



Universidad Nacional Autónoma de México
FACULTAD DE CIENCIAS

TEORIA DE PERTURBACIONES DE
VAN DER WAALS PARA FLUIDOS
BOSONICOS A TEMPERATURA
ABSOLUTA CERO

TESIS
Que para obtener el grado de
DOCTOR EN CIENCIAS
(FISICA)

Presenta
Miguel Angel Solís Atala

México, D.F., 1987

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

00382
6
2



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

- i) Agradecimientos
- ii) Dedicatoria
- iii) Lista de figuras
- iv) Lista de tablas
- v) Resumen

I.-	Introducción	(1)
II.-	Expansión en potencias de λ	(5)
III.-	Extrapolaciones en la densidad: $\epsilon_j(x)$	(9)
IV.-	Análisis de la serie en λ : Aplicación a Helio Cuatro Líquido, ^4He	(15)
	1) Esfera Dura más Pozo Rectangular (EDPR):	(17)
	de Burkhardt (BURK)	(26)
	2) Lennard-Jones (L-J):	(29)
	a) Corte Viejo (L-JV)	
	b) Corte Nuevo (L-JN)	
	3) Aziz et al. (AZIZ):	(36)
	a) Corte viejo	
V.-	El Cuarto Coeficiente:	(49)
	1) El "Ansatz"	
	2) Validez del "Ansatz"	
VI.-	Conclusiones	(56)
	Referencias	(57)
	Tablas	(61)
	Apéndice	(71)

LISTA DE FIGURAS

- Figura FG1.- Aproximantes $\epsilon_1(x)$ para el potencial Lennard-Jones "Corte Nuevo". La que satisface los criterios físicos es la FORM i.
- Figura FB1.- $\epsilon_j(x)$; $j = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt. $c = 1.685 \text{ \AA}$, $C_{30} = 25.397$.
- Figura FB2.- Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/O](x, \lambda)$, $L = 1, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt, respecto a la curva de energía experimental (EXPT). $c = 1.685 \text{ \AA}$, $C_{30} = 25.397$.
- Figura FB3.- Mínimos de las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L+M = 4$ (Δ), $L+M = 5$ (\blacktriangle) y $L+M = 6$ (\bigcirc); para el potencial de Burkhardt con $c = 1.685 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.
- Figura FB4.- Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/O](x, \lambda)$, $L = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt, respecto a la curva de energía experimental (EXPT). $c = 1.928 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.
- Figura FB5.- Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/O](x, \lambda)$, $L = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt con $c = 2.042 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.
 $x_s = x_{s, \text{expt}}$.
- Figura FB6.- Comparación de las curvas de energías $E/N[L/O](x, \lambda)$, $L = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt, la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo (GFMC) (\blacksquare) para el potencial L-J. $c = 1.985 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.
- Figura FB7.- Zona de saturación. Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L+M = 6$, para el potencial de Burkhardt, respecto a la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo (GFMC) (\blacksquare) para el potencial L-J. $c = 1.985 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.
- Figura FL1.- $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$, para el potencial Lennard-Jones "Corte Viejo". La forma óptima esta indicada entre paréntesis.
- Figura FL2.- Los mínimos de las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L+M = 4$ (Δ), $L+M = 5$ (\blacktriangle) y $L+M = 6$ (\bigcirc), mostrando la disminución en la dispersión; las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L+M = 6$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function

Monte Carlo GFMC (■). Para el potencial Lennard-Jones, "Corte Viejo".

Figura FL3.- $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$, para el potencial Lennard-Jones (L-J), "Corte Nuevo". La forma óptima está indicada entre paréntesis.

Figura FL4.- Los mínimos de las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L + M = 4$ (Δ), $L + M = 5$ (\triangle) y $L + M = 6$ (\circ), mostrando la disminución en la dispersión; las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L + M = 6$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo GFMC (■). Para el potencial Lennard-Jones (L-J), "Corte Nuevo".

Figura FA1.- La expresión original (2.1) para la energía $E/N(x)$ donde se ha hecho el cambio de variable $x = \sqrt{\rho a_0^3}$ y se ha sustituido el valor de a de Aziz. Para densidades $0 < x \leq 0.005$ (primera rama) la escala es normal y para $x > 0.005$ usamos escala logarítmica.

Figura FA2.- $\epsilon_j(x) = 1 + k_1 j x + k_2 j x^2 \ln x^2 + \dots$, $j = 0, \dots, 6$, para el potencial de Aziz.

Figura FA3.- Las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ sin aproximar $\epsilon_j(x)$, $j = 1, \dots, 6$ y $\epsilon_0(x) \rightarrow \epsilon_0(III)$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo GFMC (■). Para el potencial de Aziz.

Figura FA4.- Se grafican las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ sin aproximar los coeficientes $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$ con aproximantes generalizados. La curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo GFMC (■). Para el potencial de Aziz.

Figura FA5.- Se grafican las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ sin aproximar los coeficientes $\epsilon_j(x)$, $j = 1, \dots, 6$ y $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_0(i)$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos GFMC (■). Para el potencial de Aziz.

Figura FA6.- Aproximantes $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$ a las series $\epsilon_j(x) = 1 + k_1 j x + k_2 j x^2 \ln x^2 + \dots$, $j = 0, \dots, 6$, respectivamente. Para el potencial de Aziz. La forma seleccionada es indicada entre paréntesis.

Figura FA7.- Se comparan las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, los datos GFMC (■) para el potencial de AZIZ y la curva de energía experimental (EXPT).

Figura FA8.- Ampliación de la zona de saturación. Se muestran los mínimos de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ para $L + M = 5$ (\triangle) y $L + M = 6$ (\circ); las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L + M = 6$ y los da-

tos GFMC (■), para el potencial de Aziz, y la curva experimental (EXPT).

Figura FG2.- $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ con $\epsilon_0(x)$ el aproximante a $\epsilon_0(x)$ con tres términos (FORM I) y con cuatro términos (FORM III). Datos Green Function Monte Carlo GFMC (■), para el sistema de esferas duras cuánticas. x_B es la densidad de Bernal cuántica.

Figura FG3.- Diferencias porcentuales $([e] - f(x))/f(x)$ entre los respectivos Padé de orden 4([e]) y la función $f(x) = \sqrt{(1+x)/(1+2x)}$.

LISTA DE TABLAS

- Tabla 1.- Coeficientes α_j , β_j y γ_j de los desarrollos $a = a_0 + \sum_{j=1}^6 \alpha_j \lambda^j$, $r_0 = r_{00} + \sum_{j=1}^6 \beta_j \lambda^j$, $A_0^n = A_{00}^n + \sum_{j=1}^6 \gamma_j \lambda^j$. Para los potenciales indicados.
- Tabla 2.- Coeficientes C_{ij} , $i = 1, 2$, $j = 0, \dots, 6$ de las series $e_j(x) = 1 + C_{1j}x + C_{2j}x^2 \ln x^2 + \dots$, con $j = 0, \dots, 6$. Para cada uno de los potenciales indicados.
- Tabla 3.- Los 5 aproximantes de la serie $e(x)$, con tres términos
- Tabla 4.- Los 12 aproximantes de la serie $e(x)$, con cuatro términos
- Tabla 5.- Resumen del análisis de los aproximantes $e_j(x)$ a la serie $e_j(x)$, para el potencial de Burkhardt.
- Tabla 6.- Resumen del análisis de los aproximantes $e_j(x)$ a la serie $e_j(x)$, para el potencial L-J, Corte Viejo. Los aproximantes óptimos son los que no tienen indicación alguna.
- Tabla 7.- Resumen del análisis de los aproximantes $e_j(x)$ a la serie $e_j(x)$, para el potencial L-J, Corte Nuevo. Los aproximantes óptimos son los que no tienen indicación alguna.
- Tabla 8.- Resumen del análisis de los aproximantes $e_j(x)$ a la serie $e_j(x)$, para el potencial Azis *et al.* Los aproximantes óptimos son los que no tienen indicación alguna.
- Tabla 9.- Densidad (x_{\min}) y energía $((E/N)_{\min})$ mínimas para las diferentes curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L + M \leq 6$. Potencial de Burkhardt, $c = 1.685 \text{ \AA}$ y $C_3 = 25.397$.
- Tabla 10.- Densidad (x_{\min}) y energía $((E/N)_{\min})$ mínimas para las diferentes curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L + M \leq 6$. Potencial Lennard-Jones "Corte Viejo".
- Tabla 11.- Densidad (x_{\min}) y energía $((E/N)_{\min})$ mínimas para las diferentes curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L + M \leq 6$. Potencial Lennard-Jones "Corte Nuevo".
- Tabla 12.- Densidad (x_{\min}) y energía $((E/N)_{\min})$ mínimas para las diferentes curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L + M \leq 6$. Potencial de Azis *et al.*

Tabla 13.- Densidad (x_{\min}) y energía $((E/N)_{\min})$ mínimas para las diferentes curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L + M \leq 6$. Potencial de Burkhardt, $c = 1.985 \text{ \AA}$ y $C_3 = 25.397$.

Tabla 14.- Expresiones analíticas para los aproximantes de Padé hasta orden 5 ($L + M = 5$)

Resumen

En este trabajo, se estudia la energía de un sistema de N bosones a temperatura $T = 0$ a partir de un potencial de interacción de dos cuerpos $v(r)$ como función de la densidad de partículas $\rho = N/V$, con V el volumen del sistema. Con este fin, se parte de la expresión de la energía del sistema para bajas densidades y con un potencial repulsivo. La atracción entre las partículas se introduce en forma perturbativa, de manera que se obtiene una serie doble en términos de la densidad y de un parámetro que caracteriza la intensidad de la atracción. Este esquema representa un tratamiento perturbativo alrededor del fluido de esferas repulsivas (altamente no trivial desde el punto de vista de muchos cuerpos), en lugar del tratamiento tradicional que parte del gas ideal. Mediante técnicas adecuadas de tipo Padé y sus generalizaciones se extrapolan las distintas correcciones perturbativas a la energía a densidades que corresponden al sistema físico (como en el caso del ^4He líquido).

El análisis se efectúa con los siguientes potenciales de interacción: Esfera dura con pozo rectangular, de Burkhardt (BURK); la interacción Lennard-Jones con a) Corte Viejo (L-J,V) y b) Corte Nuevo (L-J,N); el potencial de Aziz et al (AZIZ).

Los resultados llevados hasta orden seis en el parámetro de atracción entre partículas, muestra una rapidez de convergencia muy satisfactoria hacia un valor estable que representa la energía del estado fundamental del sistema de muchos bosones en interacción. La comparación de estos resultados con los datos experimentales de laboratorio y de computadora muestran una concordancia muy satisfactoria. Este trabajo sugiere que el parámetro de pequeñez apropiado para la descripción de líquidos cuánticos como el ^4He , es precisamente, el parámetro de intensidad de las atracciones entre partículas.

Introducción

Durante varias décadas, uno de los objetivos fundamentales de la teoría de Materia Condensada ha sido la determinación, a partir de primeros principios, de las propiedades de un sistema de muchos cuerpos en interacción, de manera simple, no costosa y confiable.

A la fecha, existen dos métodos generales para abordar este problema: las teorías perturbativas y los métodos variacionales, basados en los trabajos originales de Brueckner & Bethe, y Jastrow, respectivamente. Sin embargo, una preocupación persistente ha sido la limitación de las teorías originales, a densidades relativamente bajas de los sistemas de muchos bosones y muchos fermiones, estudiados dentro del esquema de la ecuación de Schrödinger no relativista. Muchos y notables han sido los esfuerzos para extender estos esquemas teóricos a densidades intermedias que son las que corresponden a la situación física de los sistemas de interés.

Por otro lado, actualmente hay pocas simulaciones computacionales de Monte Carlo^[1] ya sean: del tipo Variacional de Jastrow o, las más fundamentales, de Funciones de Green, que sean disponibles aun para cantidades básicas tales como la energía del estado base (como función de la densidad), de los varios sistemas cuánticos de muchos cuerpos. La razón es simple: Estas simulaciones requieren enormes tiempos de computadora que las convierten en caras. Sin embargo, es una alternativa que ha proporcionado resultados valiosos y que ha abierto todo un campo de trabajo en esa dirección. Lo anterior, no es para menos, motiva la búsqueda de nuevas alternativas.

Aquí proponemos un nuevo Método que denominamos Perturbaciones Van der Waals para calcular, a partir de primeros principios, las propiedades de un sistema de muchos cuerpos, ya sean fermiones o bosones, a densidades intermedias. En particular desarrollamos un estudio detallado para el sistema de bosones y lo aplicamos a Helio Cuatro Líquido, ^4He .

En este trabajo, partimos de las expansiones originales para bajas densidades, que los métodos de Teoría de Campo Cuántico han generado en las décadas pasadas para la energía por partícula del estado base de muchos bosones^[2].

En el Capítulo II, transformamos la expansión para la energía por partícula, desarrollando las cantidades que dependen del potencial de interacción, en una serie de

potencias del parámetro de intensidad atractiva. Se considera que el potencial de interacción está compuesto de una parte repulsiva y otra atractiva. Este nuevo enfoque perturbativo parte, a orden cero, de un sistema de referencia que ya no es el sistema de gas ideal de partículas sin interacción, sino el de un fluido de partículas púramente repulsivas. Este estado fluido, no trivial desde el punto de vista de muchos cuerpos, es entonces perturbado en forma sistemática, introduciendo la parte atractiva entre pares de partículas.

En el Capítulo III, utilizamos técnicas modernas para la aceleración de la convergencia de series irregulares, parecidas a los aproximantes de Padé^[3] (discutidos en el Apéndice), con el propósito de extrapolar la energía a densidades intermedias, dejando fijo el parámetro de intensidad atractiva. Las propiedades físicas del sistema en cuestión se utilizan para determinar las mejores extrapolaciones. Un método de análisis similar, de tipo Padé aplicado a las expansiones del virial clásicos, ha conducido^[4] a la descripción de i) fluidos densos, ii) el sólido amorfo y, también, indicaciones de iii) la fase cristalina, que como es sabido de Dinámica Molecular, ocurre aún en sistemas de esferas duras.

En el Capítulo IV extrapolamos la energía por partícula en el parámetro de intensidad atractiva y analizamos el sistema Helio Cuatro Líquido, ${}^4\text{He}$, a temperatura $T = 0$. Para ello partimos de 4 tipos diferentes de potencial de interacción de dos cuerpos, de uso frecuente en la literatura. Estos son: a) el potencial de Burkhardt, b) Lennard-Jones "Corte Viejo", c) Lennard-Jones "Corte Nuevo" y d) Potencial de Aziz *et al.* Los resultados, que se derivan de los tres coeficientes conocidos en el desarrollo de la energía por partícula a bajas densidades, son excelentes al ser comparados con los resultados experimentales tanto de laboratorio como de simulaciones por computadora. La inclusión y determinación del cuarto coeficiente (desconocido y dependiente de la forma del potencial), del desarrollo de la energía, es una posibilidad que nos conduciría a una mayor precisión en los resultados.

En el Capítulo V, reportamos un primer intento de incluir y determinar, el cuarto término del desarrollo inicial de la energía por partícula, para bosones. Esencialmente, se propone un "Ansatz" para el coeficiente C_3 , cuya estructura general se determina al incorporar la forma analítica del coeficiente análogo del desarrollo de la energía por partícula para fermiones y del resultado variacional en que $C_3 \neq 0$ cuando el potencial entre partículas es el de Moszkowski^[5]. Los parámetros del "Ansatz" fueron fijados con el potencial de Burkhardt actuando entre partículas. Cuando el "Ansatz", así determinado, se transfirió a otro potencial, el de Moszkowski, no mostró la universalidad que esperábamos. Sin embargo, ésto originó nuevas maneras de determinar el cuarto coeficiente y que motivan un estudio posterior.

El método que proponemos en este trabajo sugiere su generalización para: a) La obtención inmediata de propiedades termodinámicas del sistema estudiado, a partir de las expresiones para la energía del estado base, calculadas b) La aplicación del método

a los nuevos sistemas cuánticos de bosones (Hidrógeno atómico y Tritio, con espines alineados)^[6] c) Completar los cálculos, que con este mismo método se están llevando a cabo^[7] para sistemas fermiónicos d) Explorar la aplicabilidad del método para sistemas fuera del estado base.

Finalmente, en el Capítulo VI reportamos nuestras conclusiones.

Expansión en Potencias de λ

A partir de la teoría de Perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger y con los métodos de Teoría de Campo Cuántico ha sido posible obtener una expansión, para bajas densidades y alrededor de un gas ideal cuántico, para la energía del estado base de un sistema de partículas cuánticas con interacciones centrales arbitrarias entre parejas^[2,6].

En particular, para el sistema de N bosones, de masa m , encerrados en una caja de volumen V , tal que la densidad de partículas es $\rho = N/V$, la expansión para la energía por bosón E/N es^[2]

$$\frac{E}{N} \cong \frac{2\pi\hbar^2}{m} \rho a [1 + C_1(\rho a^3)^{1/2} + C_2 \rho a^3 \ln \rho a^3 + C_3 \rho a^3 + O\{(\rho a^3)^{3/2} \ln \rho a^3\}], \quad (2.1)$$

donde C_1 y C_2 son constantes absolutas conocidas. No así C_3 , que es desconocida y depende de correlaciones de tres cuerpos y por tanto de la forma del potencial de interacción. Así

$$C_1 = \frac{128}{15\sqrt{\pi}}, \quad C_2 = 8 \left(\frac{4}{3}\pi - \sqrt{3} \right)$$

y a es la longitud de dispersión de onda S , definida en términos del potencial central $v(r)$ de interacción de dos cuerpos y de la función de onda radial reducida $u_0(r)$ de dispersión de onda S , a energía cero, como

$$a = \int_0^\infty dr r v(r) u_0(r).$$

Sin embargo, para analizar sistemas reales de bosones, por ejemplo ^4He -Líquido, la expansión ec. (2.1), tiene dos limitaciones:

- 1) Para varios potenciales $v(r)$ realistas se tiene que $a < 0$, por tanto, el segundo término de la expansión se vuelve imaginario puro y deja de tener significado físico.
- 2) El desarrollo es válido sólo para bajas densidades.

En este trabajo sobrepasamos el primer inconveniente desarrollando a en una serie de potencias del parámetro $\lambda > 0$, una medida de la intensidad atractiva del potencial

$v(r)$. O sea

$$a = a_0 \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \lambda^j \right),$$

con α_j constantes conocidas.

Sustituyendo el desarrollo para a y definiendo la variable adimensional

$$x \equiv \sqrt{\rho a_0^3}$$

en la expresión para la energía, ésta se transforma en una doble serie: en la densidad y en el parámetro λ . O sea

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{m a_0^2} x^2 \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \epsilon_j(x) \lambda^j, \quad (2.2)$$

con

$$\epsilon_j(x) = [1 + C_{1j}x + C_{2j}x^2 \ln(x^2) + \dots]; \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3)$$

En lo sucesivo nos referiremos a la variable x como la densidad del sistema, a efecto de la relación directa de ésta con ρ .

En esta parte del trabajo estaremos interesados en los tres primeros términos del desarrollo en la densidad de las ec. (2.3) y hasta orden 6 en λ en la ec. (2.2). En el capítulo V, analizamos la posibilidad de introducir el próximo término del desarrollo (2.3) en la densidad de la forma $C_3 x^2$.

Las constantes α_j y C_{ij} , $j = 0, \dots, 6$, $i = 0, 1, 2$, son dadas en la tabla 1 y 2 para los diferentes potenciales estudiados aquí. Como puede verse, hemos transformado la serie original para la energía en otra que, además de que todos sus términos son reales, independientemente del valor de a , es un desarrollo perturbativo ya no alrededor del gas ideal de bosones sino ¡alrededor de un sistema de esferas repulsivas! O sea, a la manera de Van der Waals que propuso esta táctica para estudiar fluidos clásicos hace más de cien años. De aquí el origen del nombre de este trabajo.

El segundo inconveniente del desarrollo para la energía, es superado haciendo uso de extrapolantes de Padé† y sus generalizaciones, que nos proporcionan extrapolaciones tanto en λ como en la densidad, respectivamente, hacia regiones físicas de interés. Así, para $\lambda = 0$, se seleccionan los aproximantes $\epsilon_j(x)$ para cada una de las $e_j(x)$; $j = 0, 1, \dots, 6$. La expresión para la energía por partícula es transformada a

$$\frac{E}{N} \simeq \frac{2\pi\hbar^2}{m a_0^2} x^2 \sum_{j=0}^6 \alpha_j \epsilon_j(x) \lambda^j. \quad (2.4)$$

† Ver Apéndice.

la cual podemos reescribir como

$$\frac{E}{N} \approx \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^3} x^2 \epsilon_0(x) \left(1 + \sum_{j=1}^6 F_j(x) \lambda^j \right),$$

donde hemos definido

$$F_j(x) \equiv \frac{\alpha_j \epsilon_j(x)}{\epsilon_0(x)}.$$

Finalmente, extrapolamos la anterior expresión a $\lambda > 0$, mediante aproximantes de Padé y la energía será dada por la expresión

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^3} x^2 \epsilon_0(x) [L/M](\lambda),$$

con $0 \leq L + M \leq 6$.

Extrapolaciones en la densidad: $\epsilon_j(x)$

Las extrapolaciones en la densidad a regiones físicas fue realizado mediante el método "Tailing"^[9]. Este es un método de generar aproximantes a una serie (regular o irregular), en la que sus primeros términos son conocidos. Este método, también, es más general que el de Padé (normal y generalizado) en el sentido de que los aproximantes de Padé $[L/M]$, son un subconjunto de los aproximantes "tailing" (L/M) .

El método es motivado por el hecho frecuente de que en las series físicas, los primeros términos son, numéricamente, mejor conocidos que los últimos términos de la expansión.

Mostramos el método para nuestro caso particular en la que la serie no es una serie de potencias sino que contiene términos logarítmicos;

$$\epsilon_j(x) = 1 + k_1 x + k_2 x^2 \ln(x^2) + \dots \quad (3.1)$$

con k_1 y k_2 constantes conocidas.

Se parte expresando la cola ("tail"), de la serie, como el mínimo número de términos que nos permita expresarla como una razón de dos funciones $N(x)$ y $D(x)$. Con esta idea reescribimos (3.1) así

$$\epsilon_j(x) = 1 + k_1 x \left(1 + \frac{k_2}{k_1} x \ln(x^2) \right)$$

Se escogen las funciones $N(x)$ y $D(x)$, las más simples y no triviales, tales que el desarrollo binomial de $N(x)/D(x)$, reproduzca, al menos, exactamente la cola. Entonces

$$1 + \frac{k_2}{k_1} x \ln(x^2) \simeq \frac{1}{1 - \frac{k_2}{k_1} x \ln(x^2)} + O(x^2)$$

y

$$1 + \frac{k_2}{k_1} x \ln(x^2) \triangleq \frac{1}{1 - \frac{k_2}{k_1} x \ln(x^2)},$$

donde el símbolo \triangleq significa "representado por". En general la representación quedará dada por

$$\epsilon_j(x) \triangleq P(x) + \frac{N(x)}{D(x)}$$

donde $P(x)$ será la serie sin la cola. Por lo tanto la primera representación de $\epsilon_j(x)$ es

$$\epsilon_j(x) \doteq 1 + \frac{k_1 x}{1 - \frac{k_2}{k_1} x \ln(x^2)} \equiv \epsilon_j(x)$$

Se continúa dejando el siguiente término, a la izquierda en la serie $\epsilon_j(x)$, en la cola. De nuevo, se obtienen los aproximantes de Padé Generalizados a ésta, que junto con los términos restantes generan los siguientes aproximantes a $\epsilon_j(x)$. Esto se continúa hasta incluir en la cola a la $\epsilon_j(x)$ completa ($P(x) = 0$). O sea, en nuestro caso, representar la ec. (3.1) de las tres formas siguientes:

$$\begin{aligned} 1 + k_1 x + k_2 x^2 \ln(x^2) &\doteq \frac{1}{1 - k_1 x - k_2 x^2 \ln(x^2)} \\ &\doteq \frac{1 + k_2 x^2 \ln(x^2)}{1 - k_1 x} \\ &\doteq \frac{1 + k_1 x}{1 - k_2 x^2 \ln(x^2)} \end{aligned}$$

y que nos conducen finalmente a cinco posibles aproximantes $\epsilon_j(x)$, para cada $\epsilon_j(x)$, como se muestran en la tabla 3.

Cuando se considera el cuarto coeficiente $k_3 x^2$, el número de posibles aproximantes para cada $\epsilon_j(x)$, aumenta a 12. Estos son tabulados en la tabla 4. Para efecto de identificación hemos etiquetado a cada una de las cinco primeras formas por FORM 0, ..., FORM iv; y a cada una de las otras doce formas por FORM I, ..., FORM XII.

Se puede ver que para el caso examinado aquí, se tienen cinco aproximantes para cada $\epsilon_j(x)$ con $j = 0, \dots, 6$; en total 35 aproximantes. Como es de esperarse no todas representan el mejor comportamiento real. Fue necesario recurrir a criterios físicos para identificar las siete mejores $\epsilon_j(x)$, proceso que se describe en seguida.

Criterios Físicos

Dado que $\epsilon_0(x)$ está relacionada con la solución del sistema de esferas repulsivas y el cual hemos aproximado por uno de esferas duras, su selección la trasladamos para cuando discutimos este último. Sin embargo, podemos adelantar que ésta deberá ser monótonicamente creciente conforme aumentamos la densidad; ya que cada vez que localizamos más a las partículas, la energía, por principio de incertidumbre, aumenta.

A la luz de la teoría de perturbaciones de Raleigh-Schrödinger, para estados estacionarios y no degenerados, dedujimos características globales del comportamiento de

las $\epsilon_j(x)$, $j = 1, 2$. Para ello, separamos nuestro potencial, $v(r)$, de interacción entre bosones, en una parte repulsiva, $v_0(r)$, y la restante parte atractiva, $\lambda v_1(r)$, de tal forma que

$$v(r) = v_0(r) + \lambda v_1(r).$$

Así, definimos el hamiltoniano de nuestro sistema como

$$H = H_0 + \lambda H_1,$$

donde, desde el punto de vista perturbativo, H_0 , que contiene la parte repulsiva del potencial, será el hamiltoniano no perturbado y, λH_1 , la parte atractiva o perturbativa. Aquí, λ es un parámetro real de intensidad atractiva y puede ser: cero, en cuyo caso retornamos al hamiltoniano no perturbado o crecer hasta su valor total, cuando consideramos la interacción completa. Este valor total puede variar de un potencial a otro, aunque, por lo general, es tomado como 1.

Supongamos, ahora, que la solución del sistema no perturbado

$$H_0|\Psi_n^0\rangle = E_n^0|\Psi_n^0\rangle$$

es conocida; con $|\Psi_n^0\rangle$ y E_n^0 , sus eigenfunciones y eigenvalores respectivamente. En términos de estas cantidades, la energía E_m del sistema perturbado puede ser expresada como un desarrollo en potencias del parámetro λ ^[10]

$$E_m = E_m^0 + \lambda(H_1)_{mm} + \lambda^2 \sum_{n \neq m} \frac{(H_1)_{mn}^2}{E_m^0 - E_n^0} + O(\lambda^3), \quad (3.2)$$

con

$$(H_1)_{mn} = \langle \Psi_m^0 | H_1 | \Psi_n^0 \rangle.$$

Como H_1 es la parte atractiva de $v(r)$, $H_1 \leq 0$ y

$$(H_1)_{mm} \leq 0,$$

por lo que la primera corrección a la energía del estado base deberá ser negativa. Se induce que el segundo término de (2.4), es negativo y, como $\alpha_1 < 0$,

$$\epsilon_1(x) \geq 0. \quad (3.3)$$

Por otro lado, conforme aumentamos la densidad aumentamos el número de partículas en la zona de mayor atracción por lo que $\epsilon_1(x)$ será, también, monótonicamente creciente con la densidad.

Similarmente, de (3.2), es inmediato deducir que para el estado base ($m = 0$), la segunda corrección a la energía será siempre negativa, sin importar que la perturbación sea atractiva o repulsiva, pues

$$|(H_1)_{mn}|^2 \geq 0 \quad \text{y} \quad E_0^0 - E_n^0 < 0 \quad \forall n \neq 0$$

y de nuevo, como $\alpha_2 < 0$,

$$\epsilon_2(x) \geq 0. \quad (3.4)$$

Las restantes $\epsilon_j(x)$, $j > 2$, deben satisfacer las siguientes consideraciones:

- 1) La aplicación de este método a otros sistemas, en particular sistemas de fermiones^[11], ha mostrado que

$$\epsilon_{j-1}(x) \geq \epsilon_j(x), \quad j = 2, \dots, 6,$$

dentro del intervalo de densidades de interés. Esta monotonicidad en orden se procuró respetar aquí.

- 2) Ha sido demostrado en una^[12] y dos^[13], y esperado para tres dimensiones^[13], que para un sistema de partículas clásicas interactuando vía un potencial por parejas de corto alcance, la teoría de perturbaciones termodinámicas es exacta a primer orden cuando la densidad se aproxima a la densidad de empaquetamiento. O sea, a esta densidad todos los demás términos de la energía de orden superior a uno, se hacen cero.

Aunque nuestro sistema es cuántico y en tres dimensiones, con un potencial de interacción por parejas de largo alcance, hemos observado que las $\epsilon_j(x)$ con $j \geq 2$ tienden a cero conforme nos acercamos a la zona de una posible densidad de empaquetamiento que está alrededor de la densidad de empaquetamiento (x_B) del sistema de esferas duras bosónicas. Lo anterior nos sugirió suponer: a) la existencia de una densidad finita de empaquetamiento para el sistema estudiado aquí y b) que nuestra teoría de perturbaciones tiende a ser exacta a primer orden, para esta densidad. O sea, las $\epsilon_j(x)$, $j \geq 2$, deberán ser (o tender a) cero alrededor de la densidad de empaquetamiento. Estas suposiciones nos condujeron a seleccionar de entre las ϵ_j con un comportamiento similar en todo el intervalo de interés, a aquella cuyo valor era más cercano a cero alrededor de la densidad de empaquetamiento.

Fueron descartadas todas aquellas que tienen un polo dentro del intervalo físico $0 < x \leq x_B$, ya que no representarían una situación física real.

La elección de las $\epsilon_j(x)$, para cada uno de los potenciales, son resumidos en las tablas 5-8. En éstas, para cada $\epsilon_j(x)$, se señalan los criterios que no satisfacen y que la eliminaron. Las elegidas son aquellas que no tienen indicación alguna. La notación que aparece en las tablas es la siguiente: 'vp', viola positividad; 'nmc', no monotónicamente creciente; 'vmo', viola monotonicidad de orden. Condiciones necesarias son: la positividad, para $\epsilon_0(x)$, $\epsilon_1(x)$ y $\epsilon_2(x)$; crecer monotónicamente, para $\epsilon_0(x)$ y $\epsilon_1(x)$. La monotonicidad en orden se impuso en las $\epsilon_j(x)$, con $j > 2$.

Por último, a manera de ejemplo, adjuntamos la figura FG1, que contiene todas las formas posibles de $\epsilon_1(x)$, para el potencial L-JN, de las cuales seleccionamos la

FORM i. Se puede notar que las formas FORM iv y FORM ii no son monotónicamente crecientes y que las formas FORM 0 y FORM iii, violan la positividad ($\epsilon_1(x) \geq 0$). La única que cumple con los criterios físicos, es la FORM i.

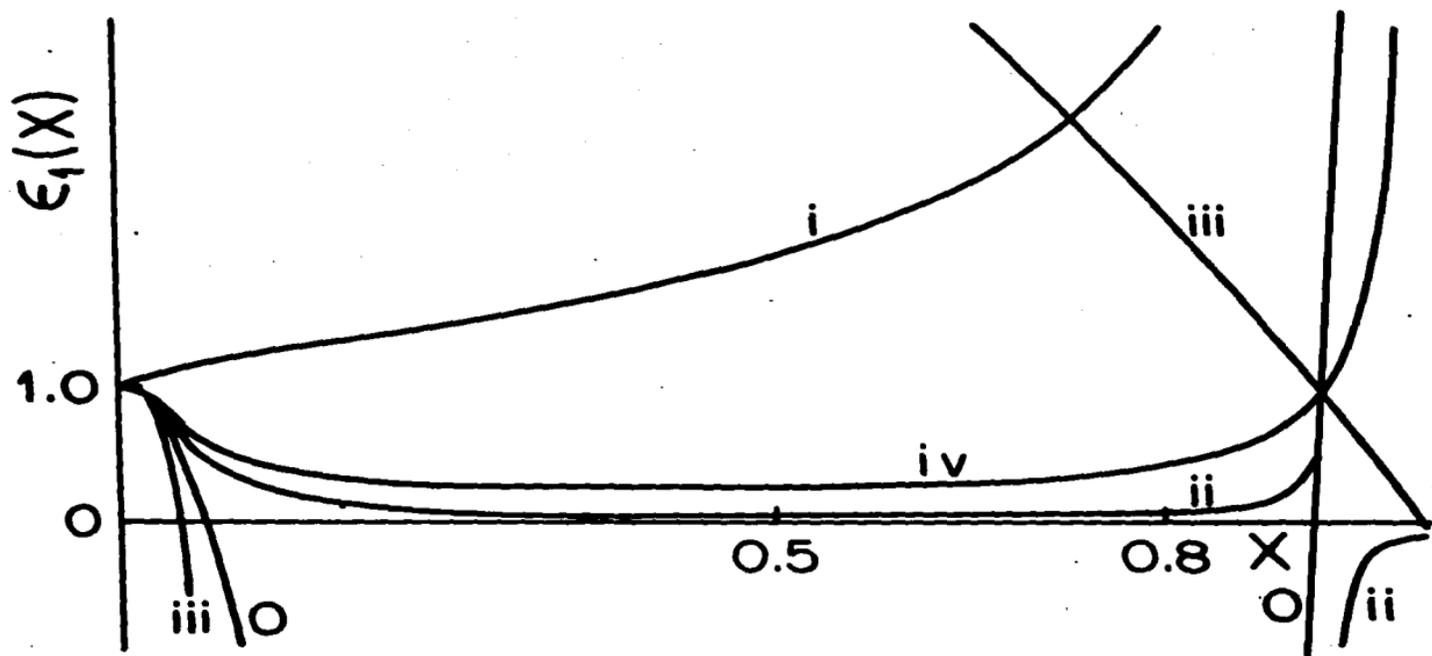


Figura FG1.- Aproximantes $\epsilon_1(x)$ para el potencial Lennard-Jones "Corte Nuevo". La que satisface los criterios físicos es la FORM i.

Análisis de la Serie en λ : aplicación a Helio-Cuatro Líquido, ^4He

Después de haber analizado el conjunto de funciones $\epsilon_j(x)$, y caracterizado sus propiedades, procedemos a analizar las series en λ . Esto lo haremos para cada uno de los potenciales $v(r)$, que suponemos existe entre dos cualesquiera pares de bosones del sistema Helio-Cuatro-Líquido, ^4He . Estos son:

- 1) Esfera Dura más Pozo Rectangular (EDPR): Potencial de Burkhardt^[14]
- 2) La interacción Lennard-Jones
Corte Viejo (L-JV)
Corte Nuevo (L-JN)
- 3) El potencial de Aziz *et al.* (AZIZ)

Al generar el desarrollo perturbativo, cada uno de los potenciales ha sido reescrito como la suma de una parte repulsiva $v_0(r)$, más una parte atractiva $\lambda v_1(r)$, es decir,

$$v(r) = v_0(r) + \lambda v_1(r), \quad (4.1)$$

con λ el parámetro perturbativo que es una medida de la intensidad atractiva y cuyo valor depende de cada uno de los potenciales.

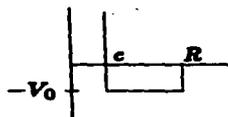
En el caso del potencial de Burkhardt, la determinación de λ es trivial: corresponde sencillamente a la profundidad del pozo atractivo. Sin embargo, en el potencial de Lennard-Jones, la separación de la parte atractiva no es única; será separado en dos formas ligeramente diferentes la una de la otra, y que hemos denominado "Corte Viejo" y "Corte Nuevo". En el caso clásico, estas dos formas de separar el potencial han sido propuestas por Barker & Henderson^[15] y por Weeks, Chandler & Anderson^[16], respectivamente. Finalmente, la separación de la parte atractiva del potencial de Aziz *et al.* se realiza de la misma manera que para el potencial anterior, aunque los cálculos asociados a la separación "Corte Nuevo", están por concluirse.

Potencial EDPR. Este es un potencial de esfera dura más un pozo rectangular, que definimos como:

$$v(r) = \begin{cases} \infty, & r < c, \\ -V_0, & c < r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

y que reescribimos como

$$v(r) = v_0(r) + \lambda v_1(r),$$



con

$$v_0(r) \equiv v_e(r) = \begin{cases} \infty, & r < c, \\ 0, & r > c, \end{cases}$$

el potencial de esfera dura y

$$v_1(r) = \begin{cases} 0, & r < c, \\ -\hbar^2 \lambda / (c^2 \alpha^2 m), & c < r < R, \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

donde definimos

$$\alpha = (R - c)/c, \quad (4.2)$$

el intervalo de acción del pozo de potencial y

$$\lambda = \frac{mV_0}{\hbar^2} (R - c)^2 \quad (4.3)$$

Para estos potenciales EDPR, la longitud de dispersión a está dada por la forma analítica^[11]

$$a = c \left\{ 1 + \alpha \left[1 - \frac{\tan \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \right] \right\} \quad (4.4)$$

donde su desarrollo en serie de potencias de λ ,

$$a = c \left[1 - \alpha \left(\frac{1}{3} \lambda + \frac{2}{15} \lambda^2 + \frac{17}{315} \lambda^3 + \frac{62}{2835} \lambda^4 + \frac{1382}{155925} \lambda^5 + \frac{21844}{6081075} \lambda^6 + \dots \right) \right] \quad (4.5)$$

nos permite determinar de forma inmediata los valores de α_j . Para los restantes potenciales se hace necesario obtenerlos numéricamente.

Potencial de Burkhardt.- Cuando fijamos los parámetros c , R y V_0 , definimos un potencial EDPR particular. Los valores de estos parámetros que usamos aquí son los de Burkhardt^[14]

$$\begin{aligned} c &= 1.685 \text{ \AA}, \\ R &= 5.5 \text{ \AA}, \\ V_0 &= 1.43167K, \end{aligned}$$

que definen el potencial que lleva su nombre. Burkhardt ajustó sus parámetros para reproducir los defasamientos δ_l con $l = 0, \dots, 4$, del potencial L-J que posteriormente analizaremos. Introduciendo estos valores en (4.2) y (4.3), obtenemos los parámetros adimensionales

$$\begin{aligned}\lambda &= 2.2814165, \\ \alpha &= 2.264095,\end{aligned}$$

que a su vez, sustituidos en (4.3) nos proporcionan

$$a = -36.293796 \text{ \AA}.$$

Como puede verse, basta dar tres cualesquiera parámetros para fijar el potencial. De aquí en adelante nos referiremos a los parámetros c , α , y λ .

Con este potencial en mente, iniciamos el análisis en λ .

De la ecuación (2.4) podemos ver que cuando $\lambda = 0$, ésta se reduce, en general, al caso del sistema de esferas repulsivas, para la cual no tenemos una solución. Sin embargo, para los potenciales EDPR, el sistema de esferas repulsivas se reduce a uno de esferas duras, sistema que discutiremos ahora y con el cual aproximaremos al de esferas repulsivas de los potenciales restantes.

Esfera Dura.- Para $\lambda = 0$, el potencial de Burkhardt se transforma a

$$v_0(r) \rightarrow v_e(r) = \begin{cases} 0, & r > c, \\ \infty, & r < c. \end{cases}$$

La longitud de dispersión se reduce a

$$a \rightarrow a_0 = c$$

y la energía del sistema por bosón queda

$$\begin{aligned}\left(\frac{E}{N}\right)_0 &= \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^3} \alpha_0 x^2 \epsilon_0(x) \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^3} \alpha_0 x^2 [1 + C_{10}x + C_{20}x^2 \ln x^2 + C_{30}x^2 + \dots]\end{aligned}\tag{4.6}$$

con $\alpha_0 = 1$, $C_{10} = C_1 = 4.814418$, $C_{20} = C_2 = 19.853915$, $C_{30} = C_3$ desconocida y $x = \sqrt{\rho a_0^3}$.

En particular, para este sistema de esferas duras, un estudio detallado ha sido realizado por Pineda *et al.*^[17] y, más recientemente, por V. Aguilera-Navarro^[18]. Ellos usaron los cuatro términos del desarrollo (4.6). El cuarto término, que no se conoce, se determina a partir de los siguientes requerimientos físicos.

- a) $\lim_{\rho \rightarrow 0} \left(\frac{E}{N} \right)_{\lambda=0} = 0$
- b) Para este sistema ya se han determinado cuatro valores de la energía $[E/N]$, para cuatro densidades diferentes, mediante el método de Monte Carlo y Funciones de Green (GFMC)^[19]. Los cálculos, que pueden considerarse como exactos, fueron llevados a cabo para 256 partículas.
- c) Cuando las partículas tienden a la densidad de empaquetamiento, por definición éstas sufren un proceso de localización en la posición y, como consecuencia del principio de incertidumbre, su energía tenderá a infinito. De aquí que la energía por partícula $E/N(x)$, deba poseer un polo de orden 2, para alguna densidad mayor que cero ($x_B > 0$), asociado al empaquetamiento irregular de las esferas duras.

Un empaquetamiento similar ocurre en el sistema de esferas duras clásicas, a la densidad de Bernal^[20]

$$\rho_B = x^2/c^3 = 0.86\rho_0, \quad (4.7)$$

con $\rho_0 = \sqrt{2}/c^3$, la densidad de empaquetamiento regular en un arreglo 'fcc'. Para el caso cuántico es de esperarse que el polo de empaquetamiento ocurra a una densidad menor, dado que el efecto de difracción cuántica hace ver a las esferas más grandes que en el caso clásico. Por ello, la sección transversal total σ para dos esferas duras de diámetros c , a muy bajas^[21] y a muy altas^[22] energías (pero no relativistas) son, respectivamente,

$$\sigma \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi c^2 [1 + 1/3(kc)^4 + \dots] \quad (4.8)$$

$$\sigma \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 2\pi c^2 [1 + .99615/(kc)^{2/3} + \dots] \quad (4.9)$$

Cuando las partículas se acercan a la densidad de empaquetamiento irregular las energías relativas ($\hbar^2 k^2/m$) aumentan sin llegar a ser relativistas, por lo que la σ que nos es útil aquí es $\sigma \cong 2\pi c^2$. Como puede verse hay un factor 2 de diferencia con respecto a la sección transversal de dispersión clásica, $\sigma = \pi c^2$. En otras palabras, el diámetro de las esferas duras cuánticas se ve aumentado por un factor $\sqrt{2}$, respecto al de las esferas clásicas. Esto hace que la densidad de empaquetamiento de las esferas cuánticas se vea disminuida en un factor de $2^{3/2}$. De lo anterior es de esperarse que la correspondiente densidad de Bernal para el caso cuántico sea

$$\rho_B = 0.86\rho_0 = \frac{0.86\sqrt{2}}{c^3} \rightarrow \frac{0.86\sqrt{2}}{2^{3/2}c^3} \cong 0.304\rho_0$$

o, en términos de nuestra variable x ,

$$x_B = \sqrt{\rho_B c^3} \cong \sqrt{.304(\rho_0 c^3)} = .551x_0$$

de modo que esperaríamos que la divergencia ocurriese a una densidad más baja que la del valor clásico.

De los doce aproximantes posibles (ver tabla 4), que se pueden generar cuando se consideran los cuatro términos de $\epsilon_0(x)$, el mejor comportamiento, según las consideraciones antes hechas, es el denominado FORM III;

$$\epsilon_0^{1/2}(x) = \frac{1}{1 - \frac{C_{10}x}{1 - \frac{2C_{20}}{C_{10}}x \left(\ln x + \frac{C_{30} - \frac{1}{2}C_{10}^2}{2C_{20}} \right)}} \quad (4.10)$$

Como puede verse, la potencia $1/2$ asegura un polo de orden 2, asociado con el empaquetamiento de esferas duras. Así, V. Aguilera-Navarro predice un valor de $C_{30} = 25.397$ y una densidad de Bernal $x_B = 0.7200$.

Para el caso en que sólo se considera el desarrollo de $\epsilon_0(x)$ con tres términos, es decir, si tomamos $C_{30} = 0$, el único aproximante que satisface las condiciones físicas impuestas es el denominado FORM I de la tabla 5. La figura FG2 muestra estas dos aproximaciones para $\epsilon_0(x)$, incluyendo los cuatro puntos de GFMC. Nótese que allí se está graficando $\epsilon_0^{-1/2}(x)$, con la idea de visualizar las densidades de Bernal, x_B . También, es claro que el comportamiento de la $\epsilon_0(x)$ es monótonicamente creciente como era esperado.

De lo anterior se puede asegurar que tenemos una expresión para la energía en función de la densidad, para un sistema de esferas duras cuánticas,

$$\left(\frac{E}{N}\right)_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x^2 \epsilon_0(x)$$

con ϵ_0 satisfaciendo (4.10).

En ausencia de una expresión análoga para el sistema de esferas repulsivas, ésta se aproxima por el del sistema de esferas duras.

Volviendo al potencial BURK, consideremos ahora los términos atractivos, es decir, $\lambda \neq 0$. La energía tendrá una contribución en todos los órdenes de λ . Aquí consideramos hasta orden 6, de tal forma que

$$\frac{E}{N}(x, \lambda) = \frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x^2 \sum_{j=0}^6 \alpha_j \epsilon_j(x) \lambda^j \quad (4.11)$$

Los valores de las α_j , se obtienen del desarrollo en serie de potencias de λ , (4.11), para α . Los valores se muestran en la tabla 1. Las ϵ_j seleccionadas son dadas en la tabla 5, una gráfica de ellas es la figura FB1.

De acuerdo con nuestro análisis del Capítulo III, procedemos ahora a obtener los aproximantes Padé en λ , $E/N[L/M](\lambda)$, con $L+M \leq 6$. Para ésto, la expresión (4.11) se reescribió

$$\frac{E}{N}(x, \lambda) = \frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x^2 \epsilon_0(x) \left[1 + \sum_{j=1}^6 F_j(x) \lambda^j \right].$$

con

$$F_j(x) = \frac{\alpha_j \epsilon_j}{\epsilon_0(x)}$$

y se calcularon los diferentes aproximantes según el método usual descrito en el Apéndice.

La figura FB2 muestra los resultados de los diferentes aproximantes a la energía por partícula $E/N[L/M](\lambda)$, así como el de la curva experimental. Ha de notarse que $[0/0](\lambda)$ no es más que la energía del sistema de esferas duras. Las energías $E/N[L/0](\lambda)$, con $L = 1, \dots, 6$, que son los desarrollos de Taylor de orden L , convergen rápidamente a unos valores de energía y densidad de saturación que sin embargo están lejos de los valores experimentales, $(E/N)_s = -7.14K$ y $\rho = 0.0219 \text{ part}/\text{Å}^3$; esta densidad equivale a nuestra variable adimensional $x_s = 0.3237$. Los valores mínimos a los cuales tienden nuestras curvas se muestran en la tabla 9. A manera de comparación, los valores mínimos que se obtienen del aproximante asociado a $[3/3](\lambda)$, son: $E/N = -9.354K$ y $x_s = 0.4318$ ($\rho = 0.0390 \text{ part}/\text{Å}^3$). En realidad, como se puede deducir de esta misma tabla, son valores a los cuales están convergiendo nuestros cálculos. Para ser más exactos, analizamos por separado las diferentes curvas $E/N[L/M](\lambda)$ para cada uno de los órdenes en λ . Y, como esperábamos, la dispersión de las diferentes curvas de energías para una $L + M$ dada, fue disminuyendo conforme aumentábamos el orden. En particular nos fijamos en la dispersión que tienen los valores de la energía y densidad de saturación. Así, podemos decir que estos convergieron a valores que se encuentran en el rectángulo de incertidumbre $(E/N)_s \in [-9.355348, -9.8952980] K$ y $x_s \in [0.4318, 0.4366]$ ($\rho \in [0.03897, 0.03984] \text{ part}/\text{Å}^3$). Gráficas de los mínimos de energías $E/N[L/M](\lambda)$ con $L + M = 6, 5$ y 4 , se muestran en la figura FB3. Como dijimos antes, estos valores distan de los valores experimentales; sin embargo, el comportamiento cualitativo indica una excelente convergencia del método perturbativo. De aquí podemos concluir que el desacuerdo cuantitativo es una consecuencia de lo inadecuado del potencial de Burkhardt, para representar la interacción entre los átomos de ${}^4\text{He}$. Así, baste señalar que una variación, un aumento, en el diámetro c de las esferas duras conduce a un mejor comportamiento cuantitativo. Si aumentamos c dejando fijos los parámetros α y λ , de manera que el valor de α permanezca dentro del margen experimental^[23],

$$|\alpha| \geq 20 \text{ Å},$$

se puede hacer coincidir el mínimo de la energía calculada con el mínimo de la energía experimental, con $c = 1.9287 \text{ Å}$, sin embargo, la densidad de saturación no corresponde al valor experimental. Entonces, se volvió a variar c para hacer coincidir las densidades asociadas a los mínimos de energía lográndose para $c = 2.042 \text{ Å}$. Las figuras FB4 y FB5 muestran estas dos situaciones. A manera de comparación, optamos por un comportamiento intermedio que obtuvimos al tomar el valor de c como el simple promedio de las dos anteriores. Este promedio es $c = 1.985 \text{ Å}$ y el comportamiento de las energías $E/N[L/0](\lambda)$ con $L \leq 6$, se puede observar en la figura FB6. Además se rehizo la tabla de los mínimos, tabla 13, y se observó la convergencia a los valores $(E/N)_s = -6.74 \pm 0.38 K$ y $x_s = 0.4318 \pm 0.0047$ o $\rho_s = 0.0238 \pm 0.0005 \text{ part}/\text{Å}^3$.

Las incertidumbres fueron calculadas considerando que todos los mínimos de orden 6 estuvieran contenidos. En realidad, si la incertidumbre se volvió significativa fue porque $E/N[1/5](\lambda)$ se separó de las restantes con $L + M = 6$. A manera de comparación se graficaron (gráfica FB7) todas las $E/N[L/M](\lambda)$ de orden 6, en una zona que contiene los mínimos de estas curvas, los cuatro datos GFMC y a la curva experimental. Aunque los datos GFMC que se grafican son para el potencial de interacción Lennard-Jones, ha de recordarse que los parámetros del potencial de Burkhardt fueron ajustados pensando en esquematizar a aquel potencial.

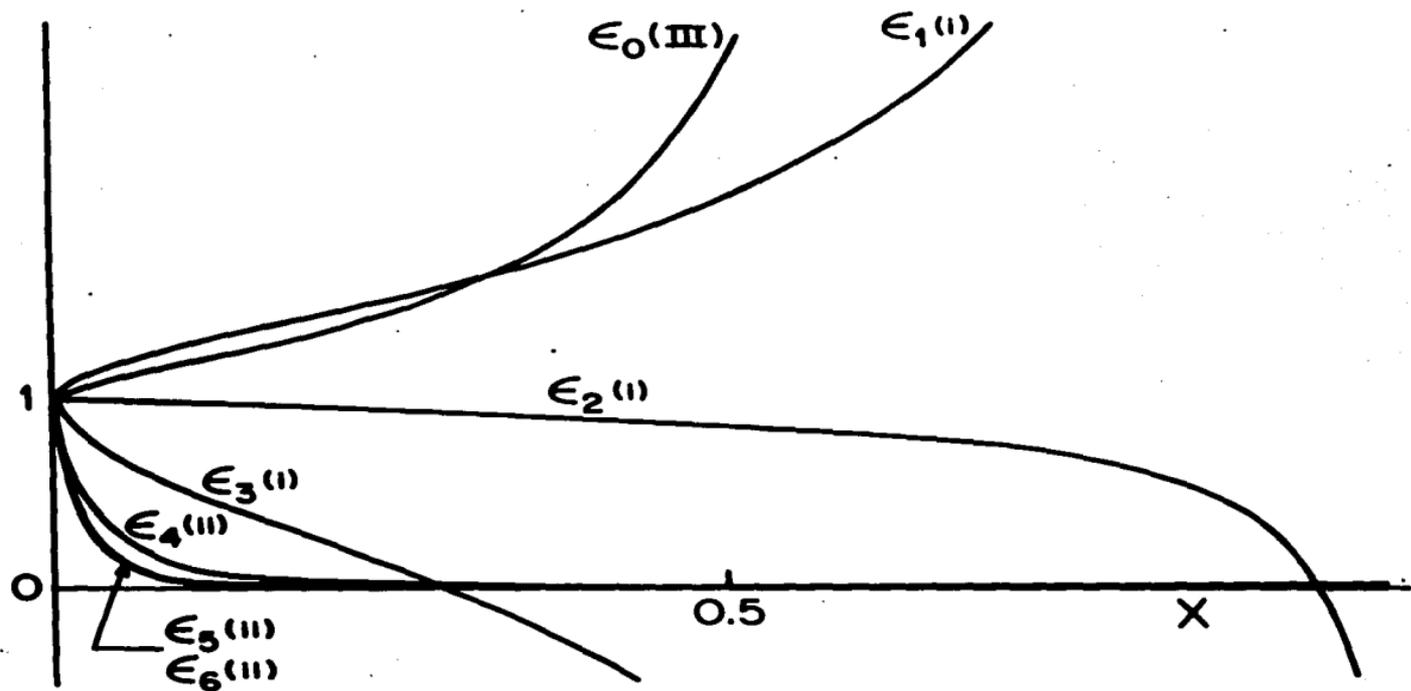


Figura FB1.- $\epsilon_j(x)$; $j = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt. $c = 1.685 \text{ \AA}$, $C_{30} = 25.397$.

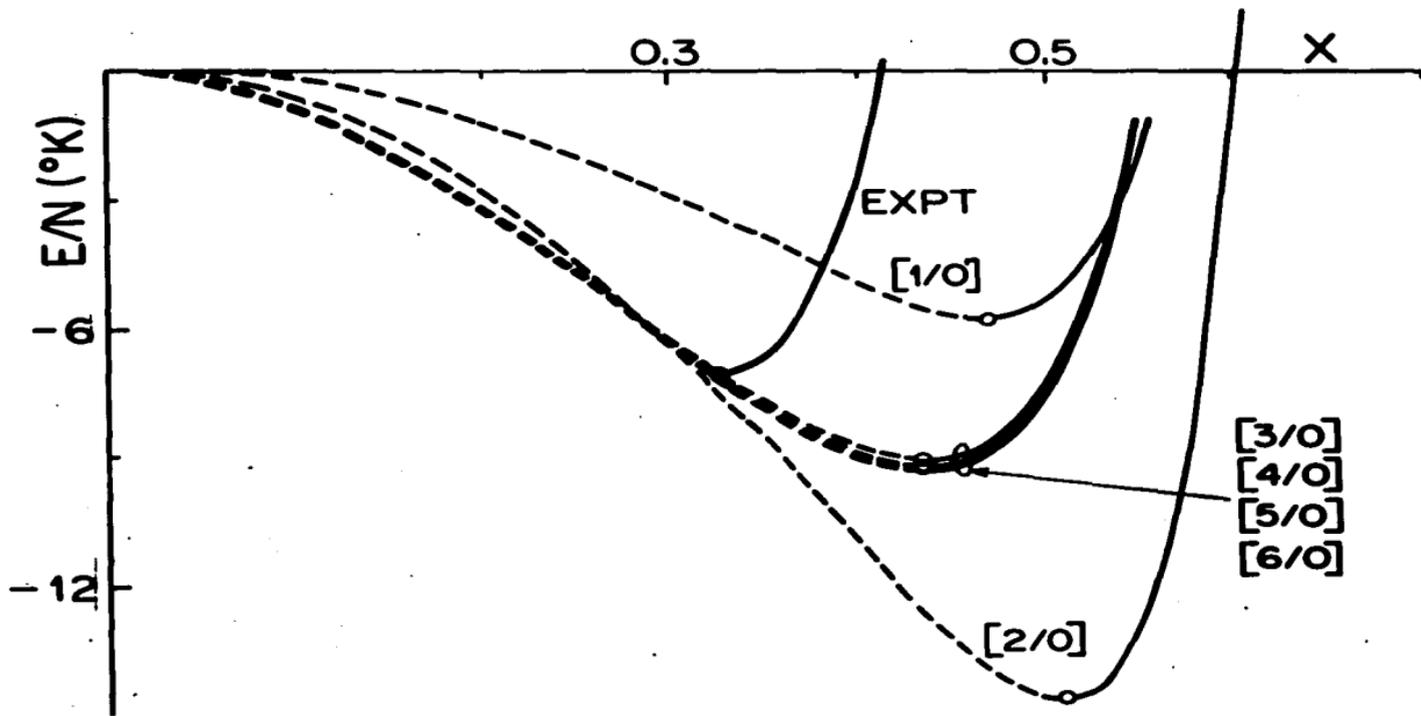


Figura FB2.- Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/0](x, \lambda)$, $L = 1, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt, respecto a la curva de energía experimental (EXPT). $c = 1.685 \text{ \AA}$, $C_{30} = 25.397$.

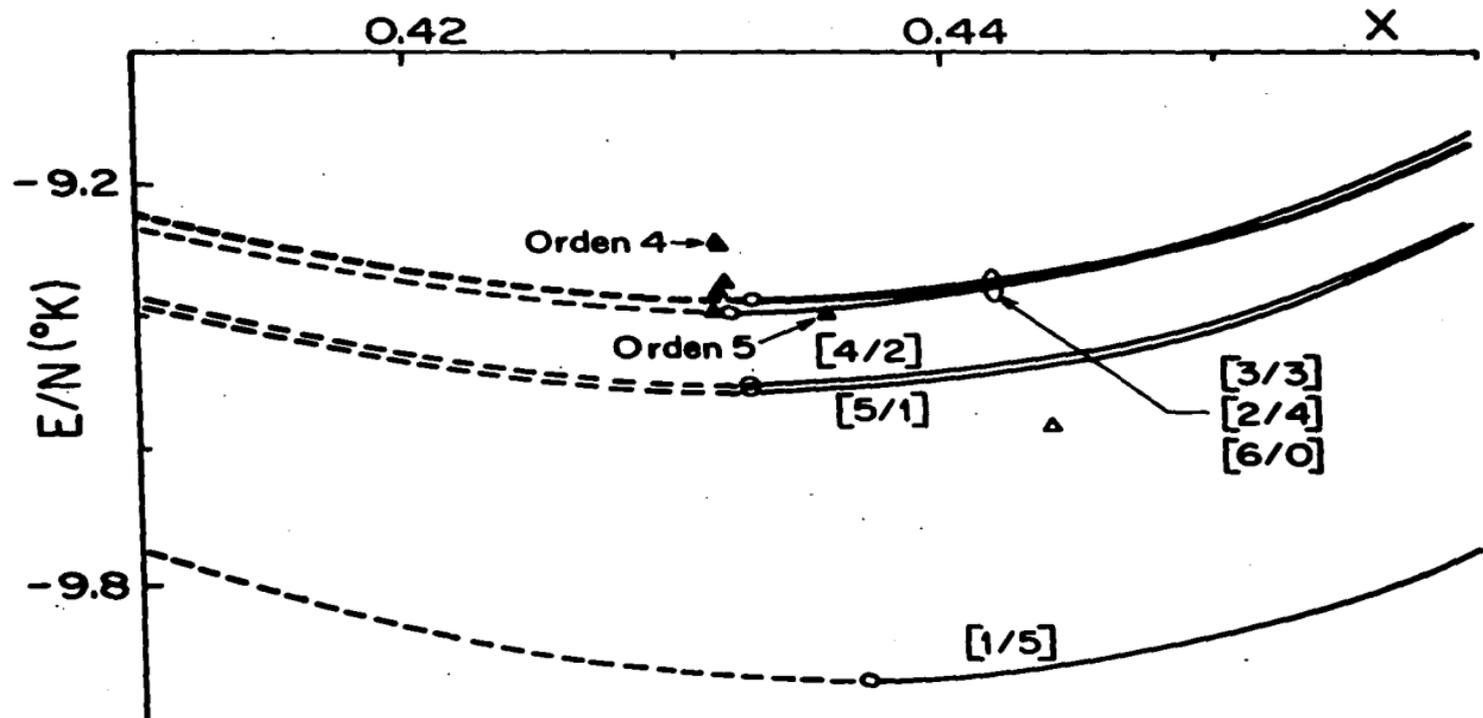


Figura FB3.- Mínimos de las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L+M = 4$ (Δ), $L+M = 5$ (\triangle) y $L+M = 6$ (\circ); para el potencial de Burkhardt con $c = 1.685 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.

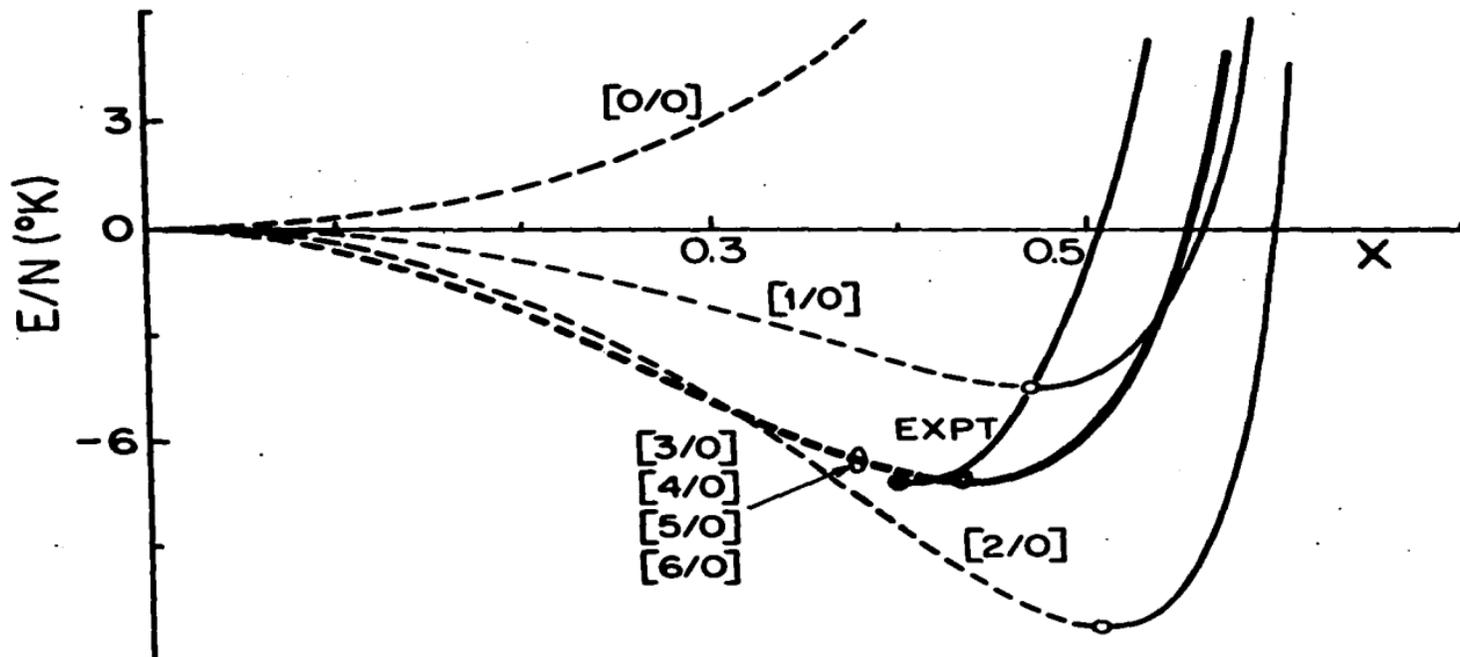


Figura FB4.- Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/0](x, \lambda)$, $L = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt, respecto a la curva de energía experimental (EXPT). $c = 1.928 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.

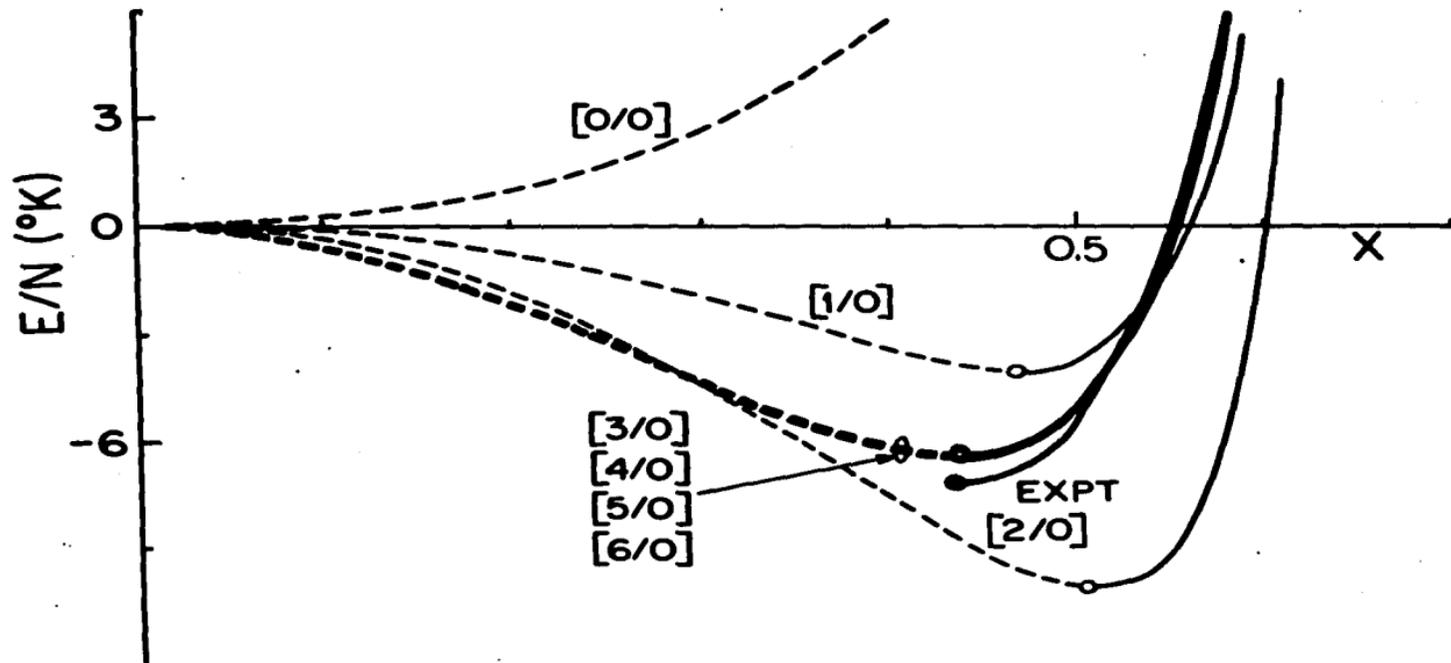


Figura FB5.- Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/0](x, \lambda)$, $L = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt con $c = 2.042 \text{ \AA}$ y $C_{20} = 25.397$. $x_0 = x_{0, \text{expt}}$.

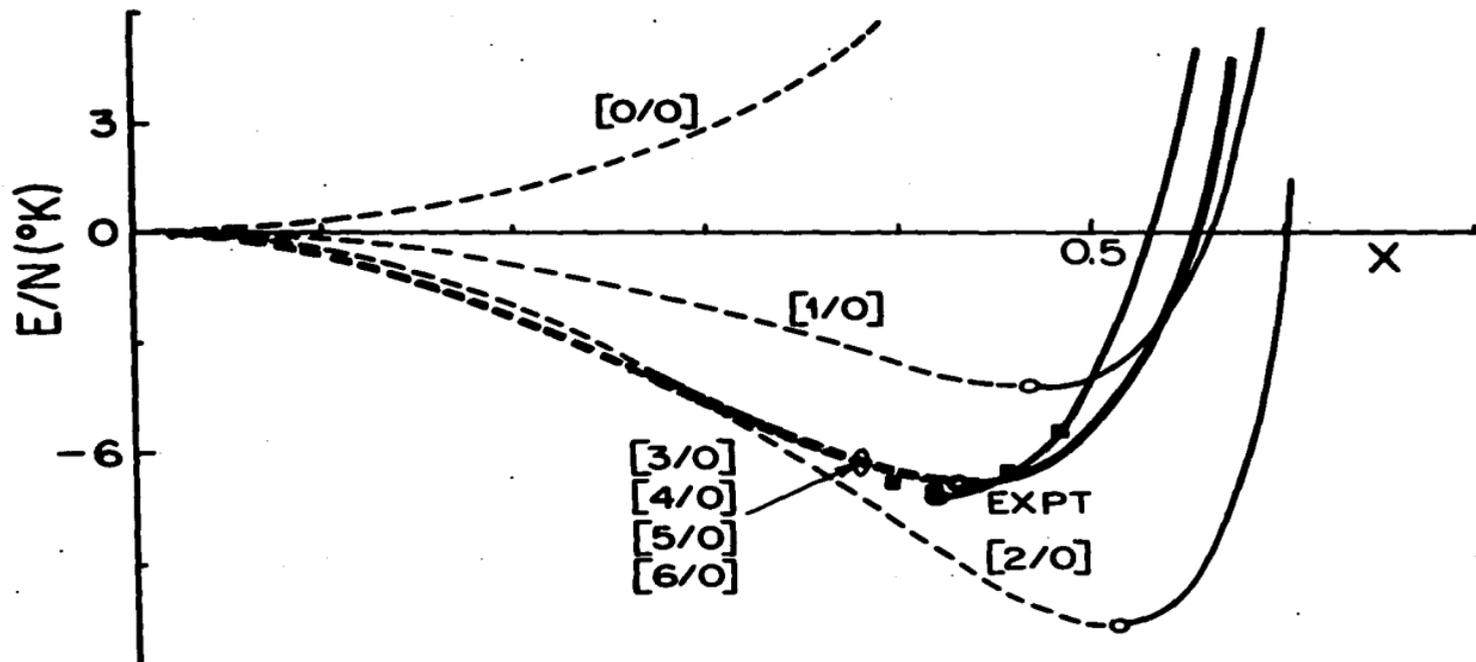


Figura FB6.- Comparación de las curvas de energías $E/N[L/0](x, \lambda)$, $L = 0, \dots, 6$, para el potencial de Burkhardt, la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo (GFMC) (■) para el potencial L-J. $c = 1.985 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.

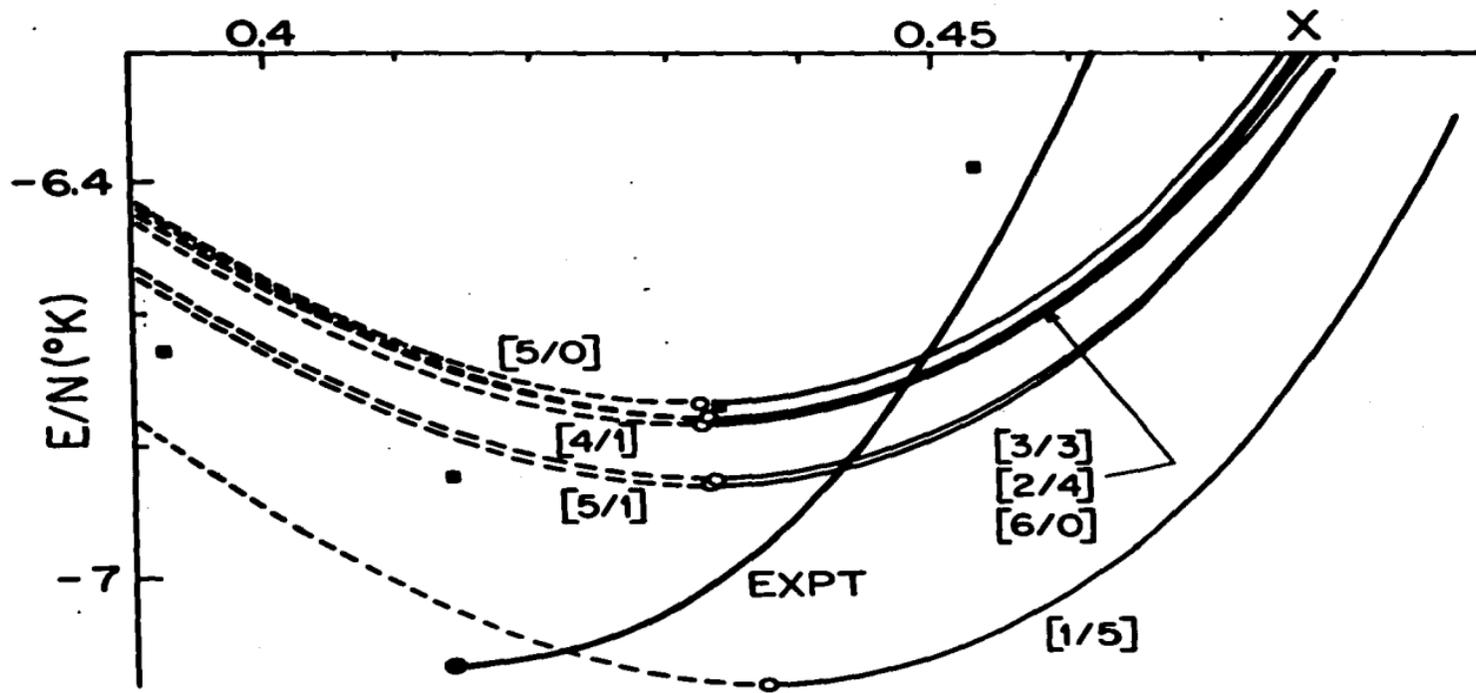


Figura FB7.- Zona de saturación. Comportamiento de las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L + M = 6$, para el potencial de Burkhardt, respecto a la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo (GFMC) (■) para el potencial L-J. $c = 1.985 \text{ \AA}$ y $C_{30} = 25.397$.

Interacción Lennard-Jones (L-J)

Uno de los potenciales que más se ha usado^[38] para representar la interacción entre átomos de Helio Líquido y calcular su energía del estado base, ha sido el potencial Lennard-Jones

$$v(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

donde r es la distancia de separación entre los dos átomos y σ y ϵ satisfacen

$$v(\sigma) = 0$$

y

$$v(r) \geq -\epsilon, \quad \forall r > 0.$$

Los valores de σ y ϵ que usamos aquí, son los obtenidos por Boers and Michels^[34], ajustando los valores teóricos para este potencial a los datos experimentales del segundo coeficiente del virial:

$$\sigma = 2.556 \text{ \AA}, \quad \epsilon = 10.22K.$$

Para realizar el desarrollo perturbativo separamos al potencial $v(r)$ en dos partes, como es hecho para líquidos clásicos^[15,16]: Una parte repulsiva $v_0(r)$, que será reemplazada posteriormente por un potencial de esfera dura de diámetro igual a la longitud de dispersión de $v_0(r)$ y el resto de la interacción, $\lambda v_1(r)$, que será tratada como una perturbación. Aquí, $0 \leq \lambda \leq 1$. Donde para considerar toda la perturbación atractiva hacemos $\lambda = 1$.

Hemos usado dos formas para separar $v(r)$. La primera, que denominamos "Corte Viajo",

$$v_0(r) = \begin{cases} v(r), & r < \sigma, \\ 0, & r \geq \sigma, \end{cases}$$

y

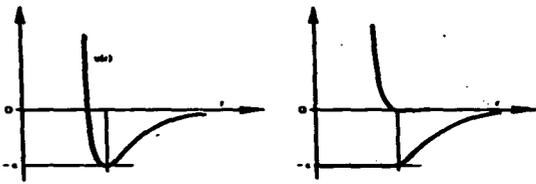
$$v_1(r) = \begin{cases} 0, & r < \sigma, \\ v(r), & r \geq \sigma, \end{cases}$$

la segunda, que denominamos "corte nuevo",

$$v_0(r) = \begin{cases} v(r) + \epsilon, & r < 2^{1/6}\sigma, \\ 0, & r \geq 2^{1/6}\sigma, \end{cases}$$

y

$$v_1(r) = \begin{cases} -\epsilon, & r < 2^{1/6}\sigma, \\ v(r), & r \geq 2^{1/6}\sigma. \end{cases}$$



En realidad, al escoger uno u otro corte, estamos escogiendo la parte del potencial $v(r)$ que debe ser reemplazado por el potencial de esfera dura. *A priori*, no podemos decir qué selección será mejor. Sin embargo, para fluidos clásicos existe^[16] la experiencia de que el corte nuevo da mejores resultados para líquidos y el corte viejo para gases^[15].

Corte Viejo.- El valor de σ y sus correspondientes coeficientes α_j , de su desarrollo en potencias de λ , han sido calculados hasta orden diez ($j=10$) por E. Buendía et al.^[25]. Los valores, hasta orden seis ($j=6$), son reproducidos en la tabla 1. Las ϵ_j que satisficieron los criterios físicos son las que en la tabla 6, no tienen notación alguna y aparecen graficadas en la figura FL1: $\epsilon_1(x)$ -FORM i; $\epsilon_2(x)$ -FORM i; $\epsilon_3(x)$ -FORM i; $\epsilon_4(x)$ -FORM iii; $\epsilon_5(x)$ -FORM ii; $\epsilon_6(x)$ -FORM ii.

En la figura FL1 se puede notar que como

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^2} x^2 \sum \alpha_j \epsilon_j(x) \lambda^j,$$

entonces la contribución j -ésima a la energía por bosón

$$\left(\frac{E}{N}\right)_j \equiv \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^2} x^2 m \alpha_j \epsilon_j(x) \lambda^j, \quad j = 0, \dots, 6,$$

es negativa y pequeña para $j = 4, 5$ y 6 , en la zona líquida, dejando las mayores contribuciones a los términos de órdenes menores.

Como se dijo antes, la energía del sistema de referencia es sustituida por la energía del sistema de Esferas Duras de diámetro $a_0 = 2.092954 \text{ \AA}$. Ha de notarse aquí la semejanza con el diámetro de las esferas duras del potencial de Burkhardt.

Las diferentes expresiones finales para la energía por bosón $(E/N)[L/M](\lambda)$, $L + M \leq 6$, que reportamos, muestran no sólo el comportamiento cualitativo encontrado cuando $v(r)$ era el de BURK, sino también un excelente comportamiento cuantitativo. Se observó una disminución en la dispersión de las diferentes $(E/N)[L/M](\lambda)$

para cada valor de $L + M$, conforme éste aumentaba al valor 6. Esto nos hace suponer que conforme decidiéramos continuar obteniendo las diferentes formas de energía $(E/N)[L/M](\lambda)$ para $L + M > 6$, su dispersión tendería a cero y, a su vez, las curvas de energía a una sola. Sin embargo nos conformamos en reportar las 6 curvas de energía $(E/N)[L/M](\lambda)$ para las cuales $L + M = 6$.

En la figura FL2, se grafican éstas, los datos GFMC, la curva experimental y los mínimos de las curvas de energía para $L + M = 4$ (triángulos blancos) y $L + M = 5$ (triángulos oscuros). Se puede notar que nuestras curvas están encima de la curva experimental y ligeramente encima de los datos GFMC, pero significativamente desplazadas hacia densidades más altas. El dato que con frecuencia se usa para comparar resultados son las energías y densidades de saturación. Como no tenemos una curva única, reportamos los diversos mínimos de energía y sus correspondientes densidades (x), para las curvas $(E/N)[L/M](\lambda)$ con $L + M = 6$. En realidad, en la tabla 10 todos son dados para $L + M \leq 6$. Así, decimos que la energía y densidad de saturación que obtenemos se encuentra en el rectángulo $x_s \in [0.4644, 0.4655]$ o $\rho_s \in [0.0235, 0.0236]$ part/ \AA^3 y $(E/N)_s \in [-6.717267, -6.800720]$ K. Estos pueden ser comparados con los valores experimentales: $\rho_s = 0.0219$ part/ \AA^3 , $(E/N)_s = -7.14$ K y los valores de los datos GFMC: la ρ_s es igual a la experimental porque así se tomó y $(E/N)_s = -6.848 \pm 0.018$ K. De aquí, podemos concluir que nuestra densidad de saturación está dentro de un error del 7.8% y la energía dentro del 6%, respecto al valor experimental y 2% respecto a los datos GFMC.

Corte Nuevo.— El procedimiento seguido para obtener los resultados para este "corte nuevo" del potencial Lennard-Jones no varió respecto al anterior. El cambio esencial respecto al caso anterior se observa en los valores nuevos de las α_j , así como de la α_0 . Estos valores fueron calculados por Guardiola *et al.*[28] y son reportados en la tabla 1. Se puede notar que el efecto inmediato es el aumento de la longitud de dispersión α_0 de la parte repulsiva v_0 , del potencial de interacción $v(r)$ y, como una consecuencia, del diámetro c de las esferas duras por el cual es sustituido v_0 .

Las $\epsilon_j(x)$ seleccionadas son aquellas para las cuales no aparece notación alguna en la tabla 7 y sus gráficas forman la figura FL3. De nuevo, se observó que la dispersión en las diversas curvas de energía $(E/N)[L/M]$ para cada valor de $L + M$, disminuyó conforme $L + M \rightarrow 6$. A la vez, las curvas de energía con $L + M = 6$, son más bajas que las correspondientes obtenidas con el "corte viejo". El desplazamiento a densidades altas respecto a la curva experimental observado en aquél, disminuyó significativamente. ver fig. FL4. Así, predcimos una energía y densidad de saturación (ver tabla 11), que se encuentran en el rectángulo $(E/N)_s \in [-6.739902, -6.983520]$ K, $x_s \in [0.4649, 0.4693]$ o $\rho_s \in [0.0221, 0.0225]$ part/ \AA^3 . En el peor de los casos, la densidad de saturación predicha, estaría alejada de la densidad experimental con un error del 2.7%; y la energía, en un 5.6%. Sin embargo, más significativo es comparar nuestros resultados con lo respectivos del método GFMC, que usan, para sus cálculos, el mismo potencial de interacción entre parejas, usado por nosotros y que no podemos asegurar sea el real. Al

comparar, se encontró que ¡los datos *GFMC* están en la zona de incertidumbre predicha en nuestros cálculos!

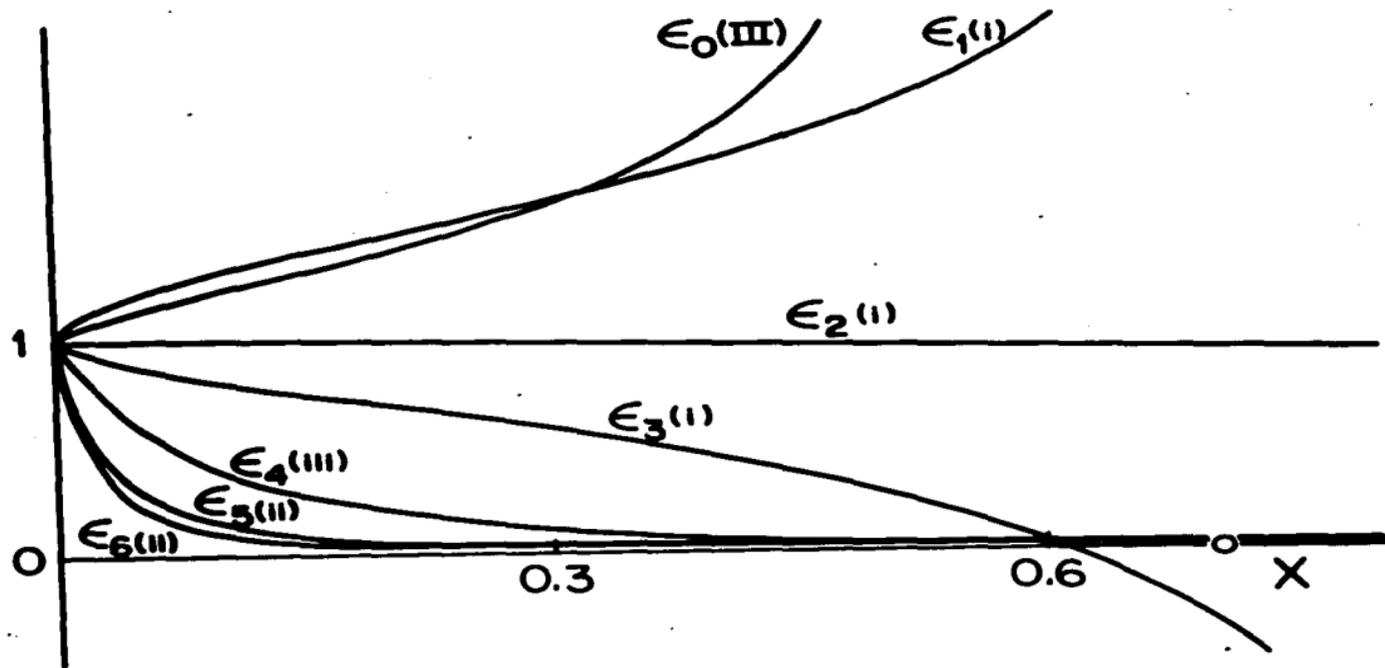


Figura FL1.- $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$, para el potencial Lennard-Jones "Corte Viejo". La forma óptima esta indicada entre paréntesis.

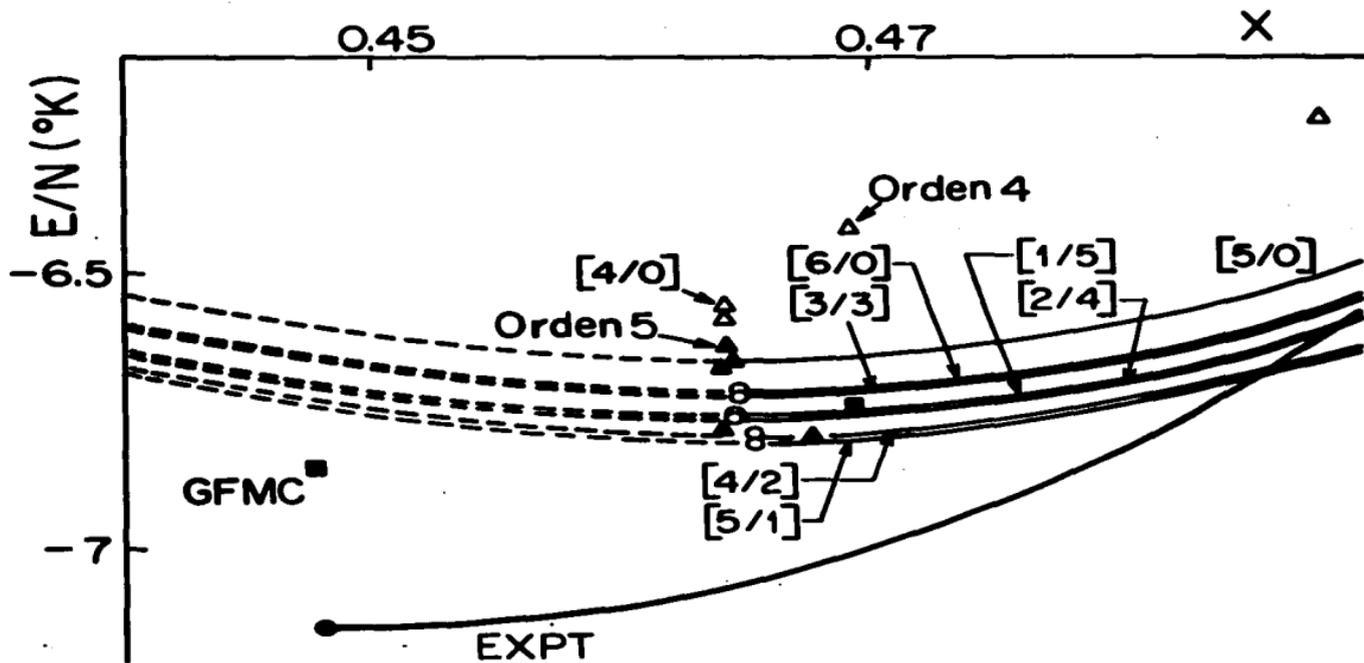


Figura FL2.- Los mínimos de las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L + M = 4$ (Δ), $L + M = 5$ (\blacktriangle) y $L + M = 6$ (\circ), mostrando la disminución en la dispersión; las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L + M = 6$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo GFMC (\blacksquare). Para el potencial Lennard-Jones, "Corte Viejo".

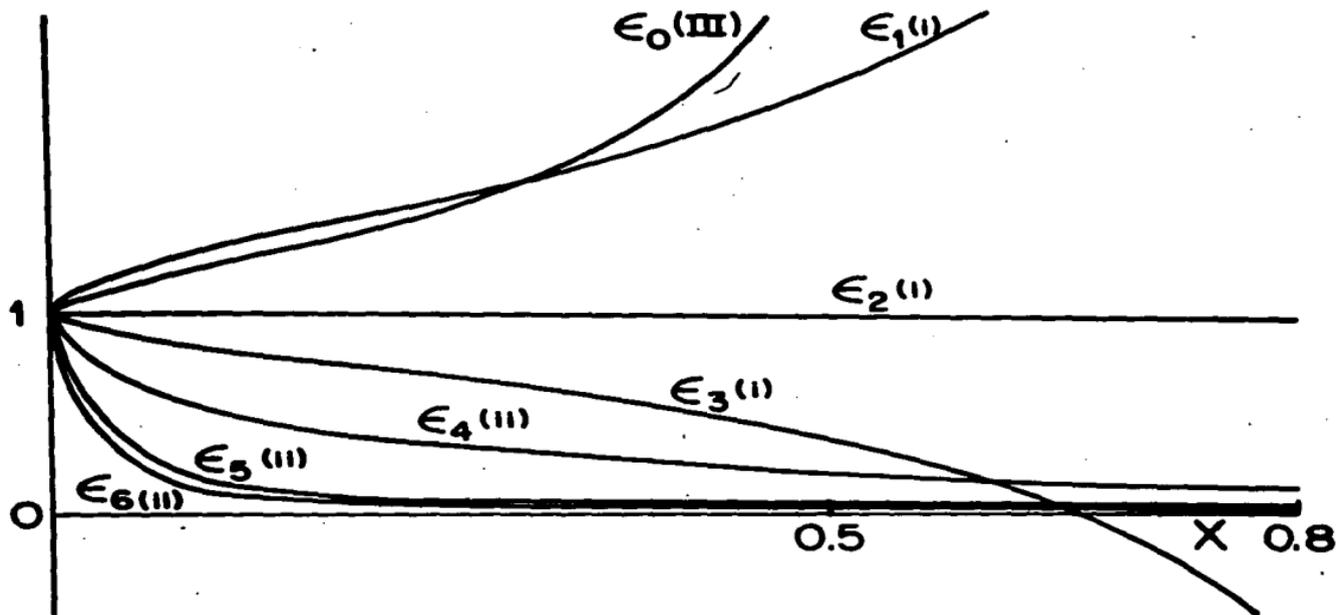


Figura FL3.- $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$, para el potencial Lennard-Jones (L-J), "Corte Nuevo". La forma óptima está indicada entre paréntesis.

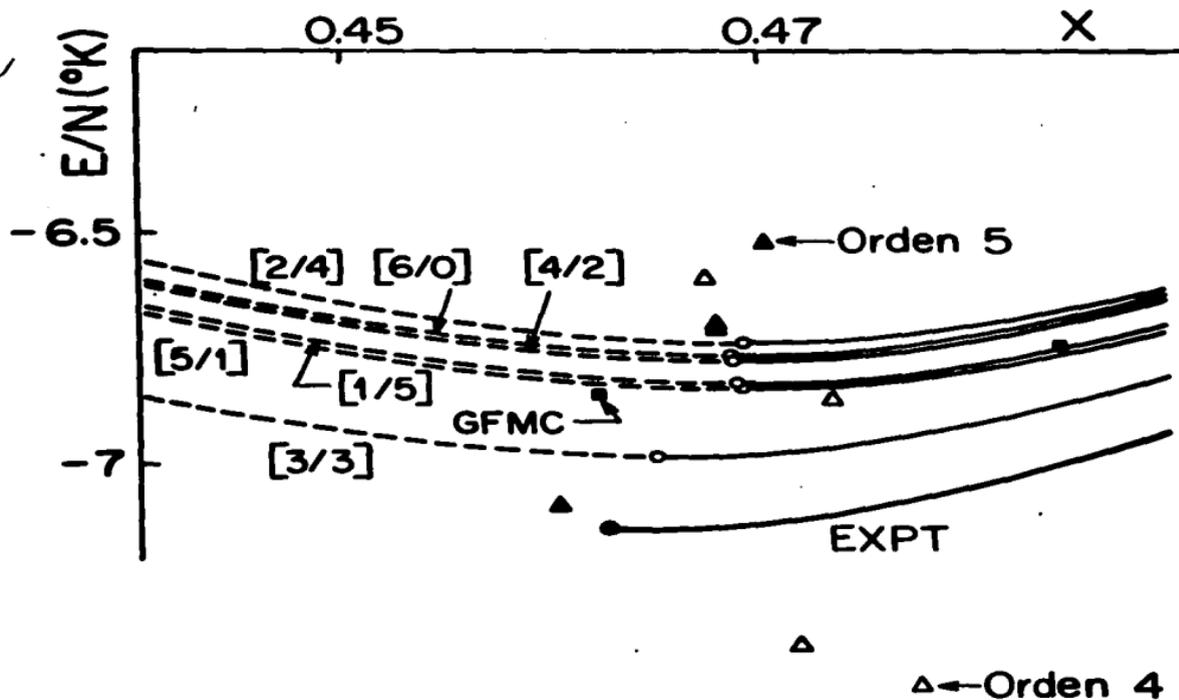


Figura FL4.- Los mínimos de las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L + M = 4$ (Δ), $L + M = 5$ (\blacktriangle) y $L + M = 6$ (\circ), mostrando la disminución en la dispersión; las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L + M = 6$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo GFMC (\blacksquare). Para el potencial Lennard-Jones (L-J), "Corte Nuevo".

Interacción de Azis

Si bien, el potencial de L-J en sus dos modalidades estudiadas en las secciones anteriores, nos ha conducido a muy buenos resultados respecto a los datos experimentales, queda la pregunta de si es posible disminuir la pequeña discrepancia observada entre las energías calculadas y las medidas.

Una fuente de error puede ser el potencial de interacción central de pares $v(r)$, usado en los cálculos y que puede no representar adecuadamente a la interacción real.

Recientemente, Azis *et al.*^[27] han propuesto un potencial intermolecular y empírico para Helio, el cual ha sido elegido de entre seis potenciales, porque predice mejor las propiedades del bulbo de gas diluido así como las secciones transversales de dispersión diferencial. El segundo mejor comportamiento, denominado por ellos MS12G6, es un potencial de L-J modificado^[28].

La forma del potencial, propuesta inicialmente por Ahlrichs *et al.*^[29], quienes usaron una combinación de un cálculo *ab initio* de la repulsión de Hartree Fock de campo autoconsistente entre sistemas de capa cerrada, una estimación de la energía de correlación y los coeficientes de dispersión C_6 , C_8 y C_{10} , determinados semiempíricamente, es

$$v(r) = \epsilon_a \left\{ A \exp\left(\frac{-\delta r}{r_m}\right) - \left[C_6 \left(\frac{r_m}{r}\right)^6 + C_8 \left(\frac{r_m}{r}\right)^8 + C_{10} \left(\frac{r_m}{r}\right)^{10} \right] F(r) \right\}$$

donde

$$F(r) = \begin{cases} \exp[-((Dr_m/r) - 1)^2], & r/r_m < D, \\ 1, & r/r_m \geq D, \end{cases}$$

donde la función $F(x)$ que se considera universal para todos los sistemas esféricos, fue obtenida ajustando un potencial de esta forma a la curva potencial, conocida exactamente, del estado $^3\Sigma_g^+$ de H_2 .

Aunque, con los parámetros dados por Ahlrichs *et al.*, este potencial genera resultados sorprendentemente buenos respecto a otros potenciales, no es capaz de reproducir los datos de viscosidad de Smith y colaboradores^[30,31], los datos precisos del segundo coeficiente de Gammon^[32] ni los datos de conductividad térmica de Haarman^[33] (precisos hasta ± 0.3 %).

Para mejorar las predicciones de las propiedades del bulbo a altas temperaturas, Azis *et al.* modificaron la pared repulsiva del potencial total, haciéndola ligeramente más suave que la dada por Ahlrichs *et al.* También, modificaron los coeficientes de dispersión y la cantidad D fue ajustada para reproducir los datos el segundo coeficiente del virial de Gammon (entre 100 y 450 K) y los datos de conductividad térmica de Haarman (entre 328 y 468 K). Los valores de los parámetros dados por Azis *et al.* son:

$$\begin{array}{ll}
 A = 0.5448504 \times 10^6 & \epsilon_a/k = 10.8 \text{ K} \\
 \delta = 13.353384 & C_0 = 1.3732412 \\
 D = 1.241314 & C_8 = 0.4253785 \\
 r_m = 2.9673 \text{ \AA} & C_{10} = 0.178100
 \end{array}$$

Los resultados de Kalos *et al.*^[34] para la energía del estado base del sistema de bosones, con este potencial de interacción y mediante el método GFMC, se acercaron más a los resultados experimentales, en la zona líquida, que los respectivos cálculos realizados con el potencial L-J.

Aquí, de nuevo, aplicamos nuestro método para obtener la energía del sistema de bosones a $T = 0$ con este potencial de interacción y lo hacemos graficando, a la vez, el proceso de transformación que se efectúa sobre la expresión original para la energía, válida sólo para bajas densidades.

Como en los casos anteriores, separamos el potencial de interacción $v(r)$, en su parte repulsiva $v_0(r)$ mas la parte atractiva, $\lambda v_1(r)$. Lo hacemos de la manera que denominamos "Corte Viejo". El valor de λ varía desde $\lambda = 0$, en cuyo caso nos restringimos a la parte repulsiva del potencial, hasta $\lambda = 1$ cuando consideramos la interacción completa.

Bien, como a , la longitud de dispersión de onda S para el potencial de AZIZ, es positiva e igual a^[35]

$$a = 125.08100387 \text{ \AA},$$

es posible sustituirla en la expresión (2.1), para la energía, sin que nos conduzca a números imaginarios y que, en términos de la variable x , nos quede

$$\begin{aligned}
 \frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{a}{a_0}\right)^3 x^2 \left[1 + C_1 \left(\frac{a}{a_0}\right)^{3/2} x + C_2 \left(\frac{a}{a_0}\right)^3 x^2 \ln \left(\frac{a}{a_0}\right)^3 x^2 \right. \\
 \left. + C_3 \left(\frac{a}{a_0}\right)^3 x^2 + O\left\{\left(\frac{a}{a_0}\right)^{9/2} x^2 \ln \left(\frac{a}{a_0}\right)^3 x^2\right\} \right].
 \end{aligned}$$

En la figura FA1 se muestra el comportamiento de la energía. Se puede notar que ésta crece sumamente rápido e indefinidamente, aún para densidades pequeñas ($x \leq 0.03$). El siguiente paso es desarrollar a en serie de potencias de λ

$$a = a_0 \left(1 + \sum_{j=1} \alpha_j \lambda^j\right)$$

y sustituirla en la expresión para la energía. Esta nos queda

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{ma^2} x^2 \left\{ \epsilon_0(x) + \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \epsilon_j(x) \lambda^j \right\} \quad (4.12)$$

donde hemos cortado la serie hasta orden seis ($j=6$). Los valores de las α_j , $j = 1, \dots, 6$, fueron calculados por Benofy *et al.* [36] y están en la tabla 1. Graficamos cada una de las $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$ (ver figura FA2), así como las energías $(E/N)[L/0]$, $L = 0, \dots, 6$, con estas $\epsilon_j(x)$; figura FA3. En las figuras FA4 y FA5, se puede notar cómo se transforman estas curvas de energías, conforme modificamos la $\epsilon_0(x)$ a la FORM I, y a la FORM III. En estas cuatro últimas gráficas no se puede notar convergencia alguna.

Se procede a aproximar las $\epsilon_j(x)$ por las mejores $\epsilon_j(x)$, para cada $j = 0, \dots, 6$. Para este potencial de AZIZ, las $\epsilon_j(x)$ seleccionadas son las que no tienen notación alguna en la tabla 8. Una gráfica de ellas es la fig. FA6. Aquí, puede notarse un comportamiento, en general, similar a las gráficas correspondientes obtenidas con el potencial L-J, en sus dos versiones: Corte Viejo y Corte Nuevo. Sin embargo, la $\epsilon_4(x)$ de AZIZ se apartó del comportamiento esperado; fue más grande que la $\epsilon_4(x)$ de L-J, alrededor de x_s . Esto se manifestó en un aumento considerable de la energía de amarre total, respecto a la obtenida con el potencial L-J.

En términos de las $\epsilon_j(x)$ $j = 0, \dots, 6$, la expresión (4.12), para la energía, se aproxima por

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^3} x^2 \epsilon_0(x) \left\{ 1 + \sum_{j=1}^6 \alpha_j F_j(x) \lambda^j + \dots \right\},$$

con

$$F_j = \frac{\epsilon_j(x)}{\epsilon_0(x)} \quad j = 1, \dots, 6.$$

De inmediato se obtienen los diferentes aproximantes de Padé en λ , $(E/N)[L/M](\lambda)$, con $L + M \leq 6$. Para considerar toda la interacción $v(r)$, hacemos $\lambda = 1$. Las curvas de energías $(E/N)[L/0](\lambda)$, con $L = 0, \dots, 6$, y $(E/N)[L/M](\lambda)$, con $L = M \leq 3$, se grafican en la figura FA7. Es notoria la manera en que las curvas $(E/N)[L/0](\lambda)$ se van anidando para converger a una curva cercana a la $(E/N)[6/0](\lambda)$ y, también, el salto en magnitud que existe entre la $(E/N)[3/0](\lambda)$ y la $(E/N)[4/0](\lambda)$ el cual es de casi la misma magnitud que el salto entre la $(E/N)[2/0](\lambda)$ y la $(E/N)[3/0](\lambda)$; efecto ocasionado por el comportamiento singular de la ϵ_4 , advertido antes. Inicialmente, el desarrollo (4.3) lo habíamos hecho hasta $j = 5$. Sin embargo, al observar el acercamiento entre la $(E/N)[1/1]$ y la $(E/N)[2/2]$, esperanzamos la posibilidad de que la $(E/N)[3/3]$ también se acercará a las dos anteriores, y así usarlas como las curvas convergentes a la energía correcta. Cuando (4.3) se prolongó hasta orden seis ($j=6$) y se obtuvo $(E/N)[3/3]$, ésta no sólo no se acercó a $(E/N)[1/1]$ y $(E/N)[2/2]$, sino que se apartó ligeramente de todas las de orden 6.

Nótese que $(E/N)[2/2]$ tiene un polo alrededor de $x = 0.23$ y que pudo obligarnos a eliminarla. No se hizo porque el polo está fuera de la región física de interés; la zona líquida del sistema.

Se hizo un análisis de las diferentes curvas de energías $(E/N)[L/M](\lambda)$, con $L + M \leq 6$, y se observó que la dispersión entre las diferentes curvas $(E/N)[L/M]$, para un valor dado de $L + M$, disminuyó conforme $L + M \rightarrow 6$; comportamiento ya observado en los casos anteriores. Esto nos permitió determinar que la curva a la cual tiende nuestros cálculos es una curva muy parecida a una cualquiera de las $(E/N)[L/M]$, con $L + M = 6$. En particular, las energías y densidades de saturación son esperadas en el intervalo $(E/N)_0 \in [-9.466740, -8.448625] \text{ K}$ y $x_0 \in [0.4715, 0.4818]$ o $\rho_0 \in [0.0225, 0.0235] \text{ part/\AA}^3$. El comportamiento de las $(E/N)[L/M]$ $L + M = 6$, en la región líquida, así como el de los mínimos de orden 5 (triángulos negros) y 6 (círculos abiertos), son graficados en la fig. FAS. Los intervalos de incertidumbres son dados con base en la tabla 12, asegurando que todos los mínimos de orden 6 estén contenidos.

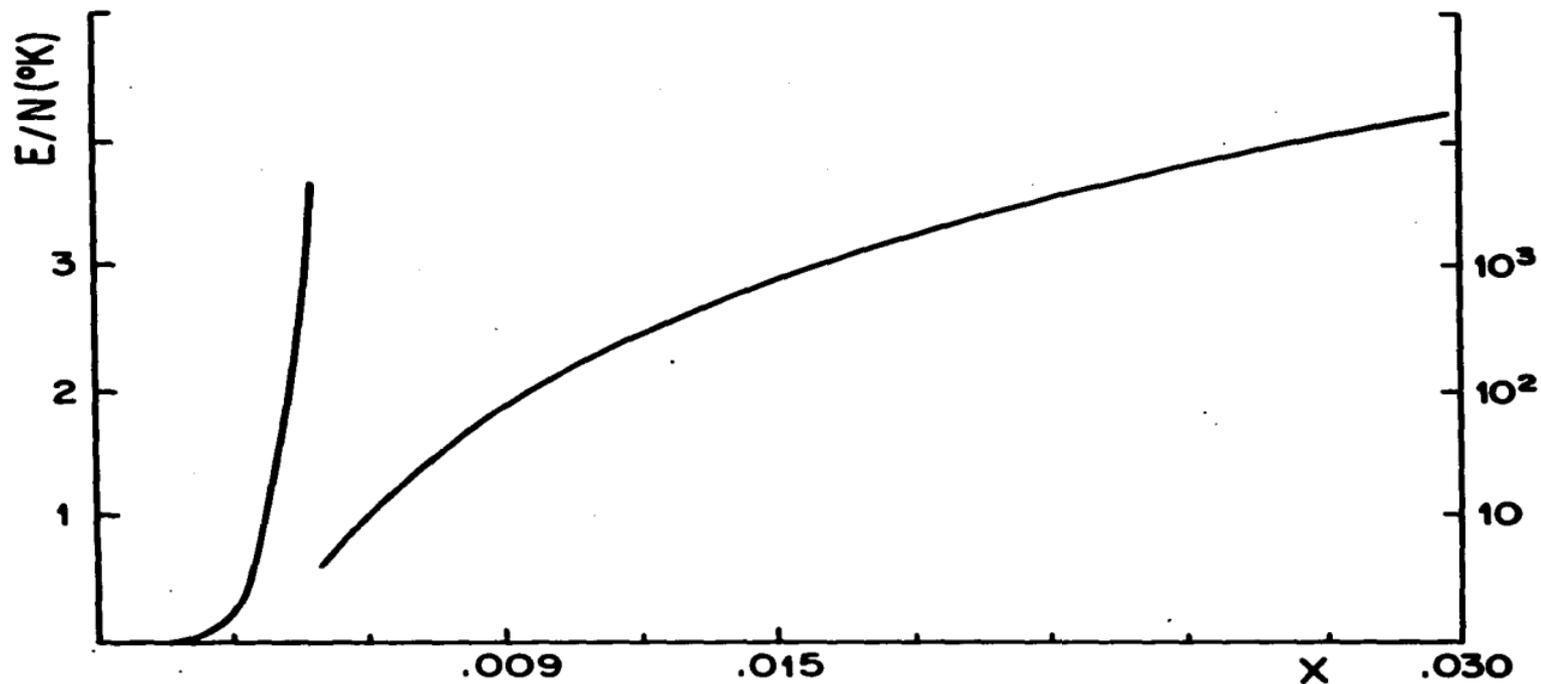


Figura FA1.- La expresión original (2.1) para la energía $E/N(x)$ donde se ha hecho el cambio de variable $x = \sqrt{\rho a_0^3}$ y se ha sustituido el valor de a de Asis. Para densidades $0 < x \leq 0.005$ (primera rama) la escala es normal y para $x > 0.005$ usamos escala logarítmica.

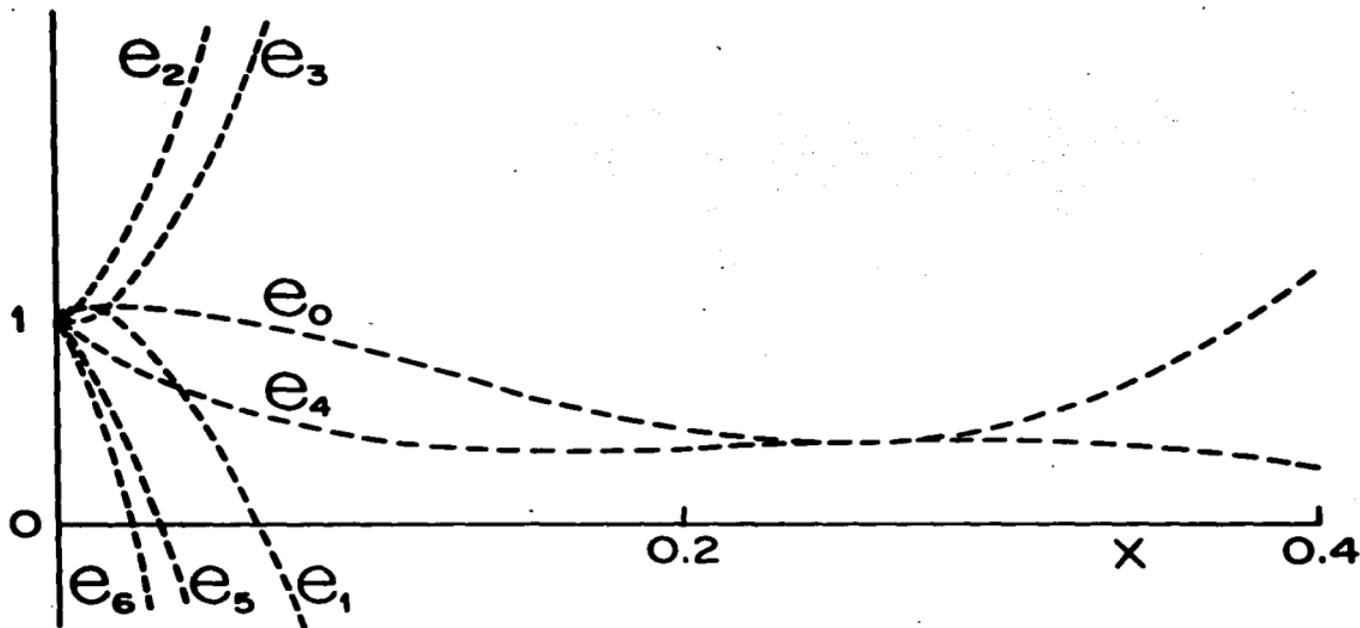


Figura FA2.- $\epsilon_j(x) = 1 + k_{1j}x + k_{2j}x^2 \ln x^2 + \dots$, $j = 0, \dots, 6$, para el potencial de Axis.

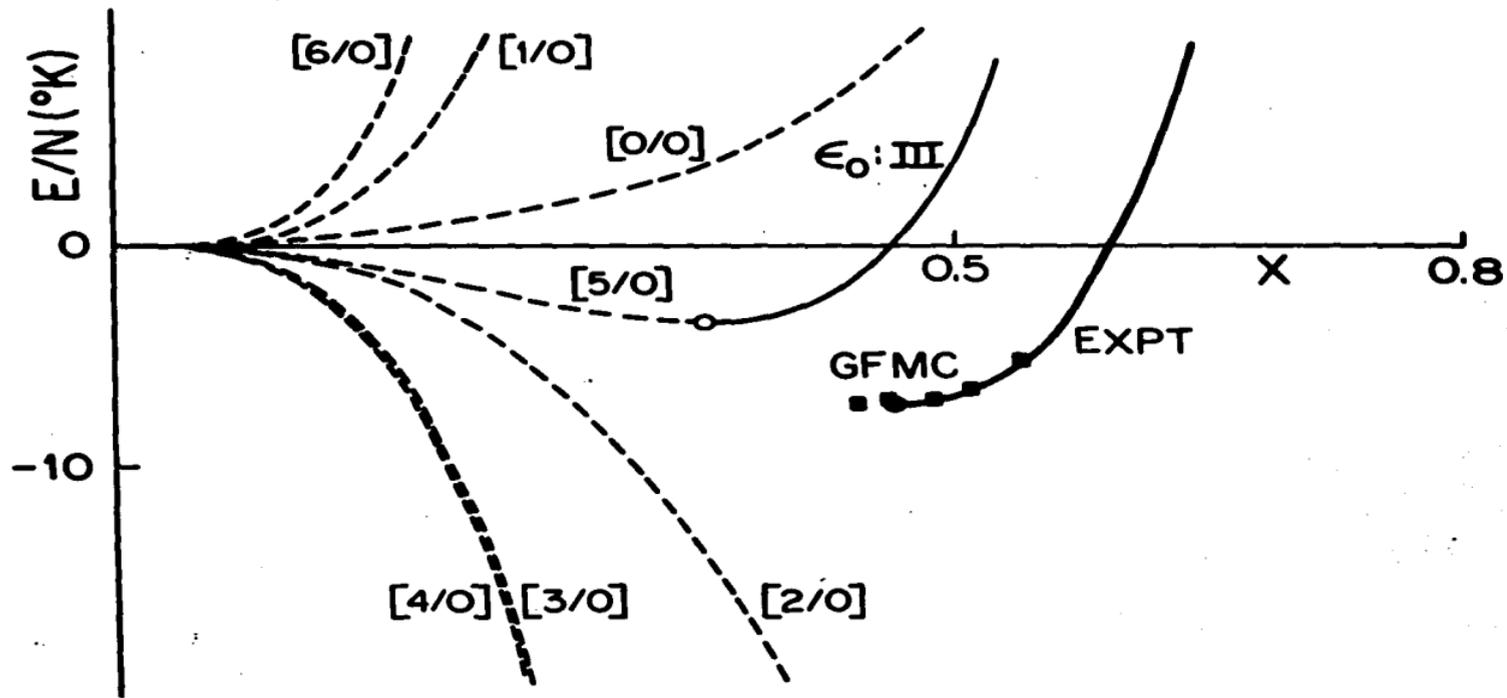


Figura FA3.- Las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ sin aproximar $e_j(x)$, $j = 1, \dots, 6$ y $e_0(x) \rightarrow e_0(\text{III})$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo GFMC (■). Para el potencial de Azis.

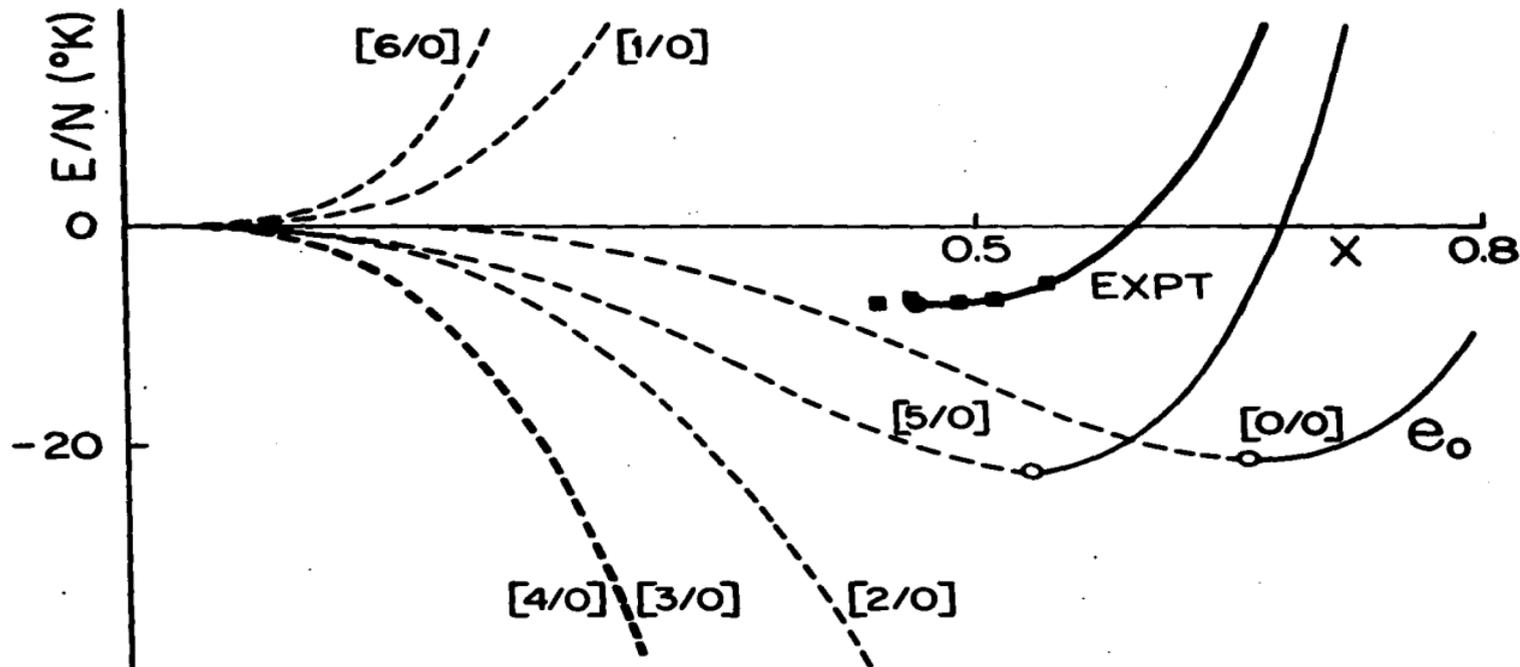


Figura FA4.- Se grafican las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ sin aproximar los coeficientes $e_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$ con aproximantes generalizados. La curva de energía experimental (EXPT) y los datos Green Function Monte Carlo GFMC (■). Para el potencial de Aziz.

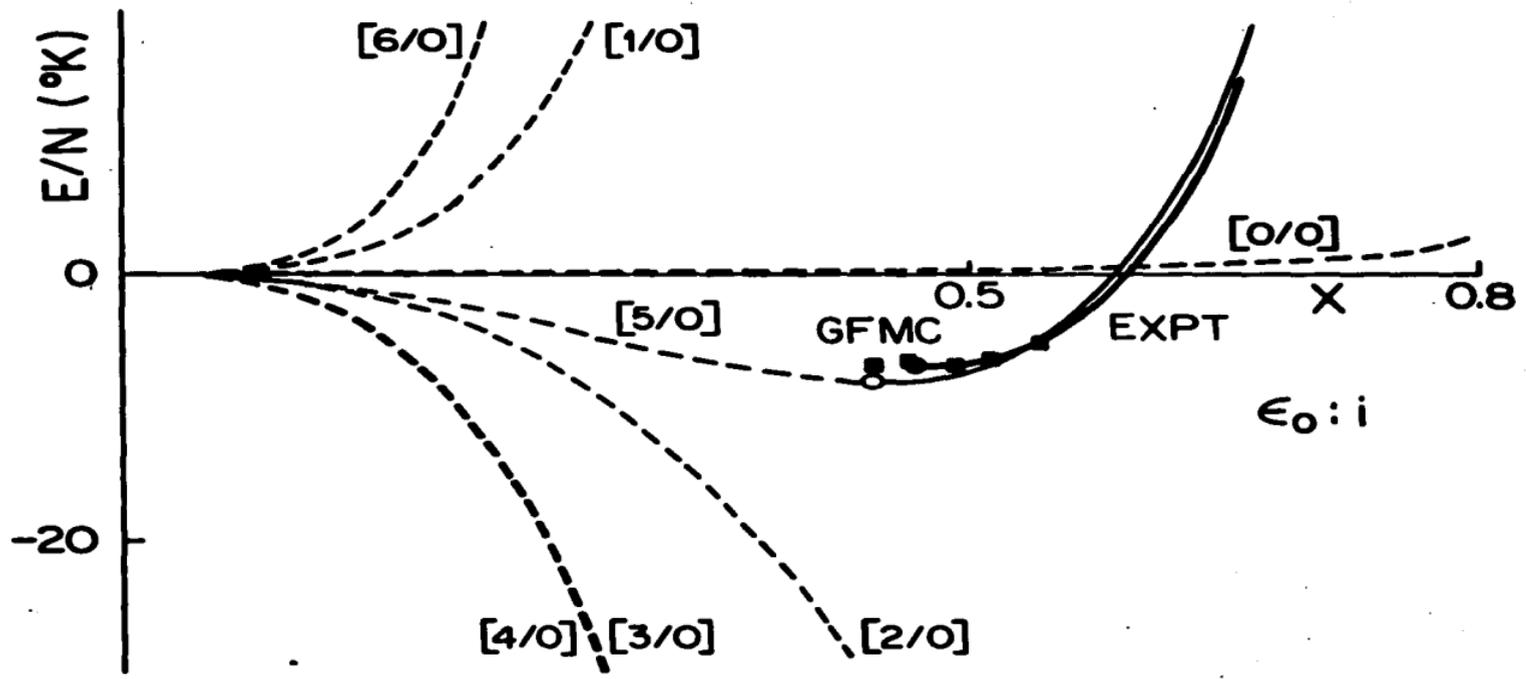


Figura FA5.- Se grafican las energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ sin aproximar los coeficientes $e_j(x)$, $j = 1, \dots, 6$ y $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon_0(i)$; la curva de energía experimental (EXPT) y los datos GFMC (○). Para el potencial de Azis.

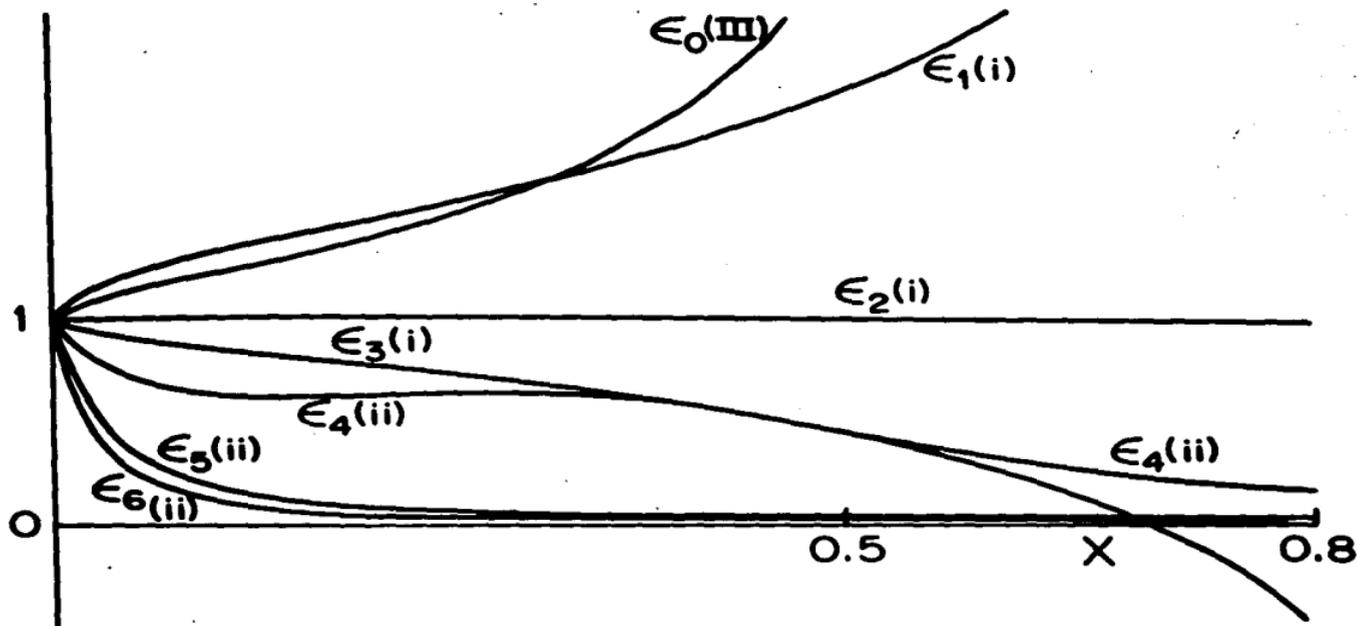


Figura FA6.- Aproximantes $e_j(x)$, $j = 0, \dots, 6$ a las series $e_j(x) = 1 + k_1 x + k_2 x^2 \ln x^2 + \dots$, $j = 0, \dots, 6$, respectivamente. Para el potencial de Azis. La forma seleccionada es indicada entre paréntesis.

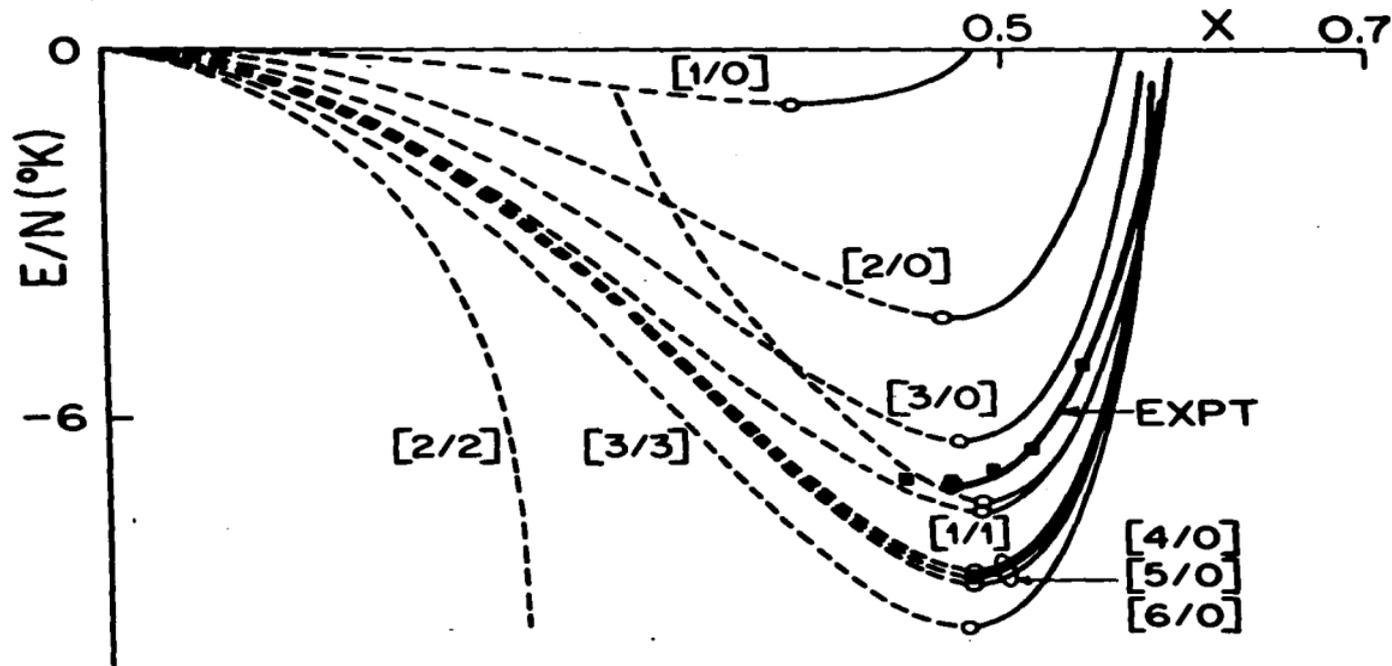


Figura FA7.- Se comparan las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, los datos GFMC (■) para el potencial de AZIZ y la curva de energía experimental (EXPT).

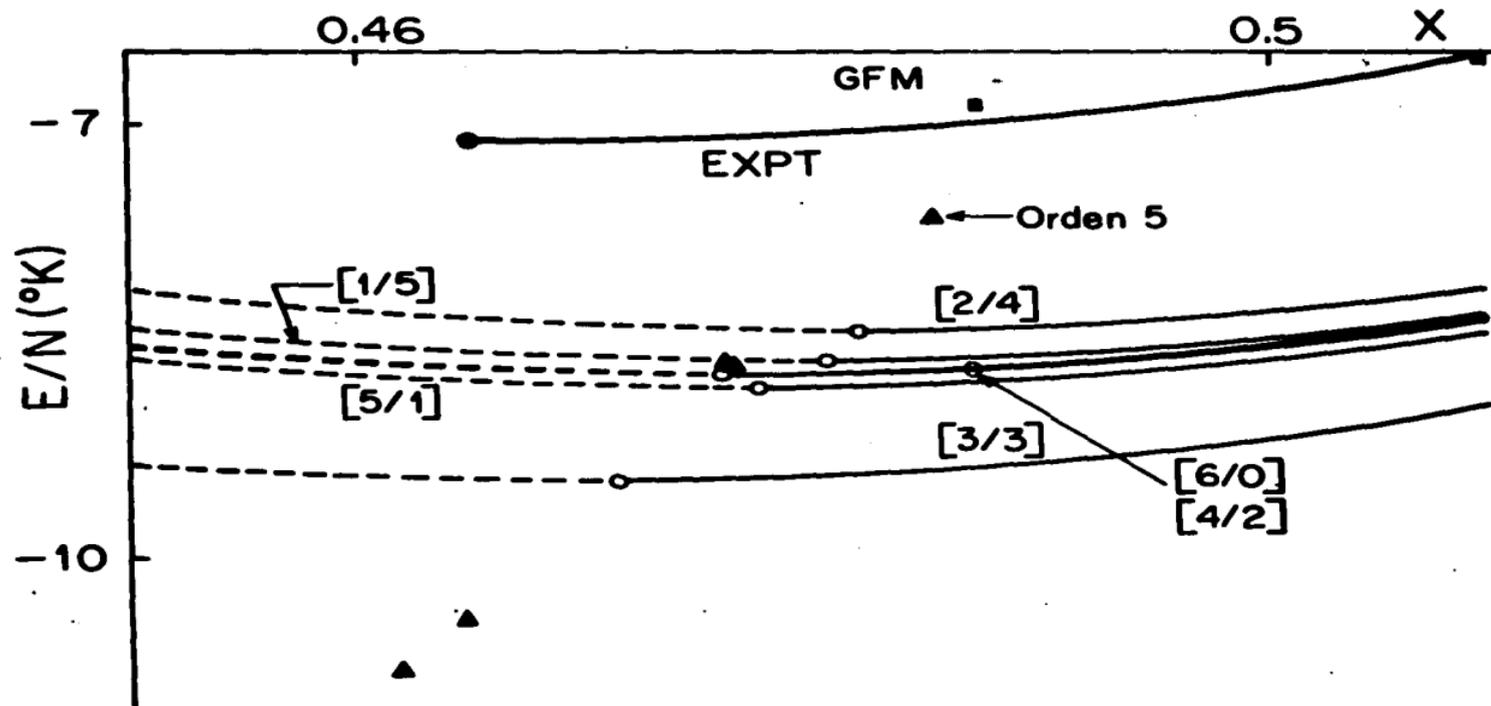


Figura FA8.- Ampliación de las zona de saturación. Se muestran los mínimos de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ para $L+M=5$ (\blacktriangle) y $L+M=6$ (\circ); las curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$ con $L+M=6$ y los datos GFM (■), para el potencial de Asis, y la curva experimental (EXPT).

El Cuarto Coeficiente

El deseo de hacer más precisos los resultados obtenidos en el capítulo anterior nos condujo a considerar la inclusión del cuarto coeficiente C_3 del desarrollo original (2.1) que, como indicamos, es desconocido y depende de la interacción de tres cuerpos.

Aquí, se describe un intento realizado para obtener un valor C_3 adecuado y general para cualquier potencial $v(r)$ entre partículas. Para ello se propuso un "Ansatz" para el coeficiente C_3 , cuya forma fue sugerida tanto por el coeficiente análogo de la expansión en baja densidad para la energía por partícula del estado base de un sistema de fermiones, como por el resultado variacional de que $C_3 \neq 0$ cuando el potencial entre las partículas es el de Moszkowski^[5].

La expansión en baja densidad para un sistema de N fermiones encerrados en un volumen V , está dada por^[37]

$$\begin{aligned} \frac{10Em}{3N\hbar^2 k_f^2} \simeq & 1 + c_1 k_f a + c_2 (k_f a)^2 + \left[c_3 \frac{r_0}{2a} + c_4 \frac{A_1(0)}{a^3} + c_5 (k_f a)^3 \right. \\ & \left. + c_6 (k_f a)^4 \ln |k_f a| + \left[c_7 \frac{r_0}{2a} + c_8 \frac{A_0''(0)}{a^3} + c_9 \right] (k_f a)^4 + \dots, \end{aligned} \quad (5.1)$$

donde a es la longitud de dispersión de onda S , r_0 , $A_1(0)$ y $A_0''(0)$ son parámetros conteniendo información adicional sobre el potencial central de interacción de dos cuerpos, $v(r)$. $\hbar k_f$, es el momento de Fermi, c_1, c_2, \dots, c_9 son coeficientes adimensionales que dependen de ν , el número de grados de libertad intrínsecos, asociado a cada fermión (Por ejemplo: $\nu = 2$ para gas de electrones y ^3He , y $\nu = 4$ para materia nuclear).

De (5.1), E/N puede reescribirse en términos de ρ . El término en ρ^2 , el mismo del cual C_3 es coeficiente en el caso de bosones, tiene como coeficiente

$$\left[c_7 \frac{r_0}{2a} + c_8 \frac{A_0''(0)}{a^3} + c_9 \right] \left(\frac{3\hbar^2}{10m} \right) a^4 \left(\frac{6\pi^2}{\nu} \right)^2, \quad (5.2)$$

donde a , r_0 (el rango efectivo) y $A_1(0)$ (la longitud de dispersión de onda P), son independientes de la forma del potencial, ya que pueden ser determinadas de los defa-

samientos a baja energía a través de las ecuaciones^[38]

$$k \cot \delta_0(k) \underset{k \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + O(k^4),$$

$$k^3 \cot \delta_1(k) \underset{k \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{A_1(0)} + O(k^2),$$

donde $k \equiv (2mE_c/\hbar^2)^{1/2}$, E_c es la energía cinética de dispersión, y δ_0 , δ_1 son los defasamientos en onda S y P , respectivamente.

La dependencia en la forma del potencial está contenida en $A_0''(0)$, definido como

$$A_0''(0) = -\frac{m}{3\hbar^2} \int_0^\infty dr r^4 v(r) \psi_0(0, r),$$

con $\psi_0(0, r)$ la solución radial de onda S , cuando $k \rightarrow 0^+$, de la ecuación de Schrödinger. Su evaluación requiere el conocimiento de $v(r)$.

La primera intención fue proponer el "Ansatz" con la misma estructura que la de (5.2). Sin embargo,

$$\frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{6\pi^2}{\nu} \right) \left[c_7 \frac{r_0}{2a} + c_8 \frac{A_0''(0)}{a^3} + c_9 \right] a^4 \xrightarrow{a \rightarrow 0} 0,$$

lo cual no es deseable ya que Moszkowski^[5] obtuvo un valor diferente de cero, para C_3 , cuando trató el caso $a = 0$, $\alpha = 1$.

Por tal motivo se modificó (5.2) y se propuso la siguiente forma para C_3

$$C_3 = A \left(\frac{a_0}{a} \right)^4 + B \left(\frac{r_0 a_0}{a^2} \right) + C \left(\frac{A_0''(0) a_0}{a^4} \right), \quad (5.3)$$

con A , B y C , constantes por determinar.

Se puede notar aquí que el término

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} C_3 \rho^2 a^4 \neq 0, \quad (5.4)$$

pues este término se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} [A a_0^4 + B(r_0 a_0 a^2) + C A_0''(0) a_0] \rho^2, \quad (5.5)$$

donde para un potencial de esfera dura mas pozo rectangular^[18]

$$\begin{aligned}
 a_0 &= c, & \text{diámetro de las esferas duras} \\
 a &= a_0 \left[1 + \alpha \left(1 - \frac{\tan \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \right) \right] \\
 \frac{r_0 a^2}{c^3} &= \frac{2}{3} \alpha^3 \left\{ \left(\frac{\tan \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \right)^3 + \left(1 + \frac{1}{\alpha} - \frac{\tan \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \right)^3 \right. \\
 &\quad \left. - \frac{3}{2} \left(\frac{1 + \tan^2 \sqrt{\lambda}}{\lambda} - \frac{\tan \sqrt{\lambda}}{(\sqrt{\lambda})^3} \right) \right\} \neq 0 \\
 A_0^n(0) &= \frac{R-c}{\sqrt{\lambda}} \left(R^2 - \frac{2(R-c)^2}{\lambda} \right) \tan \sqrt{\lambda} - \frac{R}{3} \left(R^2 - \frac{6(R-c)^2}{\lambda} \right) \\
 &\quad - \frac{c}{3} \left(\frac{6(R-c)^2}{\lambda} - c^2 \right) \sec \sqrt{\lambda} - \frac{1}{3} c^3 \neq 0
 \end{aligned}$$

y que al introducirlos en la expresión (5.5), nos conduce a la desigualdad (5.4).

Este "Ansatz", expresión (5.3), se sustituye en la expresión (2.1), quedándonos

$$\begin{aligned}
 \frac{E}{N} \frac{m}{2\pi\hbar^2} &\approx \rho a [1 + C_1(\rho a^3)^{1/2} + C_2 \rho a^3 \ln(\rho a^3)] \\
 &\quad + \left\{ A \left(\frac{a_0}{a} \right)^4 + B \left(\frac{r_0 a_0}{a^2} \right) + C \left(\frac{A_0^n(0) a_0}{a^4} \right) \right\} \rho a^3 \\
 &\quad + O\{(\rho a^3)^{3/2} \ln(\rho a^3)\}.
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

En forma análoga como fue hecho en Capítulo II, y por las mismas razones, se propone desarrollar no sólo a , sino también r_0 y $A_0^n(0)$, en términos de λ , o sea

$$a = a_0 \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \lambda^j \right), \tag{5.7}$$

$$r_0 = r_{00} \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \beta_j \lambda^j \right), \tag{5.8}$$

$$A_0^n(0) = A_{00}^n(0) \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \gamma_j \lambda^j \right). \tag{5.9}$$

Los desarrollos fueron llevados hasta orden cinco en λ . En la tabla 1 se muestran los coeficientes α , β y γ .

Al sustituir los desarrollos (5.7)-(5.9) y hacer el cambio de variable

$$x = \sqrt{\rho a_0^3}$$

en la expresión (5.6), para la energía, ésta nos queda

$$\frac{E}{N} \simeq \frac{2\pi\hbar^2}{ma_0^3} x^2 \sum_{j=0}^5 \alpha_j e_j(x) \lambda^j, \quad (5.10)$$

con

$$e_j(x) = 1 + C_{1j}x + C_{2j}x^2 \ln(x^2) + C_{3j}x^2 + \dots, \quad j = 0, \dots, 5.$$

En particular, para $j = 0$,

$$C_{10} = C_1 = 4.814418, \quad C_{20} = C_2 = 19.653915, \quad C_{30} = A + B \frac{r_{00}}{a_0} + C \frac{A''_{00}(0)}{a_0^3}.$$

Las restantes C_{1j} , C_{2j} , $j = 1, \dots, 5$, dependen del parámetro α , de C_1 y de C_2 ; las C_{3j} , $j = 1, \dots, 5$, son funciones de α_j , β_j , γ_j y de las constantes por determinar A , B y C . El conjunto completo de las C_{ij} , $i = 1, 2, 3$, $j = 0, \dots, 5$, se muestran en la tabla 2. Se procedió a obtener los aproximantes $e_j(x)$ para cada $e_j(x)$. Se observó que satisficieran los criterios físicos señalados en el Capítulo III y, más aún, a las $e_j(x)$, $j = 2, \dots, 5$, no sólo se les pidió que su valor fuese pequeño alrededor de la densidad de Bernal Cuántica x_B , sino que fuesen iguales a cero. Es decir, $e_j(x_B) = 0$, $j = 2, \dots, 5$. Esto último, junto a las condiciones que deben de satisfacer $e_0(x)$ y $e_1(x)$, que inmediatamente describimos, nos permitió determinar las constantes A , B y C y como consecuencia, el "Ansatz".

Al seleccionar la $e_0(x)$ se exigió que tuviera un polo de orden 2 y que reprodujera los datos de energía GFMC para el sistema de esferas duras. Esto condujo a Pineda *et al.*^[17] a fijar el valor de

$$C_{30} = 26.2 \quad (5.11)$$

y, a la vez, la densidad de empaquetamiento $x_B = 0.7082$. La $e_0(x)$ seleccionada fue la FORM III, que usamos en el capítulo anterior, con C_{30} y x_B recalculados por V. Aguilera-Navarro^[26]. Al sustituir C_{30} , en términos de A , B y C , en (5.11), obtenemos

$$A + B \frac{r_{00}}{a_0} + C \frac{A''_{00}(0)}{a_0^3} = 26.2. \quad (5.12)$$

En nuestro caso, el potencial de BURKHARDT,

$$a_0 = c, \quad r_{00} = \frac{2}{3}c, \quad A''_{00}(0) = -\frac{c^3}{3};$$

y la ecuación (5.12) queda

$$A + \frac{2}{3}B - \frac{C}{3} = 26.2, \quad (5.13)$$

que es la primera ecuación de un sistema de tres, que nos permitirán deducir los valores de A , B y C .

Cuando el sistema alcanza la densidad de empaquetamiento x_B , es de esperarse que la energía E/N diverja, lo cual se asegura en $\epsilon_0(x)$; por otro lado, la corrección a la energía de esferas duras será dominada por un efecto causado por el pozo rectangular. En realidad, cuando el sistema se acerca a x_B , la corrección atractiva crecerá ya que más partículas están dentro de la zona de acción del pozo rectangular. En sí, es de esperarse que la corrección sea dada por

$$-\frac{1}{2}V_0 \times \left[\begin{array}{l} \text{Número de centros de esferas duras dentro} \\ \text{de las esferas concéntricas de radios } R \text{ y } c \end{array} \right]$$

o sea

$$= -\frac{1}{2}V_0 \left[\frac{4\pi\rho_B R^3}{3} - 1 \right].$$

Como puede verse, es lineal en V_0 y por ende, en λ . De aquí que el término del desarrollo (5.10) que contribuye a la corrección sea el término lineal en λ , haciéndose cero los restantes términos en x_B .

Lo anterior nos permite plantear las siguientes ecuaciones:

$$\frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x_B^2 \alpha_1 \epsilon_1(x_B) \lambda = -\frac{1}{2}V_0 \left[\frac{4\pi x_B^2 R^3}{3c^3} - 1 \right], \quad (5.14)$$

$$\frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x_B^2 \alpha_j \epsilon_j(x_B) \lambda^j = 0; \quad j = 2, 3, \dots \quad (5.15)$$

Como

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{mV_0}{\hbar^2} (R-c)^2, \\ \alpha &= \frac{R-c}{c} \rightarrow R = c(\alpha+1), \\ \alpha_1 &= -\frac{c}{3} \quad \text{y} \quad x_B = 0.7082, \end{aligned}$$

las ecuaciones (5.14) y (5.15) se pueden reescribir así:

$$\epsilon_1(x_B) = \frac{3}{4\pi x_B^2 \alpha^3} \left[\frac{4}{3} \pi x_B^2 (\alpha+1)^3 - 1 \right] = 2.9554196, \quad (5.16)$$

$$\epsilon_j(x_B) = 0, \quad j = 2, \dots \quad (5.17)$$

Las dos primeras, junto a (5.13), forman el sistema de tres ecuaciones usadas para calcular A , B y C . Se puede notar que en estas últimas ecuaciones las constantes A , B y C , están contenidas implícitamente y a través de C_{3j} . De aquí que sus valores dependerán de la $\epsilon_j(x)$ escogida. Se analizaron y calcularon las A , B y C para las diferentes formas de aproximantes posibles, tanto para $\epsilon_2(x)$ como $\epsilon_3(x)$. Esto no condujo a seleccionar la FORM III para $\epsilon_2(x)$ y $\epsilon_3(x)$. Es decir,

$$\epsilon_j(x) = \left[1 + \frac{C_{1j}x}{1 - \frac{C_{2j}}{C_{1j}}x - 2\frac{C_{3j}}{C_{1j}}x \ln(x)} \right], \quad j = 1, 2. \quad (5.18)$$

Al sustituir las expresiones para las C_{1j} en (5.18), y ésta en (5.16) y (5.17) obtenemos

$$\begin{aligned} 0.00297B + 0.23207C &= 3.63643, \\ 1.15113B + 0.54683C &= -35.301388, \end{aligned}$$

cuya solución nos da

$$\begin{aligned} B &= -38.34345, \\ C &= 16.16025, \end{aligned}$$

que al sustituirlos en (5.13) encontramos

$$A = 57.14938.$$

En este momento el "Ansatz" queda determinado;

$$C_3 \equiv 57.14938 \left(\frac{a_0}{a}\right)^4 - 38.34345 \left(\frac{r_0 a_0}{a^2}\right) + 16.16025 \left(\frac{A_0''(0) a_0}{a^4}\right)$$

así como las C_{ij} , $i = 1, 2, 3$, $j = 0, 1, 2$ que son tabuladas en la tabla 2.

VALIDEZ DEL "ANSATZ"

Obtenido el "Ansatz" se procedió a probar su validez universal, aplicándolo a otro potencial de interacción entre partículas, $v(r)$. Qué mejor que para el mismo potencial de MOSZKOWSKI que, en cierta manera, sugirió la forma final del "Ansatz".

POTENCIAL DE MOSZKOWSKI.- El potencial de Moszkowski no es mas que un potencial de esfera dura mas pozo rectangular para el cual $\alpha = 0$ y $\alpha = 1$. Introduciendo estos valores en la expresión (4.1), y resolviendo para λ , obtenemos

$$\lambda = 1.358533.$$

El valor del diámetro de esferas duras usado fue $a_0 = c = 1 \text{ \AA}$. Para este potencial

$$\begin{aligned} r_0 a^2 &= a_0^2 \left(\frac{4}{3} + \frac{1}{\lambda}\right) = 2.069421, \\ A_0''(0) &= a_0^2 \left[\frac{15}{3} + \frac{1}{3} \left(1 - \frac{6}{\lambda}\right) \sqrt{1 + 4\lambda}\right]. \end{aligned}$$

Con estos mismos parámetros Moszkowski^[8] determinó, mediante un cálculo variacional, la energía por bosón $(E/N)_M$ como función de la densidad $\rho = (N/V)$,

$$\left(\frac{E}{N}\right)_M = 2\pi \frac{\hbar^2}{mc^2} \frac{12.8}{2\pi} c^6 \rho^2 (1 + 5c^3 \rho)^2,$$

la cual será un cota superior de energía, para toda ρ ; en particular para ρ pequeñas ($\rho \rightarrow 0$). O sea

$$\left(\frac{E}{N}\right) \leq \left(\frac{E}{N}\right)_M. \quad (5.19)$$

Para ρ pequeñas ($\rho \rightarrow 0$),

$$\left(\frac{E}{N}\right)_{M \rho \rightarrow 0} \cong \frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} \frac{12.8}{2\pi} c^0 \rho^2. \quad (5.20)$$

De la expresión (5.6), cuando hacemos $a = 0$, el único término que sobrevive es el término en ρ^2 , así que

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left\{ A \left(\frac{a_0}{a}\right)^4 + B \left(\frac{r_0 a_0}{a^2}\right) + C \left(\frac{A_0''(0) a_0}{a^4}\right) \right\} \rho^2 a^4 \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \{ A a_0^4 + B r_0 a_0 a^2 + C A_0''(0) a_0 \} \rho^2, \\ \frac{E}{N} &= \frac{2\pi\hbar^2}{m a_0^3} a_0^3 \{ A a_0^3 + B r_0 a^2 + C A_0''(0) \} \rho^2. \end{aligned} \quad (5.21)$$

De aquí, para que el "Ansatz" sea bueno, es necesario que se satisfaga (5.19). Comparando (5.21) y (5.20), (5.19) se satisfará para bajas densidades si

$$a_0^{-3} \{ A a_0^3 + B r_0 a^2 + C A_0''(0) \} \leq \frac{12.8}{2\pi}.$$

Evaluando, el primer término de esta desigualdad vale 11.919092, el cual es mayor que $12.8/2\pi = 2.04$. De aquí que la desigualdad (5.19) no se satisfaga y, como consecuencia, el "Ansatz" no genere el coeficiente C_3 correcto para el potencial de Moszkowski. Esto también lo descarta como el coeficiente C_3 correcto para cualquier otro potencial. Muy probablemente es una consecuencia de la sencillez del "Ansatz" propuesto. Si bien se consideró la dependencia con el potencial a través de la cantidad $A_0''(0)$, ésto no fue suficiente. Proponer un nuevo "Ansatz" motiva un análisis más profundo del coeficiente C_3 , mismo.

Motivo de estudio es, también, proponer a C_3 como un desarrollo en potencias del parámetro perturbativo λ , ($C_3 = C_{30} + C_{31}\lambda + C_{32}\lambda^2 + \dots$) y, para cada potencial, determinar los primeros coeficientes del desarrollo a través de los criterios físicos que deben de satisfacer las $\epsilon_j(x)$, $j = 0, \dots, 5$. Aunque los coeficientes C_3 que obtendríamos serían parciales (para un potencial y con un número limitado de términos), nos proporcionarían información sobre su dependencia con el potencial que sugerirían un coeficiente C_3 universal.

Conclusiones

El método de Perturbaciones Van der Waals desarrollado en este trabajo, nos permitió calcular la energía del estado base de un sistema de bosones a temperatura absoluta $T = 0$. Los resultados son excelentes. A esto hay que agregar que el esfuerzo invertido es mucho menor que el requerido por otros métodos, por ejemplo el método GFMC.

Nuestro método se puede aplicar directamente a nuevos fluidos cuánticos bosónicos (por ejemplo $H\uparrow$ y $T\uparrow$), así como a sistemas fermiónicos en el estado base (por ejemplo 3He y $D\uparrow$).

Los resultados se vieron favorecidos cuando, para el caso Lennard-Jones, cambiamos la manera de separar el potencial: del "Corte Viejo" al "Corte Nuevo". De aquí que a semejanza del caso clásico, el "Corte Nuevo" parece ser la manera conveniente de separar el potencial cuando tratamos sistemas densos. Esto podrá ser corroborado cuando apliquemos el método a los nuevos sistemas bosónicos.

La inclusión del cuarto término del desarrollo de la energía, aunque desafortunado en esta ocasión, deberá ser reconsiderada, ya sea proponiendo un nuevo "Ansatz" o bien un desarrollo en potencias del parámetro de intensidad atractiva, λ . Esto último nos permitiría determinar C_3 para cada potencial de interacción, $v(r)$, considerado. Un posterior análisis de las C_3 así calculadas, nos proporcionaría información acerca de la dependencia de éstas respecto al potencial.

Finalmente, es conveniente señalar que el parámetro de pequeñas, apropiado para la descripción de líquidos cuánticos como 4He , es precisamente el parámetro de intensidad atractiva λ .

REFERENCIAS

- 1.- D.M. Ceperly and M.H. Kalos, in "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", ed. by K. Binder (Springer, Berlin, 1979).
- 2.- T.T. Wu, *Phys. Rev.* **115**, 1390 (1959); M.H. Hugenholtz and D. Pines, *Phys. Rev.* **116**, 489 (1959).
- 3.- G.A. Baker, Jr., and P. Graves-Morris, "Padé Approximants, in *Encly. of Math. and its Appls*", ed. by G. C. Rota (Addison-Wesley, Reading, MA, 1981) vols. 13 y 14.
- 4.- V.C. Aguilera-Navarro, M. Fortes, M. de Llano and A. Plastino, *J. Chem. Phys.* **76**, 749 (1982); V.C. Aguilera-Navarro, M. Fortes, M. de Llano, J. del Río, A. Plastino and O. Rojo, *J. Stat. Phys.* **32**, 95 (1983); V. C. Aguilera-Navarro, M. de Llano, R.F.T. Souza and S. Mini, *Physica* **128B**, 190 (1985).
- 5.- S.A. Moszkowski, (Comunicación Personal).
- 6.- R.D. Eppers, J.V. Dugan, Jr., and R. W. Palmer, *J. Chem. Phys.* **36**, 313 (1975); W.C. Stwalley and L.H. Nosanow, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 910 (1976).
- 7.- V.C. Aguilera-Navarro, G.A. Baker, Jr., L.P. Benofy, M. Fortes and M. de Llano, "Constructive Methods for the Ground-State Energy of Neutron Matter", (por publicarse).
- 8.- G.A. Baker, Jr., *Rev. Mod. Phys.* **43**, 479 (1971).
- 9.- V.C. Aguilera-Navarro, R. Guardiola, C. Keller, M. de Llano, M. Popovic and M. Fortes, *Phys. Rev. A* **35**, 3901 (1987).
- 10.- D.S. Saxon, "Elementary Quantum Mechanics", Holden-Day 1960, pp. 189-193.
- 11.- G.A. Baker, Jr. *et al.*, *Phys. Rev. A* **26**, 3575 (1982).
- 12.- J.M. Kincaid, G. Stell and C.K. Hall, *J. Chem. Phys.* **65**, 2161 (1976).
- 13.- G. Stell, O. Penrose, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1397 (1983).
- 14.- T.W. Burkhardt, *Ann. Phys.* **47**, 516-564 (1968).
- 15.- J.A. Barker and Henderson, *J. Chem. Phys.* **47**, 2856 (1967).
- 16.- D. Chandler and J.D. Weeks, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 149 (1970); J.D. Week, D. Chandler and H.C. Andersen, *J. Chem. Phys.* **54**, 5237 (1971).

- 17.- G.A. Baker, Jr., M. de Llano and J. Pineda, *Phys. Rev. B* **24**, 6304 (1981).
- 18.- V. Aguilera-Navarro, (Comunicación Personal).
- 19.- M.H. Kalos *et al.*, *Phys. Rev. B* **24**, 115 (1981).
- 20.- J.D. Bernal and J. Mason, *Nature* **188**, 910 (London 1960).
- 21.- P. Roman, "Advanced Quantum Theory", Addison Wesley, New York, 1965.
- 22.- S.I. Rubinow and T.T. Wu, *J. Appl. Phys.* **27**, 1032 (1956).
- 23.- J.P. Toennies and K. Winckelmann, *J. Chem. Phys.* **66**, 3965 (1967).
- 24.- J. de Boer and A. Michels, *Physica* **5**, 945 (1938).
- 25.- E. Buendía, R. Guardiola and M. de Llano, *Phys. Rev. A* **30**, 941 (1984).
- 26.- Guardiola *et al.*, (Comunicación Personal) .
- 27.- R.A. Asiz *et al.*, *J. Chem. Phys.* **70**, 9 (1979).
- 28.- G.C. Maitland and E.B. Smith, *Chem. Phys. Lett.* **22**, 443 (1973).
- 29.- R. Ahlrichs, P. Penco and G. Scoles, *Chem. Phys.* **19**, 119 (1976).
- 30.- A.G. Clarke and E.B. Smith, *J. Chem. Phys.* **51**, 4156 (1969).
- 31.- R.A. Dawe and E.B. Smith, *J. Chem. Phys.* **52**, 693 (1970).
- 32.- B.E. Gammon, *J. Chem. Phys.* **64**, 2556 (1976).
- 33.- J.W. Haarman, *AIP Conf. Proc.* **11**, 193 (1973).
- 34.- M.H. Kalos *et al.*, *Phys. Rev. B* **24**, 115 (1981).
- 35.- G. Gutiérrez, M. de Llano and W. C. Stwalley, *Phys. Rev. B* **29**, 5211 (1984).
- 36.- L.P. Benofy *et al.*, *Phys. Rev. A* **33**, 3749 (1986).
- 37.- G.A. Baker, Jr., *Rev. Mod. Phys.* **43**, 479 (1971).
- 38.- L.S. Rodberg and R.M. Thaler, "Introduction to the Quantum Theory of Scattering", Academic Press, New York, 1967.
- 39.- C.M. Bender and S.A. Orszag, "Advanced Mathematical Methods for Scientist and Engineers", Mc Graw-Hill, 1978.

-
- 40.- R.H. Rand, "Computer Algebra in Applied Mathematics: An Introduction to MACSYMA", Pitman, London, 1984.

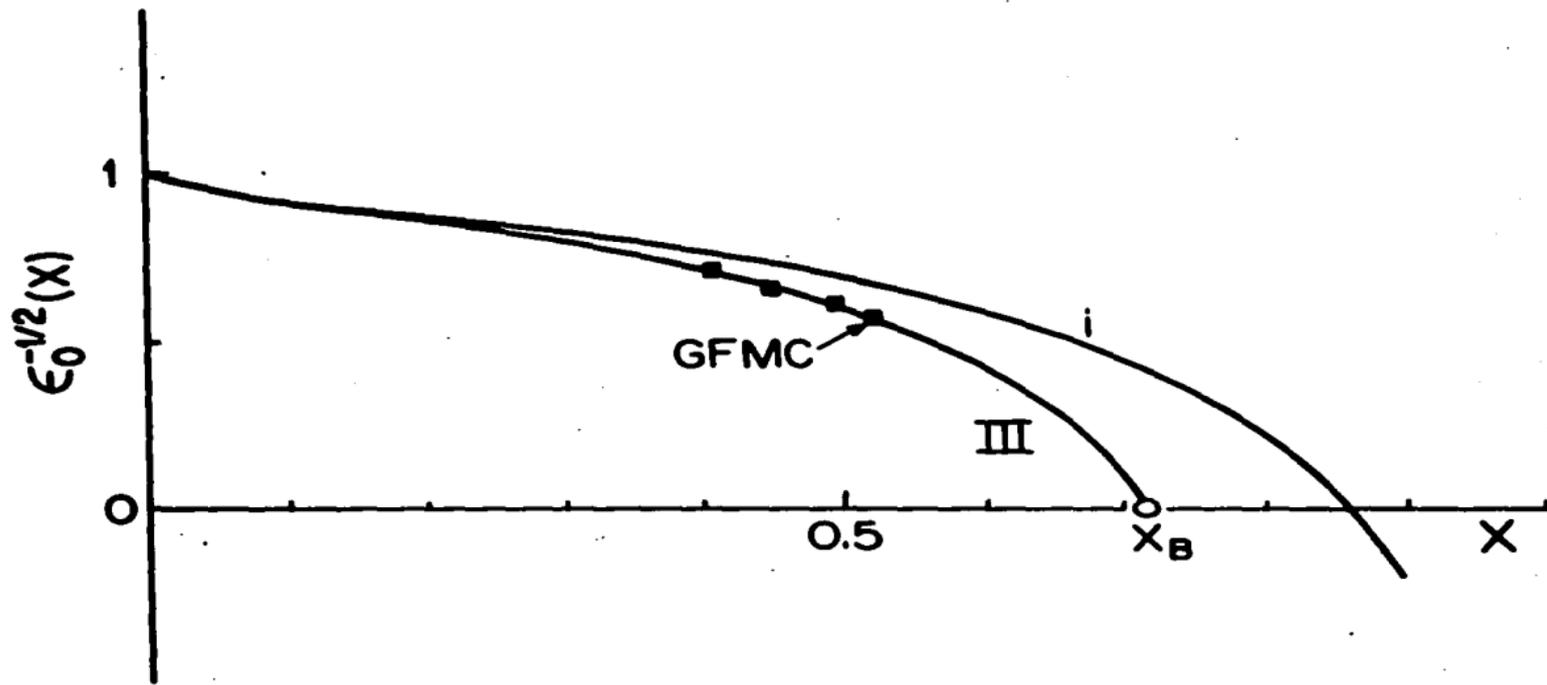


Figura FG2.- $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ con $\epsilon_0(x)$ el aproximante a $\epsilon_0(x)$ con tres términos (FORM i) y con cuatro términos (FORM III). Datos Green Function Monte Carlo GFM (■), para el sistema de esferas duras cuánticas. x_B es la densidad de Bernal cuántica.

Tabla 1.- Coeficientes α_j , β_j y γ_j de los desarrollos $a = a_0 + \sum_{j=1}^6 \alpha_j \lambda^j$, $r_0 = r_{00} + \sum_{j=1}^6 \beta_j \lambda^j$, $A_0'' = A_{00}'' + \sum_{j=1}^6 \gamma_j \lambda^j$. Para los potenciales indicados.

<i>alfas</i>	<i>betas</i>	<i>gammas</i>
Potencial de BURKHARDT		
$a_0 = 1.685 \text{ \AA}$, $r_{00} =$, $A_{00}''(0) =$		
-0.7546983	1.566509	-8.929896
-0.3018794	6.07562	-3.493361
-0.1221893	11.9414	-1.410843
-4.951461×10^{-2}	19.49282	-0.5715778
-2.006721×10^{-2}	29.11434	-0.2316425
-8.132919×10^{-3}		

<i>alfas</i>	<i>betas</i>	<i>gammas</i>
Potencial de MOSZKOWSKI		
$a_0 = 1 \text{ \AA}$, $r_{00} =$, $A_{00}''(0) =$		
-0.3333334	-0.1333334	-2.45
-0.1333334	0.247619	-0.9761904
-5.396826×10^{-2}	0.4342858	-0.3950231
-2.186949×10^{-2}	0.5050762	-0.1600712
-8.863236×10^{-3}	0.5082494	-6.487335×10^{-2}
-3.592128×10^{-3}		

<i>alfas</i>	<i>betas</i>	<i>gammas</i>
Potencial LENNARD-JONES, Corte Viejo		
$a_0 = 2.092954 \text{ \AA}$, $r_{00} = 1.395086 \text{ \AA}$, $A_{00}''(0) = -3.127948 \text{ \AA}^3$		
-1.337801	8.391969	-20.23182
-1.133802	34.83306	-9.934143
-1.099385	114.8573	-9.297482
-1.082054	339.9313	-9.108573
-1.067299	946.2255	-8.978078
-1.053099	2532.427	-8.857646

<i>alfas</i>	<i>betas</i>	<i>gammas</i>
Potencial LENNARD-JONES, Corte Nuevo		
$a_0 = 2.138328 \text{ \AA}, r_{00} = 1.423727 \text{ \AA}, A_{00}^N(0) = -3.360581 \text{ \AA}^3$		
-1.272788	7.670783	-18.60121
-1.067322	30.47999	-8.929398
-1.032604	96.97935	-8.311133
-1.016212	277.566	-8.134466
-1.002769	747.8023	-8.019602
-0.989968	1937.860	-7.915895

<i>alfas</i>	<i>betas</i>	<i>gammas</i>
Potencial AZIZ		
$a_0 = 2.1463176 \text{ \AA}, r_{00} = 1.429516 \text{ \AA}, A_{00}^N(0) = -3.389850 \text{ \AA}^3$		
-1.281184	6.799698	-17.58060
-1.125817	28.02254	-9.138008
-1.128648	91.76434	-8.870992
-1.147347	269.3671	-8.981896
-1.168591	743.1810	-9.142953
-1.190567	1970.741	-9.314092

Tabla 2.- Coeficientes C_{ij} , $i = 1, 2$, $j = 0, \dots, 6$ de las series $e_j(x) = 1 + C_{1j}x + C_{2j}x^2 \ln x^3 + \dots$ con $j = 0, \dots, 6$. Para cada uno de los potenciales indicados.

Potencial de BURKHARDT

$C_{10} \equiv C_1 = 4.814418$	$C_{20} \equiv C_2 = 19.653915$	$C_{30} = 25.397$
$C_{11} = 12.03605$	$C_{21} = 78.61566$	$C_{31} = ?$
$C_{12} = -4.995668$	$C_{22} = -143.8759$	$C_{32} = ?$
$C_{13} = -16.3339$	$C_{23} = -84.5683$	$C_{33} = ?$
$C_{14} = -21.29653$	$C_{24} = 112.5559$	$C_{34} = ?$
$C_{15} = -18.09437$	$C_{25} = 323.8062$	$C_{35} = ?$

Potencial de LENNARD-JONES, Corte Viejo

$C_{10} \equiv C_1 = 4.814418$	$C_{20} \equiv C_2 = 19.653915$	$C_{30} = 25.397$
$C_{11} = 12.03605$	$C_{21} = 78.61566$	$C_{31} = ?$
$C_{12} = -2.213165$	$C_{22} = -107.5271$	$C_{32} = ?$
$C_{13} = -9.596263$	$C_{23} = -75.56631$	$C_{33} = ?$
$C_{14} = -14.20699$	$C_{24} = 2.055173$	$C_{34} = ?$
$C_{15} = -15.80247$	$C_{25} = 98.14943$	$C_{35} = ?$
$C_{16} = -13.71285$	$C_{26} = 184.0432$	$C_{36} = ?$

Potencial de LENNARD-JONES, Corte Nuevo

$C_{10} \equiv C_1 = 4.814418$	$C_{20} \equiv C_2 = 19.653915$	$C_{30} = 25.397$
$C_{11} = 12.03605$	$C_{21} = 78.61566$	$C_{31} = ?$
$C_{12} = -1.665258$	$C_{22} = -100.3695$	$C_{32} = ?$
$C_{13} = -6.711356$	$C_{23} = -74.68053$	$C_{33} = ?$
$C_{14} = -13.26767$	$C_{24} = -8.072665$	$C_{34} = ?$
$C_{15} = -15.19937$	$C_{25} = 77.11551$	$C_{35} = ?$
$C_{16} = -13.97842$	$C_{26} = 157.3693$	$C_{36} = ?$

Tabla 3.- Los 5 aproximantes de la serie $e(x)$, con tres términos

$$\begin{aligned} \text{FORMO} &= 1 + k_1x + k_2x^2 \ln x^2 \\ \text{FORMi} &= 1 + \frac{k_1x}{1 - \frac{k_2}{k_1}x \ln x^2} \\ \text{FORMii} &= \frac{1}{1 - k_1x - k_2x^2 \ln x^2} \\ \text{FORMiii} &= \frac{1 + k_2x^2 \ln x^2}{1 - k_1x} \\ \text{FORMiv} &= \frac{1 + k_1x}{1 - k_2x^2 \ln x^2} \end{aligned}$$

Tabla 4.- Los 12 aproximantes de la serie $e(x)$, con cuatro términos

$$\begin{aligned} \text{FORMI} &= 1 + \frac{k_1x + k_2x^2 \ln x^2}{1 - \frac{k_2}{k_1}x} \\ \text{FORMII} &= 1 + \frac{k_1x + k_2x^2}{1 - \frac{k_2}{k_1}x \ln x^2} \\ \text{FORMIII} &= 1 + \frac{k_1x}{1 - \frac{k_2}{k_1}x \ln x^2 - \frac{k_2}{k_1}x} \\ \text{FORMIV} &= \frac{1 + (k_1 - \frac{k_2}{k_1})x}{1 - \frac{k_2}{k_1}x - k_2x^2 \ln x^2} \\ \text{FORMV} &= \frac{1 + (k_1 - \frac{k_2}{k_1})x + k_2x^2 \ln x^2}{1 - \frac{k_2}{k_1}x} \\ \text{FORMVI} &= \frac{1}{1 - k_1x - k_2x^2 \ln x^2 - (k_2 - k_1^2)x^2} \\ \text{FORMVII} &= \frac{1 + k_1x + k_2x^2 \ln x^2}{1 - k_2x^2} \\ \text{FORMVIII} &= \frac{1 + k_2x^2 \ln x^2 + (k_2 - k_1^2)x^2}{1 - k_1x} \\ \text{FORMIX} &= \frac{1 + k_1x + k_2x^2}{1 - k_2x^2 \ln x^2} \\ \text{FORMX} &= \frac{1 + k_1x}{1 - k_2x^2 \ln x^2 - (k_2 - k_1^2)x^2} \\ \text{FORMXI} &= \frac{1 + k_2x^2 \ln x^2}{1 - k_1x - (k_2 - k_1^2)x^2} \\ \text{FORMXII} &= \frac{1 + (k_2 - k_1^2)x^2}{1 - k_1x - k_2x^2 \ln x^2} \end{aligned}$$

Tabla 5.- Resumen del análisis de los aproximantes $\epsilon_j(x)$ a la serie $e_j(x)$, para el potencial de Burkhardt.

FORMAS	ϵ_0	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4	ϵ_5	ϵ_6
FORM 0	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	<i>umo</i>	<i>umo</i>	--	--	--
FORM I					polo en 0.0258	polo en 0.0053	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM II	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	polo en 0.0348	polo en 0.0682			
FORM III	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	<i>umo</i>	<i>nmo</i>	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM IV	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	polo en 0.0317	polo en 0.0434	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$

Tabla 6.- Resumen del análisis de los aproximantes $\epsilon_j(x)$ a la serie $e_j(x)$, para el potencial L-J, Corte Viejo. Los aproximantes óptimos son los que no tienen indicación alguna.

FORMAS	ϵ_0	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4	ϵ_5	ϵ_6
FORM 0	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	<i>umo</i>	<i>umo</i>	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM I					grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	polo en 0.0076
FORM II	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	polo en 0.0396	polo en 0.0614	grande en $\sim \mathcal{E}_B$		
FORM III	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	<i>umo</i>	<i>umo</i>		grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM IV	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	polo en 0.0377	polo en 0.0464	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$

Tabla 7.- Resumen del análisis de los aproximantes $\epsilon_j(x)$ a la serie $e_j(x)$, para el potencial L-J, Corte Nuevo. Los aproximantes óptimos son los que no tienen indicación alguna.

FORMAS	ϵ_0	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4	ϵ_5	ϵ_6
FORM 0	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	--	--	--	--	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM I					grande en ~ 0.85	grande en ~ 0.85	polo en 0.0082
FORM II	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	polo en 0.0408	polo en 0.0603			
FORM III	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	<i>umo</i>	<i>umo</i>	<i>umo</i> desde 0.4	grande en ~ 0.85	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM IV	<i>nmc</i>	<i>nmc</i>	polo en 0.0392	polo en 0.0467	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$

Tabla 6.- Resumen del análisis de los aproximantes $\epsilon_j(x)$ a la serie $\epsilon_j(x)$, para el potencial Asis et al. Los aproximantes óptimos son los que no tienen indicación alguna

FORMAS	ϵ_0	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4	ϵ_5	ϵ_6
FORM 0	nmc	nmc	--	--	--	--	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM I					grande en ~ 0.85	grande en ~ 0.85	pele en 0.0155
FORM II	nmc	nmc	pele en 0.0421	pele en 0.0585			
FORM III	nmc	nmc	vmo	vmo	vmo desde 0.2	grande en ~ 0.85	grande en $\sim \mathcal{E}_B$
FORM IV	nmc	nmc	pele en 0.0495	pele en 0.0462	pele en 0.1261	grande en $\sim \mathcal{E}_B$	grande en $\sim \mathcal{E}_B$

nmc = no monotómicamente creciente.

up = viola positividad.

vmo = viola monotonidad de orden.

Densidad (x_{\min}) y energía ($(E/N)_{\min}$) mínimas para las diferentes curvas de energías $E/N[L/M](x, \lambda)$, con $L + M \leq 6$. Potencial de

Tabla 9.- Burkhardt.

 $c = 1.685 \text{ \AA}$

PADES	x_{\min} ρ_{\min}	E/N_{\min}
[1/5]	0.4366(0.0398)	$-9.895298 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/4]	0.4328(0.0391)	$-9.362421 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/3]	0.4318(0.0390)	$-9.354365 \pm 5 \times 10^{-7}$
[4/2]	0.4318(0.0390)	$-9.355348 \pm 5 \times 10^{-7}$
[5/1]	0.4318(0.0390)	$-9.356182 \pm 5 \times 10^{-7}$
[6/0]	0.4318(0.0390)	$-9.356182 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/4]	0.4267(0.0380)	$-8.571955 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/3]	0.4358(0.0397)	$-9.396998 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/2]	0.4320(0.0390)	$-9.348418 \pm 5 \times 10^{-7}$
[4/1]	0.4320(0.0390)	$-9.390661 \pm 5 \times 10^{-7}$
[5/0]	0.4316(0.0389)	$-9.356170 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/3]	0.4454(0.0451)	$-11.192175 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/2]	0.4435(0.0411)	$-9.568630 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/1]	0.4316(0.0389)	$-9.293957 \pm 5 \times 10^{-7}$
[4/0]	0.4316(0.0389)	$-9.299927 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/2]	0.4323(0.0390)	$-7.395815 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/1]	0.4735(0.0469)	$-10.810698 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/0]	0.4309(0.0388)	$-9.152559 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/1]	0.5061(0.0535)	$-20.504162 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/0]	0.5034(0.0530)	$-14.680449 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/0]	0.4655(0.0453)	$-5.836048 \pm 5 \times 10^{-7}$

Tabla 10.- Lennard-Jones "Corte Viejo".

 $\epsilon_4 - iii$ $C_3 = 25.397$ $\sigma_B = .7200$

PADES	x_{\min} ρ_{\min}	E/N_{\min}
[1/5]	0.4644(0.0235)	-6.780955
[2/4]	0.4645(0.0235)	$-6.762268 \pm 6 \times 10^{-6}$
[3/3]	0.4649(0.0236)	$-6.721056 \pm 3 \times 10^{-6}$
[4/2]	0.4654(0.0236)	$-6.800720 \pm 8 \times 10^{-6}$
[5/1]	0.4655(0.0236)	$-6.800680 \pm 1 \times 10^{-6}$
[6/0]	0.4650(0.0236)	$-6.717267 \pm 3 \times 10^{-6}$
[1/4]	0.4644(0.0235)	$-6.783917 \pm 1 \times 10^{-6}$
[2/3]	0.4645(0.0235)	$-6.635720 \pm 2 \times 10^{-6}$
[3/2]	0.4642(0.0235)	$-6.668213 \pm 1 \times 10^{-6}$
[4/1]	0.4677(0.0239)	$-6.793903 \pm 7 \times 10^{-6}$
[5/0]	0.4646(0.0235)	$-6.659356 \pm 7 \times 10^{-6}$
[1/3]	0.4689(0.0240)	$-6.466560 \pm 2 \times 10^{-6}$
[2/2]	0.4878(0.0260)	$-6.209028 \pm 4 \times 10^{-6}$
[3/1]	0.4641(0.0235)	$-6.586240 \pm 1 \times 10^{-6}$
[4/0]	0.4641(0.0235)	$-6.561314 \pm 1 \times 10^{-6}$
[1/2]	0.4472(0.0218)	$-7.045362 \pm 1 \times 10^{-6}$
[2/1]	0.4502(0.0221)	$-7.080066 \pm 1 \times 10^{-6}$
[3/0]	0.4644(0.0235)	$-6.390382 \pm 1 \times 10^{-6}$
[1/1]	0.4786(0.0250)	$-8.014263 \pm 1 \times 10^{-6}$
[2/0]	0.4685(0.0239)	$-5.051147 \pm 1 \times 10^{-6}$
[1/0]	0.4035(0.0178)	$-1.308101 \pm 1 \times 10^{-6}$

Tabla 11.- Lennard-Jones "Corte Nuevo".

$\epsilon_4 - ii$

$C_3 = 25.397$
 $z_B = .7200$

PADES

	σ_{min} ρ_{min}	E/N_{min}
[1/5]	0.4686(0.0225)	$-6.823997 \pm 1 \times 10^{-7}$
[2/4]	0.4693(0.0225)	$-6.739902 \pm 1 \times 10^{-7}$
[3/3]	0.4649(0.0221)	$-6.983520 \pm 1 \times 10^{-7}$
[4/2]	0.4683(0.0224)	$-6.776058 \pm 1 \times 10^{-7}$
[5/1]	0.4687(0.0225)	$-6.839265 \pm 1 \times 10^{-7}$
[6/0]	0.4682(0.0224)	$-6.763473 \pm 1 \times 10^{-7}$
[1/4]	0.4699(0.0226)	$-6.523319 \pm 1 \times 10^{-7}$
[2/3]	0.4605(0.0217)	$-7.088111 \pm 1 \times 10^{-7}$
[3/2]	0.4601(0.0217)	$-7.091184 \pm 1 \times 10^{-7}$
[4/1]	0.4679(0.0224)	$-6.719667 \pm 1 \times 10^{-7}$
[5/0]	0.4679(0.0224)	$-6.703163 \pm 1 \times 10^{-7}$
[1/3]	0.4715(0.0227)	$-7.389631 \pm 5 \times 10^{-8}$
[2/2]	0.4735(0.0229)	-6.857819 oscilaba
[3/1]	0.4776(0.0233)	-7.474478 alrededor
[4/0]	0.4672(0.0223)	-6.594949 del mínimo
[1/2]	0.4488(0.0206)	$-7.006701 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/1]	0.4480(0.0205)	$-7.011468 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/0]	0.4633(0.0219)	$-5.780535 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/1]	0.4719(0.0228)	$-6.858895 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/0]	0.4600(0.0216)	$-4.186048 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/0]	0.3870(0.0153)	$-0.944567 \pm 5 \times 10^{-7}$

Tabla 12.- Aziz et al.

$\epsilon_4 - ii$

$C_3 = 25.397$
 $z_B = .7200$

PADES

	σ_{min} ρ_{min}	E/N_{min}
[1/5]	0.4803(0.0233)	$-8.662507 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/4]	0.4818(0.0235)	$-8.448625 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/3]	0.4715(0.0225)	$-9.466740 \pm 5 \times 10^{-7}$
[4/2]	0.4771(0.0230)	$-8.758893 \pm 5 \times 10^{-7}$
[5/1]	0.4775(0.0230)	$-8.840013 \pm 5 \times 10^{-7}$
[6/0]	0.4770(0.0230)	$-8.747942 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/4]	0.4851(0.0238)	$-7.663389 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/3]	0.4642(0.0218)	$-10.389866 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/2]	0.4612(0.0215)	$-10.753648 \pm 5 \times 10^{-7}$
[4/1]	0.4768(0.0230)	$-8.681310 \pm 5 \times 10^{-7}$
[5/0]	0.4767(0.0230)	$-8.671009 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/3]	0.4432(0.0199)	$-14.481485 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/2]	0.4856(0.0238)	$-7.428491 \pm 5 \times 10^{-8}$
[3/1]	0.5938(0.0357)	$15.733476 \pm 5 \times 10^{-7}$
[4/0]	0.4760(0.0229)	$-8.529905 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/2]	0.4559(0.0210)	$-8.444503 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/1]	0.4530(0.0207)	$-8.501179 \pm 5 \times 10^{-7}$
[3/0]	0.4708(0.0224)	$-6.461321 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/1]	0.4765(0.0230)	$-7.587645 \pm 5 \times 10^{-7}$
[2/0]	0.4640(0.0218)	$-4.451591 \pm 5 \times 10^{-7}$
[1/0]	0.3893(0.0153)	$-0.975293 \pm 5 \times 10^{-7}$

Table 13.- Burkhardt.

$$c = 1.985 \text{ \AA}$$

$$C_3 = 25.397$$

$$s_B = .7200$$

PADES	F_{\min} F_{\min}	E/N_{\min}
[1/5]	0.4366(0.0244)	-7.130296 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[2/4]	0.4329(0.0240)	-6.746322 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[3/3]	0.4318(0.0238)	-6.740516 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[4/2]	0.4318(0.0238)	-6.741224 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[5/1]	0.4318(0.0238)	-6.741825 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[6/0]	0.4318(0.0238)	-6.741824 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[1/4]	0.4269(0.0233)	-6.176726 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[2/3]	0.4358(0.0243)	-6.771229 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[3/2]	0.4319(0.0238)	-6.738228 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[4/1]	0.4319(0.0238)	-6.766812 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[5/0]	0.4318(0.0238)	-6.741822 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[1/3]	0.4453(0.0253)	-8.064791 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[2/2]	0.4435(0.0251)	-6.894905 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[3/1]	0.4316(0.0238)	-6.696987 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[4/0]	0.4316(0.0238)	-6.701289 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[1/2]	0.4324(0.0239)	-5.329235 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[2/1]	0.4736(0.0287)	-7.789911 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[3/0]	0.4309(0.0237)	-6.595097 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[1/1]	0.5061(0.0327)	-14.774772 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[2/0]	0.5034(0.0324)	-10.578355 $\pm 5 \times 10^{-7}$
[1/0]	0.4656(0.0277)	-4.205305 $\pm 5 \times 10^{-7}$

Aproximantes de Padé

En Física es muy frecuente encontrarnos con problemas cuya solución puede darse solamente en términos de una serie infinita, ya sea convergente o divergente. Son ejemplos inmediatos los problemas atacados mediante algún método de Perturbaciones que generan desarrollos en potencias del parámetro perturbativo.

Si la serie converge rápidamente, una buena aproximación a la solución buscada es la suma de sus primeros términos. En los casos en que la convergencia es lenta es necesario: si es posible, sumar una mayor cantidad de términos o aplicar algún método para acelerar la convergencia (por ejemplo, Transformaciones de Shank^[50]).

Más comunes son las series divergentes, donde lo engorroso de los cálculos limitan a un número finito el conocimiento de sus términos. Una técnica afortunada para aproximar la suma de estos tipos de series es la de los Aproximantes de Padé.

Los Aproximantes de Padé son aproximantes racionales en los que, dado el desarrollo en serie de potencias de una función

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i x^i,$$

se aproxima por el cociente de dos polinomios

$$f(x) \approx \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} \equiv [L/M](x),$$

donde

$$P_L(x) = \sum_{i=1}^L p_i x^i \quad \text{y} \quad Q_M(x) = \sum_{i=1}^M q_i x^i.$$

Los coeficientes p_i y q_i se determinan de la condición de que los $N (= L + M)$ primeros términos tanto de la serie como del desarrollo de $[L/M](x)$, coincidan. En otras palabras, que sus primeras N derivadas coincidan en el punto en cuestión, es decir,

$$f(x) - \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} = O(x^{L+M+1}). \quad (\text{A.1})$$

Sin pérdida de generalidad hacemos

$$Q_M(0) = q_0 = 1.$$

Multiplicando ambos miembros de (A.1) por $Q_M(x)$, obtenemos

$$Q_M(x)f(x) = P_L(x) + O(x^{L+M+1}),$$

que escribiéndola en detalle nos queda como

$$\begin{aligned} a_0 &= p_0, \\ a_1 + a_0q_1 &= p_1, \\ a_2 + a_1q_1 + a_0q_2 &= p_2, \\ &\vdots \\ a_L + a_{L-1}q_1 + \cdots + a_0q_L &= p_L, \\ a_{L+1} + a_Lq_1 + \cdots + a_{L-M+1}q_M &= 0, \\ &\vdots \\ a_{L+M} + a_{L+M-1}q_1 + \cdots + a_Lq_M &= 0, \end{aligned} \tag{A.2}$$

donde definimos $a_N = 0$ si $N < 0$ y $q_j \equiv 0$ si $j > M$.

Ha de notarse que no es necesario conocer la serie completa para construir el Padé, sino solamente los primeros $L + M + 1$ términos; propiedad que magnifica su utilidad.

Obtener el aproximante de Padé a $f(x)$ se ha transformado en resolver el sistema de ecuaciones (A.2). Aunque durante el desarrollo anterior hemos considerado que las a_j son constantes, éstas pueden ser también funciones de x . Entonces el sistema de ecuaciones (A.2) puede ser resuelto punto a punto. Otra manera es resolver el sistema de ecuaciones analíticamente y dar las formas explícitas de las p_i y q_i , y por ende de los $[L/M](x)$. Esta manera de proceder no es muy recomendable si no se cuenta con un programa de computadora que realice el álgebra, ya que para $L + M > 3$ la labor aumenta enormemente. La tabla 14 contiene las expresiones analíticas para los Aproximantes de Padé hasta orden seis ($L + M = 5$), que fueron obtenidos con el programa de computadora "MACSYMA"^[40]. Para ejemplificar la bondad del método, incluimos la gráfica (Figura FG2) en la que, para la función

$$f(x) = \sqrt{\frac{1+x}{1+2x}},$$

se trazan las diferencias porcentuales entre los respectivos Padé de orden 4 y la función misma, $([4] - f(x))/f(x)$. Nótese que el Padé $[4/0](x)$ no es más que el desarrollo de Taylor de $f(x)$. Es inmediato que el Padé $[2/2](x)$ es el mejor aproximante, aventajando por mucho al simple desarrollo de Taylor.

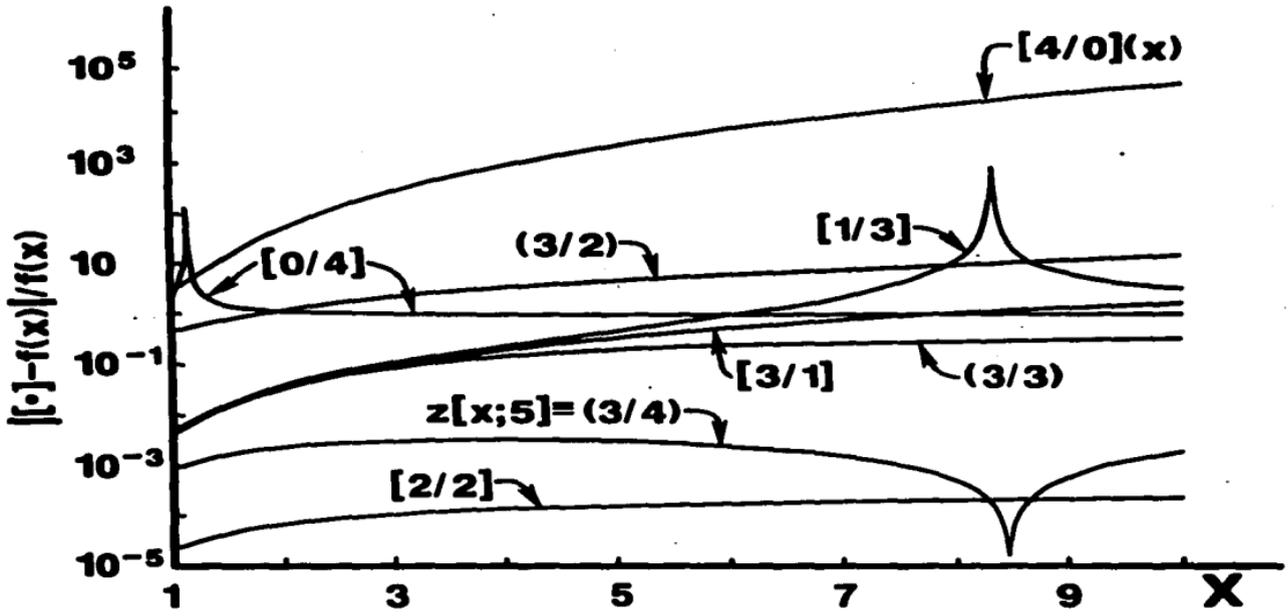


Figura FG3.- Diferencias porcentuales $([\cdot] - f(x))/f(x)$ entre los respectivos Padé de orden 4 $([\cdot])$ y la función $f(x) = \sqrt{(1+x)/(1+2x)}$.

Tabla 14.- Expresiones analíticas para los aproximantes de Padé hasta orden 5 ($L + M = 5$)

20100 First order Pades : PADE1.BAS
 20110 PADE01 = $1/(1-F1*X)$: RETURN
 20120 PADE10 = $1+F1*X$
 20130 RETURN
 20200 Second order Pades : PADE2.BAS
 20210 PADE02 = $1/(1-X*(F1+X*(F2-F1*F1)))$: RETURN
 20220 PADE11 = $(F1+(F1*F1-F2)*X)/(F1-F2*X)$: RETURN
 20230 PADE20 = $1+X*(F1+F2*X)$
 20240 RETURN
 20300 Third order Pades : PADE3.BAS
 20310 PADE03 = $1/(1-X*(F1+X*(F2-F1*F1+X*(F3+F1*F1*F1-2*F1*F2))))$: RETURN
 20320 PADE12 = $(F1*F1-F2+(F1*F1*F1-2*F1*F2+F3)*X)/(F1*F1-F2+X*(F3-F1*F2+X*(F2*F2-F1*F3)))$: RETURN
 20330 PADE21 = $(F2+X*(F1*F2-F3+X*(F2*F2-F1*F3)))/(F2-F3*X)$: RETURN
 20340 PADE30 = $1+X*(F1+X*(F2+X*F3))$
 20350 RETURN
 20400 Fourth order Pades : PADE4.BAS
 20410 PADE04 = $1/(1-X*(F1+X*(F2-F1*F1+X*(F1*F1*F1-2*F1*F2+F3+X*(F4-2*F1*F3-F2*F2+3*F1*F1*F2-F1*F1*F1))))$: RETURN
 20420 PADE13 = $(F3-2*F1*F2+F1*F1*F1+(F1*F1*F1*F1-3*F1*F1*F2+F2*F2+2*F1*F3-F4)*X)/(F3-2*F1*F2+F1*F1*F1+X*(F1*F3+F2*F2-F1*F1*F2-F4+X*(F1*F4-F2*F3-F1*F1*F3+F1*F2*F2+X*(F2*F4-F1*F1*F4-F1*F3-F2*F2+X*(F1*F1*F3+F2*F3-F1*F4-F1*F2*F2+X*(F2*F4-F1*F1*F4-F3*F3+2*F1*F2*F3-F2*F2*F2))))$: RETURN
 20430 PADE22 = $(F1*F3-F2*F2+X*(F1*F1*F3+F2*F3-F1*F4-F1*F2*F2+X*(F2*F4-F1*F1*F4-F3*F3+2*F1*F2*F3-F2*F2*F2)))/(F1*F3-F2*F2+X*(F2*F3-F1*F4+X*(F2*F4-F3*F3)))$: RETURN
 20440 PADE31 = $(F3+X*(F1*F3-F4+X*(F2*F3-F1*F4+X*(F3*F3-F2*F4))))/(F3-F4*X)$: RETURN
 20450 PADE40 = $1+X*(F1+X*(F2+X*(F3+X*F4)))$
 20460 RETURN

20500 Fifth order Pades : PADE5_BAS

20510 PADE05 = 1 / (1 - X * (F1 + X * (F2 - F1 * F1 + X * (F3 - 2 * F1 * F2 + F1^3 + X * (F4 - 2 * F1 * F3 + F2 * F2 + 3 * F1 * F1 * F2 - F1^4 + X * (F5 - 2 * F1 * F4 + (3 * F1 * F1 - 2 * F2) * F3 + 3 * F1 * F2 * F2 - 4 * F1^3 * F2 + F1^5)))))) : RETURN

20520 PADE14

20521 F12=F1*F1; F22=F2*F2; F32=F3*F3; F42=F4*F4; FO=F4-2*F1*F3-F22+3*F12*F2-F12*F12; PADE14= FO + X*(F2*F1*F12-2*F1*F22+(2*F2-F12)*F3+F1*F4-F5+ X*(F1*F5-(F2*F12)*F4+F1*F12*F3+F2*F22-F12*F22))

20522 PADE14=PADE14+ X^3*((F2-F12)*F5+(F1*F12-F3)*F4+2*F1*F32-(F22+2*F12*F2)*F3+F1*F2*F22 +X*((F3-2*F1*F2+F1*F12)*F5-F42+2*(F1*F3+F22-F12*F2)*F4-(F2*F2+F12)*F32+3*F1*F22*F3-F22*F22))

20523 PADE14=(FO -X*(F5-2*F1*F4+(3*F12-F2-F2)*F3+3*F1*F22-4*F1*F12*F2+F12*F12*F1))/PADE14 ; RETURN

20530 PADE23

20531 F12=F1*F1; F22=F2*F2; F32=F3*F3; F42=F4*F4; FO=(F12-F2)*F4+F32-2*F1*F2*F3+F22*F2; PADE23=FO +X*((F2-F12)*F5+(F1*F2-F3)*F4+F1*F32-F22*F3 +X*((F1*F2-F3)*F5+F42-(F1*F3+F22)*F4+F2*F32))

20532 PADE23=PADE23 + X^3*((F1*F3-F22)*F5-F1*F42+2*F2*F3*F4-F32*F3)

20533 PADE23=(FO -X*((F12-F2)*F5+(F3-F12*F1)*F4-2*F1*F32+(F22+2*F12*F2)*F3-F1*F2*2*F2+ X*((F3-2*F1*F2+F12*F1)*F5-F42+2*(F1*F3+F22-F12*F2)*F4-(F2*F2+F12)*F32+3*F1*F22*F3-F22*F22)))/PADE23 ; RETURN

20540 PADE32

20541 F12=F1*F1; F22=F2*F2; F32=F3*F3; F42=F4*F4; FO=F2*F4-F32; PADE32=FO +X*(F3*F4-F2*F5 +X*(F3*F5-F42))

20542 PADE32=(FO +X*(F4*(F3+F1*F2)-F2*F5-F1*F32 +X*((F3-F1*F2)*F5-F42+(F1*F3+F22)*F4-F2*F32 +X*((F1*F3-F22)*F5-F1*F42+2*F2*F3*F4-F32*F3))))/PADE32 ; RETURN

20550 PADE41

20551 PADE41=(F4 - X * (F5-F1*F4 + X * (F1*F5-F2*F4 + X * (F2*F5-F3*F4 + X * (F3*F5-F4*F4)))))/(F4 - F5*X) ; RETURN

20560 PADE50

20560 PADE50 = 1 + X * (F1 + X * (F2 + X * (F3 + X * (F4 + F5*X)))) ; RETURN