7) een behouden grootte is, d.w.z. dat

$$[\underline{H}, \underline{M}] = 0 \quad (10)$$

Dit is het geval als:

$$J_x = J_y \quad (11a)$$

We kunnen in dit geval schrijven:

$$\underline{H}(J_x, J_x, J_z) = J_x \cdot \underline{H}(1, 1, \frac{J_z}{J_x}) = J_x \cdot \underline{H}(1, 1, \Delta) \quad (11b)$$

met

$$\Delta = \frac{J_z}{J_x} \quad (11c)$$

Wij kunnen de voorfactor wegschalen waardoor (11b) overgaat in

$$\frac{1}{|J_x|} \underline{H}(J_x, J_x, J_z) = \text{sign } J_x \cdot \underline{H}(1, 1, \Delta) \quad (11d)$$

Het teken is echter ook irrelevant voor de bepaling van het eigenwaardespectrum omdat het spectrum van $-\underline{H}(1, 1, \Delta)$ overeenkomt met dat van $\underline{H}(1, 1, -\Delta)$. Dit kunnen wij inzien door een gelijkvormigheidstransformatie:

$$\underline{A} = \prod_{i=\text{even}} \sigma_z^{(i)} \quad (12a)$$

uit te voeren. Dan geldt wegens de commutatierelaties (8):

$$\underline{\underline{A}} \underline{\underline{\mathcal{H}}}(1,1,\Delta) \underline{\underline{A}}^{-1} = - \underline{\underline{\mathcal{H}}}(1,1,-\Delta) \quad (12b)$$

Het is dus voldoende om te bestuderen de hamiltoniaan:

$$\underline{\underline{\mathcal{H}}}(\Delta) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ \underline{\underline{\sigma}}_x^{(i)} \underline{\underline{\sigma}}_x^{(i+1)} + \underline{\underline{\sigma}}_y^{(i)} \underline{\underline{\sigma}}_y^{(i+1)} + \Delta \underline{\underline{\sigma}}_z^{(i)} \underline{\underline{\sigma}}_z^{(i+1)} \right\} \quad (13)$$

en het eigenwaardeprobleem:

$$\underline{\underline{\mathcal{H}}}(\Delta) \underline{\underline{\Psi}} = E \underline{\underline{\Psi}} \quad (14)$$

Van speciaal belang zijn de gevallen:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta = 0 \quad : \text{de isotrope x-y-hamiltoniaan,} \\ \Delta = 1 \quad : \text{de isotrope ferromagneet,} \\ \Delta = -1 \quad : \text{de isotrope antiferromagneet (volgens 12b equivalent } -\mathcal{H}(1) \text{)} \\ \text{en } \Delta = \pm \infty \quad : \text{het Ising-model.} \end{array} \right.$$

b) Algemene eigenschappen van de grondtoestand van het Heisenberg-model.

We zijn geïnteresseerd in de absolute grondtoestand van de hamiltoniaan (13). Meer algemeen (om ook het probleem met uitwendig magneetveld aan te kunnen) willen we bepalen de grondtoestand bij gegeven magnetisatie m , die we aanduiden met $\Psi_0(m, \Delta)$. Deze moet voldoen aan de eigenwaardevergelijking:

$$\underline{\underline{\mathcal{H}}} \Psi_0(m, \Delta) = E_N(m, \Delta) \cdot \Psi_0(m, \Delta) \quad (15)$$

Bij het bepalen van de grondtoestand maken wij gebruik van de volgende stelling(A):

St.A $\left\{ \begin{array}{l} \text{Voor een eindige keten geldt } \underline{1}^{\circ} \text{ dat de grondtoestand bij elke magnetisatie } m \text{ niet} \\ \text{ontaard is, } \underline{2}^{\circ} \text{ dat de bijbehorende energie } E_N(m, \Delta) \text{ analytisch in } \Delta \text{ is voor} \\ \text{alle reële } \Delta, \text{ en } \underline{3}^{\circ} \text{ dat de bijbehorende eigenvector } \Psi_0(m, \Delta) \text{ louter positieve elemen-} \\ \text{ten heeft.} \end{array} \right.$

Om dit in te zien herschrijven wij nu de Hamiltoniaan in de vorm

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathcal{H}}}(\Delta) &= -\frac{\Delta N}{2} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ \underline{\underline{\sigma}}_x^{(i)} \underline{\underline{\sigma}}_x^{(i+1)} + \underline{\underline{\sigma}}_y^{(i)} \underline{\underline{\sigma}}_y^{(i+1)} + \Delta \underline{\underline{\sigma}}_z^{(i)} \underline{\underline{\sigma}}_z^{(i+1)} - \Delta \underline{\underline{\mathbb{1}}} \right\} \\ &= -\frac{\Delta N}{2} + \sum_{i=1}^N \underline{\underline{\mathbb{1}}}_{2 \times 2} \otimes \underline{\underline{\mathbb{1}}} \otimes \dots \otimes \underline{\underline{\mathbb{1}}} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta & -1 & 0 \\ 0 & -1 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \underline{\underline{\mathbb{1}}} \otimes \dots \otimes \underline{\underline{\mathbb{1}}} \quad (16) \end{aligned}$$

Dit is een symmetrische matrix, waarvan de niet-diagonaal elementen alleen de waarden 0 of -1 aan kunnen nemen. De matrix (16) valt uiteen in blokken langs de diagonaal die ieder corresponderen met een vaste waarde m van de magnetisatie. Zo'n deelmatrix is bijvoorbeeld de $\binom{N}{m} \times \binom{N}{m}$ -matrix $\underline{\underline{\mathcal{H}}}(m)$ die werkt in de onderruimte met magnetisatie m . Deze matrix is irreducibel, omdat $\underline{\underline{\mathcal{H}}}(m)$ elk tweetal toestanden van het type $|x_1, x_2, \dots, x_n\rangle$ met dezelfde $n = \frac{N}{2}(1-m)$ onderling verbindt. Dit is namelijk het geval voor elke twee toestanden die slechts verschillen in de verwisseling van een upspin met een aangrenzende downspin. En dus kan ook een willekeurige toestand in de deelruimte van magnetisatie m met elke andere dergelijke toestand verbonden worden via een aantal van dergelijke verwisselingen. Kiezen we nu een geschikte constante ρ , dan is $\underline{\underline{A}} = \rho \underline{\underline{\mathbb{1}}} - \underline{\underline{\mathcal{H}}}(m)$ een irreducibele symmetrische matrix met op de diagonaal alleen positieve getallen en buiten de diagonaal alléén nul of één. We kunnen nu de stelling van Perron-Frobenius [16] toepassen die zegt dat de grootste eigenwaarde van $\underline{\underline{A}}$ niet ontaard is en dat de bijbehorende eigenvector louter positieve elementen heeft. Dit houdt in dat de grondtoestand van $\underline{\underline{\mathcal{H}}}(m)$ niet ontaard is en dat de bijbehorende energie die een begrensde algebraïsche functie van Δ is voor reële Δ , nu ook geen vertakkingspunten mag bezitten en dus analytisch is voor alle reële Δ .

Vervolgens willen wij uitrekenen hoe deze grondtoestandsenergie zich gedraagt in de limiet voor een oneindige keten. Definieer daartoe:

$$e(m, \Delta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} E_N(m(N), \Delta), \text{ met } -1 \leq m \leq 1 \quad (17)$$

De magnetisatie m in het linkerlid is nu een continue variabele geworden. (Om het rechterlid van (17) een betekenis te geven moeten we voor $m(N)$ in een eindige keten ter lengte N de grootste eigenwaarde van de magnetisatie kiezen, waarvoor nog geldt dat $m(N) \leq m$, d.w.z. $m(N) = \frac{1}{N} [Nm]$.) Het bestaan van de limiet (17) volgt uit de begrensdheid van de interactie tussen nabuurspins, zodat als we het systeem opdelen in grote subcellen oppervlakte-effecten verwaarloosd mogen worden, zie bv. [17].

Wij berekenen de limiet (17) eerst voor het geval $\Delta \geq 1$. Uit (16) zien wij dat \mathcal{H} de som is van $-\frac{1}{2}N\Delta$ en een aantal matrices met eigenwaarden 0 en $\Delta \pm 1$. Nemen wij van al deze matrices de kleinste eigenwaarde, dan komen wij tot de schatting:

$$E_N(m, \Delta) \geq -\frac{1}{2}N\Delta \quad \text{als } \Delta \geq 1 \quad (18a)$$

$$\text{m.a.w. } e(m, \Delta) \geq -\frac{1}{2}\Delta \quad \text{als } \Delta \geq 1 \quad (18b)$$

Dit geldt met het gelijkteken, als alle spins gelijk gericht zijn ($m = +1$ of -1). In de andere gevallen ($n \neq 0, N$) proberen we als trialgolffunctie Φ een toestand met twee "Weiszgebieden":

$$|\Phi\rangle = \underbrace{|\downarrow\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle}_n |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle = |-\cdots-\cdots+\cdots+\rangle \quad (19a)$$

d.w.z. met downspins op de eerste n plaatsen en upspins op de overige $N-n$ plaatsen.

We vinden zo m.b.v. het variatieprincipe dat:

$$E_N(m, \Delta) \leq \langle \Phi | \mathcal{H} | \Phi \rangle = -\frac{1}{2}N\Delta + 2\Delta \quad (19b)$$

waarbij we via (16) zien dat de twee voorkomende antiparallelle spins slechts een bedrag 2Δ bijdragen. In de limiet van een groot systeem vinden we:

$$e(m, \Delta) \leq -\frac{1}{2}\Delta \quad (19c)$$

Combineren van (18) en (19) levert:

$$e(m, \Delta) = -\frac{1}{2} \Delta \quad , \text{ als } \Delta \geq 1 \quad (20)$$

Dit resultaat is volkomen begrijpelijk, want als $\Delta \geq 1$, dan zijn parallelle spins bevoordeeld t.o.v. antiparallelle. De parallelle paren dragen bij een energie $-\frac{\Delta}{2}$, de antiparallelle paren een energie tussen $\frac{\Delta}{2} - 1$ en $\frac{\Delta}{2} + 1$, wat men kan zien aan de hamiltoniaan (13) of (16). De grondtoestand moet dus ferromagnetisch zijn en elk nabuurpaar draagt $-\frac{1}{2} \Delta$ bij aan de energie.

Ook kunnen we opmerken dat het eigenwaardeprobleem (15) invariant is voor gelijktijdige verwisseling van alle up- en downspins, dus:

$$E_N(-m, \Delta) = E_N(m, \Delta) \quad \text{ofwel:} \quad e(m, \Delta) = e(-m, \Delta) \quad (21)$$

We behoeven dus in het vervolg alleen nog maar te beschouwen:

$$n \leq \frac{1}{2} N \quad \text{ofwel} \quad m \geq 0 \quad (22)$$

We willen nu bewijzen dat de absolute grondtoestand van de hamiltoniaan (13) behoort tot de deelruimte die correspondeert met magnetisatie nul, m.a.w. dat

$$e(0, \Delta) \leq e(m, \Delta) = \frac{e(m, \Delta) + e(-m, \Delta)}{2} \quad (\text{alle } m) \quad (23)$$

Deze eigenschap volgt als bijzonder geval uit de eigenschap dat $e(m, \Delta)$ een concave functie van m is, d.w.z. dat

$$\left. \begin{aligned} e(m, \Delta) &\leq a \cdot e(m_1, \Delta) + (1-a) \cdot e(m_2, \Delta) \\ \text{als } m &= a m_1 + (1-a) m_2 \quad , \quad 0 \leq a \leq 1 \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

Dit laatste leidt men af door het systeem in twee subsystemen te verdelen en in het ene deel de golffunctie gelijk te stellen aan die van de grondtoestand bij magnetisatie m_1 , en in het andere deel aan die bij magneti-

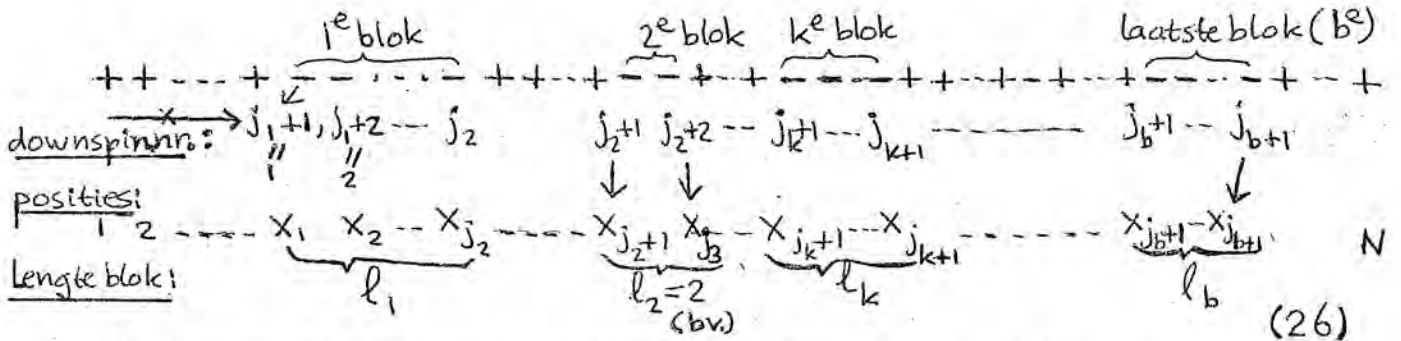
satie m_2 . In de "thermodynamische" limiet vallen oppervlaktetermen weg, zodat deze product-trialgolf functie aanleiding geeft tot (24).

c) Overgang van spinorrepresentatie naar plaatsrepresentatie.

Wij keren nu terug naar het eigenwaardeprobleem (14) en ontwikkelen de eigen-toestanden behorend bij een bepaald aantal downspins n , naar de basis (5):

$$\Psi_{(n)} = \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq N} f(x_1, x_2, \dots, x_n) \cdot |x_1, x_2, \dots, x_n\rangle \quad (25)$$

Ten opzichte van deze basis wordt een toestand beschreven door de golf functie $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Om in te zien hoe de hamiltoniaan op deze functies werkt karakteriseren wij nu elke basistoestand $|x_1, x_2, \dots, x_n\rangle$ door zijn blok-indeling in up- en downspins:



Wij nummeren de aaneengesloten blokken van downspins met het rangnummer $k = 1, 2, \dots, b$, en de downspins binnen een bepaald blok, k , van j_k t/m j_{k+1}

$j_{k+1} = j_k + l_k$ ($j_1 = 0$) waar l_k telkens het aantal spins in het k -de blok voorstelt. Het rangnummer van de laatste downspin van ieder blok wordt bepaald door de relatie

$$j_{k+1} = \sum_{\alpha=1}^k l_{\alpha} \quad (26a)$$

en het totale aantal downspins wordt gegeven door

$$n = \sum_{\alpha=1}^b l_{\alpha} \quad (26b)$$

De hamiltoniaan (16) werkt alleen maar op de uiteinden van de blokken van downspins, n.l. op de spins op posities X_{j_k+1} en $X_{j_k+l_k}$. Toepassen van de hamiltoniaan (16) op de golfvector (25) levert na contractie met de toestandsvector $\langle X_1, X_2, \dots, X_n |$:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{op} \cdot f(x_1, \dots, x_n) &\equiv -\frac{1}{2} N \Delta \cdot f(x_1, \dots, x_n) + \\
 &+ \sum_{k=1}^b \left\{ \Delta \cdot f(x_1, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_{j_k+1-1}, \dots, x_n) \right\} + \\
 &+ \sum_{k=1}^b \left\{ \Delta \cdot f(x_1, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_{j_k+l_k+1}, \dots, x_n) \right\} = \\
 &= -\sum_{k=1}^{b(x_1, \dots, x_n)} f(x_1, \dots, x_{j_k+1-1}, \dots, x_n) - \sum_{k=1}^{b(x_1, \dots, x_n)} f(x_1, \dots, x_{j_k+l_k+1}, \dots, x_n) + \\
 &+ \left(2 b(x_1, \dots, x_n) \cdot \Delta - \frac{1}{2} N \Delta \right) \cdot f(x_1, \dots, x_n) \\
 &= E_N(m, \Delta) \cdot f(x_1, \dots, x_n) \tag{27}
 \end{aligned}$$

Hierin stelt $b(x_1, x_2, \dots, x_n)$ vóór, het totale aantal blokken als functie van de posities X_1, X_2, \dots, X_n van de n downspins. Deze functie neemt steeds met een eenheid toe, zodra twee downspins op nabuurplaatsen van elkaar gescheiden worden.

In de vergelijking (27) kunnen ook termen voorkomen met argument $X_1 = 0$ of $X_n = N+1$. Omdat wij cyclische randcondities hebben opgelegd moeten wij deze termen interpreteren als:

$ \begin{aligned} f(0, x_2, \dots, x_n) &\equiv f(x_2, x_3, \dots, x_n, N) \\ f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, N+1) &\equiv f(1, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}) \end{aligned} $	}	(28)
--	---	------

d) De eigenwaardevergelijking als differentievergelijking.

We kunnen het probleem (27), (28) notationeel vereenvoudigen door enerzijds het gebied (6) uit te breiden tot:

$$1 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n \leq N \quad (29)$$

en anderzijds te eisen:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad \text{als ergens geldt} \quad x_i = x_{i+1} \quad (30)$$

Door eventueel een aantal termen gelijk nul toe te voegen mogen wij dan de sommaties in de eerste twee termen van (27) uitbreiden tot alle downspins (i.p.v. de eerste en laatste in ieder blok). Hierdoor gaat (27) over in:

$$- \sum_{j=1}^n f(x_1, \dots, x_{j-1}, \dots, x_n) - \sum_{j=1}^n f(x_1, \dots, x_{j+1}, \dots, x_n) + (2b(x_1, \dots, x_n) \cdot \Delta - \frac{1}{2} N \Delta) f(x_1, \dots, x_n) = E_N(m, \Delta) f(x_1, \dots, x_n) \quad (31)$$

Met de definitie van de tweede differentie:

$$\frac{\Delta^2 f}{\Delta x_j^2} = f(x_1, \dots, (x_j-1), \dots, x_n) + f(x_1, \dots, (x_j+1), \dots, x_n) - 2f(x_1, \dots, x_n) \quad (32)$$

kan dit geschreven worden in de vorm:

$$\boxed{- \sum_{j=1}^n \frac{\Delta^2 f}{\Delta x_j^2} + (2b(x_1, \dots, x_n) \cdot \Delta - \frac{1}{2} N \Delta - 2n) f(x_1, \dots, x_n) = E_N^{Heis}(m, \Delta) f(x_1, \dots, x_n)} \quad (33)$$

waarbij wij E_N van het symbool Heis. voorzien hebben ter onderscheiding van het quantumroostergas.

§ 3. Het quantumroostergas.

a) Definitie van het quantumroostergas.

De vergelijking (33) - die overigens eenvoudig te generaliseren is naar hogere dimensies - heeft formeel de vorm van een gediscretiseerde Schrödinger-vergelijking van een aantal deeltjes wisselwerkend via een potentiaal $b(x_1, \dots, x_n)$. Matsubara en Matsuda [18] hebben een dergelijk model ingevoerd onder de naam quantumroostergas om numerieke resultaten te krijgen voor de λ -overgang van het gewone drie-dimensionale helium. Vloeibaar helium is zeker niet te beschrijven met de ideale Bosegas-wet, maar om het probleem met interactie aan te pakken is ver van eenvoudig. Wij zullen ons beperken tot het één-dimensionale geval dat exact te behandelen is. Bovendien zullen we laten zien dat het continue Bose-gas uit het vorige hoofdstuk de continuum-limiet is van dit quantumroostergas.

We beschouwen een cyclische keten met N roosterplaatsen, waarop zich n Bose-deeltjes bevinden. Als basis voor de n-deeltjes-toestanden nemen wij:

$$|x_1, x_2, \dots, x_n\rangle \quad \text{met } 1 \leq x_i \leq N, i=1, \dots, n \quad (34)$$

zodat elke toestand Ψ kan worden weergegeven als:

$$\Psi = \sum_{x_1=1}^N \dots \sum_{x_n=1}^N f(x_1, \dots, x_n) \cdot |x_1, \dots, x_n\rangle \quad (34a)$$

We kiezen de golffunctie f symmetrisch, zodat het voldoende is deze vast te leggen op het beperktere gebied (29). Als we bovendien eisen dat twee deeltjes op dezelfde plaats elkaar oneindig sterk afstoten, betekent dat dat de golffunctie nul is, evenals dit het geval was voor de Heisenberg-keten (zie (30)). We kunnen dan een toestand generiek karakteriseren door voor iedere roosterplaats te geven of hij al dan niet bezet is. Dit leidt tot de volgende correspondentie met het Heisenberg-model:

$$\left. \begin{array}{ll} \text{downspins} \longleftrightarrow \text{atomen} & (\text{eenmaal bezette plaatsen}) \\ \text{upspins} \longleftrightarrow \text{geen atomen} & (\text{onbezette plaatsen}) \end{array} \right\} \quad (35)$$

We definiëren nu het quantumroostergas door het invoeren van een hamiltoniaan. Anders dan bij het klassieke roostergas moeten we nu naast de interactie ook het kinetische energiedeel in de hamiltoniaan opnemen, aangezien bij de berekening van de partitiefunctie de bijdrage van dit gedeelte niet langer uitfactoriseert. Voor de kinetische energie-operator van ons roostergas nemen wij naar analogie van die voor het continue systeem:

$$\underline{\mathcal{H}}_{\text{kin}} = - \sum_{j=1}^n \frac{\Delta^2}{\Delta X_j^2} \quad (36)$$

waar de tweede differentie is gedefinieerd als in (32).

Voor de potentiële energie nemen wij een som van paarbijdragen,

$$\underline{\mathcal{H}}_{\text{pot}} = V(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\substack{\langle i, j \rangle \\ \text{paren}}} V(x_i, x_j) \quad (37a)$$

waarbij $V(x_i, x_j)$ een naaste nabuurinteractie voorstelt, gegeven door:

$$\left. \begin{array}{l} V(i, i) = +\infty \\ V(i, i+1) = -2\Delta \\ V(i, i+t) = 0, \text{ als } t \geq 2 \end{array} \right\} i=1, 2, \dots, N \quad (37b)$$

Het quantumroostergas wordt nu gedefinieerd door het Schrödinger-probleem:

$$\underline{\mathcal{H}} \Psi = E \Psi \quad , \text{ ofwel } \underline{\mathcal{H}}_{\text{op}} f(x_1, \dots, x_n) = E f(x_1, \dots, x_n) \quad (38a)$$

$$\text{met } \underline{\mathcal{H}}_{\text{op}} = - \sum_{j=1}^n \frac{\Delta^2}{\Delta X_j^2} + \sum_{\substack{\langle i, j \rangle \\ \text{paren}}} V(x_i, x_j) \quad (38b)$$

Vanwege de Bose-symmetrie kunnen we ons dus hier beperken tot het bereik (6) :

$1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq N$. Voor elke configuratie van atomen in dit domein kunnen we weer de blokindeling (26) maken. Aangezien een systeem van n atomen verdeeld over b blokken $n - b(x_1, \dots, x_n)$ naaste-buur-paren bevat, kunnen wij het eigenwaardeprobleem voor het quantumroostergas schrijven als:

$$-\sum_{j=1}^n \frac{\Delta^2 f}{\Delta x_j^2} - 2\Delta(n - b(x_1, \dots, x_n)) \cdot f(x_1, \dots, x_n) = E_N^{QRG}(n, \Delta) f(x_1, \dots, x_n) \quad (39)$$

Dit geldt weer in het bereik (6) onder inachtneming van de randcondities (28) en de conditie (30) voor een oneindig harde pit in de potentiaal. Dus het Heisenberg-model gegeven door (33) en het quantumroostergas volgens (39) hebben dezelfde eigentoestanden. Hun hamiltonianen voor respectievelijk vaste magnetisatie en vast deeltjesaantal onderscheiden zich slechts door een constante additieve bijdrage:

$$E_N^{QRG}(n, \Delta) = E_N^{Heis}(m, \Delta) + \left(\frac{1}{2}N\Delta + 2n - 2n\Delta\right) \quad (40)$$

$$n = \frac{N}{2}(1-m)$$

Vanwege deze equivalentie hoeven we in het vervolg alleen de eigentoestanden en het energiespectrum van het quantumroostergas te berekenen. Wel zullen we begrippen ontleend aan het Heisenberg-model, zoals magnetisatie blijven gebruiken. Het zal nu ook duidelijk zijn dat net als voor het klassieke roostergas de kanonieke partitiefunctie van het magnetische systeem zal samenhangen met de grootkanonieke partitiefunctie van het quantumroostergas.

b) Vertaling van de differentievergelijking met interactieterm in een vrije Schrödinger-vergelijking met extra randcondities.

Vergelijking (39) lijkt op een eenvoudige differentievergelijking. De oplossing wordt echter bemoeilijkt door de restricties (30) en door de aanwezigheid van nabuurinteractietermen, $-2\Delta \cdot (n - b(x_1, \dots, x_n)) \neq 0$, die afhankelijk van de coördinaten x_1, \dots, x_n zijn. Als deze moeilijkheden er niet waren dan hadden we

de "vrije" lineaire differentievergelijking:

$$-\sum_{j=1}^n \frac{\Delta^2 f}{\Delta x_j^2} = E \cdot f(x_1, \dots, x_n) \quad (41)$$

met als volledige set oplossingen:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{N}} e^{i \sum_{j=1}^n k_j x_j} \quad (42)$$

$$\text{èn: } E = \sum_{j=1}^n (2 - 2 \cos k_j) = \sum_{j=1}^n 4 \sin^2 \frac{k_j}{2} \quad (43)$$

We zijn geïnteresseerd in de eigenfuncties van (39) op het bereik

$$1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq N \quad (6)$$

die bovendien bij samenvallende coördinaten de waarde nul aannemen. Wij willen nu het probleem (39) transformeren in een probleem van het type (41), waarbij nu echter de golffunctie bij samenvallende coördinaten verschillend van nul wordt, maar overigens onveranderd blijft. Wij doen dit door telkens één nabuurinteractieterm in (39) te elimineren door deze in twee opeenvolgende kinetische energitermen op te nemen. De potentiële energiterm bestaat uit $n - b(x_1, \dots, x_n)$ identieke termen van de grootte $-2 \Delta_j f(x_1, \dots, x_n)$. Een nabuurinteractieterm komt voor telkens als x_j en x_{j+1} buren zijn, d.w.z. als $x_{j+1} = x_j + 1$. De twee bijbehorende termen in de kinetische energie zijn volgens (32):

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\Delta^2 f(x_1, \dots, x_n)}{\Delta x_j^2} + \frac{\Delta^2 f(x_1, \dots, x_n)}{\Delta x_{j+1}^2} \right)_{x_{j+1} = x_j + 1} = \\ & = -f(x_1, \dots, x_{j+1}, x_{j+1}, \dots, x_n) + 2f(x_1, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n) \\ & \quad - f(x_1, \dots, x_j, x_{j+2}, \dots, x_n) + 2f(x_1, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_j, x_j, \dots, x_n) \\ & \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \quad \uparrow \\ & \quad \quad \quad j^{\text{e}} \text{ plaats} \quad (j+1)^{\text{e}} \text{ plaats} \end{aligned}$$

De eerste en de laatste term hiervan, die oorspronkelijk wegens (30) nul zijn, vervangen wij nu samen door de potentiële energieterm $-2\Delta \cdot f(x_1, \dots, x_n)$ door de conditie (30) te vervangen door de nieuwe eis:

$$\boxed{\begin{aligned} f(x_1, \dots, x_{j+1}, x_{j+1}, \dots, x_n) + f(x_1, \dots, x_j, x_{j+1}-1, \dots, x_n) = \\ = 2\Delta \cdot f(x_1, \dots, x_n) \quad \text{telkens als } x_{j+1} = x_j + 1 \end{aligned}} \quad (44)$$

We zien dus dat op het bereik (6) het probleem (39) met bijconditie (30) dezelfde oplossingen geeft als probleem (41) met bijconditie (44) (waar in beide gevallen de randcondities door (28) gegeven zijn).

c) Verband met het Bose-gas met delta-interactie.

Om het probleem gegeven door (41), (44) te kunnen oplossen, merken we op dat dit probleem de discretisatie ^{is} van het Bose-gasprobleem uit het vorige hoofdstuk op het beperkte gebied. Om dit aan te tonen introduceren we in het discrete geval de roosterafstand a , die we achteraf naar nul laten gaan. M.a.w. we vervangen de coördinaten:

$$\left. \begin{array}{ll} X_i & \longrightarrow X_i^{(a)} = a X_i \\ \text{rooster: } 1, 2, \dots, N & \longrightarrow a, 2a, \dots, Na \equiv L \\ \text{golffunctie: } f(x_1, x_2, \dots, x_n) & \longrightarrow f^{(a)}(x_1^{(a)}, x_2^{(a)}, \dots, x_n^{(a)}) \end{array} \right\} \quad (45)$$

Het domein (6) transformeert volgens:

$$1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq N \longrightarrow 0 < a \leq x_1^{(a)} < x_2^{(a)} < \dots < x_n^{(a)} \leq Na \equiv L \quad (46)$$

dus in de limiet $a \rightarrow 0$ gaat dit gebied inderdaad over in het beperkte gebied (I 9) uit het vorige hoofdstuk.

Voor de tweede differentiequotiënten krijgen we dan i.p.v. (32)

$$\frac{1}{a^2} \frac{\Delta^2 f}{\Delta x_k^2} = \frac{\Delta^2 f^{(a)}}{(\Delta x_k^{(a)})^2} = \frac{f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_k^{(a)}+a, \dots, x_n^{(a)}) + f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_k^{(a)}-a, \dots, x_n^{(a)}) - 2f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_n^{(a)})}{a^2}$$

$$\xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{\partial^2 f^{(0)}}{\partial x_k^{(0)2}} \quad (47)$$

Dus om (41) te laten overgaan in (I 14) moeten we ook nog stellen:

$$E_N^{QRG}(n, \Delta) \rightarrow \frac{1}{a^2} \frac{\hbar^2}{2m} E_N^{QRG}(n, \Delta) \equiv E_L^{(a)}(n, c) \quad (48)$$

Wij vinden dan inderdaad na de limiet $a \rightarrow 0$ uit (41):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f^{(0)}}{\partial x_j^{(0)2}} = E_L^{(0)}(n, c) f^{(0)}(x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}), \text{ m.a.w.} \quad (I 14)$$

Wij kunnen (44) omschrijven tot:

$$\frac{\Delta f^{(a)}}{\Delta x_j^{(a)}} + \frac{\Delta f^{(a)}}{-\Delta x_{j+1}^{(a)}} \equiv \frac{f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_j^{(a)}+a, x_{j+1}^{(a)}, \dots, x_n^{(a)}) - f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_n^{(a)})}{a} +$$

$$+ \frac{f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_j^{(a)}, x_{j+1}^{(a)}-a, \dots, x_n^{(a)}) - f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_n^{(a)})}{a} = \frac{2(\Delta-1)}{a} f^{(a)}(x_1^{(a)}, \dots, x_n^{(a)})$$

(44)
↑ voor $x_{j+1}^{(a)} = x_j^{(a)} + a$

wat in de limiet $a \rightarrow 0$ wordt:

$$\left(\frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_j^{(0)}} - \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_{j+1}^{(0)}} \right) \Big|_{x_{j+1}^{(0)} \downarrow x_j^{(0)}} = -c f^{(0)}(x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \Big|_{x_{j+1}^{(0)} \downarrow x_j^{(0)}}, \text{ m.a.w.} \quad (I 15)$$

waarbij we gesteld hebben:

$$\frac{2(1-\Delta)}{a} = c, \text{ ofwel } \Delta = 1 - \frac{1}{2}ac \quad (49)$$

Op analoge wijze kan worden aangetoond dat de randcondities (28) overgaan in (I 16)

n.l.

$$f^{(0)}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \Big|_{x \downarrow 0} = f^{(0)}(x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}, L).$$

De golfgetallen die in het vorige hoofdstuk uit deze condities bepaald werden veranderen bij de overgang van het quantumroostergas naar het continue Bose-gas in:

$$k_j \rightarrow k_j^{(a)} \equiv \frac{k_j}{a} \xrightarrow{a \rightarrow 0} k_j^{(0)} \quad (50)$$

Hoofdstuk III. Oplossing van het Heisenberg- en quantumroostergasprobleem m.b.v. de Bethe-Ansatz.

§ 1. De Bethe-Ansatz.

We hebben aangetoond dat het Bose-gas met δ -interactie, zoals behandeld in het hoofdstuk I, kan worden beschouwd als het limietgeval:

$$\left. \begin{array}{l} a \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty \\ \Delta \rightarrow 1 \end{array} \right\} \text{ zodanig dat } \left\{ \begin{array}{l} aN = L \\ \frac{2(1-\Delta)}{a} = c \\ n = n \end{array} \right. \quad (1)$$

van het quantumroostergas. Als oplossing van (41), (44) proberen we weer de speciale combinatie van vlakke golven van Bethe-vorm (zie (I 13)):

$$\boxed{f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_P a(P) \exp \left[i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x_j \right]} \quad (2)$$

Om aan de vrije golfvergelijking (II 41) te voldoen zouden wij kunnen volstaan met één vlakke golf. We willen echter ook voldoen aan de bijcondities (II 44) die impliciet weergeven hoe de deeltjes wisselwerken. Omdat deze interactie niet verder draagt dan één roosterafstand wordt een vlakke golf-golffunctie alleen gekoppeld aan andere vlakke golftoestanden, waarin t.o.v. de oorspronkelijke vlakke golf de impulsen van twee deeltjes uitgewisseld zijn. (Wij kunnen hierbij denken aan het klassiek mechanische analogon van een puntbotsing van twee identieke deeltjes, waarbij dan eveneens op grond van actie = -reactie de impulsen van de twee deeltjes worden uitgewisseld.) Voor de opbouw van een eigentoestand van de hamiltoniaan behoeven we daarom alleen die vlakke golven mee te nemen waarbij de golfgetallen onderling gepermuteerd zijn. Dit wordt uitgedrukt door de Bethe-Ansatz, (2). Deze uitdrukking bevat $n!$ onbekende coëfficiënten $a(P)$, die de golffunctie vastleggen in $\binom{N}{n}$ coördinaten. Desondanks zal blijken dat steeds een unieke set van $n!$ coëfficiënten $a(P)$ kan worden bepaald zodanig dat (2) voldoet aan de aansluit-

condities (II 44).

Uit de eis dat (2) een oplossing van de differentievergelijking (II 41) is, volgt:

$$E_{NRG}^Q (n, \Delta) = \sum_{j=1}^n (2 - 2 \cos k_j) = \sum_{j=1}^n 4 \sin^2 \frac{k_j}{2} \quad (3)$$

Analoog aan de afleiding voor het Bose-gas met delta-repulsie (I 18 t/m I 23) uit (I 13) substitueren we nu de Bethe-Ansatz (2) in de condities (II 44). We beschouwen achtereenvolgens het geval van één, twee of meer deeltjes:

A) In het geval van één deeltje zijn er geen condities, dus vindt men de bekende spin-golf van Bloch:

$$\left. \begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikx} \\ \text{met } k &= l \cdot \frac{2\pi}{N} \quad \text{en } l \text{ geheel} \\ E &= k^2 = l^2 \cdot \frac{4\pi^2}{N^2} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

B) In het geval van twee deeltjes is er weer maar één conditie (II 44) die men analoog aan (I 19) kan oplossen.

C) In het algemene geval van n deeltjes geeft (II 44):

$$\sum_P a(P) \cdot e^{i \sum_{l \neq j, j+1} k_{P(l)} x_l} \left\{ e^{ik_{P(j)}(x_{j+1}) + ik_{P(j+1)}(x_{j+1})} + e^{ik_{P(j)}x_j + ik_{P(j+1)}x_j} - 2\Delta e^{ik_{P(j)}x_j + ik_{P(j+1)}(x_{j+1})} \right\} = 0$$

$$\text{ofwel: } \sum_P a(P) e^{i \sum_{l \neq j, j+1} k_{P(l)} x_l + (ik_{P(j)} + ik_{P(j+1)})x_j} \left\{ e^{ik_{P(j)} + ik_{P(j+1)}} + 1 - 2\Delta e^{ik_{P(j+1)}} \right\} = 0$$

Stellen we weer de coëfficiënten van gelijke e-machten gelijk, dan vinden we:

$$\sum_{P'=P, P^*} a(P') \left\{ e^{ik_{P'(j)} + ik_{P'(j+1)}} + 1 - 2\Delta e^{ik_{P'(j+1)}} \right\} = 0$$

waarbij P en P^* twee permutaties zijn die samenhangen via de verwisseling van één paar k 's:

$$\left. \begin{aligned} P(j) &= P^*(j+1) \\ P(j+1) &= P^*(j) \\ P(l) &= P^*(l), \quad l \neq j, j+1 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} k_{P(j)} &= k_{P^*(j+1)} = p \\ k_{P(j+1)} &= k_{P^*(j)} = q. \end{aligned} \quad (5a)$$

Dit leidt tot:

$$\frac{a(P)}{a(P^*)} = - \frac{2 \Delta e^{ip} - 1 - e^{ip+iq}}{2 \Delta e^{iq} - 1 - e^{ip+iq}} \stackrel{\text{def.}}{=} - e^{-i \Theta(p,q)} \quad (5b)$$

waar we gedefinieerd hebben een functie Θ , die gegeven wordt door:

$$\boxed{\operatorname{tg} \frac{\Theta(p,q)}{2} = \frac{\operatorname{tg} \frac{q}{2} - \operatorname{tg} \frac{p}{2}}{(1 - \frac{1}{\Delta}) + (1 + \frac{1}{\Delta}) \operatorname{tg} \frac{q}{2} \operatorname{tg} \frac{p}{2}}} \quad (6)$$

We kunnen nu analoog aan (I 24) als oplossing van (5) geven:

$$a(P) = (-1)^P \prod_{l < j} \exp \left[-\frac{i}{2} \Theta(k_{P(l)}, k_{P(j)}) \right] \quad (7)$$

§ 2. Het spectrum van k -waarden.

Tot nu toe waren de golfgetallen $\{k_j\}$ nog willekeurig. De toegestane k -waarden volgen direct uit de periodieke randcondities (II 28) analoog (I 25 t/m I 28). Na uitvoering van een cyclische doorschuiving vindt men het zelfde resultaat als (I 28): n.l.

$$\exp(ik_j N) = (-1)^{n-1} \exp \left[-i \sum_{l=1}^n \Theta(k_j, k_l) \right] \quad \text{voor } j = 1, \dots, n \quad (8)$$

Na het nemen van de logaritme hieruit vinden we weer:

$$k_j N = 2\pi I_j - \sum_{\ell=1}^n \Theta(k_j, k_\ell) \quad , \quad j=1,2,\dots,n \quad (9a)$$

waarbij de I_j 's de tak van de logaritme vastleggen. Vanwege de factor $(-1)^{n-1}$ is:

$$I_j \begin{cases} \text{geheel} & \text{als } n \text{ oneven is} \\ \text{halftallig} & \text{als } n \text{ even is} \end{cases} \quad (9b)$$

Al deze vergelijkingen zijn directe generalisaties van die van het eerste hoofdstuk. In de speciale continuu-limiet (1) vindt men steeds die van het Bose-gas met delta-interactie terug. We willen dan ook weten of de set getallen $\{I_j\}$ in (9) weer een goede set quantumgetallen is, d.w.z. of de toestanden ermee uitputtend gelabeld kunnen worden.

Voorts willen wij weten of, net als door (I 40) in het eerste hoofdstuk, ook meer algemeen voor het quantumroostergas, ofwel Heisenberg-model, de grondtoestand weer gegeven is door de set:

$$I_j^{(0)} = j - \frac{n+1}{2} \quad , \quad j=1,2,\dots,n \quad (10)$$

d.w.z. $\{I_j^{(0)}\} = \left\{ -\frac{n-1}{2}, -\frac{n-1}{2} + 1, \dots, +\frac{n-1}{2} \right\}$

§ 3. Het speciale geval $\Delta=0$

a) Volledigheid van de oplossingen (9).

We bestuderen eerst het eenvoudigste geval $\Delta=0$, n.l. het isotrope x-y-model. Hiervoor is krachtens (6):

$$\Theta(p,q) \equiv 0 \quad (11a)$$

en dus uit (7): $a(p) = (-1)^p \quad (11b)$

Dit geval vertoont dus sterke overeenkomst met het geval $c = \infty$ uit het eerste hoofdstuk. Evenals toen zullen we verschillende uitspraken generaliseren voor alle Δ , door analytische voortzetting. Maar nu eerst verder met $\Delta = 0$.

Met (9a) en (11a) volgt in dit geval:

$$k_j = \frac{2\pi}{N} I_j \quad (11c)$$

Daar verandering van de golfgetallen k_j met een bedrag 2π geen invloed heeft op de golf functie (2), is de keuze van de getallen I_j slechts bepaald modulo N . Door eventuele henummering van de golfgetallen en rekening houdend met de periodiciteit, zien we dat het voldoende is de quantumgetallen te kiezen uit:

$$-\frac{N-1}{2} \leq I_1 \leq I_2 \leq \dots \leq I_n \leq \frac{N}{2}$$

waarbij we ook rekening moeten houden met (9b). Bovendien moeten alle golfgetallen verschillend gekozen worden, omdat anders de kandidaat-golf functie (2) wegens (11b) identiek nul zou worden. We moeten de I 's dus zo kiezen dat

$$-\frac{N-1}{2} \leq I_1 < I_2 < \dots < I_n \leq \frac{N}{2} \quad (12)$$

(Opmerking: gelijke golfgetallen kunnen alleen voorkomen als dat niet automatisch betekent dat de uitdrukking (5b) gelijk aan -1 is, zodra $p = q$. We denken hierbij

$$\left. \begin{array}{l} \Delta = 1 \text{ èn } p = q = 0 \\ \Delta = -1 \text{ èn } p = q = \pi \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{a(p)}{a(p^*)} = \frac{0}{0}$$

of b.v. in het vorige hoofdstuk: $c = 0$ èn $k_j \equiv 0$ (I 40).)

Bij iedere keuze (12) vinden we via (11b) en (11c) een andere toestand (2). We zien hieruit dat er bij deeltjesaantal n (d.w.z. magnetisatie m) precies $\binom{N}{n}$ verschillende toestanden behoren. Deze toestanden vormen een complete set. De bijbehorende energieën zijn

$$E = \sum_{j=1}^n 4 \sin^2 \frac{k_j}{2} \quad (3)$$

Lieb, Schultz en Mattis [19] hebben dezelfde oplossing gevonden via de operatorenmethode. Hun methode werkt echter niet voor $\Delta \neq 0$.

b) De grondtoestand voor het geval $\Delta = 0$

Wij zien dat de energie (3) minimaal is als de k_j 's en dus wegens (11c) de I_j 's zo dicht mogelijk rond nul zitten. De grondtoestand wordt dus, zoals voorspeld is, gegeven door de set waarden (10):

$$I_j^{(0)} = j - \frac{n+1}{2} \quad \text{met } j=1, 2, \dots, n$$

Dit kunnen wij ook als volgt zien: in het geval $\Delta = 0$ zijn de eigenfuncties (2) wegens (11b) en (11c):

$$f^{(0)}(x_1, \dots, x_n) \stackrel{(2)}{=} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_P (-1)^P \exp i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x_j =$$

$$\stackrel{(11b)}{=} \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{vmatrix} \exp i k_1 x_1 & \exp i k_2 x_1 & \dots & \exp i k_n x_1 \\ \exp i k_1 x_2 & \exp i k_2 x_2 & \dots & \exp i k_n x_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \exp i k_1 x_n & \exp i k_2 x_n & \dots & \exp i k_n x_n \end{vmatrix} \quad (13)$$

Stel nu:

$$S_j = \exp \left(i \frac{2\pi}{N} x_j \right) \quad (13a)$$

dan wordt:

$$f^{(0)}(x_1, \dots, x_n) \stackrel{(11c) \& (10)}{=} \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{vmatrix} S_1^{-\frac{n-1}{2}} & S_1^{-\frac{n-1}{2}+1} & \dots & S_1^{\frac{n-1}{2}} \\ S_2^{-\frac{n-1}{2}} & S_2^{-\frac{n-1}{2}+1} & \dots & S_2^{\frac{n-1}{2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_n^{-\frac{n-1}{2}} & S_n^{-\frac{n-1}{2}+1} & \dots & S_n^{\frac{n-1}{2}} \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\prod_{l=1}^n S_l^{-\frac{n-1}{2}} \right) \begin{vmatrix} 1 & S_1 & S_1^2 & \dots & S_1^{n-1} \\ 1 & S_2 & S_2^2 & \dots & S_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & S_n & S_n^2 & \dots & S_n^{n-1} \end{vmatrix}$$

Uitwerken van de determinant in deze uitdrukking (de determinant van Van der Monde) geeft:

$$\begin{aligned}
 f^{(0)}(x_1, \dots, x_n) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\prod_{l=1}^n s_l^{-\frac{n-1}{2}} \right) \cdot \prod_{1 \leq i < j \leq n} (s_j - s_i) \\
 &= \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} s_i^{-\frac{1}{2}} s_j^{-\frac{1}{2}} (s_j - s_i) \\
 &= \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \left[\left(\frac{s_j}{s_i} \right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{s_i}{s_j} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \\
 &\stackrel{(13a)}{=} \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \left[2i \cdot \sin \frac{\pi}{N} (x_j - x_i) \right] \quad (14b)
 \end{aligned}$$

of na hernormering

$$f^{(0)}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\mathcal{N}'} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \sin \left[\frac{\pi}{N} (x_j - x_i) \right] \quad (14c)$$

Nu is de functie (14) gedefinieerd in het gebied (II 6), n.1.

$1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq N$, dus $0 < x_j - x_i < N$ voor $j > i$. We zien dus dat overal geldt:

$$f^{(0)}(x_1, x_2, \dots, x_n) > 0 \quad (15)$$

Dit moet de grondtoestand zijn op grond van stelling A uit II § 2b, immers elke andere eigenfunctie is niet tekenvast op orthogonaliteitsgronden.

§ 4. Volledigheid van de Bethe-Ansatz oplossingen voor $\Delta \neq 0$

We gaan weer terug naar willekeurige Δ en maken nu de substitutie:

$$u_j = e^{ik_j} \tag{16}$$

Hiermee gaat de Bethe-Ansatz-oplossing over in:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) \stackrel{(2)}{=} \frac{1}{N} \sum_P a(P) \prod_{j=1}^n u_{P(j)}^{x_j} \tag{17a}$$

$$E^{QRG}(n, \Delta) \stackrel{(3)}{=} \sum_{j=1}^n \left(2 - u_j - \frac{1}{u_j} \right) \tag{17b}$$

$$e^{-i\Theta(k_j, k_\ell)} \stackrel{(5b)}{=} \frac{2\Delta u_j - 1 - u_j u_\ell}{2\Delta u_\ell - 1 - u_j u_\ell} \tag{17c}$$

M.b.v. (7) zien wij in dat $a(P)$ een algebraïsche functie is in u_j 's en Δ :

$$a(P) = (-1)^P \prod_{\ell < j} \left(\frac{2\Delta u_{P(\ell)} - 1 - u_{P(j)} u_{P(\ell)}}{2\Delta u_{P(j)} - 1 - u_{P(j)} u_{P(\ell)}} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{17d}$$

We kunnen de wortel verdrijven door de coëfficiënt van de identieke permutatie $a(I)$ af te splitsen:

$$a(I) = \prod_{\ell < j} \left(\frac{2\Delta u_\ell - 1 - u_j u_\ell}{2\Delta u_j - 1 - u_j u_\ell} \right)^{\frac{1}{2}}$$

In deze $a(I)$ kunnen wij opnemen alle factoren waarvoor met $\ell < j$ ook $P(\ell) < P(j)$ is. De overige benodigde factoren $P(\ell) > P(j)$ komen in (17d) vergeleken met de overeenkomstige factoren in $a(I)$ als omgekeerde voor. Na de afsplitsing van $a(I)$ worden deze factoren dus gekwadraterd, waardoor (17d) overgaat in:

$$\begin{aligned} a(P) &= a(I) \cdot (-1)^P \prod_{\substack{\ell < j \\ P(\ell) > P(j)}} \frac{2\Delta u_{P(\ell)} - 1 - u_{P(j)} u_{P(\ell)}}{2\Delta u_{P(j)} - 1 - u_{P(j)} u_{P(\ell)}} \\ &= \frac{a(I)}{\prod_{\ell > j} (2\Delta u_\ell - 1 - u_j u_\ell)} \cdot (-1)^P \cdot \prod_{P(\ell) > P(j)} (2\Delta u_{P(\ell)} - 1 - u_{P(j)} u_{P(\ell)}) \end{aligned} \tag{17e}$$

In wezen is de coëfficiënt dus afgezien van een normeringsfactor gelijk aan een van de permutatie P afhankelijk polynoom in de u_j 's en Δ .

De vergelijking voor de golfgetallen (8) gaat door de substitutie (16) over in een stelsel van algebraïsche vergelijkingen:

$$u_j^N = (-1)^{n-1} \prod_{\ell=1}^n \frac{2 \Delta u_j - 1 - u_j u_\ell}{2 \Delta u_\ell - 1 - u_j u_\ell}, \text{ voor } j = 1, \dots, n \quad (18)$$

Oplossing van deze vergelijkingen geeft een set van algebraïsche functies $\{u_j(\Delta)\}$ dus functies van Δ , met hoogstens polen en vertakkingspunten van eindige orde. Ook de energie wordt dan volgens (17b) een algebraïsche functie van Δ , evenals de golf functie (17a) en zijn coëfficiënten (17e).

Voor $\Delta=0$ kennen wij de volledige oplossing van ons probleem:

$$u_j^N = (-1)^{n-1}, \text{ voor } j=1, \dots, n \rightarrow u_j = e^{i \frac{2\pi}{N} I_j} \quad (19)$$

We moeten hieruit dan overeenkomstig (12) een set van n verschillende eenheidswortels kiezen. Voor algemene Δ nemen we alleen die oplossingen die voor $\Delta \rightarrow 0$ in een van de genoemde oplossingen van (19) overgaan. We kunnen dus de oplossing voor algemene Δ opvatten als de analytische voortzetting van de oplossing (19) voor het geval $\Delta=0$.

We kunnen echter problemen verwachten als we op de reële Δ -as polen of vertakkingspunten van de golf functie of de energie passeren. Dit kan zoals gezegd slechts in eindig veel punten gebeuren. Er kunnen echter geen polen optreden, want de golf functies zijn normeerbaar en ook de energie is eindig omdat de hamiltoniaan een begrensde operator is (wat men eenvoudig uit (II 13) of (II 16) en (II 40) kan aflezen), zodang Δ begrensd is. Dus de polen en nulpunten van de functies $u_j(\Delta)$ moeten steeds tegen elkaar wegvallen. Ook de vertakkingspunten geven geen onoverkomelijke moeilijkheden. Worden namelijk de analytische voortzettingen van twee bij $\Delta=0$ verschillende golf functies ergens (bijv. bij $\Delta=\Delta_0$)

aan elkaar gelijk, dan kan men in een omgeving van Δ_0 hieruit een nieuw ortho-
normaal paar functies vormen en vervolgens de limiet nemen voor Δ naar Δ_0 .

Samenvattend zien wij dus dat de Bethe-Ansatz inderdaad leidt tot een vol-
ledige set van eigentoestanden.

§ 5. Eigenschappen van de grondtoestand voor $\Delta \neq 0$.

Wij tonen in deze paragraaf aan dat ook voor $\Delta \neq 0$ de grondtoestand wordt
bepaald door de oplossing $\{k_j(\Delta)\}$ van de voorwaarde (9) met de keuze (10), ofwel:

$$\varphi_j(k_1, k_2, \dots, k_n; \Delta) \stackrel{\text{def}}{=} -k_j N + 2\pi I_j^{(b)} - \sum_{l \neq j} \Theta(k_j, k_l) \stackrel{(9)}{=} 0 \quad (20)$$

waarbij de quantumgetallen

$$I_j^{(b)} = j - \frac{n+1}{2}, \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (20a)$$

een aaneengesloten blok van gehele of halftallige waarden rondom het nulpunt op-
vullen. Men kan bovendien aantonen dat voor elke $|\Delta| < 1$ de set golfgetallen die
door (20) bepaald worden allen reëel zijn en allen liggen binnen het natuurlijk
bereik, (d.w.z. waar (20) glad is (zie appendix)).

$$\left. \begin{array}{l} -\pi < k_1 < k_2 < \dots < k_n < \pi \quad \text{als } \Delta \leq -1 \\ -(\pi-\mu) < k_1 < k_2 < \dots < k_n < \pi-\mu \quad \text{als } -1 < \Delta < 1 \end{array} \right\} \quad (21)$$

Hier wordt de hoek μ bepaald door de waarde van de parameter Δ , via de relatie:

$$\Delta = -\cos \mu \quad \left(\begin{array}{l} \text{tak: } -1 < \Delta < 1 \\ 0 < \mu < \pi \end{array} \right) \quad (22)$$

Wij hebben de bovengenoemde eigenschappen van de golfvectoren voor de grond-

toestand al kunnen vaststellen voor het triviale geval $\Delta=0$, waar op grond van (11c)

$$k_j = \frac{2\pi I_j^{(0)}}{N} \quad (j=1,2,\dots,n; \Delta=0) \quad (11c)$$

Nu is de functie φ_j gegeven door (20) in het gebied (21) differentiëerbaar naar de golfgetallen k_j . Bovendien is de matrix van eerste afgeleiden in het punt $\Delta=0$:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial k_j} = -N \delta_{ij} \quad (\Delta=0)$$

niet singulier. In de buurt van $\Delta=0$ vinden we dus eenduidig de reële oplossing $k_j = k_j(\Delta)$ als voortzetting van de oplossing bij $\Delta=0$. Op grond van de eenduidigheid en de symmetrie van vergelijking (20) moet deze oplossing naast ieder golfgetal $k_j(\Delta)$ ook $-k_j(\Delta)$ bevatten, waarvoor geldt op grond van (20a):

$$-k_j(\Delta) = k_{n+1-j}(\Delta) \quad \text{voor } j = 1, 2, \dots, n \quad (23)$$

We kunnen deze symmetrische reële oplossing analytisch voortzetten, totdat we een singulariteit tegenkomen zoals besproken is in § 4. De functies $u_j(\Delta) = \exp ik_j(\Delta)$ liggen daarbij steeds op de eenheidscirkel en hebben daarom geen pool. We kunnen dus als eerste singulariteit op de reële as, zeg voor $\Delta = \Delta_1$, alleen een vertakkingspunt van eindige orde verwachten, n.l. daàr waar een aantal u_j 's aan elkaar gelijk worden.

Dit is het geval bij $\Delta=1$. We vinden daar n.l. $k_j=0$ resp. $u_j=1$ voor alle j , als $\Delta=1$.

$$(24)$$

We kunnen de aard van deze singulariteit nader onderzoeken door (18) te ontwikkelen naar $\{u_j-1\}$ en $\Delta-1$. We vinden dan analoog aan (I 43) voor het bijna ideale

Bose-gas:

$$\left. \begin{aligned} u_j &= 1 + q_j \sqrt{2(\Delta-1)} + O(\Delta-1) \\ k_j &= i q_j \sqrt{2(\Delta-1)} + O(\Delta-1) \end{aligned} \right\} \Delta \rightarrow 1 \quad (25)$$

waar de q_j 's nu de nulpunten blijken te zijn van het n-de Gegenbauerpolynoom $C_n^{(\frac{N-3}{2})}(q)$ [20]. De golfgetallen worden dus van zuiver reëel voor $\Delta < 1$ zuiver imaginair als $\Delta > 1$!

Om aan te tonen dat er voor $\Delta < 1$ geen vertakkingspunt kan optreden merken wij allereerst op, dat als de golfgetallen in het bereik (21) liggen, zij nooit aan elkaar gelijk kunnen worden, omdat dit zou impliceren dat minstens twee quantumgetallen $I_i^{(\omega)} \stackrel{(20)}{=} I_j^{(\omega)}$ aan elkaar gelijk zouden worden, wat in strijd met (20a) is. De golfgetallen kunnen dus nog hoogstens bij een zekere Δ de rand van het bereik (21) overschrijden. Dit kan men uitsluiten door aan te tonen dat minstens één van de functies $\varphi_j(k_1, \dots, k_n; \Delta)$ gegeven door (20) van nul gaat verschillen zodra één der k 's op de rand van het gebied (21) komt te liggen. (De benodigde afschattingen zijn te vinden in [21].)

Wij hebben dus aangetoond dat (20) een unieke reële oplossing $\{k_j(\Delta)\}$ heeft in het gebied (21) die analytisch is langs de reële Δ -as voor $\Delta < 1$. De bijbehorende energie gegeven door (3) is dus eveneens analytisch voor $\Delta < 1$. Omdat wegens de stelling A uit II § 2b de grondtoestand niet ontaard is en een analytische energie heeft en omdat onze oplossing voor $\Delta = 0$ de grondtoestand geeft, leidt deze oplossing inderdaad ook tot de grondtoestand voor $\Delta < 1$. Voor $\Delta \geq 1$ is de grondtoestand ferromagnetisch met een energie tussen de grenzen (II 18a) en (II 19b). De bijbehorende golfgetallen zijn dan zuiver imaginair.

§ 6. De grondtoestandsenergie voor een oneindige keten.

Wij hebben tot nog toe steeds een eindig systeem beschouwd. Nu gaan wij, zoals in (II 17) de thermodynamische limiet nemen:

$$\boxed{\begin{array}{l} N \rightarrow \infty \\ n \rightarrow \infty \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} N \rightarrow \infty \\ n \rightarrow \infty \end{array}} \right\} \frac{n}{N} \rightarrow d = \frac{1-m}{2} \quad \begin{array}{l} d \text{ vast} \end{array} \quad (26)$$

We willen nu berekenen (zie (II 17)) de grondtoestandsenergie per spin (roosterplaats) bij magnetisatie m (dichtheid d):

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{Heis}}(m, \Delta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} E_N^{\text{Heis}}(m(N), \Delta) \end{array} \right. \quad (27a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{QRG}}(d, \Delta) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \frac{n}{N} \rightarrow d}} \frac{1}{N} E_N^{\text{QRG}}(n, \Delta) \end{array} \right. \quad (27b)$$

Wegens (II 40) geldt hiertussen de relatie:

$$\left. \begin{array}{l} e^{\text{QRG}}(d, \Delta) = e^{\text{Heis}}(m, \Delta) + \frac{1}{2} \Delta + 2d(1-\Delta) \\ \text{met } d = \frac{1-m}{2} \end{array} \right\} \quad (27c)$$

Voor $\Delta \geq 1$ (d.w.z. voor het ferromagnetische geval) hebben wij dit probleem al opgelost in (II 20). De oplossing luidt in dit geval:

$\left. \begin{array}{l} e^{\text{Heis}}(m, \Delta) \equiv -\frac{1}{2} \Delta \\ e^{\text{QRG}}(d, \Delta) = 2d(1-\Delta) \end{array} \right\} \Delta \geq 1$	(28a)
	(28b)

Op grond van de spininversiesymmetrie (II 21) geldt verder:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{Heis}}(m, \Delta) = e^{\text{Heis}}(-m, \Delta) \end{array} \right. \quad (29a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{QRG}}(d, \Delta) = e^{\text{QRG}}(1-d, \Delta) \end{array} \right. \quad (29b)$$

Wij hoeven dus nu alleen nog te beschouwen het geval $\Delta < 1$ en $n \leq \frac{1}{2}N$. In dit geval verdichten de golfgetallen k_j zich in de limiet (26) tot een nette symmetrische verdelingsfunctie in het interval (21).^{*})

^{*}) Men kan dit bewijzen volgens de methoden uit [22], of door verscherping van de volgende argumenten. (Voor $\Delta < -2$ en $0 \leq \Delta < 1$ is dit eenvoudig te doen.)

Wij schrijven voor het aantal golfgetallen in het interval $(k, k + dk)$:

$$N \cdot \rho(k) \cdot dk = \left(\sum_{\ell=1}^n \delta(k - k_{\ell}) \right) \cdot dk \quad (30)$$

waar wij een factor N afgesplitst hebben, opdat $\rho(k)$ eindig blijft in de limiet (26).

De dichtheid van golfgetallen in de k -ruimte, $\rho(k)$, staat in direct verband met de verdeling in de ruimte van de variabelen:

$$h_j \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi I_j^{(0)}}{N} \stackrel{(20a)}{=} \frac{2\pi}{N} \left(j - \frac{n+1}{2} \right) \quad \text{voor } j = 1, \dots, n \quad (31)$$

die uniform is binnen het interval:

$$- \frac{\pi(n-1)}{N} \leq h \leq \frac{\pi(n-1)}{N} \quad (31a)$$

Dit is een gevolg van het feit dat de I -waarden in de grondtoestand (20a) een aaneengesloten blok rondom $I = 0$ vormen. Als wij dus het aantal "toestanden" h_j in het interval $(h, h + dh)$ van de h -ruimte aangeven met:

$$N \cdot g(h) \cdot dh = \left(\sum_{\ell=1}^n \delta(h - h_{\ell}) \right) \cdot dh \quad (\text{met } h_j \text{ volgens (31)}) \quad (32)$$

dan gaat dit in de limiet voor grote N (26) over in :

$$g(h) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} & \text{voor } -\pi d \leq h \leq \pi d \\ 0 & \text{voor } h < -\pi d, \text{ of } h > \pi d \end{cases} \quad (33)$$

Met behulp van de definities (31) en (32), zien wij dat het stelsel vergelijkingen:

$$k_j = \frac{2\pi I_j}{N} - \frac{1}{N} \sum_{\ell=1}^n \Theta(k_j, k_{\ell}) \quad j = 1, \dots, n \quad (9)$$

voor de golfgetallen $\{k_j\}$, overgaat in de integraalvergelijking:

$$k(h) = h - \int_{-\pi d}^{+\pi d} dh' \cdot g(h') \cdot \Theta(k(h), k(h')) \quad (34)$$

voor de functie $k(h)$. Immers voor $h = h_j$, en met (32) ingevuld gaat (34) weer in (9) over.

Wij nemen nu de limiet voor een oneindige keten (26), door in (34) de limietverdeling (33) in te vullen. De integraalvergelijking (34) heeft dan één unieke oplossing $k(h)$, die monotoon stijgend is. Hierdoor bestaat de inverse functie $h(k)$, die wegens (34) voldoet aan de functionaalvergelijking:

$$k = h(k) - \int_{-Q}^{+Q} dk' \cdot \frac{dh(k')}{dk} \cdot g(h(k')) \cdot \Theta(k, k') \quad (35)$$

met: $\pi d = h(Q)$ of: $Q = k(\pi d)$

Het verband tussen de dichtheidsfuncties $f(k)$ en $g(h)$ volgt uit de eis:

$$f(k) dk = g(h) dh \quad (k=k(h)) \quad (35a)$$

of:

$$\frac{dh}{dk}(k) = \frac{f(k)}{g(h)} \stackrel{(33)}{=} 2\pi f(k) \quad (35b)$$

Differentieren wij nu beide leden van (35) naar k , en vullen wij (35b) in, dan vinden wij de volgende integraalvergelijking voor de functie $f(k)$:

$$1 = 2\pi f(k) - \int_{-Q}^{+Q} \frac{\partial \Theta(k, k')}{\partial k} \cdot f(k') dk' \quad \text{voor } -Q < k < +Q \quad (36)$$

In deze vergelijking en in (35) is de waarde van de parameter Q die in de integraalgrenzen optreedt, vastgelegd door de eis:

$$\left. \begin{aligned} g(h) \neq 0 \text{ en } p(k) \neq 0 & \text{ als } \begin{aligned} -Q < k < Q \\ (-\pi d < h < \pi d) \end{aligned} \\ g(h) = p(k) = 0 & \text{ als } k > Q \text{ of } k < -Q \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

Hieruit volgt op grond van (35a) en (33), dat:

$$\boxed{\int_{-Q}^{+Q} p(k) dk = \int_{-\pi d}^{+\pi d} g(h) dh = d} \quad (38)$$

Uit deze betrekking kan Q als functie van de dichtheid d berekend worden.

Op dezelfde wijze kunnen wij ook de uitdrukking voor de energie van het quantumroostergas omvormen tot een integraal: (uit (3))

$$\boxed{e^{QRG}(d, \Delta) = \int_{-Q}^{+Q} 2(1 - \cos k) p(k) dk} \quad (39a)$$

en tenslotte vinden wij m.b.v. (27c) en (38) voor het Heisenbergmodel:

$$\boxed{e^{\text{Heis}}(m, \Delta) = -\frac{\Delta}{2} + \int_{-Q}^{+Q} 2(\Delta - \cos k) p(k) dk} \quad (39b)$$

Wij moeten nu dus eerst (36) oplossen, waaruit wij $p(k; Q, \Delta)$ vinden. Door invullen in (38) vinden wij dan $Q = Q(d) = Q(m)$, waarna de energie volgt uit (39). Wij behandelen eerst twee eenvoudige gevallen:

A) Het eenvoudigste is het geval $d = 0$, $m = 1$ (geen deeltjes, resp. alle spins up). Met (37) en (38) volgt dan onmiddellijk $Q = 0$. Dus de energie (39) wordt in dit geval:

$$\left\{ \begin{aligned} e^{QRG}(0, \Delta) &= 0 \end{aligned} \right. \quad (40a)$$

$$\left\{ \begin{aligned} e^{\text{Heis}}(1, \Delta) &= -\frac{\Delta}{2} \end{aligned} \right. \quad (40b)$$

wat onmiddellijk begrijpelijk is, aangezien in deze toestand alle spins up staan met paarinteractie $-\frac{1}{2} \Delta$, respectievelijk het aantal deeltjes nul is.

[B) Ook eenvoudig is het X-Y-model. Dit is het geval $\Delta = 0$, waarvoor wij gezien hebben in (11a), dat $\Theta \equiv 0$. Uit (36) vinden wij daarmee:

$$\rho(k) \equiv \frac{1}{2\pi} \quad \text{als} \quad -Q < k < +Q \quad (41a)$$

wat m.b.v. (38) leidt tot:

$$d = \frac{Q}{\pi}, \quad \text{of wel} \quad Q = \pi d = \pi \left(\frac{1-m}{2}\right) \quad (41b)$$

Vullen wij dit in in (39) dan vinden wij:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{QRG}(d,0) = 2d - \frac{2}{\pi} \sin \pi d \\ e^{Heis}(m,0) = -\frac{2}{\pi} \sin \frac{\pi}{2}(1-m) = -\frac{2}{\pi} \cos \frac{\pi}{2}m \end{array} \right. \quad (41c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{QRG}(d,0) = 2d - \frac{2}{\pi} \sin \pi d \\ e^{Heis}(m,0) = -\frac{2}{\pi} \sin \frac{\pi}{2}(1-m) = -\frac{2}{\pi} \cos \frac{\pi}{2}m \end{array} \right. \quad (41d)$$

Alvorens het algemene geval aan te pakken, merken wij op dat de integraalvergelijking (36) aanzienlijk vereenvoudigd kan worden door een zodanige transformatie op nieuwe variabelen uit te voeren, dat de integraalkern $\Theta(k_1, k_2)$ overgevoerd wordt in een verschilkern. Deze transformatie zullen wij nu eerst bespreken.

§ 7. De verschilkern transformatie.

Wij zoeken nu eerst een transformatie:

$$\left. \begin{array}{l} k \longrightarrow \alpha \\ k_1 \longrightarrow \alpha_1 \\ k_2 \longrightarrow \alpha_2 \end{array} \right\} \text{ dus} \quad k = k(\alpha) \quad (42)$$

zodanig dat de functie $\Theta(k_1, k_2)$, gedefinieerd door (5b), of wel:

$$e^{-i\Theta(k_1, k_2)} = \frac{2\Delta e^{ik_1-1} - e^{i(k_1+k_2)}}{2\Delta e^{ik_2-1} - e^{i(k_1+k_2)}} \quad (43)$$

overgaat in een verschilkern. Daartoe stellen wij de eis dat de functie $k(\alpha)$ voldoet aan de volgende functionaalvergelijking:

$$\Theta(k_1, k_2) = \boxed{\Theta(k(\alpha_1), k(\alpha_2)) = \Theta(0, k(\alpha_2 - \alpha_1))} \stackrel{\text{def}}{=} \Theta(\alpha_2 - \alpha_1) \quad (44)$$

Wij kunnen deze vergelijking als volgt oplossen: Differentieer (44) naar α_2 en stel $\alpha_2 = \alpha_1 = \alpha$. Dan vindt men:

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial \alpha_2}\right)_{\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha} = \left(\frac{\partial \Theta}{\partial k_2}\right)_{k_1 = k_2 = k(\alpha)} \cdot \left(\frac{dk(\alpha_2)}{d\alpha_2}\right)_{\alpha_2 = \alpha} = \left(\frac{\partial \Theta}{\partial k_2}\right)_{k_1 = k_2 = 0} \cdot \left(\frac{dk(\alpha_2 - \alpha_1)}{d\alpha_2}\right)_{\alpha_2 = \alpha_1} \quad (45a)$$

dus

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial k_2}\right)_{k_1 = k_2 = k} \cdot \frac{dk(\alpha)}{d\alpha} = \left(\frac{\partial \Theta}{\partial k_2}\right)_{k_1 = k_2 = 0} \cdot \left(\frac{dk(\alpha)}{d\alpha}\right)_{\alpha=0} = \text{const}(\Delta) \quad (45b)$$

Uit (43), of (6) berekenen wij nu eerst:

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial k_2}\right)_{k_1 = k_2 = k} = \frac{\Delta}{\Delta - \cos k} \quad (46)$$

Combineren van (45b) en (46) leert:

$$\frac{\Delta}{\Delta - \cos k} \cdot \frac{dk}{d\alpha} = \text{const}(\Delta) = C^{-1} \quad (45c)$$

of wel:

$$\boxed{\alpha(k) = \alpha(0) + C \cdot \int_0^k \frac{\Delta dk}{\Delta - \cos k}} \quad (47)$$

Uitvoering van de integratie in (47) levert voor $\Delta \neq \pm 1$:

$$\alpha(k) = \alpha(0) - \frac{C\Delta}{\sqrt{1-\Delta^2}} \ln \frac{(-\Delta + i\sqrt{1-\Delta^2}) + e^{ik}}{1 + (-\Delta + i\sqrt{1-\Delta^2})e^{ik}} \quad (48a)$$

Door gebruik te maken van de definitie (22), of wel:

$$\Delta = -\cos \mu, \quad \sqrt{1-\Delta^2} = \sin \mu \quad (22)$$

gaat (48a) over in:

$$\alpha(k) = \alpha(0) + \frac{c}{\operatorname{tg} \mu} \ln \left(\frac{e^{i\mu} + e^{ik}}{1 + e^{i(\mu+k)}} \right) \quad (48b)$$

Het ligt voor de hand om te kiezen

$$\left. \begin{aligned} \alpha(0) &= 0 \\ c &= -\frac{\sqrt{1-\Delta^2}}{\Delta} = \operatorname{tg} \mu \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

waardoor de transformatie (48) overgaat in de "gebroken lineaire" transformatie^{*}:

$$e^\alpha = \frac{e^{i\mu} + e^{ik}}{1 + e^{i(\mu+k)}} \quad (50a)$$

$$e^{ik} = \frac{(-e^{i\mu}) + e^\alpha}{1 + (-e^{i\mu}) \cdot e^\alpha} \quad (50b)$$

Dit kunnen wij ook schrijven als:

$$\operatorname{tgh} \frac{\alpha}{2} = \operatorname{tg} \frac{\mu}{2} \cdot \operatorname{tg} \frac{k}{2} \quad (50c)$$

De differentiaalvergelijking (45) is slechts een noodzakelijke voorwaarde waaraan de transformatie moet voldoen. Deze conditie is niet zonder meer voldoende, omdat het bestaan van de verschilkerntransformaties (44) niet automatisch voor

^{*}) De gebroken lineaire transformatie komt in de literatuur over deze modellen het eerst voor bij Walker [23], die hem zonder meer als de verschilkernttransformatie poneert.

elke Θ gegarandeerd is. In ons geval is alles in orde, wat blijkt als wij de gevonden transformatie (50) invullen in de uitdrukking (43) of (6) voor $\Theta(k_1, k_2)$.

Deze gaat hierdoor over in:

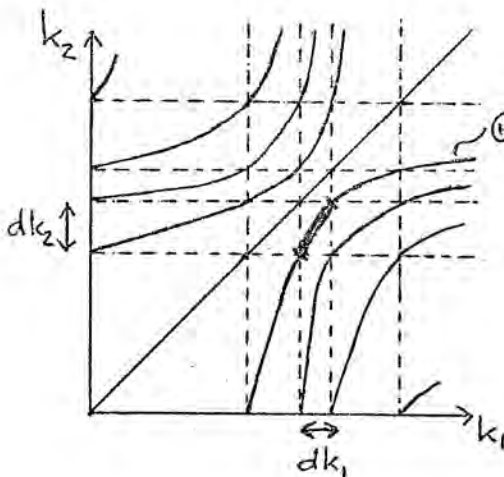
$$e^{-i\theta(\alpha_2 - \alpha_1)} = \frac{-e^{-2i\mu} + e^{\alpha_2 - \alpha_1}}{1 - e^{-2i\mu + (\alpha_2 - \alpha_1)}} \quad (51a)$$

of:

$$\operatorname{tg} \frac{1}{2} \theta(\alpha_2 - \alpha_1) = \operatorname{cotg} \mu \cdot \operatorname{tgh} \frac{1}{2}(\alpha_2 - \alpha_1) \quad (51b)$$

dus inderdaad in een verschilkern.

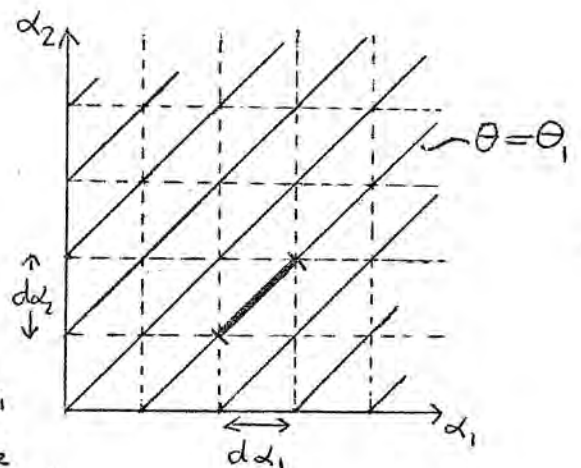
Wij kunnen ook op algemenere gronden inzien, wat de betekenis van de transformatie is, d.w.z. wat noodzakelijke en voldoende voorwaarden zijn opdat de verschilkerntransformatie (44) bestaat. Wij gaan daartoe kijken naar lijnen in het (k_1, k_2) -vlak, waar $\Theta(k_1, k_2)$ constant is. Deze staan kwalitatief geschetst in figuur 1.



figuur 1.

$$\begin{cases} \alpha_1 = \alpha(k_1) \\ \alpha_2 = \alpha(k_2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} d\alpha_1 = \alpha'(k_1) dk_1 \\ d\alpha_2 = \alpha'(k_2) dk_2 \end{cases}$$



figuur 2.

Voor deze lijnen geldt:

$$d\Theta = \frac{\partial \Theta}{\partial k_1} dk_1 + \frac{\partial \Theta}{\partial k_2} dk_2 \equiv 0 \quad \text{ofwel}$$

$$\left(\frac{dk_2}{dk_1} \right)_{\Theta} = - \frac{\frac{\partial \Theta}{\partial k_1}}{\frac{\partial \Theta}{\partial k_2}} \stackrel{(6)}{=} \frac{\cos \mu + \cos k_2}{\cos \mu + \cos k_1} \quad (52)$$

De verschilkerntransformatie veroorzaakt, zoals wij uit de figuren 1 en 2 kunnen zien, een zodanige schaalverandering op de assen, dat de lijnen van constante Θ overgaan in rechte lijnen, die een hoek van 45° maken met de nieuwe assen. Nodige én voldoende voorwaarde voor het bestaan van een transformatie, $k \rightarrow \alpha$, die $\Theta(k_1, k_2)$ omzet in een verschilkern $\Theta(\alpha_2 - \alpha_1)$, is de eis dat na transformatie geldt:

$$\left(\frac{d\alpha_2}{d\alpha_1} \right)_{\Theta} \equiv \left(\frac{\alpha'(k_2) dk_2}{\alpha'(k_1) dk_1} \right)_{\Theta} \equiv 1 \quad (52a)$$

dus wegens (52) dat:

$$- \frac{\frac{\partial \Theta(k_1, k_2)}{\partial k_1}}{\frac{\partial \Theta(k_1, k_2)}{\partial k_2}} \equiv \frac{\alpha'(k_1)}{\alpha'(k_2)} \quad (52b)$$

een quotiënt is van een tekenvaste functie van k_1 en dezelfde functie van k_2 . Aan deze voorwaarde is in het onderhavige geval voldaan (zie (52)).

De transformatie (50) kan worden geïnterpreteerd als een homogene lineaire transformatie. Stel daartoe, zoals in (16):

$$e^{ik} = \frac{u_2}{u_1} = u \quad (53a)$$

en analoog

$$e^{\alpha} = \frac{z_2}{z_1} = z \quad (53b)$$

Hierdoor kan de gebroken lineaire transformatie (50) worden geschreven in de meer suggestieve vorm:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1 = a_{11}z_1 + a_{12}z_2 \quad (54a) \\ u_2 = a_{21}z_1 + a_{22}z_2 \quad (54b) \end{array} \right. \quad u = \frac{-e^{i\mu} + z}{1 - e^{i\mu}z} \quad (54c)$$

waar a_{11}, a_{12}, a_{21} en a_{22} de componenten zijn van een homogene matrix A en voldoen aan de betrekkingen:

$$a_{11} = a_{22} \quad (55a)$$

$$a_{12} = a_{21} \quad (55b)$$

$$\frac{a_{12}}{a_{11}} = -e^{i\mu} \quad (55c)$$

Wij zien dat deze transformatie singulier is als:

$$-e^{i\mu} = \pm 1 \quad \text{d.w.z.} \quad \Delta = \pm 1 \quad (56)$$

Wat te verwachten was omdat dan de integratie van (47) niet netjes gedaan is in (48a).

Voor reële μ in het interval

$$0 < \mu < \pi \quad \text{dus voor} \quad -1 < \Delta < 1 \quad (57a)$$

gaan de punten van de eenheidscirkel in het u-vlak over in punten van de reële as in het complexe z-vlak; met name corresponderende k-waarden in het "natuurlijke bereik",

$$-(\pi - \mu) < k < \pi - \mu \quad (\text{k reëel}) \quad (58a)$$

met de punten

$$z = \frac{e^{i\mu} + u}{1 + e^{i\mu} \cdot u} = \frac{\cos \frac{1}{2}(\mu - k)}{\cos \frac{1}{2}(\mu + k)} \quad (59a)$$

van de positieve reële as in het z -vlak, en dus met de gehele reële as in het α -vlak:

$$-\infty < \alpha < \infty \quad (60a)$$

Voor zuiver imaginaire μ -waarden:

$$-\infty < \lambda \stackrel{\text{def}}{=} -i\mu < \infty \quad \text{dus voor} \quad \Delta < -1 \quad (57b)$$

gaan de punten van de eenheidscirkel in het u -vlak over in punten van de eenheidscirkel in het z -vlak,

$$z = \frac{e^{-\lambda} + e^{ik}}{e^{-\lambda} + e^{-ik}} \cdot e^{-ik} \Rightarrow |z| = 1 \quad (59b)$$

Voor k in het natuurlijke bereik

$$-\pi < k < \pi \quad (58b)$$

doorloopt α dus nu het interval

$$\text{" } -i\pi < \alpha < i\pi \text{"} \quad (60b)$$

van de imaginaire as, wat men ook kon inzien uit (50c), of wel

$$\text{tg } \frac{-i\alpha}{2} = \text{tgh } \frac{\lambda}{2} \cdot \text{tg } \frac{k}{2} \quad (50d)$$

§ 8. De oplossing van het algemene geval.

Wij keren nu terug naar de integraalvergelijking (36), met de conditie (38) en de uitdrukkingen (39) voor de grondtoestandsenergie per deeltje van een oneindige keten. Hierop willen wij de transformatie (50) toepassen. Daartoe voeren wij een nieuwe dichtheidsfunctie in de α -ruimte $R(\alpha)$ in, gedefinieerd door de eis:

$$R(\alpha) d\alpha = \rho(k) dk \quad (61a)$$

dus

$$\rho(k) = R(\alpha) \cdot \frac{d\alpha(k)}{dk} \quad (61b)$$

Invullen van (56b) en van de identiteit

$$\frac{\partial \Theta(k, k')}{\partial k} = \frac{\partial \Theta(\alpha' - \alpha)}{\partial \alpha} \cdot \frac{d\alpha(k)}{dk} = - \frac{\partial \Theta(\alpha' - \alpha)}{\partial \alpha'} \cdot \frac{d\alpha(k)}{dk} \quad (62)$$

in de integraalvergelijking (36) levert:

$$\boxed{\frac{dk(\alpha)}{d\alpha} = 2\pi R(\alpha) + \int_{-b}^{+b} \frac{\partial \Theta(\alpha' - \alpha)}{\partial \alpha'} \cdot R(\alpha') d\alpha'} \quad (63)$$

waarbij b wegens (38) en (61a) met Q samenhangt volgens:

$$\boxed{\int_{-b}^{+b} R(\alpha) d\alpha = \int_{-Q}^{+Q} \rho(k) dk = d = \frac{1-m}{2}} \quad (64)$$

Dit moeten wij oplossen na invullen van de identiteiten:

$$\frac{dk(\alpha)}{d\alpha} \stackrel{(50)}{=} \frac{\sin \mu}{\cosh \alpha - \cos \mu} \stackrel{\text{def}}{=} \Phi(\alpha, \mu) \quad (65a)$$

en

$$\frac{\partial \theta(\alpha' - \alpha)}{\partial \alpha'} \stackrel{(51)}{=} \frac{\sin 2\mu}{\cosh(\alpha' - \alpha) - \cos 2\mu} = \Phi(\alpha' - \alpha, 2\mu) \quad (65b)$$

die direct volgen uit de transformatieformules (50) en (51). Door dit te substitueren gaat de integraalvergelijking (63) over in:

$$\Phi(\alpha, \mu) = 2\pi R(\alpha) + \int_{-b}^{+b} \Phi(\alpha - \alpha', 2\mu) R(\alpha') d\alpha' \quad (66)$$

Wij willen de transformatie (50) ook toepassen op de uitdrukkingen (39) voor de energieën. Hierin komt vóór de vorm $\Delta - \cos k$, die wij via (45c) en (49) kunnen elimineren:

$$\Delta - \cos k = C \Delta \cdot \frac{dk}{d\alpha} = - \frac{\sin^2 \mu}{\cosh \alpha - \cos \mu} \quad (67)$$

Hiermee vinden wij achtereenvolgens:

$$e^{\text{Heis}}(m, \mu) = \frac{1}{2} \cos \mu - 2 \sin^2 \mu \cdot \int_{-b}^{+b} \frac{R(\alpha) d\alpha}{\cosh \alpha - \cos \mu} \quad (68a)$$

$$e^{\text{QRG}}(d, \mu) = 2d(1 + \cos \mu) - 2 \sin^2 \mu \cdot \int_{-b}^{+b} \frac{R(\alpha) d\alpha}{\cosh \alpha - \cos \mu} \quad (68b)$$

De integraalvergelijking (66) bevat een verschilkern en wij willen deze dus via Fourier-transformatie en de convolutiestelling oplossen. Voor algemene b mag dit echter niet, want dan zijn $\Phi(\alpha, \mu)$ en $\Phi(\alpha, 2\mu)$ niet periodiek modulo $2b$ in α . Wel is dit zo in het geval dat $b = \infty$ ($-1 < \Delta < 1$) of $b = i\pi$ ($\Delta < -1$). Bovendien zijn dan de optredende integralen te berekenen met de residuenstelling en contourverlegging. Wij zullen ons verder tot dit geval beperken, dat zal blijken te corresponderen met het geval $d = \frac{1}{2}$, of wel $m = 0$, m.a.w. met de

absolute grondtoestand in het geval van het Heisenberg-model, zoals blijkt uit (II 23).

Voor $-1 < \Delta < 1, b = b_0 = \infty$ vinden wij door Fouriertransformeren en convolutiestelling toepassen uit de integraalvergelijking (66), dat

$$r_0(s) = \frac{1}{2\pi} \frac{\varphi(s, \mu)}{1 + \varphi(s, 2\mu)} \quad (69a)$$

waar

$$r_0(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R_0(\alpha) e^{-is\alpha} d\alpha \quad (70a)$$

en

$$\varphi(s, \mu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\alpha, \mu) e^{-is\alpha} d\alpha \quad (71a)$$

$$= \frac{\sinh(\pi - \mu)s}{\sinh \pi s} \quad (72a)$$

de (inverse) Fouriergetransformeerden van de functies $R_0(\alpha)$ en $\Phi(\alpha, \mu)$ voorstellen. Invullen van (72a) in (69a) levert na terugtransformeren:

$$R_0(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} r_0(s) e^{is\alpha} ds \quad (73a)$$

$$R_0(\alpha) = \frac{1}{4\mu \cosh \frac{\pi\alpha}{2\mu}} \quad (74a)$$

Voor $\Delta < -1, b_0 = i\pi$ gaan wij over op de reële variabele $\bar{\alpha} = -i\alpha$ en voeren een (inverse) Fouriertransformatie naar $\bar{\alpha}$ in het interval $-\pi < \bar{\alpha} < \pi$ uit. Dit levert:

$$r_{0,n} = \frac{1}{2\pi} \frac{\varphi_n(\mu)}{1 + i\varphi_n(2\mu)} \quad (n=0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (69b)$$

waar

$$r_{0,n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} R_0(i\bar{\alpha}) e^{-in\bar{\alpha}} d\bar{\alpha} \quad (70b)$$

en

$$\varphi_n(\mu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \Phi(i\bar{\alpha}, \mu) e^{-in\bar{\alpha}} d\bar{\alpha} \quad (71b)$$

$$= -i e^{i\mu \cdot |n|} = -i e^{-\lambda \cdot |n|} \quad (\lambda = -i\mu) \quad (72b)$$

de ontwikkelingscoëfficiënten van de n-de term in de Fourier-sommen van de functies $R_0(i\bar{\alpha})$ en $\Phi(i\bar{\alpha}, \mu)$ voorstellen. Invullen van (72b) in (69b), en terugtransformeren geeft nu:

$$R_0(i\bar{\alpha}) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_{0,n} e^{in\bar{\alpha}} \quad (73b)$$

ofwel

$$R_0(\alpha) = R_0(i\bar{\alpha}) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_{0,n} e^{n\alpha}$$

$$R_0(\alpha) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{-i}{4\pi \cosh \mu n} \cdot e^{n\alpha} = \frac{-i}{4\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{n\alpha}}{\cosh \lambda n} \quad (74b)$$

Wat zuiver imaginair is, zodat de combinatie $R_0(\alpha)d\alpha$ reëel positief is. Wij kunnen dit omzetten in een andere reeks (zie [24]), waarvan de termen meer lijken op (74a):

$$R_0(\alpha) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4\mu \cdot \cosh \frac{\pi(\alpha + n \cdot 2\pi i)}{2\mu}} \quad (74c)$$

Door de uitdrukkingen (74) voor $R_0(\alpha)$ in te vullen in (64), en de integratie van $-\infty$ tot $+\infty$, respectievelijk van $-i\pi$ tot $+i\pi$ uit te voeren verifieert men gemakkelijk dat deze dichtheidsfunctie behoort bij de waarde $d = \frac{1}{2}$ ($m = 0$), zoals wij voorspeld hadden.

De gegeven uitdrukking (74b) is een reeksuitdrukking voor een elliptische functie. Voeren wij namelijk in de nieuwe variabele:

$$q = e^{-\lambda} = e^{i\mu} \quad (75a)$$

dan gaat (74b) over in:

$$R_0(\alpha) = \frac{-i}{4\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{2q^n}{1+q^{2n}} e^{n\alpha} \quad (\Delta < -1)$$

$$= -\frac{i}{4\pi} - \frac{i}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2q^n}{1+q^{2n}} \cos(in\alpha) \quad (75b)$$

Dit is volgens [25] gelijk aan:

$$R_0(\alpha) = -i \frac{K(k)}{2\pi^2} \cdot \operatorname{dn}\left(i \frac{K(k)}{\pi} \alpha \mid k\right) \quad (75c)$$

$(\Delta < -1)$

waarbij de modulus K gedefinieerd is volgens:

$$\mu = i\lambda = -i \cdot \ln q = i\pi \frac{K(\sqrt{1-k^2})}{K(k)} \quad (75d)$$

met

$$K(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}} \quad (75d)$$

de volledige elliptische integraal van de tweede soort.

Wij zien hieruit dat $R_0(\alpha)$ als functie van Δ voor $\Delta = -1$ een wezenlijk singulier punt heeft. Dit hadden wij al kunnen verwachten, omdat (74a) maar één term heeft en (74c) een reeks is. Dit komt omdat de integraalgrens b_0 bij $\Delta = -1$ van de eindige waarde $i\pi$ naar oneindig overspringt. In onze afleiding wordt het singuliere gedrag van de functie $\Theta^{(+)}(k_1, k_2)$ (in de variabele Δ) weerspiegeld door het optreden van een singulariteit in de verschilkerntransformatie voor die waarden waar de variabele $\mu = \arccos(-\Delta)$ vertakkingspunten heeft, d.w.z. voor $\Delta = \pm 1$.

Wij kunnen nu de oplossingen (74a) en (74b) voor $R_0(\alpha)$ invullen in de uitdrukkingen (68a,b) voor de energie per deeltje. Wij vinden dan voor $-1 < \Delta = -\cos\mu < 1$, $0 < \mu < \pi$:

$$\left\{ \begin{aligned} e^{\text{Heis}}(0, \Delta) &= \frac{1}{2} \cos\mu - \frac{\sin^2\mu}{2\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\alpha}{\cosh \frac{\pi\alpha}{2\mu} (\cosh\alpha - \cos\mu)} \quad (76a) \\ e^{\text{QRG}}\left(\frac{1}{2}, \Delta\right) &= (1 + \cos\mu) - \frac{\sin^2\mu}{2\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\alpha}{\cosh \frac{\pi\alpha}{2\mu} (\cosh\alpha - \cos\mu)} \quad (76b) \end{aligned} \right.$$

en voor $\Delta = -\cosh\lambda < -1$, $\lambda = -i\mu > 0$, na uitvoeren van de integratie:

$$\left\{ \begin{aligned} e^{\text{Heis}}(0, \Delta) &= \frac{1}{2} \cosh\lambda - \sinh\lambda \cdot \left(1 + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{2\lambda n} + 1}\right) \quad (77a) \\ e^{\text{QRG}}\left(\frac{1}{2}, \Delta\right) &= (1 + \cosh\lambda) - \sinh\lambda \cdot \left(1 + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{2\lambda n} + 1}\right) \quad (77b) \end{aligned} \right.$$

Voor $\Delta \gg 1$ hadden wij al gevonden (28a,b) wat leidt tot:

$$\left\{ \begin{aligned} e^{\text{Heis}}(0, \Delta) &= -\frac{1}{2} \Delta \quad (78a) \\ e^{\text{QRG}}\left(\frac{1}{2}, \Delta\right) &= 1 - \Delta \quad (78b) \end{aligned} \right.$$

§ 9. Analytische eigenschappen van de energie

Uit deze uitdrukkingen (76), (77) en (78) leest men onmiddellijk af dat de energieën $e^{\text{Heis}}(0, \Delta)$ en $e^{\text{QRG}}(\frac{1}{2}, \Delta)$ analytisch zijn in Δ behalve misschien voor $\Delta = -1$ en $\Delta = +1$. Wij gaan dus de energieën in de omgevingen van deze twee punten nader bekijken, alvorens hun grafieken te tekenen in de figuren 4a en 4b.

Wij ontwikkelen dus nu de uitdrukkingen (76) in de omgeving van $\Delta \rightarrow 1-0$ in een Taylorreeks in de variabele $\sqrt{1-\Delta} = \sqrt{2} \cdot \cos \frac{\mu}{2}$. Wij vinden dan straightforward:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{Heis}}(0, \Delta) = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{3\pi} (\sqrt{1-\Delta})^3 + O_{\Delta \rightarrow 1-0}((1-\Delta)^2) \end{array} \right. \quad (79a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{QRG}}(\frac{1}{2}, \Delta) = \frac{1}{2}(1-\Delta) - \frac{\sqrt{2}}{3\pi} (\sqrt{1-\Delta})^3 + O_{\Delta \rightarrow 1-0}((1-\Delta)^2) \end{array} \right. \quad (79b)$$

De uitdrukkingen voor $|\Delta| < 1$ geven dus een vertakkingspunt van de orde twee, terwijl de uitdrukkingen (78) voor $|\Delta| > 1$ geen vertakkingspunt opleveren. Wij hebben te maken met een essentiële singulariteit. Vergelijken van (78) en (79) leert, dat voor $\Delta = 1$ de functies zelf wel continu zijn, maar dat hun eerste afgeleiden naar Δ al discontinu zijn.

Om het verband tussen de uitdrukkingen (76) en (77) in de buurt van $\Delta = -1$ te onderzoeken is het voldoende om te kijken naar de functies:

$$F(\mu) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin \mu \cdot d\alpha}{\cosh \frac{\pi \alpha}{2\mu} (\cosh \alpha - \cos \mu)}, \quad 0 < \mu < \pi \quad (80)$$

en

$$G(\lambda) \stackrel{\text{def}}{=} \lambda + 4\lambda \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{2\lambda n} + 1}, \quad \lambda > 0 \quad (81)$$

die het verschil tussen de formules (76) en (77) aangeven, immers met $\mu = i\lambda$ gelden ook: $\cos \mu = \cosh \lambda$ en $\frac{\sin \mu}{\mu} = \frac{\sinh \lambda}{\lambda}$.

Wij gieten eerst $F(\mu)$ in een vorm, meer geschikt voor ontwikkeling voor kleine μ :

$$\begin{aligned}
 F(\mu) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\alpha}{\cosh \frac{\pi\alpha}{2\mu}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta \cdot e^{-i\alpha\beta} \cdot \frac{\sinh(\pi-\mu)\beta}{\sinh \pi\beta} \\
 &= \mu \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta \frac{\sinh(\pi-\mu)\beta}{\sinh \pi\beta \cdot \cosh \mu\beta} \\
 &= 2\mu \int_0^{\infty} d\beta \left(1 - \frac{\operatorname{tgh} \mu\beta}{\operatorname{tgh} \pi\beta}\right) \\
 &= 2\mu \int_0^{\infty} d\beta \left(1 - \operatorname{tgh} \mu\beta - \frac{2 \operatorname{tgh} \mu\beta}{e^{2\pi\beta} - 1}\right) \\
 F(\mu) &= 2 \ln 2 - 4\mu \int_0^{\infty} d\beta \frac{\operatorname{tgh} \mu\beta}{e^{2\pi\beta} - 1} \tag{82}
 \end{aligned}$$

Hieruit kunnen wij de Taylorreeks vinden van $F(\mu)$ naar machten van μ^2 :

$$F(\mu) = 2 \ln 2 - \frac{1}{6} \mu^2 + O_{\mu \rightarrow 0}(\mu^4) \tag{83}$$

die een convergentiestraal nul blijkt te hebben. Door (83) in (76) in te vullen

vinden wij een Taylorontwikkeling voor de energie in machten van $1+\Delta$:

$$(1+\Delta = 2 \sin^2 \frac{1}{2} \mu \sim \frac{1}{2} \mu^2)$$

$$e^{\text{Heis}}(0, \Delta) = \frac{1}{2} - 2 \ln 2 + \left(\frac{2}{3} \ln 2 - \frac{1}{6}\right)(1+\Delta) + O_{\Delta \rightarrow -1+0}((1+\Delta)^2) \tag{84a}$$

$$e^{\text{QRG}}\left(\frac{1}{2}, \Delta\right) = 2 - 2 \ln 2 + \left(\frac{2}{3} \ln 2 - \frac{2}{3}\right)(1+\Delta) + O_{\Delta \rightarrow -1+0}((1+\Delta)^2) \tag{84b}$$

Dit is evenals (83) een asymptotische reeks. Alle rechter afgeleiden van de energie naar Δ bestaan voor $\Delta = -1$, maar toch is de energie daar niet analytisch.

Dit betekent, zoals wij al konden verwachten, dat de energie ook een essentiële singulariteit heeft voor $\Delta = -1$.

Wij willen nu te weten komen hoe de oplossingen (76) en (77) voor $\Delta = -1$ aan elkaar gekoppeld zijn. Hiertoe gaan wij $F(\mu)$ analytisch voortzetten naar het complexe μ -vlak, en wel geldt:

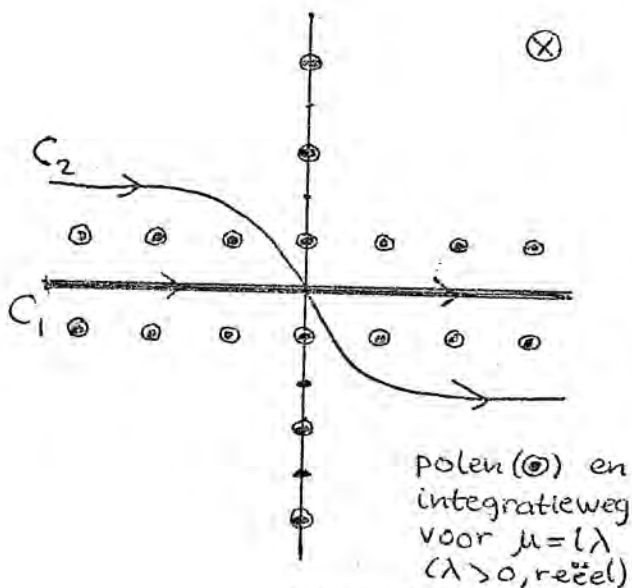
$$F(\mu) = \int_{C(\mu)} \frac{\mu \sin \mu dx}{\cosh \pi x (\cosh 2\mu x - \cos \mu)} \quad , \mu \text{ complex} \quad (85)$$

waar wij in het geval dat μ positief reëel is voor de integratieweg $C(\mu)$ gewoon $(-\infty, +\infty) \equiv C_1$ kunnen nemen. Voor μ complex moeten wij de integratieweg $C(\mu)$ vervormen opdat de polen van de integrand die liggen bij:

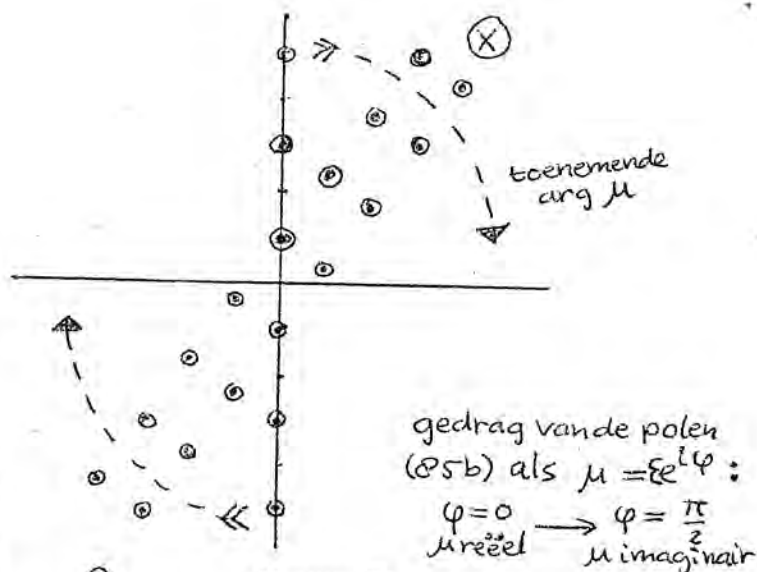
$$x = i \left(\frac{1}{2} + n \right) \quad , \quad n \text{ geheel} \quad \left. \vphantom{x = i \left(\frac{1}{2} + n \right)} \right\} \quad (85a)$$

$$x = \pm \frac{i}{2} + n, \frac{\pi i}{\mu} \quad , \quad n \text{ geheel} \quad \left. \vphantom{x = \pm \frac{i}{2} + n, \frac{\pi i}{\mu}} \right\} \quad (85b)$$

niet door de integratieweg heen lopen. Zo kunnen wij voor $\mu = i\lambda, \lambda > 0$ reëel, de integratieweg C_2 nemen, geschetst in figuur 3a. Immers de



figuur 3a



figuur 3b

polen gegeven in (85b) liggen op twee rechte lijnen, die als μ van positief reëel naar "positief" imaginair gaat, met de klok meedraaien, zoals is aangegeven in figuur 3b. Algemeener kan men door vervormen van de integratieweg inzien dat de functie $F(\mu)$ analytisch is in μ behoudens op een snede langs de negatief reële μ -as. Als wij echter de integratieweg niet willen vervormen, dan moeten wij de residuen van de passerende polen bij de integraal optellen. Zo vindt men:

$$\begin{aligned}
 F(i\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mu \sin \mu dx}{\cosh \pi x \cdot (\cosh 2\mu x - \cos \mu)} - 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sinh \frac{\pi^2 n}{\mu}} \quad (86a) \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\lambda \sinh \lambda dx}{\cosh \pi x \cdot (\cosh \lambda - \cos 2\lambda x)} - 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sinh \frac{\pi^2 n}{\lambda}} \quad (86b)
 \end{aligned}$$

Hierin kunnen wij de integraal uitrekenen via de residuenstelling, na het sluiten van de contour. Dit geeft voor de integraal:

$$\begin{aligned}
 \lambda - 4\lambda \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{e^{2\lambda n - 1}} &= \lambda - 4\lambda \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{e^{2\lambda n - 1}} - \frac{2}{e^{4\lambda n - 1}} \right) = \\
 &= \lambda + 4\lambda \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{2\lambda n - 1}} \stackrel{(81)}{=} G(\lambda)
 \end{aligned}$$

Wij hebben dus gevonden:

$$\boxed{F(i\lambda) = G(\lambda) - 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sinh \frac{\pi^2 n}{\lambda}}}, \lambda = -i\mu > 0 \quad (87)$$

De tweede term is zuiver imaginair en heeft alle Taylorcoëfficiënten gelijk aan nul. Dus met $F(\mu)$ is ook $G(\lambda)$ Taylor ontwikkelbaar en wel heeft $G(\lambda)$ op grond van (83) en (87) als reeks in $-\lambda^2$ dezelfde coëfficiënten als $F(\mu)$ in $\mu^2 = -\lambda^2$. Derhalve hebben $F(\mu)$ en $G(\lambda)$, opgevat als functies van Δ ,

dezelfde asymptotische reeks in $1 + \Delta$. Dit ingevuld in (76) en (77) levert asymptotische reeksen voor de energieën geldig voor $\Delta = -1$, m.a.w. weliswaar is de energie opgevat als functie van Δ singulier, maar alle afgeleiden naar Δ bestaan en zijn continu in $\Delta = -1$!

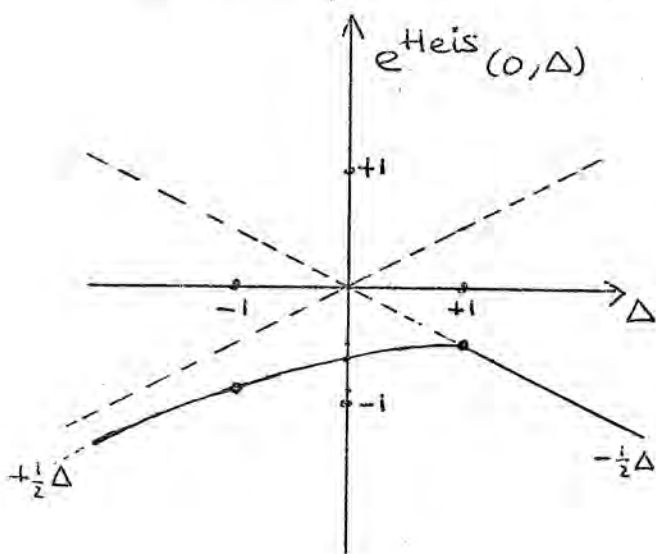
Speciaal geldt voor $\Delta = -1$:

$$e^{\text{Heis}}(0, -1) = \frac{1}{2} - 2 \ln 2 = -0,88629 \dots \quad (88a)$$

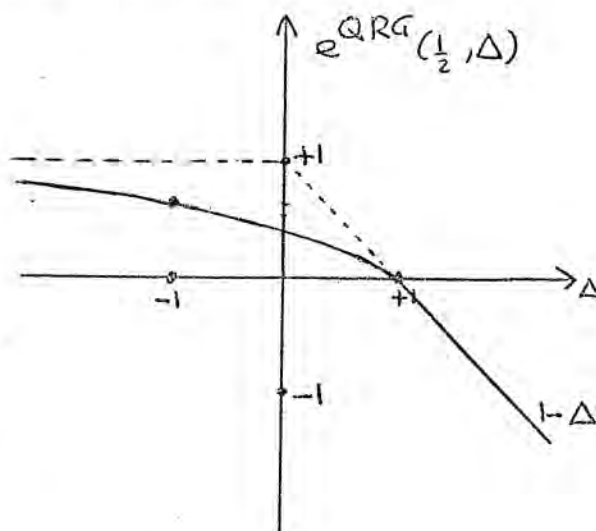
$$e^{\text{QRG}}\left(\frac{1}{2}, -1\right) = 2 - 2 \ln 2 = 0,61370 \dots \quad (88b)$$

een resultaat dat al eerder gevonden is door Hulthén [8], uitgaande van het isotrope Heisenbergmodel.

Wij kunnen de resultaten ook grafisch geven, en wel voor het



figuur 4a.



figuur 4b.

Heisenberg model in figuur 4a, en voor het Quantumroostergas in figuur 4b. Hierbij is behalve van (76) t/m (88) ook nog gebruik gemaakt van de uitkomsten (41c,d) voor het x-y-model, ofwel:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{Heis}}(0,0) = -\frac{2}{\pi} = -0,636619\dots \end{array} \right. \quad (89a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{QRG}}(\frac{1}{2},0) = 1 - \frac{2}{\pi} = 0,363380\dots \end{array} \right. \quad (89b)$$

en verder geldt in de limiet van $\Delta \rightarrow -\infty$ wegens (77a,b) de asymptotische ontwikkeling:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{Heis}}(0,\Delta) = -\frac{1}{2}\Delta + \sqrt{\Delta^2-1} (1+\dots) = \frac{1}{2}\Delta - \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta}\right) \end{array} \right. \quad (90a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\text{QRG}}(\frac{1}{2},\Delta) = (1-\Delta) + \sqrt{\Delta^2-1} (1+\dots) = 1 - \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta}\right) \end{array} \right. \quad (90b)$$

De nu gegeven oplossingen zijn toereikend voor het berekenen van de grondtoestand van ons model als functie van Δ . Wij gaan in het volgende hoofdstuk een temperatuur in onze een-dimensionale modellen invoeren. Daardoor gaan de eigenschappen nu afhangen van alle toestanden. Wij hebben dan wezenlijk meer informatie nodig. Om de berekeningen van het thermodynamisch gedrag niet nodeloos gecompliceerd te maken, maar toch een representatief voorbeeld te geven, zullen wij in het volgende hoofdstuk terugkeren naar het eenvoudigste model dat met de Bethe-Ansatz opgelost kan worden, n.l. het Bosegas met δ -interactie. Dan blijven, ook voor de hogere toestanden, alle golfgetallen reëel. Bovendien is dan de verschilkerntransformatie niet nodig.

Hoofdstuk IV. Thermodynamica van het Bose-gas met δ -interactie.

§ 1. Inleiding.

We hebben in de vorige hoofdstukken het Bose-gas met δ -repulsie en het meer algemene Heisenberg- en quantum roostergas-model ingevoerd. Wij zijn erin geslaagd in beide gevallen het eigenwaardeprobleem op te lossen m.b.v. de Bethe-Ansatz. Dit leidde tot een stelsel vergelijkingen voor de golfgetallen k_j , afhankelijk van de quantumgetallen I_j , zie (I 29), resp. (II 59). Hierna hebben wij uitvoerig aandacht besteed aan de grondtoestand (I 40), resp. (II 60). Wij konden voor beide problemen de thermodynamica bij het absolute nulpunt beschrijven in termen van dichtheidsfuncties die zeggen hoe de golfgetallen van de grondtoestand in de limiet van een grootsysteem verdeeld zijn. Wij hebben zo de grondtoestandsenergie van de oneindige Heisenbergketen bepaald door een integraalvergelijking voor de genoemde dichtheidsfunctie op te lossen.

Wij willen nu ook de thermodynamica beschrijven bij willekeurige temperatuur. Wij moeten daartoe alle eigentoestanden van de hamiltoniaan in ons verhaal betrekken. Aan het eind van het hoofdstuk I hebben wij ongelijkheden afgeleid waaruit blijkt dat de golfgetallen zich verdichten als de afmetingen van het systeem naar oneindig gaan. Wij kunnen de eigentoestanden boven de grondtoestand dus ook karakteriseren d.m.v. dichtheidsfuncties. In het geval van het Bose-gas zijn alle oplossingen van de vergelijkingen voor de golfgetallen reëel, dus is de dichtheidsfunctie alleen verschillend van nul voor reële golfgetallen. Bij het Heisenberg-model kunnen de golfgetallen zich voor zekere eigentoestanden ook gaan verdichten op andere lijnen in het complexe vlak, dan de reële as. Wij zullen daarom het Heisenberg-model buiten beschouwing laten, alhoewel er in de litteratuur [26] ook wel aandacht aan besteed is. Wij behandelen in dit hoofdstuk het Bose-gas volgens de methode van Yang en Yang [11]. De partitiefunctie kan met deze methode worden voorgesteld als een functionele integraal over een dichtheidsfunctie, die met behulp van de methode van de maximumterm benaderd kan worden uitgerekend. Dit leidt tot een toestandsverge-

lijking. Ook kunnen wij iets zeggen over de aangeslagen toestanden (excitatie)s.

§ 2. Coarse graining en dichtheidsfuncties.

a. Opsomming oude resultaten.

In hoofdstuk I hebben wij het eigenwaardeprobleem van het Bose-gas met delta-repulsie ter sterkte c opgelost. Hierbij kon de interactie-parameter c variëren van $c = 0$, ideale één-dimensionale Bose-Einstein-gas, tot en met $c = \infty$, het ideale één-dimensionale Fermi-Dirac-achtige gas. De eigentoestanden werden volgens (I 29) en (I 50) gelabeld met de quantumgetallen:

$$I_1 < I_2 < \dots < I_N, \text{ met } I_j \text{'s} \left\{ \begin{array}{l} \text{geheel als aantal deeltjes } N \text{ oneven} \\ \text{halftallig als } N \text{ even is.} \end{array} \right. \quad (1a)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{geheel als aantal deeltjes } N \text{ oneven} \\ \text{halftallig als } N \text{ even is.} \end{array} \right\} \quad (1b)$$

Deze quantumgetallen zijn te kiezen uit een rooster met afstand één op de getallenlijn, en wel zo dat er geen twee gelijke zijn. In de Fermi-Dirac-limiet ($c = \infty$) hebben zij de betekenis van golfgetallen:

$$k_j \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi I_j}{L} = k_j(c=\infty), \text{ met } L \text{ volume van vat.} \quad (2)$$

In het algemene geval kan men aan deze Fermi-Dirac-achtige labels, $\{I_j\}$, de golfgetallen toevoegen volgens de betrekking (I 29):

$$k_j = \frac{2\pi I_j}{L} + \frac{1}{L} \sum_{l=1}^N \theta(k_j - k_l), \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (3)$$

waarin de hulpfunctie $\theta(k_j - k_l)$ is gedefinieerd door (I 23):

$$\theta(k - k') = -2 \arctg\left(\frac{k - k'}{c}\right) \quad (4a)$$

$$-\pi < \theta < \pi \quad (4b)$$

d.w.z. $\theta(k-k')$ heeft direct al de gedaante van een verschilkern, zodat de transformatie $k \rightarrow \alpha$ achterwege kan blijven. De bijbehorende energie-eigenwaarde wordt gegeven door (I 17):

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \sum_{j=1}^N k_j^2 \quad (5)$$

De unieke oplossing van (3) voldoet volgens (I 51) aan de ongelijkheid:

$$\frac{2\pi I_1}{L} \leq k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_N \leq \frac{2\pi I_N}{L} \quad (6)$$

We kunnen dus de set k-waarden één-één-duidelijk toevoegen aan de set grootheden (2), door invoeren van de monotone functie $h(k)$, gedefinieerd door

$$h(k) \equiv k - \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^N \theta(k-k_\ell) = k + \frac{2}{L} \sum_{\ell=1}^N \arctg \frac{k-k_\ell}{c} \quad (7)$$

Door differentiatie volgt voor de afgeleide van deze functie:

$$\frac{dh}{dk} = 1 - \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^N \theta'(k-k_\ell) = 1 + \frac{2}{L} \sum_{\ell=1}^N \frac{c}{c^2 + (k-k_\ell)^2} \gg 1 \quad (8)$$

Vergelijking (7) kan worden opgevat als een afbeelding van de h -ruimte op de k -ruimte. Indirect bepaalt deze de energie (5) omdat deze niet als een expliciete uitdrukking in de h -taal gegeven is.

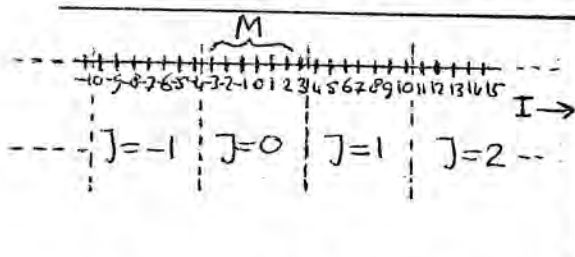
b. Coarse graining.

We willen nu eerst de thermodynamische limiet nemen, n.l. de limiet:

$$\left. \begin{array}{l} N \rightarrow \infty \\ L \rightarrow \infty \\ E \rightarrow \infty \end{array} \right\} \frac{N}{L} = d \text{ vast}, \frac{E}{L} = e \text{ vast} \quad (9)$$

We willen niet langer elke toestand afzonderlijk met een oneindige set quantum-

getallen $\{I_j\}$ beschrijven, maar naburige toestanden tezamen nemen en beschrijven met één dichtheidsfunctie, die weergeeft hoeveel quantumgetallen hun waarden in een bepaald bereik hebben. We delen het I-rooster op in cellen ter grootte M en gelabeld met de variabele J ($J = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, \infty$), en wel zo, dat voor



$$\left. \begin{aligned} I &= MJ + r \\ \left(-\frac{1}{2}M < r < +\frac{1}{2}M\right) \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Laat in de J-de cel n_J I-waarden voorkomen. Hiervoor zijn $\binom{M}{n_J}$ mogelijkheden. De coarse-grainings-benadering bestaat hieruit, dat wij voor elke cel J alle golfgetallen onderling gelijk stellen en wel aan k_J . Wij vinden zo in totaal $\prod_{J=-\infty}^{+\infty} \binom{M}{n_J}$ toestanden, gelabeld met de bezettingsgetallen $\{n_J\}$, waarbij

$$\sum_{J=-\infty}^{+\infty} n_J = N \quad (11)$$

I.p.v. (5), (7) en (3) vinden wij de benaderde vergelijkingen

$$E = \sum_{J=-\infty}^{+\infty} n_J \frac{\hbar^2 k_J^2}{2m} \quad (12)$$

$$h(k) = k - \frac{1}{L} \sum_{J=-\infty}^{+\infty} n_J \cdot \theta(k - k_J) \quad (13)$$

$$h(k_J) = k_J - \frac{1}{L} \sum_{J'=-\infty}^{+\infty} n_{J'} \cdot \theta(k_J - k_{J'}) = \frac{2\pi MJ}{L} \quad (14)$$

Hoe goed is deze benadering als $1 \ll M \ll N$? Dit gaan wij nu onderzoeken.

Wij kunnen de vergelijkingen (14) opvatten als vergelijkingen van het type (3) door alleen naar die J's te kijken waarvoor $n_J \neq 0$, en door voor elke J telkens n_J I's gelijk te stellen aan MJ. We weten dan volgens de stelling uit (I § 6b) dat de oplossing van dit stelsel, en dus ook van (14) uniek is. De door de coarse-graining gemaakte fout in de quantumgetallen I_j van een eigentoestand stellen wij voor door de N-dimensionale vector $\vec{\Delta I}$, waarvan wij volgens (10) al weten:

$$-\frac{M}{2} < \Delta I_j < \frac{M}{2} \quad \text{voor } j = 1, 2, \dots, N \quad (15)$$

Wij willen nu de fout $\Delta \vec{k}$ in de golfgetallen schatten. Hiertoe berekenen wij eerst de matrix van afgeleiden:

$$A_{ij} \equiv \frac{\partial h(k_i)}{\partial k_j} \stackrel{(7)}{=} \left\{ 1 - \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^N \theta'(k_j - k_\ell) \right\} \delta_{ij} + \frac{1}{L} \theta'(k_j - k_i) \quad (16)$$

Deze symmetrische matrix heeft de vorm:

$$A = \mathbb{1} + \frac{1}{L} C$$

met

$$C_{ij} = -\left(\sum_{\ell} \theta'_{j\ell}\right) \delta_{ij} + \theta'_{ij}$$

waar

$$-\theta'_{ij} > 0 \quad \left(\theta'_{ij} = \theta'_{ji} = \theta'(k_j - k_i) = \frac{-2c}{c^2 + (k_j - k_i)^2} \right) \quad (17)$$

Nu geldt:

$$C \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (18)$$

dus de vector waarvan alle componenten gelijk zijn is een eigenvector van C bij eigenwaarde nul. Bovendien is de matrix $\lambda \mathbb{1} - C$, voor voldoende grote waarde van λ een positieve matrix. Volgens de stelling van Perron-Frobenius [16] heeft de matrix C dus een unieke kleinste eigenwaarde behorende bij een tekenvaste eigenvector. Deze eigenwaarde is in ons geval nul. De kleinste eigenwaarde van A is dus één. Wij kunnen nu de fout $\Delta \vec{k}$ bepalen via de kettingregel:

$$\Delta h_i \approx \sum_{j=1}^N \frac{\partial h(k_i)}{\partial k_j} \Delta k_j = \sum_{j=1}^N A_{ij} \Delta k_j \quad (19)$$

We schatten nu de lengte van deze foutvector:

$$\|\Delta \vec{h}\| = \|\vec{A} \cdot \Delta \vec{k}\| \geq A_{\min} \cdot \|\Delta \vec{k}\| = \|\Delta \vec{k}\|$$

Dus

$$\|\Delta \vec{k}\| \leq \|\Delta \vec{h}\| = \frac{2\pi}{L} \cdot \|\Delta \vec{I}\|$$

De lengte van deze laatste vector kunnen wij gemakkelijk schatten, gebruikmakend van (15) en van het feit dat het aantal I-waarden, waarin t.g.v. de coarse-graining een fout gemaakt wordt hoogstens N is. Dit betekent, dat $\|\Delta \vec{I}\| < \frac{M}{2} \sqrt{N}$, dus:

$$\|\Delta \vec{k}\| \leq \frac{2\pi}{L} \|\Delta \vec{I}\| < \frac{\pi M}{L} \sqrt{N} \quad (20)$$

Voor de maximale fout in de energie die hiermee correspondeert vinden wij

$$\begin{aligned} |\Delta E| &= \frac{\hbar^2}{2m} \left| \sum_j (k_j + \Delta k_j)^2 - \sum_j k_j^2 \right| = \frac{\hbar^2}{2m} \left| 2 \cdot \sum_j k_j \Delta k_j + \sum_j \Delta k_j^2 \right| \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left| 2 \cdot (\vec{k} \cdot \Delta \vec{k}) + \|\Delta \vec{k}\|^2 \right| \leq \frac{\hbar^2}{2m} \left(2 \|\vec{k}\| \cdot \|\Delta \vec{k}\| + \|\Delta \vec{k}\|^2 \right) \end{aligned}$$

of na deling door de waarde van de coarse-grained energie,

$$E = \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \|\vec{k}\|^2$$

en invullen van de schatting (20):

$$\frac{\Delta E}{E} \leq \frac{\pi M}{L} \left(2 \sqrt{\frac{N}{\frac{2m}{\hbar^2} E}} + \frac{\pi M}{L} \cdot \frac{N}{\frac{2m}{\hbar^2} E} \right) \quad (21)$$

Aangezien de energie een extensieve grootheid is, en dus evenredig met N wordt, zien wij dus dat de relatieve fout in de energie van de orde $O\left(\frac{M}{L}\right)$ is. We zien hieruit dat in de limiet (9) de fout in de energie van kleinere orde is dan de energie zelf, mits wij de limiet $M \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$ zódanig nemen dat $\frac{M}{L} \rightarrow 0$. Het maakt daarom niet uit of wij de thermodynamische grootheden uit de exacte of uit de geocarse-grainede vergelijkingen berekenen.

c. Entropie en partitiefuncties.

Bij gegeven waarden van de set bezettingsgetallen $\{n_j\}$ is het aantal realiseerbare toestanden $\prod_{j=-\infty}^{+\infty} \binom{M}{n_j}$. Wij vinden dus de entropie via het microkanoniek ensemble:

$$Z_{m.c.}(L, E, N) \equiv e^{S/k} = \lim_{\delta E \ll E} \frac{1}{\delta E} \sum'_{\{n_j\}} \prod_{j=-\infty}^{+\infty} \binom{M}{n_j} \quad \sum n_j = N$$

$$E \leq \sum_j n_j \frac{\hbar^2 k_j(\{n_j\})^2}{2m} \leq E + \delta E \quad (22)$$

waarbij we in de thermodynamische limiet δE langzamer naar ∞ moeten laten gaan dan de afmetingen van het systeem, maar toch zo dat er zeer veel bijdragende termen in de som zijn. Wij kunnen de twee lastige bijcondities in de som elimineren door een dubbele Laplace-transformatie. Dit leidt tot de groot-kanonieke toestands-som:

$$Z_{gr}(L, \beta, \mu) \equiv e^{\beta p L} = \sum_{\{n_j\}} \prod_{j=-\infty}^{+\infty} \left[\binom{M}{n_j} e^{\beta \mu n_j - \beta \frac{\hbar^2 k_j(\{n_j\})^2}{2m} n_j} \right] \quad (23)$$

Gewoonlijk wordt op de faculteiten de benadering van Stirling toegepast, zodat

$$Z_{gr}(L, \beta, \mu) \approx \sum_{\{n_j\}} \exp \left[\sum_{j=-\infty}^{+\infty} M \ln M - n_j \ln n_j - (M - n_j) \ln (M - n_j) + \beta \mu n_j - \beta \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} n_j \right] \quad (24)$$

Het komt vaak voor bij dit soort sommen dat één term dermate domineert dat deze in de thermodynamische limiet de exacte toestandsvergelijkingen oplevert. Wij zouden dan ook maximumterm-methode toepassen, als de vergelijkingen voor de maximaliserende verdeling $\{\bar{n}_j\}$ er plezierig uit zouden zien. Dit is helaas niet het geval, omdat $k_j(\{n_j\})$ alleen maar impliciet gegeven is. Om dit te ondervangen gaan wij over van een beschrijving met bezettingsgetallen in de I-ruimte naar een beschrijving m.b.v. een verdeling in de k-ruimte.

d. De dichtheidsfunctie $g(h)$.

Wij gaan nu over van een discrete verdeling gekarakteriseerd door bezettingsgetallen $\{n_j\}$ op een formele continue verdeling met dichtheidsfunctie $g(h)$, in de variabele h uit (7):

$$h = \frac{2\pi I}{L} \stackrel{(11)}{\approx} \frac{2\pi M j}{L} \quad (25)$$

Met de afmetingen van de j -de cel correspondeert dus:

$$\Delta j = 1 \iff \Delta I = M \iff \Delta h = \frac{2\pi M}{L} \quad (25')$$

In die j -de cel zijn n_j eendeeltjestoestanden van het fermion-analoon bezet. Wij kunnen dus formeel in die cel een constante continue dichtheid invoeren volgens:

$$L g(h) \Delta h = n_j \Delta j \quad (26)$$

Dit is namelijk het aantal "bezette toestanden" in het bewuste interval. De factor L is afgesplitst om in de limiet van een groot systeem toch de functie $g(h)$ eindig te houden. Uit (25') en (26) zien wij direct:

$$g(h) = \frac{n_j}{2\pi M} \quad (27)$$

In het bewuste interval is plaats voor M quantumgetallen, dus wij kunnen ook formeel de gaten-dichtheid invoeren:

$$g_h(h) \Delta h = M - n_j$$

ofwel:

$$g_h(h) = \frac{M - n_j}{2\pi M} \quad (28)$$

dus:

$$g(h) + g_h(h) = \frac{1}{2\pi} \quad (29)$$

Op grond van (26) vinden wij:

$$L \int_{-\infty}^{+\infty} dh \cdot g(h) \dots = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} n_j \dots \quad (30)$$

mits toegepast op functies die constant zijn in elke cel. In het bijzonder gaat de normering (11) over in:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dh \cdot g(h) = \frac{1}{L} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} n_j = \frac{N}{L} = d \quad (31)$$

De golfgetallen k_j bepaald in (13) en (14) gaan nu over in een continue functie $k(h)$, die van de verdeling van quantumgetallen $g(h)$ afhangt via de integraalvergelijking:

$$h = k(h) - \int_{-\infty}^{+\infty} dh' \cdot g(h') \cdot \theta(k(h) - k(h')) \quad (32)$$

Wij kunnen hiermee de energie eigenwaarde (15) schrijven als:

$$E = L \int_{-\infty}^{+\infty} dh \cdot g(h) \cdot \frac{\hbar^2 k(h)^2}{2m} \quad (33)$$

Voor een voldoende groot systeem is overeenkomstig de schattingen (20) en (21) een herverdeling binnen elke cel volstrekt onbelangrijk. Dus het golfgetal $k(h)$ uit (32) en de energie E uit (33) zijn voor elke toestand afdoende benaderingen, waarbij de benodigde verdelingsfunctie $g(h)$ via (27) bepaald wordt. Omgekeerd kunnen we bij elke verdelingsfunctie $g(h)$ die voldoet aan:

$$G \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq g(h) \leq \frac{1}{2\pi} \quad , \text{ voor } -\infty < h < \infty \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dh \cdot g(h) = \frac{N}{L} = d \end{array} \right. \quad (34)$$

een best passende set quantumgetallen $\{I_j\}$ vinden, waarvoor dan de energie via (33) afdoende benaderd is.

Na keuze van een geschikte maat in de functieruimte G gegeven door (34) kunnen wij dus de grote partitiefunctie (24) schrijven als de functionele integraal:

$$Z_{gr}(L, \beta, \mu) = \int_G d[g(h)] \cdot \exp L \int_{-\infty}^{+\infty} dh \left\{ (g+g_h) \ln(g+g_h) - g \ln g - g_h \ln g_h + \beta \mu g(h) - \beta \frac{\hbar^2 k(h)^2}{2m} g(h) \right\} \quad (35)$$

met $g+g_h = \frac{1}{2\pi}$ (29)
 $k(h, [g])$ via (32)

waarbij $k(h)$ bepaald wordt via (32) en $g_h(h)$ via (29).

e. De dichtheidsfunctie $\rho(k)$.

De integraalvergelijking (32) heeft één unieke monotone oplossing $k(h)$. Dit kunnen wij geheel analoog bewijzen aan de afleiding in hoofdstuk I § 6b via een potentiaalfunctionaal $B[k(h)]$, analoog (I 30) te definiëren. Wij kunnen dus van de h -ruimte op de k -ruimte transformeren via de monotone functie $k(h)$. De inverse transformatie bestaat ook en noemen wij $h(k)$ (zie ook (8)).

Door deze transformatie gaat de dichtheid $g(h)$ over in de dichtheid $\rho(k)$ gegeven door:

$$\rho(k) dk = g(h) dh \quad (36)$$

De bijbehorende hole-dichtheid wordt:

$$\rho_h(k) dk = g_h(h) dh \quad (37)$$

die dus moet voldoen aan de getransformeerde van (29)

$$\rho(k) + \rho_h(k) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{dh}{dk} \quad (38)$$

De normering (31) gaat over in:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \rho(k) = \frac{N}{L} = d \quad (39)$$

De integraalvergelijking (32) gaat nu over in de expliciete uitdrukking:

$$h(k) = k - \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \cdot \rho(k') \cdot \theta(k-k') \quad (40)$$

De afgeleide hiervan wordt:

$$\frac{dh}{dk} = 1 - \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \cdot \rho(k') \cdot \theta'(k-k') = 2\pi (\rho(k) + \rho_h(k)) \quad (41)$$

De energie eigenwaarde (33) wordt nu:

$$E = L \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \rho(k) \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (42)$$

Overeenkomstig (38) en (39) moeten wij nu de dichtheidsfunctie $\rho(k)$ analoog (34) kiezen uit het gebied:

$$R. \quad \begin{cases} 0 \leq \rho(k) \leq \frac{1}{2\pi} \frac{dh}{dk} = \frac{1}{2\pi} \left\{ 1 - \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \cdot \rho(k') \cdot \theta(k-k') \right\} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \rho(k) = d \end{cases} \quad (43)$$

Hierdoor gaat de grote partitiefunctie (35) over in:

$$Z_{gr}(L, \beta, \mu) = \int_R d[\rho(k)] \cdot \int [\rho(k)] \cdot \exp L \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ (\rho + \rho_h) \ln(\rho + \rho_h) - \rho \ln \rho - \rho_h \ln \rho_h + \beta \mu \rho(k) - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rho(k) \right\} \right\} \quad (44)$$

Hierin zijn de integrand en het integratiegebied R expliciet bekend.

De Jacobiaan van de transformatie

$$J[\rho(k)] = \left| \frac{\delta [g(h)]}{\delta [\rho(k)]} \right| = \left| \det \frac{\delta g(h(k))}{\delta \rho(k')} \right|$$

kan m.b.v. (36) en (41) worden geschreven als:

$$\begin{aligned}
 J[\rho(k)] &= \left| \det \frac{\delta}{\delta \rho(k')} \left\{ \frac{\rho(k)}{1 - \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \theta'(k-k') \rho(k')} \right\} \right| \\
 &= \det \left\{ \frac{\delta(k-k')}{1 - \theta' * \rho} + \frac{\rho(k) \theta'(k-k')}{(1 - \theta' * \rho)^2} \right\} \\
 &= \det \left\{ \delta(h-h') + g(h) \frac{\partial \theta(k(h)-k(h'))}{\partial h} \right\}
 \end{aligned}$$

wat in feite niets anders is dan $\det A_{ij}$, met A de matrix uit (16). Wij zullen deze Jacobiaan verder verwaarlozen, omdat de transformatie $g(h) \leftrightarrow \rho(k)$ regulier is, waardoor deze Jacobiaan een langzaam variërende functionaal is van $\rho(k)$. De functionele integralen (35) en (44) hebben dus dezelfde "zadelpunten".

§ 3. Thermodynamica.

a. Zadelpuntsmethode.

Wij gaan nu de aanname maken dat de integrand van (44) dermate gepiekt is dat wij de integraal (44) in zadelpuntsbenadering mogen uitrekenen. Dat wil zeggen dat in de thermodynamische limiet (10) de integrand van (44) zich gaat gedragen als een delta-functionaal:

$$\text{" } \exp(L \cdot P[\rho(k)]) = \exp(L \cdot P[\rho_1(k)]) \cdot \delta[\rho - \rho_1], \text{ als } L \rightarrow \infty \quad (45)$$

waarbij $\rho_1(k)$ de dichtheidsfunctie is die $P(\rho)$ maximeert, gegeven door:

$$\begin{aligned}
 P([\rho(k)], \beta, \mu, c) &\stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ (\rho(k) + \rho_h(k)) \ln(\rho(k) + \rho_h(k)) + \right. \\
 &\quad \left. - \rho(k) \ln \rho(k) - \rho_h(k) \ln \rho_h(k) + \beta \mu \rho(k) - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rho(k) \right\} \quad (46)
 \end{aligned}$$

met $\rho_h(k)$ via (38) en (41) in te vullen. Uit (44) en (45) volgt dan:

$$\beta P = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z_{gr}(L, \beta, \mu) = P[\rho_1(k)] \quad (47)$$

Uit deze groot-kanonieke druk volgen alle andere thermodynamische grootheden.

b. Bepaling maximerende $f_1(k)$.

Wij merken eerst op dat de functieruimte R gedefinieerd in (43) convex is, d.w.z. als f_1 en f_2 ertoe behoren, behoren er ook toe de functies

$$f = f_1 + x (f_2 - f_1) \quad , \text{ met } 0 \leq x \leq 1 \quad (48a)$$

De bijbehorende gaten-dichtheden zijn:

$$f_h = f_{1h} + x (f_{2h} - f_{1h}) \quad (48b)$$

Het heeft dus zin om te praten over de richtingsafgeleide van de functionaal $P[f]$ in het "punt" f_1 in de richting f_2 . Om deze te bepalen moet men (48) invullen en naar x differentiëren:

$$\frac{\delta P[f]}{\delta (f_1 \rightarrow f_2)} = \lim_{x \downarrow 0} \frac{\partial P[f_1 + x(f_2 - f_1)]}{\partial x} \quad (49)$$

Wij willen nu een functie f_1 zoeken zodanig dat de afgeleide van de functionaal (46) nul is in alle richtingen in dat punt van de functieruimte. Als dan ook nog de tweede afgeleiden negatief zijn is het betreffende punt een echt maximum. Voeren wij dit programma uit dan vinden wij achtereenvolgens uit (46):

$$\begin{aligned} \frac{\partial P[f_1 + x(f_2 - f_1)]}{\partial x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ (f_2 - f_1 + f_{2h} - f_{1h}) \cdot \ln(f_1 + x(f_2 - f_1) + f_{1h} + x(f_{2h} - f_{1h})) \right. \\ &\quad - (f_2 - f_1) \ln(f_1 + x(f_2 - f_1)) - (f_{2h} - f_{1h}) \ln(f_{1h} + x(f_{2h} - f_{1h})) \\ &\quad \left. + \beta \mu (f_2 - f_1) - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (f_2 - f_1) \right\} \end{aligned}$$

en

$$\frac{\partial^2 P[f_1 + x(f_2 - f_1)]}{\partial x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \frac{-\{f_1(f_{2h} - f_{1h}) - f_{1h}(f_2 - f_1)\}^2}{\{f_1 + x(f_2 - f_1) + f_{1h} + x(f_{2h} - f_{1h})\} \{f_1 + x(f_2 - f_1)\} \{f_{1h} + x(f_{2h} - f_{1h})\}} < 0 \quad (51)$$

De tweede afgeleide is dus negatief voor willekeurige f_1 en f_2 in het gebied R . Als (50) een stationnair punt oplevert in het inwendige van R dan is dit het enige stationnaire punt en dus het absolute maximum van de functionaal $P[f]$.

We vullen nu in (50) $x = 0$ in en gebruiken de uit (41) volgende relatie

$$f_2(k) - f_1(k) + f_{2h}(k) - f_{1h}(k) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \theta'(k-k') (f_2(k') - f_1(k')) \quad (52)$$

Dit geeft de stationnairiteitsconditie:

$$\begin{aligned} \frac{\delta P[f]}{\delta(f_1 \rightarrow f_2)} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ (f_2 - f_1 + f_{2h} - f_{1h}) \ln \frac{f_1 + f_{1h}}{f_{1h}} + (f_2 - f_1) \ln \frac{f_{1h}}{f_1} \right. \\ &\quad \left. + \beta\mu (f_2 - f_1) - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (f_2 - f_1) \right\} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \theta'(k-k') \cdot \ln \left(1 + \frac{f_1(k')}{f_{1h}(k')} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \ln \frac{f_{1h}(k)}{f_1(k)} + \beta\mu - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\} (f_2(k) - f_1(k)) = 0 \quad (53) \end{aligned}$$

Aangezien dit geldt onafhankelijk van de keuze van f_2 moet de factor tussen accolades in de integrand identiek nul zijn:

$$-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \cdot \theta'(k-k') \cdot \ln \left(1 + \frac{f_1(k')}{f_{1h}(k')} \right) + \ln \frac{f_{1h}(k)}{f_1(k)} + \beta\mu - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 0 \quad (54)$$

De maximerende dichtheidsfunctie $f_1(k)$ moet dus voldoen aan (54), met $f_{1h}(k)$ gedefinieerd door (41). Wij zien dat in (54) alleen het quotiënt van beide dichtheden - gewone en gaten-dichtheden - voorkomt. Wij drukken dit quotiënt daarom uit in de vorm van een Boltzmann-factor, corresponderend met een "quasideeltjes"-energiespectrum $\mathcal{E}(k)$ n.l.:

$$\boxed{\frac{p_n(k)}{p(k)} \equiv e^{\beta(\varepsilon(k)-\mu)}} \quad (55)$$

(N.B. van nu af aan zullen wij de index 1 aan de maximerende dichtheid en gaten-dichtheid weglaten.) Wij vinden dan m.b.v. (54) voor $\varepsilon(k)$ de niet-lineaire integraalvergelijking:

$$\boxed{\beta \varepsilon(k) = \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \theta'(k-k') \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon(k')-\mu)})} \quad (56)$$

Door iteratie, startend met $\varepsilon^{(0)}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, kan men hieruit in principe de functie $\varepsilon(k)$ bepalen, die analytisch is op fysisch gebied $\beta > 0$ en $\mu < \mu_0$ met een geschikt gekozen waarde voor μ_0 . De laatste voorwaarde is fysisch nodig omdat de grote partitiefunctie divergeert voor μ 's groter dan de grondtoestands-energiedichtheid, d.w.z. dat "alle quasideeltjes dan in het grondniveau zitten". De oplossing is tevens symmetrisch in k .

Wij kunnen in deze oplossing $\varepsilon(k)$ ook de dichtheidsfunctie $p(k)$ uitdrukken door gebruik te maken van de vergelijkingen (55) en (41). Hiermee vinden wij:

$$\boxed{p(k) \cdot (1 + e^{\beta(\varepsilon(k)-\mu)}) = \frac{1}{2\pi} \cdot (1 - \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \theta'(k-k') p(k'))} \quad (57)$$

De Neumann-reeks voor deze Fredholm-vergelijking convergeert, dus is de oplossing uniek. Wij kunnen deze vergelijking oplossen door (56) naar μ te differentiëren:

$$1 - \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial \mu} = 1 - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \theta'(k-k') \frac{1 - \frac{\partial \varepsilon(k')}{\partial \mu}}{1 + \exp \beta(\varepsilon(k')-\mu)} \quad (58)$$

Vergelijken wij dit met (57) dan vinden wij:

$$\boxed{p(k) = \frac{\frac{1}{2\pi} (1 - \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial \mu})}{1 + \exp \beta(\varepsilon(k)-\mu)}} \quad (59)$$

Nu kan men uit (56) inzien dat $\mu - \varepsilon(k)$ tijdens de iteratieprocedure monotoon niet-dalend in μ blijft, ofwel:

$$0 \leq 1 - \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial \mu} \leq \infty \quad (60)$$

dus de maximerende verdelingsfunctie $p(k)$ is een nette symmetrische functie in het gebied R gegeven door (43), want 1° $\varepsilon(k)$ is een symmetrische functie in k , en 2° $p(k)$ en $p_h(k)$ zijn wegens (60) en (55) niet-negatief.

c. De toestandsvergelijking.

De groot-kanonieke druk wordt nu gegeven door (47) en (46). Als wij hierin (55) invullen krijgen wij:

$$\begin{aligned} \beta p &= P[p_1(k)] = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \left\{ (p(k) + p_h(k)) \cdot \ln \left(1 + \frac{p(k)}{p_h(k)} \right) + \right. \\ &\quad \left. + p(k) \cdot \ln \frac{p_h(k)}{p(k)} + \beta \mu p(k) - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} p(k) \right\} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \left[(p(k) + p_h(k)) \cdot \ln \{ 1 + \exp(-\beta(\varepsilon(k) - \mu)) \} + \right. \\ &\quad \left. + \beta p(k) \varepsilon(k) - \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} p(k) \right] \end{aligned} \quad (61)$$

Vullen wij hierin (38) en (41) in, dan krijgen wij:

$$\begin{aligned} \beta p &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \left[\frac{1}{2\pi} \left\{ 1 - \int_{-\infty}^{+\infty} dk' p(k') \theta'(k-k') \right\} \cdot \ln \{ 1 + \exp(-\beta(\varepsilon(k) - \mu)) \} \right. \\ &\quad \left. + \beta p(k) \left\{ \varepsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\} \right] \end{aligned} \quad (62)$$

Passen wij op (56) toe $\int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot p(k) \dots$ en vullen wij dit in in (62), dan komt er tenslotte:

$$\boxed{\beta p = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \ln \{ 1 + \exp(-\beta(\varepsilon(k) - \mu)) \}} \quad (63)$$

Er is geen fase-overgang, want de uitdrukking (63) is evenals de functie $\mathcal{E}(k)$ overal analytisch op het gebied:

$$\begin{cases} 0 < \beta < \infty \\ -\infty < \mu < \mu_0(c, \beta) \end{cases} \quad (64a)$$

of uitgedrukt in de dichtheid:

$$\begin{cases} 0 < \beta < \infty \\ 0 < d < \infty \end{cases} \quad (64b)$$

De dichtheid d wordt bepaald door de conditie

$$d = \frac{\partial \beta p}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1 - \frac{\partial \mathcal{E}(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp \beta(\mathcal{E}(k) - \mu)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \rho(k) \quad (65)$$

d. De gevallen $c = \infty$ en $c = 0$.

Wij hebben in de afleiding van de toestandsvergelijking de partitiefunctie uitgerekend m.b.v. de zadelpuntmethode, zonder hiervoor de complete rechtvaardiging te geven. Ter controle onderzoeken wij de gevallen $c = \infty$ en $c = 0$ en gaan na of wij, zoals vereist volgens hoofdstuk I § 3, inderdaad de toestandsvergelijking voor het één-dimensionale ideale Fermi-gas resp. het ideale Bose-gas krijgen.

Vullen wij in (56) in

$$\theta'(k-k') = - \frac{2c}{c^2 + (k-k')^2} \quad (4')$$

en kiezen wij $c = \infty$, dan wordt de oplossing:

$$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (65)$$

Als wij dit invullen in (63) dan vinden wij:

$$\beta p = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \ln \left\{ 1 + z \cdot \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \right\} \quad (67)$$

waarin z de activiteit is, gegeven door:

$$z = \exp \beta \mu \quad (68)$$

Dit is inderdaad de uitdrukking voor de groot-kanonieke druk voor het ideale Fermi-gas, geldig voor:

$$\left. \begin{array}{l} -\infty < \mu < \infty = \mu_0 \\ 0 < d < \infty \end{array} \right\} \quad (67a)$$

d.w.z.

Als wij $c = 0$ invullen in (4') en bedenken dat

$$\lim_{c \downarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{c}{c^2 + x^2} = \delta(x) \quad (69)$$

leidt vgl. (56) direct tot:

$$\beta \varepsilon(k) = \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \ln \left\{ 1 + \exp\left(-\beta (\varepsilon(k) - \mu)\right) \right\}$$

ofwel:

$$\exp\left(-\beta (\varepsilon(k) - \mu)\right) = \left\{ z^{-1} \exp\left(\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) - 1 \right\}^{-1} \quad (70)$$

Vullen wij dit in in (63), dan vinden wij:

$$\beta p = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot \ln \left\{ 1 - z \cdot \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \right\} \quad (71)$$

met de beperking:

$$\left. \begin{array}{l} -\infty < \mu < 0 = \mu_0 \\ 0 < d < \infty \end{array} \right\} \quad (71a)$$

of

Dit zijn inderdaad de goede uitdrukkingen voor het ideale Bose-gas.

e. Het geval $T = 0$, de grondtoestand.

In de limiet $T \rightarrow 0$ blijven niet meer alle functies analytisch. Zo moet volgens (57) gelden, daar het rechterlid eindig is in geval van eindige dichtheid:

$$f(k) \equiv 0 \quad \text{voor alle } k, \text{ waarvoor} \quad \varepsilon(k) - \mu > 0 \quad (72)$$

Om een zinvolle oplossing te krijgen moet daarom bij $T = 0$ de functie $\varepsilon(k) - \mu$ ook negatieve waarden kunnen aannemen. Uit de iteratieprocedure voor (56) volgt een functie $\varepsilon(k) - \mu$ die monotoon in k^2 moet zijn, omdat de monotonie van de nulde orde iteratiefunctie $\varepsilon^{(0)}(k) - \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$, bij de iteratie behouden blijft. Wij kunnen daarom een getal $q_0 > 0$ bepalen, zodanig dat:

$$\left. \begin{array}{l} \varepsilon(k) - \mu < 0 \\ \varepsilon(k) - \mu = 0 \\ \varepsilon(k) - \mu > 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{als} \quad -q_0 < k < q_0 \\ \text{als} \quad k = \pm q_0 \\ \text{als} \quad k < -q_0 \text{ of } k > q_0 \end{array} \quad (73)$$

Dit betekent op grond van (72) dat:

$$\left. \begin{array}{l} f(k) = 0 \\ f_h(k) = 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{voor} \quad k < -q_0 \text{ of } k > q_0 \\ \text{voor} \quad -q_0 < k < q_0 \end{array} \quad (74)$$

De vergelijking (56) voor $T = 0$ gaat daardoor over in:

$$\boxed{\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{c}{\pi} \int_{-q_0}^{+q_0} \frac{(\varepsilon(k') - \mu) dk'}{c^2 + (k - k')^2}} \quad (75)$$

waarbij nu geëist moet worden $\mu \geq 0$ wil men zo'n q_0 kunnen vinden. De vergelijking (57) gaat over in:

$$\boxed{f(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{c}{\pi} \int_{-q_0}^{+q_0} \frac{f(k') dk'}{c^2 + (k - k')^2}} \quad \text{voor} \quad -q_0 < k < q_0 \quad (76)$$

Deze laatste vergelijking is door Lieb en Liniger [10] langs de weg van overgang van som op integraal in vergelijking (3) gevonden, zo ongeveer als wij gedaan hebben voor de grondtoestand van de oneindige Heisenberg-keten in het vorige hoofdstuk.

f. Quasideeltjes.

De vergelijking (63) lijkt op de vergelijking (67) voor de druk van het vrije spinloze Fermi-gas, maar dan met een energiespectrum $\mathcal{E}(k; \beta, \beta\mu)$, dat van de thermodynamische toestand afhangt. Dit suggereert om een Bose-gas met δ -interactie te beschouwen als een fermion-systeem van quasi-vrije deeltjes met impulsen $\hbar k$ en energieën $\mathcal{E}(k)$. Omdat wij de deeltjes vrij denken, maar dan met een afwijkende energie-impuls-relatie, spreken wij van quasi-deeltjes. Deze term is afkomstig van Landau, die dit concept onder meer gebruikte om helium-3 bij lage temperatuur te beschrijven [12]. Landau definieert het modelsysteem van quasideeltjes als een systeem van vrije fermionen, dat in de omgeving van een bepaalde β en μ dezelfde thermodynamica heeft als het werkelijke systeem. Hij past het spectrum $\mathcal{E}(k)$ aan aan de experimentele energie-impuls-relatie, zoals die b.v. met neutronenverstrooiing gevonden wordt. In ons geval van een Bose-gas met δ -interactie kan het spectrum in principe berekend worden via (56).

Er is echter nog één complicatie. De grootheden k_j uit de Bethe-Ansatz (I 13) zijn niet de echte quasi-golfgetallen, omdat zij in het algemeen geen (onderling ongelijke) veelvoud van $\frac{2\pi}{L}$ zijn, zoals voor het ideale Fermi-gas moet gelden. De goede quasigolfgetallen zijn de grootheden $h_j = \frac{2\pi I_j}{L}$ uit (2), die in feite de quantumgetallen van de N-deeltjes-toestanden zijn. Immers, de totale impuls P van de N-deeltjes-toestand $\{h_j\}$ is gegeven door:

$$P = \hbar \sum_{j=1}^N k_j \stackrel{(I 13)}{=} \hbar \sum_{j=1}^N h_j \stackrel{(2, 3)}{=} \hbar \sum_{j=1}^N h(k_j) \stackrel{(7)}{=} \hbar \sum_{j=1}^N h(k_j) \quad (77a)$$

zodat voor het impulsverschil van de N-deeltjestoestanden $\{h_j\}$ en $\{h'_j\}$ geldt:

$$\Delta P = P' - P = \hbar \sum_{j=1}^N (h'_j - h_j) \quad (77b)$$

aan welke som alleen die j's bijdragen waarvoor de quantumgetallen h_j veranderen! Wij kunnen de grootheden $\hbar h_j$ dus opvatten als de impulsen van quasideeltjes. Wat zijn hun energieën?

Tot de thermodynamische toestand met zekere β en μ dragen al die veeldeeltjestoestanden van het oneindige systeem bij die aanleiding geven tot dezelfde quasi-impulsverdeling $g(h)$, volgend uit de zadelpuntsconditie van de functionele integraal (35):

$$\ln \frac{g_h(h)}{g(h)} + \beta\mu - \beta \cdot \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \frac{\delta E[g]}{\delta g(h)} = 0 \quad (78)$$

$(g + g_h \frac{1}{2\pi})$

Deze conditie verkrijgt Landau door de equivalente methode van maximeren van de entropie:

$$\frac{S}{Lk_B} = \int_{-\infty}^{+\infty} dh \left\{ \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{2\pi} - g(h) \cdot \ln g(h) - \left(\frac{1}{2\pi} - g(h) \right) \cdot \ln \left(\frac{1}{2\pi} - g(h) \right) \right\} \quad (79)$$

bij constante dichtheid en energie. Hierbij is echter de energie:

$$E = L \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dh \cdot g(h) \cdot k(h, [g(h)])^2 \quad (32\&33)$$

een moeilijk hanteerbare functionaal van $g(h)$. Daarom zijn wij via (32) en (36) overgegaan op de dichtheidsfunctie $p(k)$, waarna wij de zadelpuntsvergelijking (54) konden oplossen in termen van een energiespectrum $\mathcal{E}(k; \beta, \mu)$. In het bijzonder volgt door vergelijken van (41) met (58) en (59):

$$\frac{dh(k)}{dk} = 1 - \frac{\partial \mathcal{E}(k)}{\partial \mu} \quad (80)$$

Hieruit volgt tezamen met (36) en (59):

$$g(h) = \frac{\frac{1}{2\pi}}{1 + e^{\beta(\varepsilon(h) - \mu)}} \quad (81)$$

de Fermi-Dirac-verdeling, bij energie-impuls-relatie $\varepsilon(h) \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon(k(h))$. Als wij dit (of (55), (36), (37)) invullen in (78) dan vinden wij:

$$\varepsilon(h) = \varepsilon(k(h)) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \frac{\delta E[g]}{\delta g(h)} \quad (82)$$

bij ons een resultaat, bij Landau een definitie.

Dus $\varepsilon(h)$ is de energie van de quasideeltjes. Immers als wij eindig veel quasideeltjes exciteren, d.w.z. eindig veel h_j 's veranderen, -zoals bij b.v. neutronverstrooiingsexperimenten gebeurt -, (en dus bij dezelfde β en μ blijven zitten,) dan veranderen volgens (77b) en (82) de totale impuls en de energie volgens:

$$\Delta P = \hbar \sum_j \text{geexc} (h'_j - h_j) \quad (83a)$$

$$\Delta E = \sum_j \text{geexc} (\varepsilon(h'_j) - \varepsilon(h_j)) \quad (83b)$$

waarbij alleen gesommeerd wordt over de geexciteerde quasideeltjes.

(Opm. Tot slot kunnen wij de groot-kanonieke druk (63) niet zo gemakkelijk uitdrukken in het quasideeltjesspectrum $\varepsilon(h)$ als gesuggereerd werd. Immers nu geldt:

$$\beta p = \int_{-\infty}^{+\infty} dh \cdot \frac{dk(h)}{dh} \cdot \ln \left\{ 1 + e^{-\beta(\varepsilon(h) - \mu)} \right\} \quad (84)$$

met $\frac{dk}{dh}$ alleen impliciet gegeven via (32) en (81). Expliciete uitdrukkingen krijgen wij alleen in $p(k)$ en $\varepsilon(k)$. Met name is de oplossing van de thermodynamica gegeven door (63) en (56), welke formules veel ruimer geldig lijken dan voor het Bose-gas met δ -interactie. Men moet dan alleen de functie $\Theta(k-k')$ nog bepalen, die bij de interactie hoort [13].)

APPENDIX.

Wij hebben in (III 21) ad hoc een natuurlijk bereik

$$\left. \begin{aligned} -\pi < k_1 < k_2 < \dots < k_n < \pi & , \text{ als } \Delta \leq -1 \\ -(\pi-\mu) < k_1 < k_2 < \dots < k_n < (\pi-\mu) & , \text{ als } -1 < \Delta = -\cos\mu < 1 \end{aligned} \right\} (A1)$$

ingevoerd, waarbinnen de functies (III 20), of wel

$$\varphi_j(k_1, k_2, \dots, k_n; \Delta) = -k_j N + 2\pi \left(j - \frac{n+1}{2}\right) - \sum_{l \neq j} \Theta(k_j, k_l) \quad (A2)$$

voor $j=1, 2, \dots, n$

reële analytische functies zouden zijn. Dit valt pas eenvoudig in te zien na de verschilkern-transformatie (III 50):

$$\operatorname{tgh} \frac{\alpha_j}{2} = \operatorname{tg} \frac{\mu}{2} \cdot \operatorname{tg} \frac{k_j}{2} \quad (A3)$$

waardoor de functie $\Theta(k_j, k_l)$ geschreven kan worden als (III 51)

$$\operatorname{tg} \frac{1}{2} \Theta(k_j, k_l) = \operatorname{tg} \frac{1}{2} \Theta(\alpha_l - \alpha_j) = \operatorname{cotg} \mu \cdot \operatorname{tgh} \frac{1}{2} (\alpha_l - \alpha_j) \quad (A4)$$

Als wij (A1) vergelijken met (III 58a,b) dan zien wij dat de transformaties (A3) overal in (A1) regulier zijn. Wegens (III 60a,b) gaat (A1) over in:

$$\left. \begin{aligned} -\pi < -i\alpha_1 < -i\alpha_2 < \dots < -i\alpha_n < \pi & , \text{ als } \lambda = -i\mu > 0, \Delta < -1 \\ -\infty < \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n < \infty & , \text{ als } 0 < \mu < \pi, -1 < \Delta < 1 \end{aligned} \right\} (A5)$$

Dus als wij specificeren $\Theta(0,0) = 0$, dan vinden wij uit (A4) een reële analytische functie $\Theta(k_j, k_l)$ op (A1). Bijgevolg zijn de functies φ_j uit (A2) eveneens op (A1) reële analytische functies.

Wij gaan nu bewijzen dat de functies φ_j op de rand van (A1) niet alle tegelijk nul kunnen zijn. Wij beschouwen twee gevallen:

a) $\Delta < -1$. Kies $k_n = \pi$ ($k_1 = -\pi$ analoog).

$$\begin{aligned}
 \textcircled{+}(\pi, k_\ell) &= \Theta(\alpha_\ell - i\pi) \stackrel{(A4)}{=} 2 \operatorname{arctg} \left\{ \cotg \mu \cdot \operatorname{tgh} \frac{1}{2}(\alpha_\ell - i\pi) \right\} \\
 &= -2 \operatorname{arctg} \left\{ \cotg h(-i\mu) \cdot \cotg \left(-\frac{i\alpha_\ell}{2}\right) \right\} \\
 &\stackrel{(A3)}{=} -2 \operatorname{arctg} \left\{ \cotg h(i\mu) \cdot \cotg h\left(-\frac{i\mu}{2}\right) \cdot \cotg \frac{k_\ell}{2} \right\} \quad (A6)
 \end{aligned}$$

Daar $\textcircled{+}(\pi, 0) = -\pi$ vinden wij hiermee:

$$\textcircled{+}(\pi, k_\ell) + \textcircled{+}(\pi, k_{n+1-\ell}) \stackrel{(III 23)}{=} \textcircled{+}(\pi, k_\ell) + \textcircled{+}(\pi, -k_\ell) \stackrel{(A6)}{=} -2\pi \quad (A7)$$

Vullen wij dit in (A2) in, dan vinden wij:

$$\begin{aligned}
 \varphi_n(k_1, k_2, \dots, k_{n-1}, \pi; \Delta) &= -\pi N + 2\pi \left(n - \frac{n+1}{2}\right) - \frac{n}{2}(-2\pi) \\
 &= -\pi(N - 2n + 1) < 0 \quad (A8)
 \end{aligned}$$

op grond van $2n \leq N$, waartoe wij ons volgens (II 22) mochten beperken.

b) $-1 \leq \Delta < 1$. Wij kunnen ons nu beperken tot:

$$\left. \begin{aligned}
 k_j &= \pi - \mu, \quad \alpha_j = \infty \quad \text{voor } j = n-m+1, \dots, n \\
 k_j &\neq \pi - \mu, \quad \alpha_j \neq \infty \quad \text{voor } j = 1, 2, \dots, n-m
 \end{aligned} \right\} \quad (A9)$$

Nu geldt op grond van (A4): $\textcircled{+}(\pi - \mu, k) = \Theta(-\infty) = 2\mu - \pi$, als $k \neq \pi - \mu$

$$\textcircled{+}(k_j, k_\ell) = -\textcircled{+}(k_\ell, k_j) \Rightarrow \sum_{\substack{j=n-m+1 \\ j \neq \ell}}^n \sum_{\substack{\ell=n-m+1 \\ \ell \neq j}}^n \textcircled{+}(k_j, k_\ell) = 0 \quad (A10)$$

Vullen wij (A9) en (A10) in in (A2) dan vinden wij:

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=n-m+1}^n \varphi_j &= -Nm(\pi - \mu) + 2\pi \sum_{j=n-m+1}^n \left(j - \frac{n+1}{2}\right) - m(n-m)(2\mu - \pi) \\
 &= -m(\pi - \mu)(N - 2n + 2m) < 0 \quad (A11)
 \end{aligned}$$

wegens $2n \leq N$. Dus minstens één van de φ_j 's is ongelijk aan nul!

LITERATUUR.

1. L.Onsager, Phys.Rev. 65 (1944)117
Zie ook het colloquiumverslag (Geneva 1970) in "Critical Phenomena in Alloys, Magnets and Superconductors", McGraw-Hill 1971.
2. E.H.Lieb, Phys.Rev.Lett.18(1967)692; Phys.Rev.162(1967)162.
Verdere referenties in: "Phase Transitions and Critical Phenomena", C.Domb & M.S.Green (editors), Ac.Press(1972), vol.I.
3. Afleidingen van de Heisenberg-interactie:
W.Heisenberg, Z.Physik 38(1926)411.
P.A.M.Dirac, Proc.Roy.Soc.London A112(1926)661.
P.A.M.Dirac, "The principles of Quantum Mechanics", Oxford Clarendon Press, 3rd ed.(1947), Ch.IX.
T.Arai, Phys.Rev.126(1962)471.
4. B.Sutherland, Journ.Math.Phys. 11(1970)3183.
Zie ook [15].
5. A.Gaaff, "Exact oplosbare modellen voor faseovergangen", (scriptie 1973).
6. F.Bloch, Z.Phys.61(1930)206.
7. H.A.Bethe, Z.Phys.71(1931)205.
H.A.Bethe, Handbuch der Physik, Teil 24 (2.Auflage), Springer(1933).
8. L.Hulthén, Ark.f.Mat., Astr och Fys.26A, no.11(1938)1.
R.Orbach, Phys.Rev.112(1958)309.
J.des Cloizeau & J.J.Pearson, Phys.Rev.28(1962)2131.
R.B.Griffiths, Phys.Rev.133A(1964)A768.
J.des Cloizeau & M.Gaudin, Journ.Math.Phys.7(1966)1384.
9. C.N.Yang & C.P.Yang, Phys.Rev.150(1966)321,327; 151(1966)258.
10. E.H.Lieb & W.Liniger, Phys.Rev.130(1963)1605,1616.
11. C.N.Yang & C.P.Yang, Journ.Math.Phys.10(1969)1115.
12. L.D.Landau, Sowj.Phys.JETP.3(1957)920.
J.de Boer, Seminariumverslag 4 april 1974.

13. B.Sutherland, Journ.Math.Phys.12(1971)246,251.
14. W.Heisenberg, Z.Phys.49(1928)619.
J.Frenkel, Z.Phys.49(1928)31.
15. R.J.Baxter, Phys.Rev.Lett.26(1971)832-834.
Ann.of Phys.70(1972)193,323; 76(1973)1,23,48.
16. F.Gantmacher, "Matrizen", Teubner Verlag, Vol.II,p.44 e.v.
17. C.N.Yang & C.P.Yang, Phys.Rev.147(1966)303.
18. T.Matsubara & H.Matsuda, Progr.Theor.Phys.16(1956)569;
17(1957)19; 18(1957)357, (drie-dimensionaal en numeriek).
19. E.H.Lieb, T.Schultz & D.Mattis, Ann.of Phys.16(1961)407.
S.Katsura, Phys.Rev.127(1962)1508.
20. I.S.GradshTEYN & I.M.Rhyzhik, "Tables of Integral, Series and Products",
Ac.Press(1965): formules (8.936) en (8.938).
M.A.Abramowitz & I.A.Stegun, "Handbook of Math.Functions", Dover (1965):
formules (22.6.5), (22.15.6) en (22.5.20).
21. Zie de appendix, of de eerste referentie [9], en wel voor
 $\Delta < -1$ onderdeel (γ) van theorem 3 op blz.326
 $-1 \leq \Delta \leq 0$ onderdeel (β) van theorem 3 op blz.326
 $0 \leq \Delta < 1$ onderdelen (α), (β) en (γ) van theorem 1 op blz.325.
22. Zie referentie [11], appendix F. Om dit verhaal te kunnen overnemen is
benodigd $\frac{dh}{dk} \geq \text{const} > 0$, waarbij $h(k)$ is gedefinieerd als

$$h(k) = k + \frac{1}{N} \sum_{l=1}^n \Theta(k, k_l)$$
De ongelijkheid volgt nu voor $\Delta < -2$ en
 $0 \leq \Delta < 1$, door de expliciete vorm voor Θ in te vullen (gebruik de
afschatting $\frac{\partial \Theta}{\partial k}(k, k_l) > -2$ en de eis $2n \leq N$).
23. L.R.Walker, Phys.Rev.116(1959)1089.
24. Zie referentie [9], appendix B op pagina 336.
25. Zie [20] G & R: formule (8.146.3)
A & S: formule (16.23.3)
26. M.Gaudin, Phys.Rev.Lett.26(1971)1301.
M.Takahashi, Phys.Lett.36A(1971)325; Progr.Theor.Phys.46(1971)401.
M.Takahashi & M.Suzuki, Progr.Theor.Phys.48(1972)2187.