



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

EXPRESION ANALITICA PARA LA ENERGIA DE UN
FLUIDO DE ESFERAS DURAS BOSONICAS

268355

T E S I S

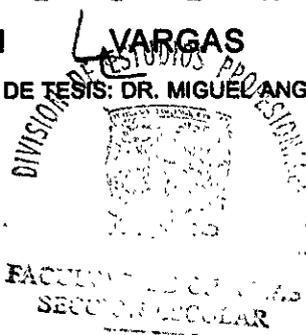
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A :

MARTIN VARGAS JIMENEZ

DIRECTOR DE TESIS: DR. MIGUEL ANGEL SOLIS ATALA.



1998

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "Expresión analítica para la energía de un fluido de esferas duras bosónicas".

realizado por Martín Vargas Jiménez

con número de cuenta 8149170-2, pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

DR. MIGUEL ANGEL SOLIS ATALA

Propietario

DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA

Propietario

DR. GERARDO JORGE VAZQUEZ FONSECA

Suplente

DR. MAURICIO FORTES BESPROSVANI

Suplente

DR. ONOFRE ROJO ASENJO

[Handwritten signatures: Miguel Ángel Solís Atala, Manuel de Llano de la Garza, Gerardo Jorge Vázquez Fonseca, Mauricio Fortes Besprosvani, Onofre Rojo Asenjo]

[Handwritten signature: P. A. Roberto Alejandro Ruelas Mayorga]

Consejo Departamental de Física

DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Lista de Figuras

Figura 1. Diagramas que nos permiten observar la forma ordenada como se construyen los aproximantes “tailing” cuando se lleva a cabo la segunda factorización (cola con 3 términos (44)). Las etiquetas sobre las flechas indican el aproximante al cual dan origen (ver Tabla 1).

Figura 2. Diagramas que nos permiten observar la forma ordenada como se construyen los aproximantes “tailing” cuando se lleva a cabo la tercera factorización (cola con 4 términos (38)). Las etiquetas sobre las flechas indican el aproximante al cual dan origen (ver Tabla 1).

Figura 3. Últimos 7 aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ de la Tabla 1, como función de $x = (\rho c^3)^{1/2}$. Los aproximantes B437(x), B438(x), B439(x) y B440(x), muestran los polos que los descalifican.

Figura 4. Aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ libres de polos, con empaquetamiento en la densidad de Bernal y que reproducen el residuo experimental.

Figura 5. Aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ óptimos B410(x) y B436(x), a la serie (38) con cuatro términos además del trivial. Se comparan con los aproximantes óptimos B201(x), B303(x), el aproximante ajustado B311(x), la ecuación de London y los datos GFMC. Se grafican como función de ρ/ρ_0 .

Figura 6. Ampliación de la Fig. 5 en el intervalo de densidades $10^{-6} \leq \rho/\rho_0 \leq 0.1$.

Figura 7. Energías $E/N(x)$ en unidades de \hbar^2/mc^2 , como función del parámetro adimensional $x = (\rho c^3)^{1/2}$, para cada uno de los aproximantes mostrados allí.

Figura 8. Presión P en unidades de \hbar^2/mc^5 , como función del parámetro adimensional $x = (\rho c^3)^{1/2}$, para cada uno de los aproximantes mostrados allí.

Figura 9. Velocidad del sonido v_s en unidades de \hbar/mc , como función del parámetro adimensional $x = (\rho c^3)^{1/2}$, para cada uno de los aproximantes mostrados allí.

Figura 10. Diferencia relativa de los aproximantes de Padé y “tailing” $[f(x)]$, respecto a la función e^x , cuando se toma en cuenta sólo cinco términos de su desarrollo de Taylor.

Figura 11. Aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}$ a la serie (38) con 3 términos además del trivial, que estuvieron libres de polos.

Lista de Tablas

Tabla 1. Cuarenta aproximantes “tailing” $\epsilon_0^{1/2}$ a la serie (38) con cuatro términos además del trivial. En las columnas 5 y 6, se tabulan los valores de los coeficientes K_3 y K_4 que hacen que los aproximantes satisfagan las propiedades físicas del sistema.

Tabla 2. $\epsilon_0^{-1/2}$, energías en unidades de \hbar^2/mc^2 y porcentaje de error relativo de las energías calculadas con los aproximantes $e_0^{-1/2}$ allí mostrados, respecto a los resultados GFMC.

Tabla 3. Resumen de los aproximantes óptimos con sus correspondientes parámetros. En la última columna se muestran los valores de la velocidad del sonido para el ${}^4\text{He}$, como un sistema de esfera duras, usando para su energía el correspondiente aproximante. $x_B = 1.10$, * ajustada, ** tiene un polo.

Tabla 4. Tabla de Padé formada todos los posibles aproximantes de Padé a una serie infinita de potencias.

Tabla 5. Aproximantes que se obtienen por el método de Padé y “tailing” cuando se aplican a los primeros 5 términos del desarrollo de la función e^x .

Tabla 6. Aproximantes “tailing” cuando se toman en cuenta sólo los dos primeros términos de la serie (38), además del trivial.

Tabla 7. Aproximantes “tailing” cuando se toman en cuenta sólo los tres primeros términos de la serie (38), además del trivial.

AGRADECIMIENTOS

Mi más sincero agradecimiento a mi asesor el Dr. Miguel Ángel Solís Atala pues siempre conté con su amistad, su dedicación, su paciencia y el buen juicio de sus comentarios.

Quiero agradecer los comentarios, correcciones y sugerencias que muy amablemente hicieron a este trabajo mis sinodales los Drs. Manuel de Llano de la Garza, Gerardo Jorge Vázquez Fonseca, Mauricio Fortes Besprosvani y Onofre Rojo Asenjo.

Agradezco el interés en mi trabajo de tesis mostrado por Dr. Marcelo del Castillo Musot y el apoyo incondicional de la Mat. María Guadalupe López Arrieta.

Al IFUNAM, las facilidades prestadas para la realización de esta tesis. En particular, al personal de cómputo quienes me auxiliaron en el manejo de la estación de trabajo ODIN y sus periféricos.

Agradezco las becas recibidas del Programa Fundación UNAM y del CONACyT a través del proyecto 3042PE.

RESUMEN

La energía por partícula en el estado base de un sistema infinito de esferas duras bosónicas a densidades entre cero y el máximo empaquetamiento posible, se modela con una expresión analítica que reproduce los primeros términos de la serie exacta a bajas densidades así como el comportamiento hacia infinito de la energía conforme el sistema se acerca a la densidad de empaquetamiento, que proponemos es la de Bernal, reproduciendo el valor experimental del *residuo*. Se parte de los primeros términos de la serie exacta para bajas densidades y utilizando métodos tipo Padé y su generalización "tailing", extrapolamos a todo el intervalo de densidades del sistema. Se consideraron cuatro términos, además del trivial, de la serie original. De los 40 aproximantes obtenidos 36 son diferentes y sólo dos satisficieron las propiedades físicas para ser una ecuación de estado del sistema de esferas duras. Una de estas dos ecuaciones de estado genera una energía sólo 21 % menor que los reportados por simulaciones de computadoras para cuatro densidades del orden de la densidad de saturación del Helio cuatro. De nuestras expresiones analíticas para la energía es inmediato obtener la presión y la velocidad del sonido, las cuales también reportamos .

Capítulo 1

Introducción

La importancia de estudiar el sistema ideal infinito de esferas duras está en el hecho de que este sistema sirve como una primera aproximación a un sistema de muchas partículas interaccionando vía un potencial de pares con una parte repulsiva de corto alcance. La aproximación es mejor a bajas densidades cuando las partículas experimentan la parte atractiva del potencial sólo débilmente, como también a muy altas densidades donde la parte repulsiva es predominante. A densidades intermedias, o densidades físicas, la parte atractiva del potencial juega un papel esencial en la descripción del comportamiento de un sistema real. No obstante, el sistema de esferas duras persiste como sistema de referencia (a orden cero) en las teorías perturbativas que intentan describir el sistema con la interacción completa.

Para describir un sistema de N esferas duras bosónicas de diámetro c y masa m debemos resolver la ecuación de Schrödinger de N -cuerpos con el Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i<j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (1)$$

donde

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < c \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (2)$$

∇_i^2 es el Laplaciano tridimensional y \mathbf{r}_i es el vector posición de la partícula i -ésima.

Los esfuerzos más importantes para obtener la energía del estado base de este sistema

se realizaron a fines de la decada de los cincuentas. K. Huang, T. D. Lee y C.N. Yang [1, 2] utilizando el método del pseudopotencial, calculando sólo los dos primeros términos de la serie infinita exacta para la energía del sistema, lo cual restringió su validez a muy bajas densidades.

En 1959 T. T. Wu [3], utilizando métodos de la teoría de campo cuántico, calculó un término más de la serie exacta de la energía por partícula en el estado base de un sistema infinito de N-bosones. Los primeros cuatro términos, además del trivial, de la serie infinita son

$$E/N = \frac{2\pi\hbar^2\rho a}{m} \left\{ 1 + C_1(\rho a^3)^{1/2} + C_2\rho a^3 \ln(\rho a^3) + C_3\rho a^3 + C_4(\rho a^3)^{3/2} \ln(\rho a^3) + \dots \right\}, \quad (3)$$

donde a es la longitud de dispersión de onda-S del potencial de interacción de pares de partículas, $C_1 = \frac{128}{15\sqrt{\pi}}$, $C_2 = 8(\frac{4\pi}{3} - \sqrt{3})$ y los coeficientes C_3 y C_4 son desconocidos. Para un sistema de esferas duras a se reduce al diámetro c de las esferas, con ρ la densidad de número de partículas y m la masa de cada bosón. Desafortunadamente los primeros dos términos de esta serie, *no* de potencias, no son suficientes para describir sistemas reales tales como ${}^4\text{He}$ o Hidrógeno atómico polarizado $\text{H}\downarrow$, etc., cuyas densidades superan sobradamente las densidades para las que (3) es válida.

Avances en el sentido de describir sistemas físicos a densidades reales se dieron hasta los años setentas, en que con el apoyo de la computadora se llevó a cabo una solución numérica de la ecuación de Schrödinger. Entre otros, el cálculo más exacto fue realizado por Kalos, Levesque y Verlet [4], utilizando el método conocido como *Green Function Monte Carlo* (GFMC), mediante el cual la Ec. diferencial de Schrödinger (1) se transforma en una ecuación integral a través del uso de las funciones de Green, y la integración se lleva a cabo con el método de Monte Carlo. Esto permite conocer la energía por partícula a

densidades intermedias, desafortunadamente sólo se dispone de cuatro puntos en la rama fluida y cinco puntos en la rama cristalina.

Un primer intento de dar una expresión analítica para la energía del estado base del sistema de esferas duras en todo el intervalo de densidades físicas, fue realizado en 1954 por London [5], sin embargo la expresión propuesta por él, no es muy buena a bajas densidades, pues sólo reproduce el primer término de la serie (3).

En este trabajo nos proponemos dar una expresión analítica para la energía del estado base del sistema de esferas duras bosónicas para densidades que van desde cero hasta la densidad de empaquetamiento, de tal manera que la expresión propuesta, reproduzca cuatro términos de la serie (3) en el límite de bajas densidades. Para ello desarrollamos un método de aceleración de la convergencia más general que el de los aproximantes de Padé: método "tailing", que nos permite extrapolar (3) a densidades intermedias e incluir el comportamiento esperado del sistema cerca del empaquetamiento. Dos intentos [6, 7] anteriores han mostrado la bondad del método así como la necesidad de mejorarlo. En éstos se obtienen los aproximantes de Padé a la serie (3) sólo tomando tres términos, el coeficiente desconocido del tercer término, se ajustó numéricamente a los puntos que se tienen vía simulación por computadora. En el primer trabajo [6] se cometió el error de tomar sólo la mitad de los valores de la energía calculada vía simulación por computadora.

En nuestro trabajo, al igual que en trabajos antes mencionados [5, 6, 7], proponemos una expresión analítica para la energía de un sistema de N bosones en el estado base para todo el rango de densidades físicas, pero con la novedad de que no hacemos un ajuste numérico, sino que la expresión propuesta para la energía, se obtiene requiriendo del sistema que satisfaga un mínimo de propiedades físicas. Para lograr nuestro objetivo, el trabajo se divide en seis capítulos.

El capítulo 2 es de revisión y referencia, donde se describe un sistema ideal de N bosones. A partir de su gran función de partición se obtienen las funciones termodinámicas que describen al sistema en su fases normal y condensada. En el capítulo 3 se describe el gas de Bose como un gas imperfecto, en el cual el potencial de interacción entre ellos es de tipo esferas duras mutuamente impenetrables. Además se introducen las expresiones para la energía exacta a muy bajas densidades. Al final se analiza la expresión de London (modificada) en los límites de bajas densidades y empaquetamiento compacto. En el capítulo 4 describimos el método de aceleración de convergencia utilizado y, las hipótesis físicas que nos permiten determinar los coeficientes desconocidos C_3 y C_4 , además de optimizar la expresión analítica para la energía por partícula del sistema de esferas duras bosónicas. En el capítulo 5 se analizan los distintos aproximantes generados por el método "tailing", descartando aquellos que no reproducen las propiedades físicas del sistema, dando por resultado que sólo dos aproximantes cumplen las hipótesis físicas propuestas. Inmediatamente calculamos la presión y la velocidad del sonido del sistema derivando una y dos veces las expresiones analíticas para la energía. En el capítulo 6 se resumen nuestras conclusiones.

Capítulo 2

Gas Ideal de Bosones

En este capítulo se describe un sistema ideal de N bosones. A partir de su gran función de partición se obtienen las funciones termodinámicas que describen al sistema en sus fases *normal* y *condensada*. Este capítulo sirve como base y referencia para capítulos posteriores donde se considerará un gas de bosones no ideal.

2.1 Definición del sistema

Sea un sistema de N bosones idénticos, sin interacción entre ellos, confinados en un cubo de volumen V , en el así llamado límite termodinámico, esto es, $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, pero con una densidad de partículas $\rho = N/V$ fija.

Como no existe interacción entre los bosones, el Hamiltoniano H del sistema de bosones se puede escribir como una suma de Hamiltonianos H_i de un solo bosón. La energía E del sistema será la suma de las energías ε_i de cada bosón, y la función de onda $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$, con r_i las coordenadas de i -ésimo bosón, el producto de las funciones de onda $\psi(r_i)$ de las partículas individuales. Es decir, el gas ideal de bosones debe de satisfacer la ecuación de Schrödinger

$$H\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = E\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (4)$$

donde

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad \text{con} \quad H_i \psi(r_i) = \varepsilon_i \psi(r_i). \quad (5)$$

Dado que las partículas del sistema son bosones indistinguibles, el operador Hamiltoniano asociado al sistema es invariante ante un intercambio de todas las coordenadas de

algún par de partículas, y la función de onda del sistema es simétrica ante el intercambio de coordenadas. Los valores propios de la energía asociada a un bosón confinado en una caja cúbica de volumen V es [8]

$$\varepsilon_i \equiv \varepsilon_k \equiv \varepsilon_{r_x, r_y, r_z} = \frac{\hbar^2(r_x^2 + r_y^2 + r_z^2)}{8mV^{2/3}} \quad r_x, r_y, r_z = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

La energía del sistema de N bosones, con n_k bosones en el nivel de energía k -ésimo, está dada por

$$E(N, V) = \sum_k n_k \varepsilon_k \quad (7)$$

$$\text{donde } N = \sum_k n_k \quad (8)$$

2.2 Propiedades Termodinámicas

La conexión entre el mundo microscópico y macroscópico se establece a través de la mecánica estadística. De acuerdo con la mecánica estadística, todas las funciones termodinámicas, se obtienen a partir de la función de partición $Q(N, V, T) = \sum_E e^{-\beta E}$. Los cálculos matemáticos se simplifican si se trabaja con la gran función de partición $\Xi(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q(N, V, T)$, donde z es la fugacidad que está relacionada con el potencial químico μ por $z = e^{\beta\mu}$ y $\beta = 1/k_B T$. Entonces, las funciones termodinámicas están dadas por [8]:

$$\Xi(z, V, T) = \prod_k (1 - z e^{-\beta \varepsilon_k})^{-1} \quad (9)$$

$$\frac{PV}{k_B T} = \ln \Xi = - \sum_k \ln (1 - z e^{-\beta \varepsilon_k}) \quad (10)$$

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi = \sum_k \frac{z e^{-\beta \varepsilon_k}}{1 - z e^{-\beta \varepsilon_k}} \quad (11)$$

$$E = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi = \sum_k \frac{z \varepsilon_k e^{-\beta \varepsilon_k}}{1 - z e^{-\beta \varepsilon_k}} \quad \text{energía interna} \quad (12)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \quad \text{capacidad calorífica} \quad (13)$$

$$F = -k_B T \ln \Xi + N k_B T \ln z \quad \text{energía libre} \quad (14)$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} \quad \text{entropía} \quad (15)$$

En el *límite termodinámico*, como $V \rightarrow \infty$, el espectro de partícula simple es casi un continuo, por lo que es posible remplazar la suma del lado derecho de las ecuaciones (10) y (11) por una integral

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \omega(k) dk = \int g(\varepsilon) d\varepsilon,$$

donde $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados o número de estados con energías entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$, que está dada por $g(\varepsilon) = \left(\frac{2\pi V}{h^3} \right) (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2}$ [8]. Sustituyendo las sumas por integrales y multiplicando cada ecuación por la densidad de estados, las ecuaciones (10) y (11) se transforman en [9]

$$\begin{aligned} \frac{P}{k_B T} &= -2\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon - \frac{\ln(1-z)}{V} \\ &= \frac{g_{5/2}(z)}{\lambda^3} - \frac{\ln(1-z)}{V}, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \rho \equiv \frac{N}{V} &= 2\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{z\varepsilon^{1/2} e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}} + \frac{z}{V(1-z)} \\ &= \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3} + \frac{z}{V(1-z)}, \end{aligned} \quad (17)$$

donde λ es la longitud de onda térmica

$$\lambda = \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}},$$

y $g_\nu(z)$ son funciones de Bose las cuales están definidas por

$$g_\nu(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1} dx}{z^{-1} e^x - 1} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^\nu}.$$

El segundo término a la derecha de las Ecs. (16) y (17) son las contribuciones a la presión y densidad respectivamente, de las partículas que se encuentran en el estado base del sistema ($\epsilon_0 \equiv 0$)¹.

De las ecuaciones (8) y (11), se observa que el número de partículas en el estado base es $n_0 = z(1-z)^{-1}$, este número de partículas se incrementa cuando $z \rightarrow 1$; la acumulación de partículas en el estado base, da origen al fenómeno de la condensación de Bose Einstein. También, es posible mostrar que para todo valor de $0 \leq z \leq 1$, el término $V^{-1} \ln(1-z)$ de la ecuación (16) es completamente despreciable [9]. Entonces, de lo anterior se desprende que las ecuaciones (16) y (17) pueden escribirse así

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{g_{5/2}(z)}{\lambda^3}, \quad (18)$$

$$\frac{\lambda^3 n_0}{V} = \rho \lambda^3 - g_{3/2}(z). \quad (19)$$

La magnitud de z puede ser considerada como una medida del grado de comportamiento cuántico del sistema, esto es, cuando $z \rightarrow 0$ corresponde a una situación cerca del límite clásico, y cuando $z \rightarrow 1$ los efectos cuánticos juegan un papel muy importante [8]. De la definición de $g_{3/2}(z)$, se observa que la función es acotada, positiva, continua y monótonamente creciente, para todo valor de $0 \leq z \leq 1$. Entonces, $g_{3/2}(z)$ tiene su valor máximo en $z = 1$, el cual está dado por

$$g_{3/2}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{3/2}} = 2.612 \dots = \zeta(3/2). \quad (20)$$

De las ecuaciones (19) y (20) se desprende que la condición para que un número apreciable de bosones se junten en el nivel de energía $\epsilon_0 = 0$ ($n_0/V > 0$) es

$$\lambda^3 \rho > g_{3/2}(1). \quad (21)$$

¹La energía del estado base según (6) es $\epsilon_0 = \frac{3\hbar^2}{8\pi V^{1/3}}$, pero físicamente los resultados deben ser independientes de donde se fije el cero de energía del sistema, por lo que se define $\epsilon_0 \equiv 0$.

La condición (21) divide el espacio termodinámico en dos regiones, las cuales están separadas por la superficie

$$\lambda^3 \rho = g_{3/2}(1) \quad (22)$$

- La región “normal”, aquí los bosones están distribuidos suavemente entre los estados cuánticos accesibles al sistema ($\lambda^3 \rho < g_{3/2}(1)$).
- La región “condensada”, una fracción apreciable de bosones ocupan el estado base ($\varepsilon = 0$), y el resto se distribuye suavemente sobre los estados accesibles al sistema ($\lambda^3 \rho > g_{3/2}(1)$).

De las dos ecuaciones anteriores se deduce que para una densidad (temperatura) dada existe una temperatura (densidad) crítica a partir de la cual el estado base del sistema comienza a ser fuertemente poblado. Sea ρ_c y T_c la densidad y temperatura crítica respectivamente, dadas por

$$\rho_c = \frac{g_{3/2}(1)}{\lambda^3} \quad (23)$$

o

$$T_c = \frac{\hbar^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{\rho}{g_{3/2}(1)} \right)^{2/3} \quad (24)$$

En términos de T_c y ρ_c , la región condensada es la región donde se cumple $T < T_c$ o $\rho > \rho_c$.

Para hallar la fugacidad z , se debe despejar ésta de la ecuación (19) y sustituirla en la ecuación (18). Esto no se puede hacer en forma analítica, la solución mediante un método gráfico está dada por [8]

$$z = \begin{cases} 1 & \text{si } T < T_c \\ \text{solución de } g_{3/2}(z) = \lambda^3 \rho & \text{si } T > T_c. \end{cases} \quad (25)$$

La fracción n_0/N de bosones en el estado base puede obtenerse de la ecuación anterior y de la ecuación (19), la cual resulta ser

$$\frac{n_0}{N} = \begin{cases} 1 - (T/T_c)^{3/2} & \text{si } T < T_c \\ 0 & \text{si } T > T_c, \end{cases} \quad (26)$$

en términos de la densidad resulta ser

$$\frac{n_0}{N} = \begin{cases} 1 - \rho_0/\rho & \text{si } \rho > \rho_0 \\ 0 & \text{si } \rho < \rho_0, \end{cases}$$

con $\rho_0 \equiv n_0/V$.

La ecuación anterior muestra que en la región “normal”, la probabilidad de encontrar un bosón en el estado base es prácticamente cero. En la región “condensada”, existe una fracción finita de bosones en el estado base, y a temperatura $T = 0$ todos los bosones ocupan el nivel base de energía ($\epsilon_0 = 0$). Esta condensación de los bosones en su estado base es conocida como *condensación de Bose Einstein*. La condensación ocurre debido a una “interacción efectiva”, a través del requerimiento de la simetría de la función de onda de N cuerpos del sistema.

De las ecuaciones (12), (13), (14), (15), (18) y del valor de z en cada región del espacio termodinámico, se deducen las funciones termodinámicas del sistema. Aquí las reproducimos, y para cada función termodinámica la ecuación superior se refiere a la región para $T > T_c$ y la ecuación inferior se refiere a la región para $T < T_c$ [1]

$$\frac{P}{kT} = \begin{cases} g_{5/2}(z) \\ g_{5/2}(1) \end{cases} \quad \frac{E}{N} = \begin{cases} 3k_B T g_{5/2}(z)/2\lambda^3 \rho \\ 3k_B T g_{5/2}(1)/2\lambda^3 \rho \end{cases} \quad (27)$$

$$(28)$$

$$\frac{F}{Nk_B T} = \begin{cases} g_{5/2}(z)/\lambda^3 \rho - \ln z \\ g_{5/2}(1)/\lambda^3 \rho \end{cases} \quad \frac{S}{Nk_B} = \begin{cases} 5g_{5/2}(z)/\lambda^3 \rho - \ln z \\ 5g_{5/2}(1)/\lambda^3 \rho \end{cases} \quad (29)$$

(30)

$$\frac{C_v}{Nk_B} = \begin{cases} 15g_{5/2}(z)/\lambda^3 \rho - 9g_{5/2}(z)/4g_{1/2}(z) \\ 15g_{5/2}(1)/4\lambda^3 \rho \end{cases} \quad (31)$$

Capítulo 3

Fluido de esferas bosónicas

En un gas real de bosones las partículas interactúan entre ellas. El potencial de interacción es del tipo Lennard-Jonnes con una parte fuertemente repulsiva de corto alcance más una parte atractiva que se hace notoria dependiendo de la densidad del sistema. Como una primera aproximación, describimos al gas real de bosones como un gas imperfecto en el cual el potencial de interacción entre los bosones es de tipo *esferas duras* mutuamente impenetrables. Además, se recuerda la forma analítica de la energía del estado base ($T = 0$) de un sistema de bosones para densidades de partículas muy bajas *expresión de Wu* y la expresión analítica en el caso de densidades de empaquetamiento compacto *expresión de London*.

3.1 Modelos de esferas duras bosónicas

Un primer modelo para encontrar la energía por partícula en el estado base de un sistema de N bosones contenidos en un recipiente de volumen V , es considerar a este sistema como un gas ideal el cual fue analizado en el capítulo anterior.

Como un segundo modelo para un sistema físico real, consideramos un gas imperfecto de bosones el cual está definido como un sistema de N bosones contenidos en una caja de volumen V , con $N \rightarrow \infty$ y $V \rightarrow \infty$ pero manteniendo la densidad constante $\rho = N/V$. Las partículas interactúan a través de un potencial de corto alcance de tal manera que no existe estado ligado de dos partículas. El hecho de que el gas sea diluido ($\rho \rightarrow 0$) hace posible tratar el potencial de interacción entre las partículas como una pequeña perturbación del gas ideal. Por lo tanto, un modelo de gas imperfecto es la primera

mejoría a un modelo de gas ideal para describir a un sistema físico real.

Es conocido que para muchas sustancias sus fases líquida y cristalina o amorfa, tienen características en común, por ejemplo: (a) el volumen de la fase líquida es muy parecido a ese de la fase cristalina o amorfa; (b) los líquidos son tan incompresibles como los sólidos. Estas propiedades sugieren que las fuerzas repulsivas entre los átomos tienen un papel muy importante en la fase líquida. Entonces, el modelo más sencillo de estructura atómica que se puede imaginar, es el de un conjunto de esfera duras mutuamente impenetrables y sin otra interacción.

Sabemos que a muy bajas energías ($T \rightarrow 0$) la teoría cuántica de la dispersión [10] afirma que la desviación que experimenta una partícula no depende de la forma del potencial de interacción, sino sólo de un parámetro llamado la longitud de dispersión a . El cálculo de la sección transversal total de dispersión a bajas energías resulta ser $4\pi a^2$. Por lo anterior, podemos decir que a bajas energías el potencial de interacción se comporta como si fuera producido por esferas duras.

Los argumentos anteriores sugieren que un modelo aceptable de interacción entre bosones es el potencial de esfera dura, el cual está dado por

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r \leq c \\ 0 & \text{si } r > c \end{cases} \quad (32)$$

donde c es el diámetro de las esferas, es decir, la distancia mínima a la cual pueden acercarse dos bosones.

3.2 Ecuación de London

London [5] fue el primero en proponer una expresión analítica para la energía por partícula del estado base ($T = 0$) de un sistema de esferas bosónicas en función de la densidad de partículas ρ . Recientemente se modificó [11] la ecuación de London para

incluir el comportamiento experimental de las esferas duras en el régimen densidades cercanas al máximo empaquetamiento compacto. La energía por partícula es:

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2 c}{m} \frac{1}{(\rho^{-1/3} - \rho_0^{-1/3})^2} \frac{1}{(\rho^{-1/3} + b\rho_0^{-1/3})}, \quad (33)$$

donde $b \equiv 2^{5/2}/\pi - 1$ para la ecuación de London, y para la ecuación modificada de London $b \equiv 2^{3/2}/\pi - 1$. Con m y c respectivamente la masa y el diámetro de la esfera dura, $\rho_0 = \sqrt{2}/c^3$ es la máxima densidad de empaquetamiento de esferas en un arreglo cúbico centrado en las caras (fcc) o hexagonal (hcp). La densidad varía en el intervalo $0 \leq \rho \leq \rho_0$. La ecuación de London es tal que se reduce a las expresiones esperadas en los siguientes dos límites

$$\frac{E}{N} \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{2\pi\hbar^2 \rho c}{m} \quad (\text{densidades bajas}) \quad (34)$$

$$\frac{E}{N} \xrightarrow{\rho \rightarrow \rho_0} \frac{A\hbar^2}{2m} (\rho^{-1/3} - \rho_0^{-1/3})^{-2} \quad (\text{densidades altas}) \quad (35)$$

donde la cantidad adimensional $A = \pi^2 2^{2/3}$ se conoce como el *residuo*.

La ecuación (34) expresa que en el límite de bajas densidades, una partícula que viaja a través del sistema experimenta un cambio de energía como si éste fuese producido por un potencial constante de determinada profundidad. Este resultado se puede justificar debido a que en la aproximación "independiente de la forma" (bajas energías), es posible remplazar el potencial de esfera dura, por un potencial de pozo cuadrado de largo alcance pero de poca profundidad, siempre que la longitud de dispersión a no cambie.

La ecuación (35) dice que para altas densidades, el sistema de esferas duras se aproxima a una densidad de empaquetamiento compacto. En este límite de empaquetamiento, las esferas están cada vez más localizadas por lo que, de acuerdo con el principio de incertidumbre, la energía diverge y lo hace en la forma que indica la ecuación (35).

3.3 Energía a bajas densidades

Para muy bajas densidades, la forma analítica exacta de la energía por partícula en el estado base de un sistema infinito de esferas duras bosónicas es una serie infinita [3] de la cual se conocen sólo los siguientes primeros términos

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho a e_0(x) \quad ; \quad x \equiv \sqrt{\rho a^3}, \quad (36)$$

con

$$e_0(x) = 1 + C_1 x + C_2 x^2 \ln x^2 + C_3 x^2 + C_4 x^3 \ln x^2 + \dots,$$

donde m es la masa del bosón, a es la longitud de dispersión de onda S del potencial de interacción, que para el caso de un sistema de esferas duras, a se reduce a el diámetro de las esferas duras c , con $C_1 = 128/15\sqrt{\pi} \simeq 4.1844$, $C_2 = 8(4\pi/3 - \sqrt{3}) \simeq 19.6539$ y los coeficientes C_3 y C_4 no son conocidos.

Es de notar que mientras los coeficientes C_1 y C_2 son independientes de la forma del potencial de interacción, los coeficientes de los términos de orden superior dependen de la ley específica de fuerzas. Esto es, no importa que interacción da origen a la longitud de dispersión a , los coeficientes C_1 y C_2 no cambian, mientras que el resto de los coeficientes dependen de la forma de la interacción [12].

Capítulo 4

Expresión analítica para la energía

La expresión para la energía por partícula en el estado base de un sistema de muchos bosones con densidades muy pequeñas, está dada en términos de una serie no de potencias de la densidad, de la cual se conoce exactamente sólo los primeros tres términos, de los restantes sólo se conoce su forma y sus coeficientes son desconocidos. Con el objeto de extender el intervalo de densidades de aplicabilidad de la expresión para la energía, en este capítulo introducimos un método de aceleración de convergencia, inspirado en, y más general que, el método de Padé conocido como método de acolamiento o “tailing”. Iniciamos con la serie original con 5 términos y mediante el método “tailing” generamos 40 aproximantes que mostramos en la Tabla 1, de los cuales sólo 36 de ellos son diferentes. La virtud de estos aproximantes es que reproducen los primeros cinco términos de la serie

Aquí también, enumeramos y discutimos las propiedades físicas que debe de satisfacer el sistema en cuestión y que nos permiten determinar el aproximante óptimo para la energía.

4.1 Extrapolaciones “Tailing” a densidades físicas

La energía por partícula en el estado base de un sistema de bosones bajo el modelo de esferas duras, en el así llamado “límite termodinámico”, dentro de la región de densidades muy bajas está dado por (Cap. 3)

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \rho c e_0(x) \quad \text{con} \quad \rho = \frac{N}{V}, \quad x \equiv \sqrt{\rho c^3}$$

y

$$e_0(x) = 1 + C_1x + C_2x^2 \ln x^2 + C_3x^2 + C_4x^3 \ln x^2 + \dots \quad \text{para } x \ll 1 \quad (37)$$

donde N es el número de partículas contenidas en el volumen V , m y c son respectivamente la masa y el diámetro de la esfera dura, $C_1 = 128/(15\sqrt{\pi})$ y $C_2 = 8(4\pi/3 - \sqrt{3})$ son constantes que no dependen de la forma del potencial de interacción entre las partículas pero no así las constantes C_3 y C_4 , que son desconocidas.

Como la ecuación anterior es correcta sólo para densidades muy pequeñas, nuestro propósito aquí es extender el intervalo de aplicación de esta ecuación a todo el rango de densidades físicas. Consideramos que la energía tiene un polo de segundo orden cuando la densidad se aproxima a la densidad de empaquetamiento compacto sea este regular o irregular. Entonces, si la ecuación (37) debe ser válida en todo el intervalo de densidades físicas, ésta debe tener un polo de segundo orden cuando la densidad sea la de empaquetamiento compacto. Pensando en visualizar y manipular este comportamiento de la energía hacia infinito, en lugar de (37) se analizará su raíz cuadrada inversa².

$$\begin{aligned} e_0^{-1/2}(x) &= \left(1 + C_1x + C_2x^2 \ln x^2 + C_3x^2 + C_4x^3 \ln x^2 + \dots\right)^{-1/2} \\ &\approx 1 - \frac{1}{2}C_1x - \frac{1}{2}C_2x^2 \ln x^2 - \frac{1}{2}\left(C_3 - \frac{3}{4}C_1^2\right)x^2 - \frac{1}{2}\left(C_4 - \frac{3}{2}C_1C_2\right)x^3 \ln x^2 \\ &\approx 1 + K_1x + K_2x^2 \ln x^2 + K_3x^2 + K_4x^3 \ln x^2 + \dots \end{aligned} \quad (38)$$

donde

$$K_1 \equiv -\frac{1}{2}C_1, \quad K_2 \equiv -\frac{1}{2}C_2, \quad K_3 \equiv -\frac{1}{2}\left(C_3 - \frac{3}{4}C_1^2\right) \quad \text{y} \quad K_4 \equiv -\frac{1}{2}\left(C_4 - \frac{3}{2}C_1C_2\right). \quad (39)$$

²la expansión binomial $(1+x)^n = 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 + \dots$

Con el objeto de extender el intervalo de validez se aplicará ahora el método “tailing” a la Ec. (38). Éste está inspirado en, pero es más general que, el método de Padé (ver Apéndice A). El método “tailing” aplicado a $e_0^{-1/2}(x)$ produce aproximantes $e_0^{-1/2}(x)$, los cuales están definidos por la estructura

$$e_0^{-1/2} \equiv P(x) + \frac{N(x)}{D(x)} \approx e_0^{-1/2} \quad \text{con } x \ll 1. \quad (40)$$

El método “tailing” inicia escribiendo los últimos términos de la “cola” de la serie (38) que puedan expresarse como un cociente de dos funciones $N(x)$ y $D(x)$, de tal manera que la expansión alrededor de $x = 0$ de el cociente $N(x)/D(x)$ reproduce todos los términos de la “cola” de la serie. La función $P(x)$ en (40) está formada por los primeros términos de la serie, es decir, la porción a la izquierda de la “cola”. El primer paso del método, consiste en factorizar la serie (38) de la siguiente manera

$$e_0^{-1/2}(x) = 1 + K_1x + K_2x^2 \ln x^2 + K_3x^2 \left[1 + \frac{K_4}{K_3}x \ln x^2 + \dots \right]. \quad (41)$$

Ahora se aplica el método de aproximantes de Padé a la “cola” de la serie (41), es decir, a la expresión entre paréntesis cuadrados, lo que resulta

$$\begin{aligned} \left[1 + \frac{K_4}{K_3}x \ln x^2 + \dots \right] &\hat{=} \left[1 + \frac{K_4}{K_3}x \ln x^2 \right] \quad (\text{trivial}) \\ &\hat{=} \left[\frac{1}{1 - \frac{K_4}{K_3}x \ln x^2} \right] \end{aligned}$$

donde $\hat{=}$ significa “aproximado por”.

Sustituyendo la ecuación anterior no trivial en (41), da por resultado el primer aproximante a $e_0^{-1/2}(x)$, y éste es etiquetado con B401(x) (ver Tabla 1)

$$e_0^{-1/2} = 1 + K_1x + K_2x^2 \ln x^2 + \frac{K_3x^2}{1 - \frac{K_4}{K_3}x \ln x^2} \equiv \text{B401}(x), \quad (42)$$

el cual es de la forma de la ecuación (40) con:

$$\begin{aligned} P(x) &= 1 + K_1x + K_2x^2 \ln x^2, \\ N(x) &= K_3x^2, \\ D(x) &= 1 - \frac{K_4}{K_3}x \ln x^2, \end{aligned}$$

donde los coeficientes $P(x)$, $N(x)$ y $D(x)$ son tales que para $x \ll 1$ la expansión binomial de $1/D(x)$ reproduce a $e_0^{-1/2}(x)$ hasta el orden deseado ($x^3 \ln x^2$).

El siguiente paso en el método "tailing" consiste en factorizar el término K_1x de la ecuación (38) en la siguiente forma,

$$e_0^{-1/2} = 1 + K_1x \left[1 + \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2 + \frac{K_3}{K_1}x + \frac{K_4}{K_1}x^2 \ln x^2 + \dots \right]. \quad (43)$$

Ahora buscamos los aproximantes de Padé de la "cola" de la serie, es decir, de la expresión entre corchetes de la ecuación anterior, esto implica que la "cola" debe ser de la forma $N(x)/D(x)$, esto es

$$1 + \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2 + \frac{K_3}{K_1}x + \frac{K_4}{K_1}x^2 \ln x^2 + \dots \approx \frac{N(x)}{D(x)} \equiv \frac{1 + N_1(x)}{1 - D_1(x)}, \quad (44)$$

donde la expansión binomial de $N(x)/D(x) \equiv (1 + N_1(x))/(1 - D_1(x))$ para $x \ll 1$ debe reproducir la parte izquierda de la ecuación (44).

Para encontrar la forma explícita de de las funciones $N_1(x)$ y $D_1(x)$, se propone que sean funciones de $x \ln x$, x y $x^2 \ln x^2$ con coeficientes a determinar³.

³La parte izquierda de la ecuación (44) tiene 4 términos con 3 coeficientes a determinar. Dado que, la forma de la parte derecha de la (44) determina el primer coeficiente. Esto es, para $x \ll 1$

$$\frac{1 + N_1(x)}{1 - D_1(x)} \approx (1 + N_1(x))(1 + D_1(x) + D_1^2(x) + \dots) \approx 1 + N_1(x) + D_1(x) + N_1(x)D_1(x) + \dots$$

entonces, debido a la forma de la parte derecha de (44) el número 1 aparece a ambos lados de esta

Con la condición de que la suma del número total de términos de $N_1(x)$ y $D_2(x)$ sea 3, pues 3 son los coeficientes a la izquierda de la ecuación (44), de esta forma, el sistema de ecuaciones que resulta queda bien determinado.

La primera ecuación que se ocurre probar es

$$N_1(x) = 0$$

$$D_1(x) = a_1x + a_2x \ln x^2 + a_3x^2 \ln x^2$$

donde a_1, a_2, a_3 son coeficientes constantes por determinar. Sustituyendo el par de ecuaciones anteriores en la ecuación (44) resulta

$$1 + \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2 + \frac{K_3}{K_1}x + \frac{K_4}{K_1}x^2 \ln x^2 + \dots \triangleq \frac{1+0}{1 - a_1x - a_2x \ln x^2 - a_3x^2 \ln x^2}. \quad (45)$$

Desarrollando (45) para $x \ll 1$, se obtiene

$$\approx 1 + a_1x + a_2x \ln x^2 + a_3x^2 \ln x^2 + a_1^2x^2 + 2a_1a_2x^2 \ln x^2 + \dots$$

$$\approx 1 + a_2x \ln x^2 + a_1x + (a_3 + 2a_1a_2)x^2 \ln x^2 + \dots,$$

de donde igualando coeficientes, se obtiene un sistema de 3 ecuaciones simultáneas que dan por resultado

$$a_2 = \frac{K_2}{K_1} \quad a_1 = \frac{K_3}{K_1} \quad a_3 = \frac{K_4}{K_1} - \frac{2K_2K_3}{K_1^2}. \quad (46)$$

Por lo tanto, un aproximante de Padé a la "cola" de la serie (43) es (ver ecuaciones 45 y 46)

$$1 + \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2 + \frac{K_3}{K_1}x + \frac{K_4}{K_1}x^2 \ln x^2 + \dots \triangleq \frac{1}{1 - \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2 - \frac{K_3}{K_1}x - \left(\frac{K_4}{K_1} - \frac{2K_2K_3}{K_1^2}\right)x^2 \ln x^2} \quad (47)$$

ecuación. Por lo tanto, sólo 3 coeficientes son independientes. También observamos que la expansión binomial anterior aparece el término $N_1(x) + D_1(x)$ y esto permite proponer que $N_1(x)$ y $D_1(x)$, sean combinaciones lineales de x , $x \ln x^2$ y $x^2 \ln x^2$, dado que la expansión binomial de la parte derecha debe reproducir la parte izquierda de (44).

Sustituyendo este aproximante de Padé en la ecuación (43), da como resultado el segundo aproximante del método "tailing",

$$\epsilon_0^{-1/2}(x) = 1 + \frac{K_1 x}{1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \frac{K_3}{K_1} x - \left(\frac{K_4}{K_1} - \frac{2K_2 K_3}{K_1^2} \right) x^2 \ln x^2} \equiv B402(x), \quad (48)$$

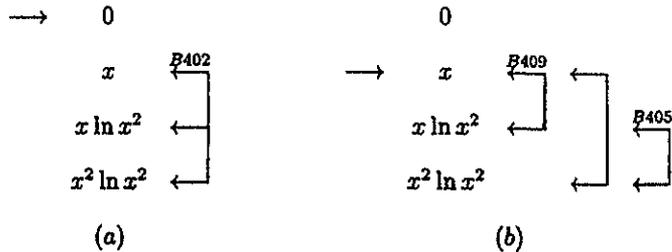
el cual claramente es de la forma $\epsilon_0^{-1/2}(x) = P(x) + N(x)/D(x)$, con

$$P(x) = 1, \quad N(x) = K_1 x,$$

$$D(x) = 1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \frac{K_3}{K_1} x - \left(\frac{K_4}{K_1} - \frac{2K_2 K_3}{K_1^2} \right) x^2 \ln x^2.$$

Por lo tanto, la ecuación (48) da un nuevo aproximante a $\epsilon_0^{-1/2}$ el cual es etiquetado con B402(x) (ver Tabla 1)

Lo que sigue ahora es hacer todas las combinaciones posibles de funciones de $x \ln x^2$, x y $x^2 \ln x^2$ en $N_1(x)$ y $D_1(x)$, con las condiciones señaladas antes, es decir, la suma total de sus términos sea 3 y que la expansión binomial de $(1 + N_1(x))/(1 - D_1(x))$ reproduzca la "cola" de la serie (43). Para hacer este proceso de una forma ordenada observemos la Fig. 1. En esta figura aparecen columnas de funciones, donde las flechas a la derecha indican la combinación de funciones que debe contener $D_1(x)$, y las flechas a la izquierda la combinación de funciones que contiene $N_1(x)$.



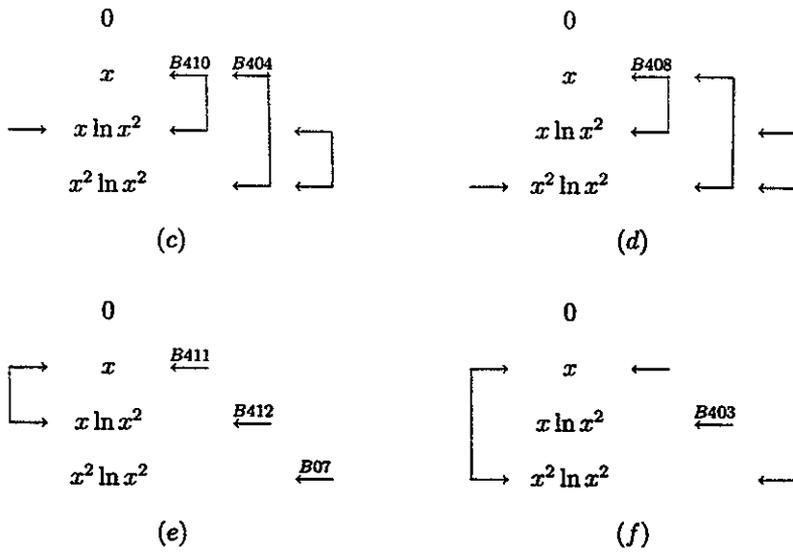


Figura 1. Diagramas que nos permiten observar la forma ordenada como se construyen los aproximantes a partir de la “cola” con tres términos (44). La etiqueta sobre las flechas indica el aproximante al cual dan origen (ver Tabla 1).

La Fig. 1 muestra sólo algunos ejemplos de las distintas combinaciones posibles que pueden aparecer en el numerador y denominador de (44). Las flechas a la izquierda de cada columna dan la combinación de términos que deben aparecer en $N_1(x)$; las flechas a la derecha de la segunda columna, muestran los términos que debe contener $D_1(x)$, las flechas a la derecha de la segunda columna que no tienen etiqueta, se debe a que esta combinación de funciones no reproduce a (44).

Ejemplo 1. La Fig. 1(b), muestra que existen tres funciones de la forma $(1 + N_1(x))/(1 - D_1(x))$ con $N_1(x) = a_1x$, éstas son:

$$\frac{1 + a_1x}{1 - a_2x - a_3x \ln x^2}, \tag{49}$$

$$\frac{1 + a_1 x}{1 - a_2 x - a_3 x^2 \ln x^2}, \quad (50)$$

$$\frac{1 + a_1 x}{1 - a_2 x \ln x^2 - a_3 x^2 \ln x^2}. \quad (51)$$

Al hacer la expansión binomial de las funciones anteriores y encontrar los respectivos coeficientes a_1 , a_2 y a_3 , en términos de K_1 , K_2 y K_3 se observa que las ecuaciones (49) y (51) reproducen correctamente los términos de la "cola" de la serie (43). La ecuación (50) no reproduce la "cola" de la serie (43) y por lo tanto es descartada. Los posibles aproximantes a la serie (43) son

$$\begin{aligned} 1 + \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 + \frac{K_3}{K_1} x + \frac{K_4}{K_1} x \ln x^2 + \dots &\triangleq \frac{1 + a_1 x}{1 - a_2 x - a_3 x \ln x^2} \\ &= \frac{1 + \left(\frac{2K_3}{K_1} - \frac{K_4}{K_2}\right) x}{1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \left(\frac{K_4}{K_2} - \frac{K_3}{K_1}\right) x}, \quad (52) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 1 + \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 + \frac{K_3}{K_1} x + \frac{K_4}{K_1} x \ln x^2 + \dots &\triangleq \frac{1 + a_1 x}{1 - a_2 x \ln x^2 - a_3 x^2 \ln x^2} \\ &= \frac{1 + \frac{K_3}{K_1} x}{1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \left(\frac{K_4}{K_1} - \frac{K_2 K_3}{K_1^2}\right) x^2 \ln x^2} \quad (53) \end{aligned}$$

Sustituyendo estos aproximantes de Padé, Ecs. (52, 53) en (43), obtenemos los siguientes aproximantes de la serie (38)

$$\epsilon_0^{-1/2}(x) = 1 + \frac{K_1 x + \left(2K_3 - \frac{K_4 K_1}{K_2}\right) x^2}{1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \left(\frac{K_4}{K_2} - \frac{K_3}{K_1}\right) x} \equiv \text{B409}(x) \quad (54)$$

y

$$\epsilon_0^{-1/2}(x) = 1 + \frac{K_1 x + K_3 x^2}{1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \left(\frac{K_4}{K_1} - \frac{K_2 K_3}{K_1^2}\right) x^2 \ln x^2} \equiv \text{B405}(x). \quad (55)$$

Estos aproximantes son los etiquetados con B409(x) y B405(x) respectivamente (ver Tabla 1).

Ejemplo 2. La Fig. 1(f), nos muestra tres funciones de la forma de la Ec. (44) con $N_1(x) = a_1x + a_2x^2 \ln x^2$, éstas son:

$$\frac{1 + a_1x + a_2x^2 \ln x^2}{1 - a_3x}, \quad (56)$$

$$\frac{1 + a_1x + a_2x^2 \ln x^2}{1 - a_3x \ln x^2}, \quad (57)$$

$$\frac{1 + a_1x + a_2x^2 \ln x^2}{1 - a_3x^2 \ln x^2}. \quad (58)$$

Al tomar la expansión binomial de las funciones anteriores, se observa que sólo la ecuación (57) reproduce los términos de la “cola” de la serie (43). Las ecuaciones (56) y (58) no reproducen la “cola” de la serie, y entonces, no son tomadas en cuenta.

$$1 + \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2 + \frac{K_3}{K_1}x + \frac{K_4}{K_1}x^2 \ln x^2 \triangleq \frac{1 + a_1x + a_2x^2 \ln x^2}{1 - a_3x \ln x^2} \quad (59)$$

$$= \frac{1 + \frac{K_3}{K_1}x + \left(\frac{K_4}{K_1} - \frac{K_3K_2}{K_1^2}\right)x^2 \ln x^2}{1 - \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2} \quad (60)$$

Sustituyendo el aproximante de Padé de la “cola” de la serie (60) en la ecuación (43), da origen al siguiente aproximante

$$e_0^{-1/2}(x) = 1 + \frac{K_1x + K_3x^2 + \left(K_4 - \frac{K_3K_2}{K_1}\right)x^3 \ln x^2}{1 - \frac{K_2}{K_1}x \ln x^2} = B403(x). \quad (61)$$

Este aproximante es el etiquetado con B403(x) en la tabla 1. De esta forma se fabrican los aproximantes a la serie (38), los cuales son etiquetados con B402(x) hasta B412(x) (ver Tabla 1).

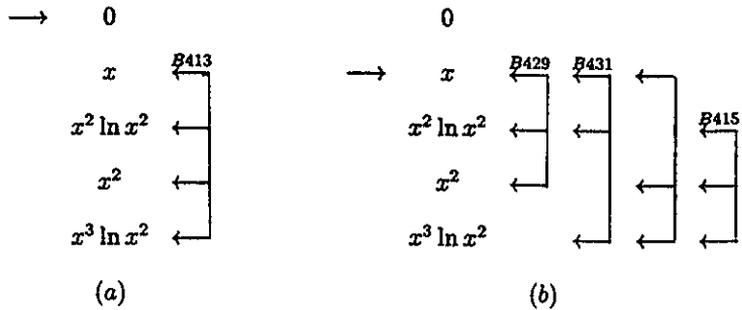
El siguiente paso en la aplicación del método “tailing” a la función $e_0^{-1/2}(x)$, consiste en tomar en cuenta el siguiente término a la izquierda de la “cola” de la serie (43). Esto es, en este caso la “cola” de la serie es la serie completa; entonces, el método “tailing” se reduce al método de Padé ($P(x) = 0$), ver Ec. (40).

Se buscan aproximantes de Padé a la serie (38) de la forma

$$\epsilon_0^{-1/2}(x) = \frac{N(x)}{D(x)} = \frac{1 + N_1(x)}{1 - D_1(x)}, \quad (62)$$

con la condición de que el desarrollo binomial de $N(x)/D(x)$ reproduzca los términos de la serie hasta el orden deseado, $(x^3 \ln x^2)$. Además la suma del número total de términos de $N(x)$ y $D(x)$ sea cuatro, pues cuatro son los coeficientes a determinar. Esto es, se buscan funciones $N_1(x)$ y $D_1(x)$ que dependan explícitamente de x , $x^2 \ln x^2$, x^2 y $x^3 \ln x^2$, con cuatro coeficientes por determinar.

Para encontrar los aproximantes de Padé en forma ordenada, procedemos como en el caso anterior. La Fig. 2 muestra columnas de funciones en las cuales las flechas a la izquierda de cada columna, indican la combinación de términos que deben estar en $N_1(x)$ (numerador) y las flechas a la derecha de cada columna muestra la combinación de términos que debe contener $D_1(x)$ (denominador).



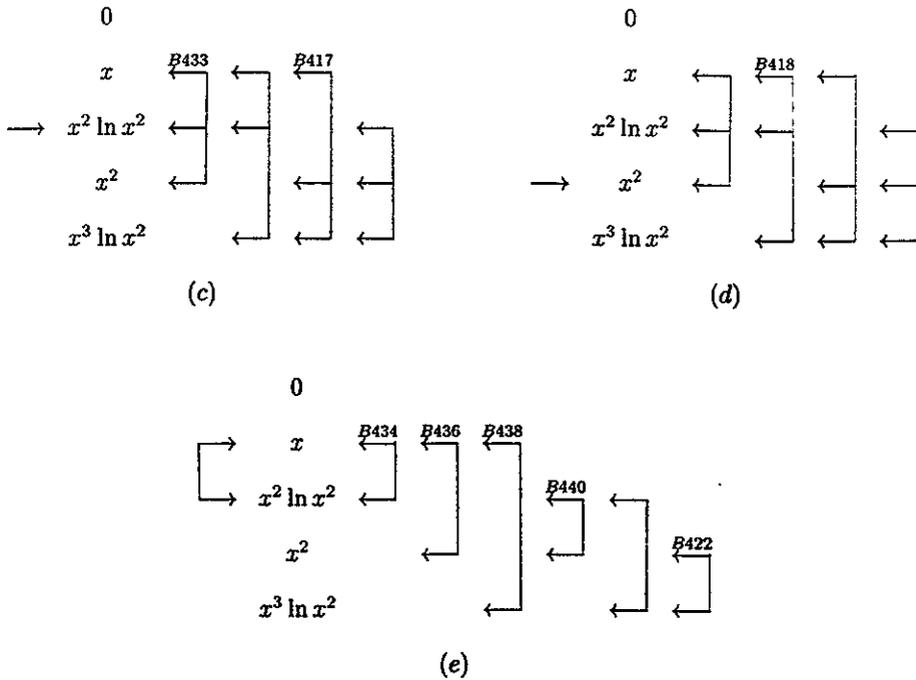


Figura 2. Diagramas que nos permiten observar la forma ordenada como se construyen los distintos aproximantes a partir de la “cola” con cuatro términos (38). Las etiquetas sobre las flechas indican el aproximante al cual dan origen (ver Tabla 1).

La Fig. 2 muestra sólo algunos ejemplos de las varias combinaciones de funciones que pueden aparecer en (62). Las flechas de la primera columna dan la combinación de términos que deben aparecer en $N_1(x)$; las flechas a la derecha de la segunda columna indican los términos que debe contener $D_1(x)$. Las columnas a la derecha que no tienen etiqueta, se debe a que esta combinación de funciones no reproduce a (38).

El ejemplo 3 muestra la forma en al cual se obtiene el aproximante de Padé de la función $e_0^{-1/2}(x)$ a partir del esquema que se muestra en la Fig. 2. De la Fig. 2(b), se

observa que existen cuatro posibles funciones que pueden ser aproximantes de $e_0^{-1/2}(x)$, éstas son:

$$\frac{1 + a_1x}{1 - a_2x - a_3x^2 \ln x^2 - a_4x^2}, \quad (63)$$

$$\frac{1 + a_1x}{1 - a_2x - a_3x^2 \ln x^2 - a_4x^3 \ln x^2}, \quad (64)$$

$$\frac{1 + a_1x}{1 - a_2x - a_3x^2 - a_4x^3 \ln x^2}, \quad (65)$$

$$\frac{1 + a_1x}{1 - a_2x^2 \ln x^2 - a_3x^2 - a_4x^3 \ln x^2}. \quad (66)$$

Se toma ahora el desarrollo binomial de las ecuaciones anteriores, el cual, al ser comparado con la serie original (38) hasta el término $x^3 \ln x^2$, da como resultado un sistema de ecuaciones simultáneas que proporcionan el valor de los coeficientes a_1 , a_2 , a_3 y a_4 en términos de K_1 , K_2 , K_3 y K_4 . Se deduce además, que la ecuación (65) en su desarrollo binomial no reproduce a la serie $e_0^{-1/2}(x)$, por lo que la descartamos. Por lo tanto, la combinación de funciones dada en la figura 2(b) da origen a los siguientes tres aproximantes, los cuales son etiquetados con $B429(x)$, $B431(x)$ y $B415(x)$ respectivamente (ver Tabla 1).

$$1 + K_1x + K_2x^2 \ln x^2 + K_3x^2 + K_4x^3 \ln x^2 + \dots$$

$$\stackrel{\Delta}{=} \frac{1 + \left(2K_1 - \frac{K_1}{K_2}\right)x}{1 - \left(\frac{K_1}{K_1} - K_1\right)x - K_2x^2 \ln x^2 - \left(K_3 - \frac{K_4K_1}{K_2} + K_1^2\right)x^2} \equiv B429(x), \quad (67)$$

$$\stackrel{\Delta}{=} \frac{1 + \left(K_1 - \frac{K_1}{K_1}\right)x}{1 - \frac{K_1}{K_1}x - K_2x^2 \ln x^2 - \left(K_4 - K_1K_2 - \frac{K_2K_3}{K_1}\right)x^3 \ln x^2} \equiv B431(x), \quad (68)$$

$$\stackrel{\Delta}{=} \frac{1 + K_1x}{1 - K_2x^2 \ln x^2 - K_3x^2 - (K_4 - K_1K_2)x^3 \ln x^2} \equiv B415(x). \quad (69)$$

Forma	P(x)	N(x)	D(x)	K_3	K_4
B401	$1 + K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2$	$K_3 x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_3} x \ln x^2$	2.1820	3.3922
B402	1	$K_1 x$	$1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \frac{K_3}{K_1} x - (\frac{K_4}{K_1} - 2 \frac{K_2 K_3}{K_1^2}) x^2 \ln x^2$	3.9071	39.4434
B403	1	$K_1 x + K_3 x^2 + (K_4 - \frac{K_3 K_2}{K_1}) x^3 \ln x^2$	$1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2$	1.5431	8.8103
B404	1	$K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2$	$1 - \frac{K_3}{K_1} x - (\frac{K_4}{K_1} - \frac{K_2 K_3}{K_1^2}) x^2 \ln x^2$	4.0162	38.1782
B405	1	$K_1 x + K_3 x^2$	$1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - (\frac{K_4}{K_1} - \frac{K_2 K_3}{K_1^2}) x^2 \ln x^2$	1.5239	13.1231
B406	1	$K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2 + (K_4 - \frac{K_3 K_2}{K_1}) x^3 \ln x^2$	$1 - \frac{K_3}{K_1} x$	4.6454	26.0713
B407	1	$K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2 + K_3 x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x^2 \ln x^2$	1.5664	21.1238
B408	1	$K_1 x + (K_4 - 2 \frac{K_3 K_2}{K_1}) x^3 \ln x^2$	$1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - \frac{K_3}{K_1} x$	3.9610	35.0873
B409	1	$K_1 x + (2 K_3 - \frac{K_4 K_1}{K_2}) x^2$	$1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2 - (\frac{K_4}{K_2} - \frac{K_3}{K_1}) x$	-24.1290	-270.1883
B410	1	$K_1 x + (2 K_2 - \frac{K_1 K_4}{K_3}) x^2 \ln x^2$	$1 - (\frac{K_4}{K_3} - \frac{K_2}{K_1}) x \ln x^2 - \frac{K_3}{K_1} x$	3.8493	39.7525
B411	1	$K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2 + (K_3 - \frac{K_4 K_1}{K_2}) x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_2} x$	-76.9482	-525.4711
B412	1	$K_1 x + (K_2 - \frac{K_1 K_4}{K_3}) x^2 \ln x^2 + K_3 x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_3} x \ln x^2$	1.5032	9.1149
B413	0	1	$1 - K_1 x - K_2 x^2 \ln x^2 - (K_3 - K_1^2) x^2 - (K_4 - 2 K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	no sol.	no sol.
B414	0	$1 + K_2 x^2 \ln x^2 + (K_3 - K_1^2) x^2 + (K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	$1 - K_1 x$	5.1624	31.6863

Forma	P(x)	N(x)	D(x)	K_3	K_4
B415	0	$1 + K_1 x$	$1 - K_2 x^2 \ln x^2 - K_3 x^2$ $-(K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	no sol.	no sol.
B416	0	$1 + K_1 x + K_3 x^2 +$ $(K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	$1 - K_2 x^2 \ln x^2$	1.5594	22.7345
B417	0	$1 + K_2 x^2 \ln x^2$	$1 - K_1 x - (K_3 - K_1^2) x^2 -$ $(K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	no sol.	no sol.
B418	0	$1 + K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2 +$ $K_4 x^3 \ln x^2$	$1 - K_3 x^2$	29.5837	15.2131
B419	0	$1 + (K_3 - K_1^2) x^2$	$1 - K_1 x - K_2 x^2 \ln x^2$ $-(K_4 - 2 K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	4.9724	57.7799
B420	0	$1 + K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2 + K_3 x^2$	$1 - K_4 x^3 \ln x^2$	3.2842	-139.888
B421	0	$1 + (K_4 - 2 K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	$1 - K_1 x - K_2 x^2 \ln x^2 -$ $(K_3 - K_1^2) x^2$	-6.9123	43.5024
B422	0	$1 + (K_3 - K_1^2) x^2 +$ $(K_4 - 2 K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	$1 - K_1 x - K_2 x^2 \ln x^2$	5.0966	46.7360
B423	0	$1 + K_1 x + K_2 x^2 \ln x^2$	$1 - K_3 x^2 - K_4 x^3 \ln x^2$	no sol.	no sol.
B424	0	$1 + K_2 x^2 \ln x^2 +$ $(K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	$1 - K_1 x - (K_3 - K_1^2) x^2$	-5.7144	28.7575
B425	0	$1 + K_1 x + K_3 x^2$	$1 - K_2 x^2 \ln x^2 -$ $(K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	1.3605	40.4217
B426	0	$1 + K_2 x^2 \ln x^2 +$ $(K_3 - K_1^2) x^2$	$1 - K_1 x - (K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	6.8961	122.5297
B427	0	$1 + K_1 x + (K_4 - K_1 K_2) x^3 \ln x^2$	$1 - K_2 x^2 \ln x^2 - K_3 x^2$	28.3857	29.9579
B428	0	$1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_2}) x + K_2 x^2 \ln x^2 +$ $(K_3 - \frac{K_1 K_4}{K_2}) x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_2} x$	-76.9482	-525.4711

Forma	P(x)	N(x)	D(x)	K_3	K_4
B429	0	$1 + (2K_1 - \frac{K_4}{K_2})x$	$1 - (\frac{K_4}{K_2} - K_1)x - K_2 x^2 \ln x^2 - (K_3 - \frac{K_4 K_1}{K_2} + K_1^2)x^2$	-6.3841	38.4005
B430	0	$1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_1})x + K_2 x^2 \ln x^2 + (K_4 - \frac{K_4 K_2}{K_1} x^3 \ln x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x$	4.6454	26.0713
B431	0	$1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_1})x$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x - K_2 x^2 \ln x^2 - (K_4 - K_1 K_2 - K_3 \frac{K_4}{K_1}) x^3 \ln x^2$	3.6119	51.2414
B432	0	$1 + K_1 x + (K_2 - \frac{K_4}{K_1})x^2 \ln x^2 + K_3 x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x^2 \ln x^2$	1.5664	21.1238
B433	0	$1 + (2K_2 - \frac{K_4}{K_1})x^2 \ln x^2$	$1 - K_1 x - (\frac{K_4}{K_1} - K_2)x^2 \ln x^2 - (K_3 - K_1^2)x^2$	-12.4833	37.1999
B434	0	$1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_1})x + (K_2 - \frac{K_4}{K_1} + \frac{K_2 K_4}{K_1^2})x^2 \ln x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x - (\frac{K_4}{K_1} - \frac{K_2 K_4}{K_1^2})x^2 \ln x^2$	4.0162	38.1782
B435	0	$1 + (2K_1 - \frac{K_4}{K_2})x + (K_3 + K_1^2 - \frac{K_1 K_4}{K_2})x^2$	$1 - (\frac{K_4}{K_2} - K_1)x - K_2 x^2 \ln x^2$	10.9769	89.6367
B436	0	$1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_2})x + K_2 x^2 \ln x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_2} x - (K_3 - \frac{K_1 K_4}{K_2})x^2$	-23.5255	35.5921
B437	0	$1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_1})x + (K_4 - K_1 K_2 - \frac{K_2 K_4}{K_1})x^3 \ln x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x - K_2 x^2 \ln x^2$	4.0028	39.3141
B438	0	$1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_1})x + K_2 x^2 \ln x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x - (K_4 - \frac{K_2 K_4}{K_1})x^3 \ln x^2$	8.7186	-113.7705
B439	0	$1 + (2K_2 - \frac{K_4}{K_1})x^2 \ln x^2 + (K_3 - K_1^2)x^2$	$1 - K_1 x - (\frac{K_4}{K_1} - K_2)x^2 \ln x^2$	5.1010	45.7302
B440	0	$1 + K_1 x + (K_2 - \frac{K_4}{K_1})x^2 \ln x^2$	$1 - \frac{K_4}{K_1} x^2 \ln x^2 - K_3 x^2$	27.5386	40.3868

Tabla 1. Cuarenta aproximantes $\epsilon_0^{1/2}$ a la serie (38). En las columnas 5 y 6, se tabulan los valores de los coeficientes K_3 y K_4 que hacen que los aproximantes satisfagan las propiedades físicas del sistema.

Siguiendo el mismo proceso que en el ejemplo (3) para obtener los aproximantes de Padé a $e_0^{-1/2}(x)$, pero ahora con todas las combinaciones posibles de funciones (de las cuales, la figura 2 sólo muestra unas pocas), se originan los restantes aproximantes de Padé los cuales se muestran en la Tabla 1.

Se concluye que la función $e_0^{-1/2}(x)$ se puede aproximar hasta orden $x^3 \ln x^2$ como uno de los 40 aproximantes obtenidos con el método "Tailing", de los cuales sólo 36 son diferentes como puede observarse en la Tabla 1.

4.2 Propiedades físicas que satisface el sistema

En la sección anterior hemos obtenido los 36 aproximantes diferentes a la serie (38) los cuales mediante una expansión reproducen sus primeros cuatro términos además del trivial. Sin embargo, para que uno, o varios, de los 36 aproximantes representen correctamente las propiedades de la energía en el estado base de un sistema de N partículas bosónica, requieren ser congruentes con las propiedades conocidas del sistema físico. Nótese que K_3 y K_4 , aún son desconocidas.

Sabemos que la densidad $\rho = N/V$, de un fluido de esferas duras clásicas o cuánticas, tiene un límite finito y que es la densidad de empaquetamiento al azar. Para el fluido de esferas duras clásicas, esta densidad es la densidad de Bernal $\rho_B \simeq 0.86\rho_0$, con $\rho_0 = \sqrt{2}/c^3$ la máxima densidad de empaquetamiento regular (hcp o fcc) de un sistema de esferas duras de diámetro c . Aquí proponemos que para el fluido de esferas duras cuánticas la densidad de empaquetamiento al azar debe de ser igual a la de las esferas clásicas debido a que en el empaquetamiento las esferas cuánticas están localizadas, y por tanto, pierden la indistinguibilidad comportándose como esferas clásicas. Esta suposición nos lleva a fijar una de las constantes desconocidas K_3 o K_4 . Por otro lado, conforme la densidad del fluido cuántico se acerca a la densidad de empaquetamiento, las partículas se localizan y

la incertidumbre en su posición tiende a cero mientras que su energía se vuelve infinita con un polo de orden dos en la densidad de empaquetamiento. Imponer este comportamiento a los aproximantes, nos fija la segunda constante desconocida. A continuación mostramos el proceso.

En general, la aplicación del método "tailing" a la función $e_0^{-1/2}(x)$ da como resultado aproximantes de la forma (40)

$$e_0^{-1/2}(x) \approx \epsilon_0^{-1/2}(x) = P(x) + \frac{N(x)}{D(x)} = \frac{P(x)D(x) + N(x)}{D(x)} = \frac{F(x)}{D(x)}, \quad (70)$$

donde

$$F(x) \equiv P(x)D(x) + N(x). \quad (71)$$

Los aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ en general se pueden denotar como cociente de dos funciones. Entonces, la energía por partícula en el estado base de un sistema de bosones puede ser extrapolada para densidades grandes, mediante los aproximantes de Padé, en la siguiente forma

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x^2 e_0(x) \quad \text{para } x \ll 1, \quad (72)$$

pero $\epsilon_0^{-1/2}(x) \triangleq \epsilon_0^{-1/2}(x)$

$$\Rightarrow \frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x^2 [\epsilon_0^{-1/2}(x)]^{-2}, \quad (73)$$

sustituyendo la Ec. (70)

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2}{mc^2} x^2 \frac{D^2(x)}{F^2(x)} \quad (74)$$

Se impone ahora la condición de que la energía por partícula debe tener un polo de orden dos en $x = x_B$. Esto significa que debe cumplirse

$$F(x_B) \equiv P(x_B)D(x_B) + N(x_B) = 0 \quad (75)$$

Por otro lado, se sabe que para altas densidades, la energía por partícula en el estado base de un sistema de bosones se comporta de la siguiente forma [5]

$$\frac{E}{N} = A \frac{\hbar^2}{2m} \left(\rho^{-1/3} - \rho_B^{-1/3} \right)^{-2}, \quad (76)$$

donde A es una constante adimensional conocida como el *residuo*, su valor experimental es $A = 15.7 \pm 0.6$ [18] el cual tomamos aquí. Haciendo el cambio de variable $x = \sqrt{\rho c^3}$ y asumiendo que la densidad de máximo empaquetamiento es la densidad de Bernal, (76) se transforma en

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2mc^2} \frac{A}{\left[x^{-2/3} - x_B^{-2/3} \right]^2}, \quad (77)$$

donde $x_B = \sqrt{\rho_B c^3}$.

Debe cumplirse además, que una buena extrapolación de la energía por partícula (Ec. 74) tiene que coincidir con la energía por partícula para densidades grandes (Ec. 77), esto es, igualando (74) y (77) y despejando el residuo se obtiene

$$\left(\frac{A}{4\pi} \right)^{1/2} = x \left[x^{-2/3} - x_B^{-2/3} \right] \frac{D(x)}{F(x)} \quad (78)$$

Notemos que cuando $x = x_B$ la ecuación (78) produce una indeterminación $0/0$. Para salvar esta dificultad, aplicamos la regla del H'opital a (78)

$$\left(\frac{A}{4\pi} \right)^{1/2} = \lim_{x \rightarrow x_0} \left[\frac{[x^{-2/3} - x_B^{-2/3}] D(x) + x[-2/3 D(x)x^{-5/3} + [x^{-2/3} - x_B^{-2/3}] D'(x)]}{F'(x)} \right] \quad (79)$$

$$= \frac{-2/3 D(x_B) x_B^{-2/3}}{F'(x)|_{x_B}} \quad (80)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{A}{4\pi} \right)^{1/2} F'(x)|_{x_B} + \frac{2}{3} x_B^{-2/3} D(x_B) = 0. \quad (81)$$

Las ecuaciones (75) y (81) son un sistema de dos ecuaciones simultáneas con dos incógnitas⁴,

⁴Otra forma de encontrar las condiciones (75) y (81) para obtener los coeficientes K_3 y K_4 , es igualando en sus dos primeros términos el desarrollo en series de Taylor de (74) y (77) alrededor de $x = x_B$, lo que da por resultado las condiciones antes mencionadas

cuya solución proporciona el valor de los coeficientes K_3 y K_4 . Estos valores se muestran para cada uno de los 40 aproximantes, en las columnas quinta y sexta de la Tabla 1.

En la búsqueda de una expresión analítica para la energía de un sistema de esferas duras bosónicas en todo el rango de densidades físicas, se encuentra la ecuación de London y los trabajos reportados en las Ref. [6, 7, 13]. En estos últimos se obtienen los aproximantes "tailing" hasta el término K_3x^2 de la Ec. (38) luego ajustan el valor del coeficiente K_3 de tal manera que los aproximantes aceptables pasen por los puntos dados vía simulación por computadora.

En este trabajo, se encuentran los aproximantes "tailing" hasta el término $K_4x^3 \ln x^2$ de (38) y se ataca el problema con una filosofía diferente; aquí los valores de los coeficientes K_3 y K_4 se obtienen de imponer a la energía del fluido que se comporte como es conocido alrededor de la densidad de empaquetamiento.

Resumiendo, el fluido cuántico debe de cumplir las siguientes hipótesis físicas:

1. La energía por partícula de un sistema de bosones $E/N = 2\pi\hbar^2x^2e_0(x)/mc^2$ en todo el rango de densidades físicas debe incrementarse monótonamente con la densidad. Por lo que, un aproximante aceptable $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ debe incrementarse más lentamente que x .
2. Como descripción de la estructura de un líquido, J. D. Bernal propuso un modelo de esferas duras de igual tamaño, las cuales se agrupan con una densidad de empaquetamiento compacto aleatorio (o densidad de Bernal) ρ_B . Bernal [14] fabricó un número grande de esferas de plastilina, las introdujo en una cámara de balón de fútbol, extrajo el aire para evitar burbujas, y entonces, comprimió la cámara hasta que las esferas llenaran todo el espacio. El resultado del experimento fue que las

esferas se hacían poliedros de varias formas irregulares, el número más frecuente de caras fue trece, y el número más común de lados en una cara fue cinco. Más recientemente Finney [15] repitió el experimento de Bernal pero ahora con 7934 esferas duras de igual tamaño, encontrando que la fracción de empaquetamiento⁵, n_p , es 0.6366 (la fracción de empaquetamiento para la estructura fcc y hcp es 0.74). que equivale a una densidad igual a la densidad de Bernal ρ_B . Modelos, vía simulación por computadora [16], también han sido propuestos para encontrar la fracción de empaquetamiento, n_p , cuyo valor encontrado concuerda aceptablemente con el valor experimental. Por lo tanto, en este trabajo se toma el valor experimental de la densidad de empaquetamiento compacto aleatorio como el valor límite de empaquetamiento de las esferas duras, dado por la densidad de Bernal

$$\rho_B \simeq 0.86\rho_0 \quad \text{con} \quad \rho_0 = \frac{\sqrt{2}}{c^3} \quad (82)$$

donde c es el diámetro de las esferas duras y ρ_0 es la densidad de empaquetamiento compacto regular de las estructuras fcc y hcp.

3. La energía del sistema de esferas duras bosónicas debe ser finita y mayor que cero en el rango de densidades $0 < \rho < \rho_B$. Entonces, un aproximante aceptable $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ no debe tener polos ni ceros en el intervalo de densidades.
4. Si la densidad de partículas ρ de un sistema de esferas duras se aproxima a la densidad de empaquetamiento aleatorio compacto, que proponemos sea la densidad de Bernal ρ_B . Entonces, por el principio de incertidumbre la energía viene dada por

⁵La fracción de empaquetamiento es el cociente entre el volumen total de las esferas y el volumen del sistema. La relación entre la fracción de empaquetamiento n_p y la densidad de número de esferas ρ es $\rho = 6n_p/\pi c^3$.

(35), donde el valor del residuo A depende de la configuración geométrica particular del sistema de esferas duras. Si el empaquetamiento compacto es cúbico centrado en la cara (fcc) o hexagonal compacto (hcp), cálculos teóricos [17] predicen que el valor del residuo está en el intervalo $1.63 \leq A \leq 27$. Por otro lado, Cole [18] a partir de datos de alta presión para la rama cristalina de sistemas ^4He , ^3He , H_2 y D_2 encuentra que el valor experimental del residuo es $A = 15.7 \pm 0.6$. El cual concuerda con el valor del residuo deducido a partir de la ecuación modificada de London [11]. Por lo tanto, para nuestros cálculos se tomará el valor experimental del residuo.

Capítulo 5

Resultados y discusión

Aquí resumimos nuestros resultados y discutimos sus consecuencias.

5.1 Expresión analítica óptima para la energía

Buena parte del esfuerzo realizado en esta tesis se ha usado para construir los distintos aproximantes “tailing” a la serie (36) para la energía a bajas densidades, donde destaca un término más respecto a los intentos previos [6, 13] de extrapolar dicha expresión a densidades físicas. La inclusión del cuarto término de la serie (38) nos llevó de 12 aproximantes obtenidos para la misma serie con tres términos, a 40 aproximantes de los cuales sólo 36 son diferentes. Una discusión más detallada al respecto se puede ver en el Apéndice A. Por completez, en el Apéndice B reproducimos los distintos aproximantes a (36) con tres y dos términos, además del trivial.

Cada uno de los 36 aproximantes fue analizado en detalle y cuestionado sobre su validez con base en las propiedades físicas discutidas en el capítulo anterior, que debe de satisfacer, al menos, un aproximante para representar la energía del sistema considerado. Como muestra, en la Fig. 3 graficamos los últimos siete aproximantes de la Tabla 1 donde claramente se puede observar en los últimos cuatro la existencia de polos, no justificables, que los descartan como buenos.

Resumimos nuestro análisis en la Tabla 1, donde cada uno de los aproximantes se numeró, columna 1, con la letra B de bosón seguida del número 4 que representa el número de términos considerados en (36), terminando con el número del aproximante correspondiente. Los distintos aproximantes, $P(x) + N(x)/D(x)$, se ordenaron poniendo

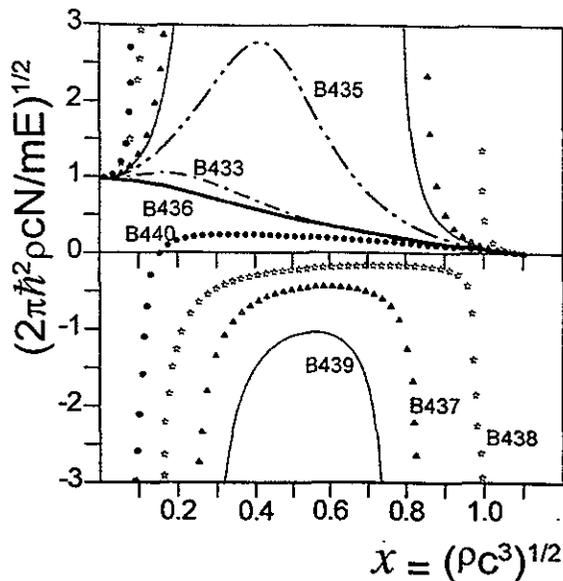


Figura 3. Últimos 7 aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ de la Tabla 1, como función de $x = (\rho c^3)^{1/2}$. Los aproximantes B437(x), B438(x), B439(x) y B440(x), muestran los polos que los descalifican.

primero a aquellos con una $P(x)$, columna 2, menos simple. En las columnas 3 y 4 se escriben las distintas funciones $N(x)$ y $D(x)$, respectivamente.

En las columnas 5 y 6 reportamos los valores de los coeficientes K_3 y K_4 que obligan a los aproximantes a satisfacer las propiedades físicas del sistema discutidas en el capítulo anterior.

De los 36 aproximantes sólo seis estuvieron libres de polos a lo largo de todo el intervalo de densidades, muestran un energía de empaquetamiento en la densidad de Bernal y reproducen el residuo experimental. Estos seis aproximantes (líneas llenas) son graficados en la Fig. 4 junto a los puntos GFMC [4] (circunferencias pequeñas), los datos variacional

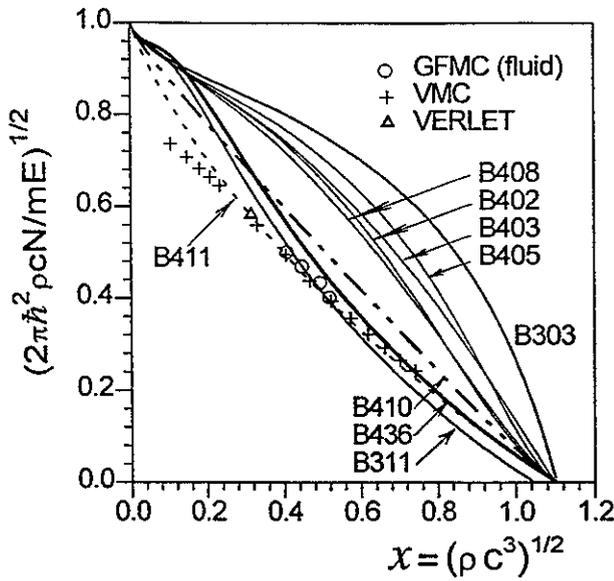


Figura 4. Aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ libres de polos, con empaquetamiento en la densidad de Bernal y que respetan el valor experimental del residuo.

Monte Carlo (cruces) [20], el aproximante óptimo B303(x) (ver Apéndice B) obtenido de entre los once aproximantes a la serie (38) con 3 términos e imponiendo las propiedades físicas del capítulo anterior, y el aproximante B311(x) que se venía usando para calcular la energía del sistema de esferas duras. Este último aproximante tiene el inconveniente de que su tercer coeficiente se ajustó para dar la mínima desviación cuadrática media respecto a los datos GFMC. En esta misma figura mostramos en trazos delgados el aproximante B411(x) que muestra un excelente acuerdo con las simulaciones de computadora dentro del intervalo de densidades donde estas últimas existen. Sin embargo, B411(x) tiene un polo en $x = 0.01870$ que lo descalifica como un buen aproximante, pero que podría representar la energía del sistema dentro de intervalo de densidades restringido.

De los seis aproximantes mencionados arriba, cuatro mostraron una *no monotonicidad* creciente en la energía en términos de la densidad por lo que fueron descalificados. Sólo los aproximantes $B410(x)$ y $B436(x)$ estuvieron libres de polos en la región física además de satisfacer las condiciones físicas requeridas:

$$B410(x) = 1 + \frac{K_1 x + (2K_2 - \frac{K_1 K_4}{K_3}) x^2 \ln x^2}{1 - (\frac{K_4}{K_3} - \frac{K_2}{K_1}) x \ln x^2 - \frac{K_3}{K_1} x^2}, \quad (83)$$

con $K_3 = 3.8493$ y $K_4 = 39.7525$,

y

$$B436(x) = \frac{1 + (K_1 - \frac{K_4}{K_2}) x + K_2 x^2 \ln x^2}{1 - \frac{K_4}{K_2} x - (K_3 - \frac{K_1 K_4}{K_2}) x^2}, \quad (84)$$

con $K_3 = -23.5255$ y $K_4 = 35.5921$.

En la Fig. 5 graficamos (83) (dos trazos cortos y uno largo) y (84) (línea gruesa continua) como función del parámetro adimensional $x = \sqrt{\rho c^3}$, y se comparan con los aproximantes óptimos para la misma serie (38) con dos y tres términos, la ecuación de London y los datos GFMC. Resalta la gran similitud en el comportamiento y cercanía del aproximante ajustado $B311(x)$ y el aproximante $B436(x)$. En la Fig. 6 hacemos una ampliación de la Fig. 5 en el intervalo de densidades $10^{-6} \leq \rho/\rho_0 \leq 0.1$.

En términos de $\epsilon_0^{-1/2}(x)$, ya sea $B410(x)$, $B436(x)$ o cualquiera de los aproximantes óptimos previos, la energía para el fluido de esferas duras queda dada por

$$\frac{E}{N}(x) = \frac{2\pi\hbar^2 x^2}{mc^2} [\epsilon_0^{-1/2}(x)]^{-2}. \quad (85)$$

A efecto de comparación, en la Tabla 2 mostramos los valores de $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ así como las energías en unidades de \hbar^2/mc^2 y el porcentaje de error relativo de las energías respecto a los datos GFMC, para cada uno de los aproximantes óptimos allí mostrados.

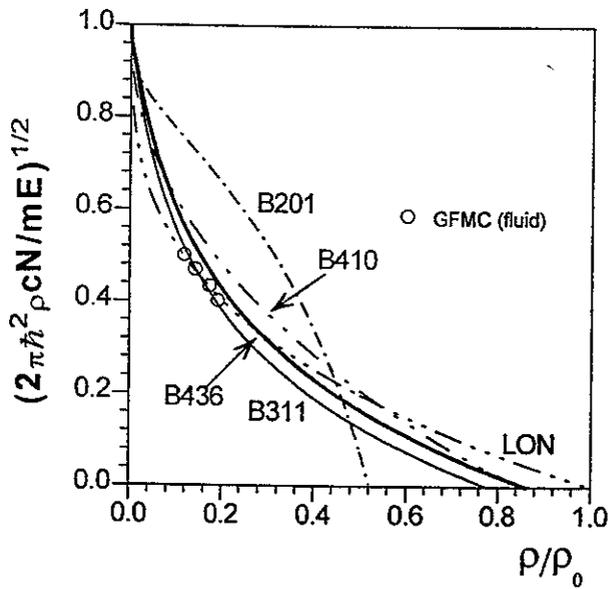


Figura 5. Aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}(x)$ óptimos B410(x) y B436(x), a la serie (38) con cuatro términos además del trivial. Se comparan con los aproximantes óptimos B201(x), B303(x), el aproximante ajustado B311(x), la ecuación de London y los datos GFMC. Se grafican como función de ρ/ρ_0 .

En la Fig. 7 mostramos el comportamiento de la energía en unidades de \hbar^2/mc^2 , como función del parámetro adimensional x , para el aproximante ajustado B311(x), el semi-aproximante B411(x), los aproximantes óptimos de este trabajo B410(x) y B436(x), y los datos GFMC.

$x \equiv \sqrt{\rho c^3}$	$e_{GFMC}^{-1/2}(x)$	B201	B303	B311	B410	B411	B436	London
0.407	0.5013 ± 0.0030	0.7543	0.8010	0.5187	0.5933	0.4932	0.5657	0.4965
	4.15 ± 0.05	1.83	1.63	3.88	2.96	4.29	3.26	4.23
		56 %	61 %	6.5 %	29 %	3.4 %	21 %	1.9 %
0.447	0.4699 ± 0.0021	0.7268	0.7833	0.4719	0.5570	0.4572	0.5192	0.4650
	5.69 ± 0.05	2.38	2.05	5.64	4.05	6.01	4.66	5.81
		58 %	64 %	0.8 %	29 %	5.6 %	18 %	2.1 %
0.494	0.4340 ± 0.0024	0.6907	0.7612	0.4203	0.5146	0.4166	0.4675	0.4292
	8.14 ± 0.09	3.21	2.65	8.68	5.79	8.83	7.01	8.32
		60 %	67 %	6.6 %	29 %	8.5 %	14 %	2.2 %
0.520	0.4019 ± 0.0013	0.6685	0.7482	0.3933	0.4912	0.3948	0.4406	0.4100
	10.50 ± 0.07	3.80	3.03	10.97	7.03	10.88	8.74	10.09
		64 %	71 %	4.5 %	33 %	3.6 %	17 %	3.9 %

Tabla 2. $\epsilon_0^{-1/2}$, energías en unidades de \hbar^2/mc^2 y porcentaje de error relativo de las energías calculadas con aproximantes $e_0^{-1/2}$ allí mostrados, respecto a los resultados GFMC.

5.2 Presión y velocidad del sonido

Es inmediato obtener la presión P y la velocidad del sonido v_s del fluido, como función de la densidad, a partir de la expresión para la energía (85) y las correspondientes expresiones para las $\epsilon_0^{-1/2}(x)$. La presión

$$P = \rho^2 d(E/N)/d\rho = \frac{x^3}{2c^3} \frac{d}{dx} E/N(x) \quad (86)$$

Aprox	K_3	K_4	residuo	ρ/ρ_0	x_p	C_3	C_4	$v_s[m/s]$
B201	?	?	0.6076	0.52	0.86	?	?	250.62
B303	5.535514	?	0.4198	0.86	x_B	6.31294	?	197.53
B311*	-27.956	?	17.05	0.776	1.05	73.2960	?	517.25
B410	3.8493	39.7525	15.7	0.86	x_B	9.68536	62.4282	373.43
B411**	-76.9482	-525.4711	15.7	0.86	x_B	171.2804	1192.8754	483.58
B436	-23.5255	35.5921	15.7	0.86	x_B	64.4350	70.7490	448.82

Tabla 3. Resumen de los aproximantes óptimos con sus correspondientes parámetros. En la última columna se muestran los valores de la velocidad del sonido para el ^4He , como un sistema de esfera duras, usando para su energía el correspondiente aproximante. $x_B = 1.10$, * ajustada, ** tiene un polo.

o, en unidades de \hbar^2/mc^5 , nos queda

$$P = \pi x^3 \frac{d}{dx} \{x^2 [\epsilon_0^{-1/2}(x)]^{-2}\}. \quad (87)$$

La velocidad del sonido se obtiene de la relación

$$mv_s^2 = \frac{dP}{d\rho} \quad (88)$$

$$mv_s^2 = \frac{1}{4} \left(3x \frac{d}{dx} E/N(x) + x^2 \frac{d^2}{dx^2} E/N(x) \right). \quad (89)$$

La velocidad del sonido v_s , en unidades de $\sqrt{\hbar^2/m^2c^2}$, nos queda

$$v_s = \sqrt{\frac{\pi}{2} \left(3x \frac{d}{dx} \{x^2 [\epsilon_0^{-1/2}(x)]^{-2}\} + x^2 \frac{d^2}{dx^2} \{x^2 [\epsilon_0^{-1/2}(x)]^{-2}\} \right)}. \quad (90)$$

Si modelamos al fluido ^4He como un fluido de esferas duras de diámetro $c = 0.8368\sigma$, con $\sigma = 2.556\text{\AA}$ y $m = 4.0026$ uma, y calculamos su velocidad del sonido a $T = 0$ donde

su densidad de saturación es $\rho_s = 0.02185\text{\AA}^{-3} = 0.3648\sigma^{-3}$ o $x_s = 0.4623$, obtenemos velocidades mayores que 373 m/s, dependiendo de la $\epsilon_0^{-1/2}$ usada. En la columna 9 de la Tabla 3 mostramos las velocidades obtenidas con cada uno de los aproximantes allí mostrados. Por supuesto, estas velocidades son mucho mayores que la velocidad del sonido del fluido real que es de 239 m/s, pero lo más extraño es que también son mayores que la velocidad del sonido de 295 m/s reportada por Kalos *et al.* [4], para el mismo sistema de esferas duras. Este resultado parece extraño porque aun la función B311(x) ajustada a los datos reportados por ellos, da una velocidad del sonido de 517.25 m/s como puede verse en la Tabla 3. Sabemos que la primera y, más aún, la segunda derivada de una función ajustada son muy sensibles tanto a la forma de la función como a las incertidumbres de los puntos ajustados. No obstante, si calculáramos la incertidumbre en la velocidad haciendo uso de la función B311(x), esta incertidumbre no incluiría el valor de Kalos *et al.*, que seguiría siendo mucho menor. Por lo anterior, creemos que la velocidad del sonido para el sistema de esferas duras reportada por Kalos *et al.* pudiera estar equivocada. En las Figs. 9 y 10 graficamos la presión en unidades de \hbar^2/mc^5 y la velocidad del sonido en unidades de $\sqrt{\hbar^2/m^2c^2}$, respectivamente. En ambas figuras mostramos las respectivas expresiones con el aproximante ajustado B311(x), el semi-aproximante B411(x), los datos GFMC y los aproximantes óptimos B410(x) y B436(x), deducidos en este trabajo.

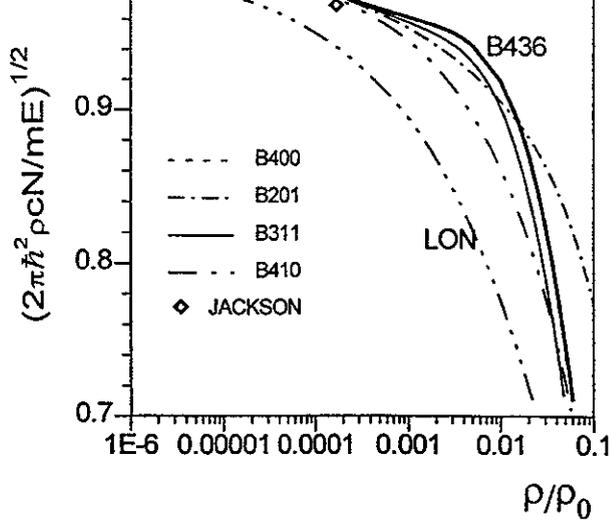


Figura 6. Ampliación de la Fig. 5 en el intervalo de densidades $10^{-6} \leq \rho/\rho_0 \leq 0.1$.

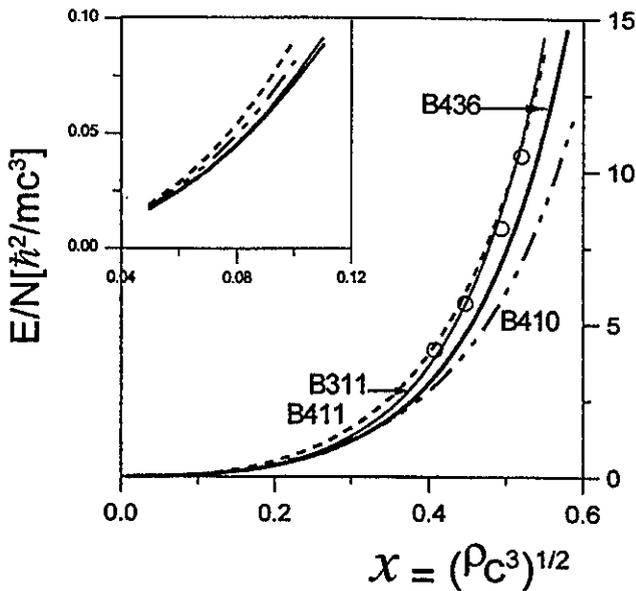


Figura 7. Energías $E/N(x)$ como función del parámetro adimensional $x = (\rho c^3)^{1/2}$, para cada uno de los aproximantes mostrados allí.

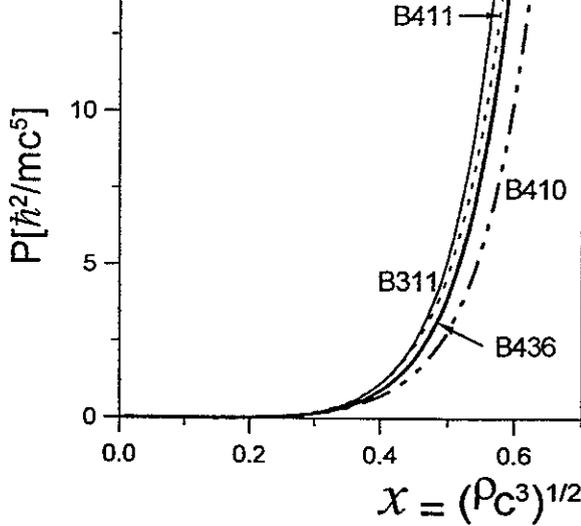


Figura 8. Presión P como función del parámetro adimensional $x = (\rho c^3)^{1/2}$, para cada uno de los aproximantes mostrados allí.

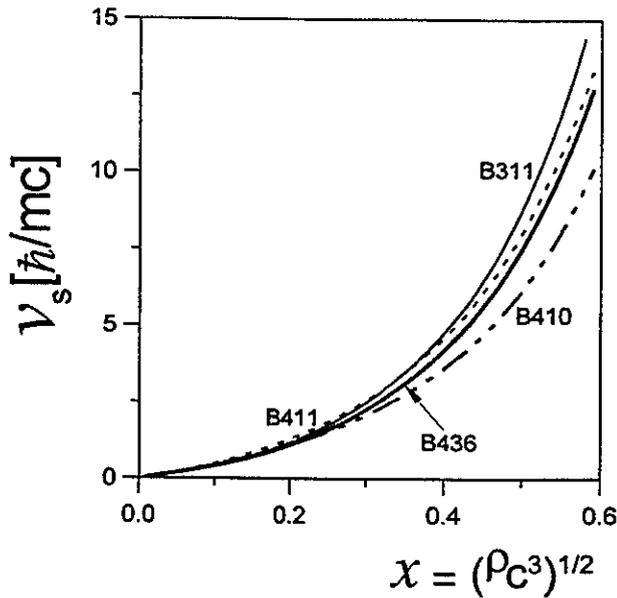


Figura 9. Velocidad del sonido v_s , como función del parámetro adimensional $x = (\rho c^3)^{1/2}$, para cada uno de los aproximantes mostrados allí.

Capítulo 6

Conclusiones

El deseo de construir una ecuación de estado para el sistema de esferas duras bosónicas, para todo el intervalo de densidades, nos ha llevado a proponer y extender un método de cálculo alternativo a los perturbativos, variacionales o a las simulaciones por computadoras. Partimos de los primeros cinco términos de la serie exacta para la energía por partícula de un sistema infinito de esferas duras bosónicas, tres de ellos conocidos y dos más desconocidos. Esta serie truncada, útil sólo para muy bajas densidades, se extrapoló a densidades reales mediante el método de aceleración de convergencia denominado "tailing" que es una generalización de los aproximantes de Padé. El número de aproximantes creció a 40 en lugar de los 12 que se obtienen cuando consideramos sólo 4 términos de la serie. De los 40 aproximantes sólo 36 son diferentes. Considerar un término más en la serie original nos llevaría a un número tal de aproximantes que empezaría a convertir al método mismo en impráctico.

Para que las extrapolaciones pudieran ser consideradas como posibles expresiones analíticas para la energía del sistema de esferas duras, se les requirió que satisficieran un mínimo de características deducidas de las propiedades conocidas del sistema en cuestión. Además, dichas propiedades nos permitieron deducir los coeficientes desconocidos de la serie original en lugar de hacer un simple ajuste.

De las dos expresiones que sobrevivieron, $B_{410}(x)$ y $B_{436}(x)$, esta última reproduce las energías GFMC dentro de un 21 % de error, mejorando a la expresiones $B_{201}(x)$ obtenida previamente y a la $B_{303}(x)$ obtenida aquí mismo. La bondad de la expresión

analítica se manifestó inmediatamente cuando calculamos la presión y la velocidad del sonido del sistema, simplemente derivando una y dos veces la expresión para la energía.

Finalmente, podemos afirmar que hemos aportado una expresión analítica para la energía del sistema, suceptible de ser mejorada, pero a la vez base para una futuro estudio del sistema de esferas duras más allá del estado base.

Apéndice A

Aproximantes de Padé y “Tailing”

El objetivo de este apéndice es mostrar dos métodos de aceleración de convergencia: Padé y “Tailing”, aplicados únicamente a *series de potencias*, resaltando los aspectos operativos más que los teóricos.

1 Método de Padé

Sucede con frecuencia que la solución a un problema físico o matemático queda expresada en términos de una serie de potencias infinita

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i, \quad (91)$$

donde la mayoría de las veces sólo se conoce exactamente un número finito de constantes a_i . Si la serie (91) converge, un número finito de términos será una solución aproximada. Si la serie (91) no converge, y sólo se conoce un número finito de términos, se puede aplicar un procedimiento conocido como aproximantes de Padé [19], en el cual la función $f(x)$ se aproxima por un cociente de dos polinomios

$$f(x) \approx \frac{N_L(x)}{D_M(x)} \equiv [L/M](x), \quad (92)$$

donde $N_L(x)$ y $D_M(x)$ son polinomios de grado L y M respectivamente

$$N_L(x) = \sum_{i=0}^L b_i x^i, \quad D_M(x) = \sum_{i=0}^M c_i x^i. \quad (93)$$

El valor de los coeficientes b_i y c_i , se determinan de la condición de que el desarrollo de Taylor de $N_L(x)/D_M(x)$ coincida con el de la función $f(x)$ hasta el grado $Z \equiv L + M$ al

cual se quiere aproximar la serie (91). Esto es, que las Z primeras derivadas de $f(x)$ y $N_L(x)/D_M(x)$ sean idénticas,

$$\left. \frac{d^n f(x)}{dx^n} \right|_{x_0} = \left. \frac{d^n}{dx^n} \left(\frac{N_L(x)}{D_M(x)} \right) \right|_{x_0} \quad \text{para} \quad n = 0, 1, 2, \dots, Z. \quad (94)$$

Haciendo el desarrollo en serie de Taylor de $f(x)$ y $N_L(x)/D_M(x)$ se obtiene

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i = \sum_{i=0}^Z \left. \frac{d^i f(x)}{dx^i} \right|_{x_0} \frac{x^i}{i!} + \sum_{Z+1}^{\infty} a_i x^i \quad (95)$$

y

$$\frac{N_L(x)}{D_M(x)} = \sum_{i=0}^Z \left. \frac{d^i}{dx^i} \left(\frac{N_L(x)}{D_M(x)} \right) \right|_{x_0} \frac{x^i}{i!} + \sum_{i=Z+1}^{\infty} \left. \frac{d^i}{dx^i} \left(\frac{N_L(x)}{D_M(x)} \right) \right|_{x_0} \frac{x^i}{i!}, \quad (96)$$

de donde restando y aplicando la igualdad de las derivadas (94) hasta grado Z , se obtiene

$$f(x) - \frac{N_L(x)}{D_M(x)} = O(x^{L+M+1}). \quad (97)$$

Esto implica que, la diferencia entre las funciones (95) y (96) es un polinomio de grado $n \geq L + M + 1 = Z + 1$.

Sin pérdida de generalidad se hace $D_M(x = 0) = c_0 = 1$. Multiplicando (97) por $D_M(x)$ se obtiene

$$f(x)D_M(x) = N_L(x) + O(x^{L+M+1}), \quad (98)$$

sustituyendo (91) y (93) en la ecuación anterior resulta

$$\sum_{i=0}^M c_i x^i \left[\sum_{j=0}^Z a_j x^j + \sum_{j=Z+1}^{\infty} a_j x^j \right] = \sum_{k=0}^L b_k x^k + O(x^{L+M+1}), \quad (99)$$

de donde reacomodando términos se obtiene

$$\sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^Z c_i a_j x^i x^j + O(x^{Z+1}) = \sum_{k=0}^L b_k x^k + O(x^{Z+1}). \quad (100)$$

De esta última ecuación se obtiene el valor de los coeficientes c_i y b_k , los cuales se extraen de el sistema de $L + M + 1$ ecuaciones lineales simultáneas siguiente

$$b_k = \sum_{i,j} c_i a_j \quad \text{para toda } i, j \text{ tal que } i + j = k \quad k = 0, 1, 2, \dots, L \quad (101)$$

$$0 = \sum_{i,j} c_i a_j \quad \text{para toda } i, j \text{ tal que } i + j = L + 1, L + 2, \dots, L + M. \quad (102)$$

Sustituyendo los coeficientes en los polinomios $N_L(x)$ y $D_M(x)$, resulta el aproximante de Padé $[L/M](x)$ dado por

$$f(x) \approx \frac{N_L(x)}{D_M(x)} = \frac{b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_Lx^L}{1 + c_1x + c_2x^2 + \dots + c_Mx^M} \equiv [L/M](x). \quad (103)$$

Concluimos que si tenemos una función $f(x)$ expresada en términos de una serie de potencias de la variable x , es posible encontrar $Z (= L + M)$ cocientes de polinomios que coincidan con la función $f(x)$ en sus desarrollos de Taylor hasta grado Z . Estos aproximantes son

$$\left. \begin{aligned} f(x) &\approx [0/Z](x) = \frac{b_0}{1 + c_1x + \dots + c_Zx^Z} \\ &\approx [1/(Z - 1)](x) = \frac{b_0 + b_1x}{1 + c_1x + \dots + c_{Z-1}x^{Z-1}} \\ &\approx [2/(Z - 2)](x) = \frac{b_0 + b_1x + b_2x^2}{1 + c_1x + \dots + c_{Z-2}x^{Z-2}} \\ &\vdots \\ &\approx [(Z - 1)/1](x) = \frac{b_0 + b_1x + \dots + b_{Z-1}x^{Z-1}}{1 + c_1x} \end{aligned} \right\} \quad (104)$$

En la discusión anterior, Z es un número fijo. Si ahora se elimina esta restricción, es decir, suponemos que Z puede variar desde 0 hasta infinito, entonces se puede generar un arreglo infinito de aproximantes de Padé conocido como la *tabla de Padé*, que mostramos como la Tabla 4.

$[0/0]$	$[0/1]$	$[0/2]$	\dots	$[0/(Z-1)]$	$[0/Z]$	\dots
$[1/0]$	$[1/1]$	$[1/2]$		$[1/(Z-1)]$	$[1/Z]$	
$[2/0]$	$[2/1]$	$[2/2]$			$[2/Z]$	
\vdots					\vdots	
	$[(Z-1)/1]$				$[(Z-1)/Z]$	
$[Z/0]$	$[Z/1]$	\dots			$[Z/Z]$	
\vdots					\vdots	

Tabla 4. Tabla de Padé formada por todos los posibles aproximantes de Padé (92) a una serie infinita de potencias (91).

El conjunto de aproximantes de Padé $[N/M]$ con N fija es un renglón de la Tabla, el conjunto $[N/M]$ con M fija es una columna, mientras que el conjunto $[N/N]$ es la diagonal de la Tabla. Notemos que los aproximantes de Padé $[N/M]$ tal que $N + M = Z$ es un número fijo, es decir, los aproximantes de Padé discutidos anteriormente, son los elementos que están sobre las diagonales inversas de la tabla de Padé. Entonces, si $f(x)$ es una función expresada en series de potencias de la variable x , y se desean todos los aproximantes de Padé de grado menor o igual a Z se tendrá que existen, Z aproximantes de grado Z , $Z - 1$ aproximantes de grado $Z - 1$, $Z - 2$ aproximantes de grado $Z - 2$, y así sucesivamente. Por tanto, el número total de aproximantes a $f(x)$ hasta grado Z es⁶

$$1 + 2 + 3 + 4 + \dots + (Z - 2) + (Z - 1) + Z = \frac{Z(Z + 1)}{2}. \quad (105)$$

⁶En el conteo no se toman en cuenta los aproximantes de Padé de la forma $[N/0]$ (primera columna de la tabla de Padé) pues estos son elementos de la misma serie (91).

2 Método “Tailing”

Se presenta un método de aproximación inspirado en el procedimiento de aproximantes de Padé pero un poco más general, conocido como método “tailing” [6].

Sea una función $f(x)$ dada en términos de una serie de potencias de grado Z , es decir, sólo se conocen sus $Z + 1$ primeros términos

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_Zx^Z + \dots \quad (106)$$

El método “tailing” establece que un aproximante a la función (106) estará dado por la expresión

$$f(x) \approx P(x) + \frac{N(x)}{D(x)}, \quad (107)$$

donde $P(x)$ es igual a los primeros términos de la serie (106) y $N(x)/D(x)$ es el aproximante de Padé de la “cola” de la serie (106). Para aclarar esta idea se desarrolla el siguiente ejemplo.

El método de “tailing” inicia factorizando el penúltimo término de la serie (106), esto es

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{Z-2}x^{Z-2} + a_{Z-1}x^{Z-1} \left[1 + \frac{a_Zx}{a_{Z-1}} + \cdots \right]. \quad (108)$$

Ahora, se obtienen los aproximantes de Padé (hasta primer grado) de la “cola” de la serie (108), es decir, de la expresión entre paréntesis de la ecuación anterior,

$$\left[1 + \frac{a_Zx}{a_{Z-1}} + \cdots \right] \triangleq [1/0](x) \quad (\text{trivial}) \quad (109)$$

$$\triangleq [0/1](x) \quad (110)$$

donde el símbolo \triangleq significa *representado por*. Esto quiere decir que, la “cola” de la serie

(108) está representada por dos aproximantes de Padé uno de los cuales es trivial⁷ (109).

Remplazando la “cola” de la serie (108) por su aproximante de Padé (110) se obtiene un primer aproximante a $f(x)$, dado por

$$f(x) \approx a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{Z-2}x^{Z-2} + a_{Z-1}x^{Z-1}[0/1](x), \quad (111)$$

observemos que la Ec. (111) tiene la misma forma que la Ec. (107), donde

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{Z-2}x^{Z-2} \quad (112)$$

$$N(x) = bx^{Z-1} \quad (113)$$

$$D(x) = c_0 + c_1x. \quad (114)$$

Notemos que la Ec. (111) es el aproximante de Padé $[Z - 1/1](x)$ a $f(x)$. Esto es, en este primer paso el método “tailing” da un aproximante ya dado por el método de aproximantes de Padé.

El siguiente paso consiste en factorizar el término $a_{Z-2}x^{Z-2}$ de la serie (106) en la forma siguiente

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{Z-3}x^{Z-3} + a_{Z-2}x^{Z-2} \left[1 + \frac{a_{Z-1}x}{a_{Z-2}} + \frac{a_Zx^2}{a_{Z-2}} \cdots \right]. \quad (115)$$

Ahora se buscan los aproximantes de Padé de la “cola” de la serie (115), o sea de la expresión entre paréntesis cuadrados de la ecuación anterior

$$\left[1 + \frac{a_{Z-1}x}{a_{Z-2}} + \frac{a_Zx^2}{a_{Z-2}} \cdots \right] \triangleq [2/0](x) \quad (\text{trivial}) \quad (116)$$

$$\triangleq [1/1](x) \quad (117)$$

$$\triangleq [0/2](x) \quad (118)$$

⁷Nótese que los aproximantes de Padé de la forma $[Z/0](x)$, conocidos como triviales no proporcionan ninguna información adicional, ya que estos aproximantes dan la serie original de la cual se partió.

Sustituyendo en (115) los aproximantes de Padé no triviales (119), (120) se obtienen los siguientes aproximantes a $f(x)$

$$f(x) \approx a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{Z-3}x^{Z-3} + a_{Z-2}x^{Z-2}[1/1](x), \quad (119)$$

$$f(x) \approx a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{Z-3}x^{Z-3} + a_{Z-2}x^{Z-2}[0/2](x), \quad (120)$$

los cuales son claramente de la forma (107). Observemos que el aproximante escrito en (119), es el aproximante de Padé a $f(x)$ dado por $[Z - 1/1](x)$. También notemos que la Ec. (120) es el aproximante de Padé $\{(Z - 1)/2\}(x)$, y este es un nuevo aproximante no dado por los aproximantes de Padé hasta grado Z . Por lo tanto, el método “tailing” produce aproximantes adicionales a los producidos por el método de Padé normal.

Continuando con el método “tailing”, el siguiente paso es factorizar el término $a_{Z-3}x^{Z-3}$ de (106) en la forma siguiente

$$f(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_{Z-3}x^{Z-3} \left[1 + \frac{a_{Z-2}x}{a_{Z-3}} + \frac{a_{Z-1}x^2}{a_{Z-3}} + \frac{a_Zx^3}{a_{Z-3}} + \cdots \right]. \quad (121)$$

Se encuentran ahora los aproximantes de Padé a la “cola” de la serie (121), es decir, de la expresión entre paréntesis cuadrados de la ecuación anterior

$$1 + \frac{a_{Z-2}x}{a_{Z-3}} + \frac{a_{Z-1}x^2}{a_{Z-3}} + \frac{a_Zx^3}{a_{Z-3}} \triangleq [3/0](x) \quad (\text{trivial}) \quad (122)$$

$$\triangleq [2/1](x) \quad (123)$$

$$\triangleq [1/2](x) \quad (124)$$

$$\triangleq [0/3](x) \quad (125)$$

Sustituyendo los aproximantes de Padé no triviales en la serie (121), se obtienen los siguientes aproximantes a $f(x)$

$$f(x) \approx a_0 + a_1x + \cdots + a_{Z-3}x^{Z-3}[2/1](x) \quad (126)$$

$$f(x) \approx a_0 + a_1x + \dots + a_{Z-3}x^{Z-3}[1/2](x) \quad (127)$$

$$f(x) \approx a_0 + a_1x + \dots + a_{Z-3}x^{Z-3}[0/3](x) \quad (128)$$

Una vez más las Ecs. (126) y (127) generan los aproximantes de Padé normales $[(Z-1)/1](x)$ y $[(Z-2)/2](x)$. La Ec. (128) genera el aproximante de Padé $[(Z-1)/3](x)$ el cual es un nuevo aproximante a $f(x)$ no incluido en los aproximantes de Padé a $f(x)$ hasta grado Z .

El proceso anterior se repite hasta acabar con todos los términos de la serie (106). Es claro que en el último paso de este proceso la “cola” de la serie es la serie completa, entonces, los aproximantes de Padé de la “cola” son los aproximantes normales de Padé de la serie (106), es decir, en el último paso del método “tailing” se reduce al método de Padé ($P(x) = 0$).

Por definición, se sabe que los aproximantes a $f(x)$ Ec. (106) utilizando el método “tailing” son de la forma $f(x) \approx P(x) + N(x)/D(x)$, con $P(x)$, $N(x)$, y $D(x)$ polinomios con coeficientes constantes. Para obtener estos coeficientes se procede como en el método de Padé normal. Es decir, que la serie de Taylor de $f(x)$ y $P(x) + N(x)/D(x)$ coincidan hasta grado Z esto es,

$$\left. \frac{d^n f(x)}{dx^n} \right|_{x_0} = \left. \frac{d^n}{dx^n} \left(P(x) + \frac{N(x)}{D(x)} \right) \right|_{x_0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, Z \quad (129)$$

Donde al igual que en el método de Padé, se obtiene un sistema de $Z+1$ ecuaciones simultáneas, cuya solución da el valor de los coeficientes de los polinomios $P(x)$, $N(x)$ y $D(x)$. De esta forma se generan los aproximantes de forma explícita.

Por lo tanto, al aplicar el método “tailing” a una serie de potencias hasta grado Z Ec. (106), se producen aproximantes con la forma dada por la Ec. (107), tal que su desarrollo en potencias reproduce la serie (106) hasta grado Z .

3 Aplicación del método “Tailing” y de Padé

En esta sección se aplica el método de Padé y “tailing” a un ejemplo concreto. Además, se obtiene el número de nuevos posibles aproximantes dados por el método “tailing” no contenidos en el método de Padé.

Como ejemplo concreto tomemos la función exponencial

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots, \quad (130)$$

calculemos entonces, por los métodos antes expuestos, los aproximantes de Padé y “tailing” de cuarto grado de la serie (130), es decir, los aproximantes de Padé y “tailing” deben cumplir con que sus desarrollos de potencias coincidan con la serie (130) hasta el término $x^4/4!$. Estos aproximantes vienen dados en la Tabla 5 y son graficados en la Fig. 10.

Aproximantes de Padé	Aproximantes “Tailing”
$[0/4] = \frac{1}{1-x+x^2/2!-x^3/3!+x^4/4!}$	$(3/1) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3/3!}{1-x/4}$
$[1/3] = \frac{1+x/4}{1-3x/4+x^2/4-x^3/4!}$	$(3/1) = 1 + x + \frac{x^2/2!+x^3/4!}{1-x/4}$
$[2/2] = \frac{1+x/2+x^2/12}{1-x/2+x^2/12}$	$(3/2) = 1 + x + \frac{x^2/2!}{1-x/3+x^2/36}$
$[3/1] = \frac{1+3x/4+x^2/4+x^3/4!}{1-x/4}$	$(3/1) = 1 + \frac{x+x^2/4+x^3/4!}{1-x/4}$
	$(2/2) = 1 + \frac{x+0x^2}{1-x/2+x^2/12}$
	$(3/3) = 1 + \frac{x}{1-x/2+x^2/12+0x^3}$

Tabla 5. Aproximantes que se obtienen por el método de Padé y “tailing” cuando se aplican a los primeros 5 términos del desarrollo la función e^x .

Para una visualización más clara del comportamiento de los aproximantes obtenidos

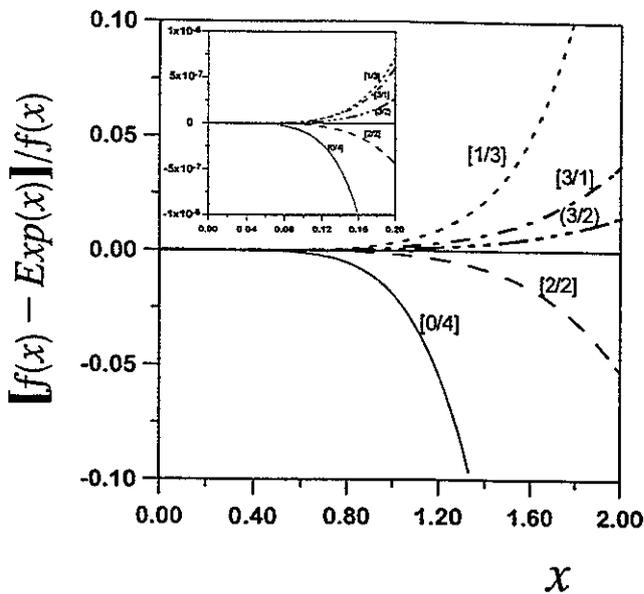


Figura 10. Diferencia relativa de los aproximantes de Padé y "tailing" $[f(x)]$ respecto de la función e^x , tomando en cuenta sólo cinco términos del desarrollo de Taylor.

por el método de Padé y "tailing" dados en la Tabla 5, en la Fig.10 se muestran las curvas de $(f(x) - e^x)/e^x$, donde $f(x)$ es un aproximante de "tailing" o Padé. Es de notar que todos los aproximantes tienen el comportamiento esperado para $x < 1$, aunque el aproximante "tailing" $(3/2)$ es el que más se acerca a la función e^x . La gráfica superior muestra las mismas curvas en una escala distinta.

En la Tabla 5 y Figura 10 notamos lo siguiente:

- El primero, segundo y cuarto de los aproximantes "tailing" son iguales entre ellos y al aproximante de Padé $[3/1]$.

- El quinto y sexto de los aproximantes “tailing” son iguales entre ellos y al aproximante de Padé $[2/2]$.
- Por lo que se verá más adelante, el método “tailing” aplicado a (130) debe producir dos posibles nuevos aproximantes no dados por el método de Padé, estos son, el tercero y sexto de los aproximantes “tailing” en la Tabla 5. Pero sólo el tercero de los aproximantes “tailing” es un nuevo aproximante. El sexto de los aproximantes “tailing” tiene un coeficiente igual a cero, por lo que se reduce a uno de los aproximantes de Padé.
- Para mostrar que efectivamente los aproximantes de Padé y “tailing” tienden a la función exponencial para valores de $x < 1$, se hace una gráfica de $(f(x) - e^x)/e^x$ vs x , donde $f(x)$ representa a el aproximante de Padé o “tailing”. En la Fig. 10 se observa que aunque todos los aproximantes de Padé tienen el comportamiento esperado, el aproximante de “tailing” $(3/2)$ es el que se “pega” más a la función e^x . Sin embargo, de aquí no podemos asegurar que para cualquier función los aproximantes “tailing” extras sean mejores que los de Padé.

De lo discutido en las primeras secciones de este apéndice y del ejemplo anterior, se originan las siguientes preguntas ¿cuántos aproximantes son generados por el método “tailing”? ¿cuántos aproximantes dados por el método “tailing” son idénticos a los dados por el método de Padé? y entonces ¿cuántos aproximantes distintos a los de Padé produce el método “tailing”? Vamos a tratar de dar respuesta a estas preguntas.

Sea una función de la variable x expresada en series de potencias donde sólo se conocen sus $Z + 1$ primeros términos.

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_Zx^Z + \dots \quad (131)$$

$$\Rightarrow f(x) = \sum_{i=0}^{Z-(k+1)} a_i x^i + \sum_{i=Z-k}^Z a_i x^i, \quad (132)$$

entonces, la factorización k -ésima en el método "tailing" resulta ser

$$f(x) = \sum_{i=0}^{Z-(k+1)} a_i x^i + a_{Z-k} x^{Z-k} \left[1 + \frac{a_{Z-k+1}}{a_{Z-k}} x^{Z-k+1} + \dots + \frac{a_Z}{a_{Z-k}} x^k \right]. \quad (133)$$

Aplicando el método de Padé al polinomio de grado k de la Ec. (133), se obtienen k aproximantes con la siguiente estructura

$$f(x) = \sum_{i=0}^{Z-(k+1)} a_i x^i + a_{Z-k} x^{Z-k} \frac{\sum_{j=0}^L b_j x^j}{\sum_{j=0}^N c_j x^j}, \quad (134)$$

con $N + L = k$ y k puede tomar los valores⁸ $k = 1, 2, \dots, (Z - 1)$. Esto es, para el polinomio de grado Z de la Ec. (131) se pueden generar por el método "tailing"

$$1 + 2 + 3 + \dots + (Z - 1) = \frac{Z(Z - 1)}{2} \quad (135)$$

aproximantes (no todos necesariamente distintos) tal que su desarrollo en series de potencias coincida con el de la función (131) hasta grado Z .

Por otro lado, el aproximante "tailing" (134) puede escribirse de la siguiente manera

$$f(x) = \frac{\left(\sum_{i=0}^{Z-(k+1)} a_i x^i \right) \left(\sum_{j=0}^N c_j x^j \right) + a_{Z-k} x^{Z-k} \left(\sum_{j=0}^L b_j x^j \right)}{\sum_{j=0}^N c_j x^j} \quad (136)$$

De (136) se desprenden dos casos interesantes

Caso 1

Partimos de un aproximante "tailing" (134) y a partir de este, se construye una estructura tipo Padé (136), luego notemos cuando esta estructura corresponde a un aproximante de Padé.

⁸Si $k = 0$ entonces el caso es trivial, si $k = Z$ entonces el método "tailing" se reduce al método de Padé.

La Ec. (136) tiene la estructura de un aproximantes de Padé a $f(x)$, si cumple que el grado del polinomio del numerador de (134) satisfice

$$Z - (k + 1) + N \leq Z - k + L \quad (137)$$

$$\Rightarrow N \leq L + 1 \quad \text{con} \quad L + N = k \quad (138)$$

Esto quiere decir que cuando se satisfacen las restricciones (138) los aproximantes producidos por el método "tailing" son idénticos a los producidos por el método de Padé. Este resultado se justifica por el hecho de que, los aproximantes de Padé son únicos.

Otra forma de obtener el resultado anterior es procediendo a la inversa, es decir, partimos de un aproximante de Padé a $f(x)$ (131) dado por

$$f(x) \simeq \frac{\sum_{i=0}^p d_i x^i}{\sum_{i=0}^q e_i x^i} \equiv [p/q] \quad \text{con} \quad p + q = Z \quad (139)$$

Si nos fijamos en los aproximantes con $q = N$, y además sumamos y restamos en el numerador de (139) la cantidad $(\sum_{i=0}^q e_i x^i) (\sum_{j=0}^{Z-(k+1)} a_j x^j)$, obtenemos

$$f(x) \simeq \sum_{j=0}^{Z-(k+1)} a_j x^j + \frac{\sum_{i=0}^p d_i x^i - (\sum_{i=0}^N e_i x^i) (\sum_{j=0}^{Z-(k+1)} a_j x^j)}{\sum_{i=0}^N e_i x^i}. \quad (140)$$

Lo anterior indica que el desarrollo en potencias del segundo término a la derecha de (140) debe dar el polinomio

$$a_{Z-k} x^{Z-k} + a_{Z-k+1} x^{Z-k+1} + \dots + a_Z x^Z + \dots \quad (141)$$

pero, el polinomio (141) también está representado en (134), y debido a que la representación es única se tiene

$$\frac{a_{Z-k} x^{Z-k} (\sum_{j=0}^L b_j x^j)}{\sum_{i=0}^N c_i x^i} = \frac{\sum_{i=0}^p d_i x^i - (\sum_{i=0}^N c_i x^i) (\sum_{j=0}^{Z-(k+1)} a_j x^j)}{\sum_{i=0}^N c_i x^i} \quad (142)$$

La Ec. (142) se satisface si

$$Z - k + L \geq N + Z - (k + 1) \quad (143)$$

$$\Rightarrow N \leq L + 1 \quad \text{con} \quad L + N = k \quad (144)$$

Entonces, los aproximantes de Padé y “tailing” son idénticos si se satisfacen las condiciones (138). Como una verificación de las restricciones (138), estas se cumplen en el caso del ejemplo concreto de la función exponencial (130).

Caso 2

Si ahora la Ecs. (136) y/o (142) no tienen la estructura de un aproximante de Padé si se cumple que

$$Z - (k + 1) + N > Z - k + L \quad (145)$$

$$\Rightarrow N > L + 1 \quad \text{con} \quad L + N = k \quad (146)$$

Por lo tanto, todo aproximante construido con el método de “tailing” que satisface las restricciones (146) es un posible nuevo aproximante no dado por el método de Padé. Como una verificación de las restricciones (146) ellas se satisfacen en el caso del ejemplo concreto de la función exponencial (130).

Vamos ahora a encontrar cuantos nuevos posibles aproximantes distintos de los de Padé, se obtienen por el método de “tailing”.

Se puede utilizar la tabla de Padé con el propósito de contar estos nuevos aproximantes, pues las restricciones (146) nos dicen que

- Los nuevos aproximantes están “arriba” de la paradiagonal que tiene elementos $[L/N]$ con $N = L + 1$

- El valor máximo de k es $k_{max} = Z - 1$ y como $N + L = k$ entonces, los nuevos aproximantes están “arriba” de la diagonal inversa que tiene elementos $[L/N]$ tal que $L + N = Z - 1$.

Si se elimina la primera columna y el último renglón de la tabla de Padé, la nueva tabla tendrá Z^2 elementos y Z elementos en su diagonal. Si m es el número de nuevos posibles aproximantes dadas por el método “tailing”. Entonces, el número total de elementos de la nueva tabla se obtiene de las siguientes relaciones

$$\text{si } Z \text{ es par} \Rightarrow Z^2 = 4m + Z + Z \quad (147)$$

$$\text{si } Z \text{ es impar} \Rightarrow Z^2 = 4m + Z + (Z - 1) \quad (148)$$

Es decir, si se tiene un polinomio de grado Z , el número de nuevos posibles aproximantes producidos por el método “tailing” no dados por el método de Padé son (despejando m de (147) y (148))

$$\text{si } Z \text{ es par} \Rightarrow m = \frac{Z^2 - 2Z}{4} \quad (149)$$

$$\text{si } Z \text{ es impar} \Rightarrow m = \frac{Z^2 - 2Z + 1}{4} \quad (150)$$

Resumen

Si $f(x)$ es una función dada por (131) entonces, se cumplen las siguientes afirmaciones

- Existen Z aproximantes de Padé $[L/N](x)$ a $f(x)$ tal que $L + N = Z$ con Z un número fijo.
- Existen $Z(Z + 1)/2$ aproximantes de Padé $[L/N](x)$ tal que $L + N = Z'$ con $Z' = 1, 2, \dots, Z$.
- Existen $Z(Z - 1)/2$ aproximantes dados por el método “tailing”.

- Si los aproximantes dados por el método “tailing” cumplen con las restricciones $N \leq L + 1$ y $L + N = k$. Entonces, estos aproximantes son idénticos a los dados por el método de Padé.
- El método “tailing” produce posibles nuevos aproximantes no dados por el método de Padé, si se cumplen las restricciones $N > L + 1$ y $L + N = k$. El número de nuevos posible aproximantes está dado en (149) y (150).
- Se encontraron los aproximantes por el método de Padé y “tailing” para el ejemplo concreto de la función exponencial (130), en esta se tuvo la oportunidad de comprobar los puntos arriba mencionados.

Apéndice B

Aproximantes “tailing” de grado menor

Aquí se reproducen los aproximantes “tailing” a la serie (38) tomando en cuenta sólo dos y tres términos de ésta.

Aproximantes “tailing” de grado menor

Se aplica el método “tailing” a la serie (38), discutido en el capítulo 4, pero ahora tomando en cuenta sólo dos y tres términos de (38) además del trivial. Da como resultado 4 y 12 aproximantes, los cuales son mostrados en las Tablas 6 y 7 respectivamente. Estos aproximantes ya han sido reportados en la Ref. [6] y aquí los reproducimos por completéz.

Form	$P(x)$	$N(x)$	$D(x)$	Comentario
B21	1	$K_1 x$	$1 - \frac{K_2}{K_1} x \ln x^2$	$x_e \approx 0.86$
B22	0	1	$1 - K_1 x - K_2 x^2 \ln x^2$	
B23	0	$1 + K_2 x^2 \ln x^2$	$1 - K_1 x$	
B24	0	$1 + k_1 x$	$1 - K_2 x^2 \ln x^2$	

Tabla 6. Muestra los aproximantes “tailing” cuando se toman en cuenta sólo los dos primeros términos de la serie (38), además del trivial.

La columna 5 de la Tabla 6 indica que sólo el aproximante $B201(x)$ puede ser tomado en cuenta, pues los restantes aproximantes no cumplen con la condición de monotonicidad requerida para la energía. El aproximante $B201(x)$ es mostrado en la Fig. 5.

Forma	P(x)	N(x)	D(x)	K_3	Residuo	Polos
B301	1	$K_1 x + K_2 x^2 \ln(x^2)$	$1 - K_3/K_1 x$	8.718603	0.2041	no
B302	1	$K_1 x + K_3 x^2$	$1 - K_2/K_1 x \ln(x^2)$	2.085151	0.0015	no
B303	1	$K_1 x$	$1 - K_2/K_1 x \ln(x^2) - K_3/K_1 x$	5.535514	0.4198	no
B304	0	$1 + (K_1 - K_3/K_1) x$	$1 - K_3/K_1 x - K_2 x^2 \ln(x^2)$	3.611888	134.8364	0.2048 0.8525
B305	0	$1 + (K_1 - K_3/K_1) x + K_2 x^2 \ln(x^2)$	$1 - K_3/K_1 x$	8.718603	0.2041	no
B306	0	1	$1 - K_1 x - K_2 x^2 \ln(x^2) - (K_3 - K_1 K_1) x^2$	no solution	—	—
B307	0	$1 + K_1 x + K_2 x^2 \ln(x^2)$	$1 - K_3 x^2$	no solution	—	—
B308	0	$1 + K_2 x^2 \ln(x^2) + (K_3 - K_1^2) x^2$	$1 - K_1 x$	6.896064	0.1063	no
B309	0	$1 + K_1 x + K_3 x^2$	$1 - K_2 x^2 \ln(x^2)$	1.360548	15095.8104	0.1692 0.9446
B310	0	$1 + K_1 x$	$1 - K_2 x^2 \ln(x^2) - K_3 x^2$	no solution	—	—
B311	0	$1 + K_2 x^2 \ln(x^2)$	$1 - K_1 x - (K_3 - K_1^2) x^2$	no solution	—	—
B312	0	$1 + (K_3 - K_1^2) x^2$	$1 - K_1 x - K_2 x^2 \ln(x^2)$	4.972436	53.5525	0.2340 0.7890
TRUN	0	$1 + K_1 x + K_2 x^2 \ln(x^2) + K_3 x^2$		3.284176	0.0110	no

Tabla 7. Aproximantes “tailing” cuando se toman en cuenta sólo los tres primeros términos de la serie (38), además del trivial.

En la Ref. [6] se reportan los 12 aproximantes a (38) con tres términos y se obtienen dos aproximantes (B302(x) y B303(x)) que mejor se ajustan a los datos GFMC. Sin embargo, el ajuste fue equivocado pues consideró sólo la mitad de la energía correcta.

En un trabajo posterior [7] se hizo el ajuste correcto apareciendo el aproximante B311(x) como el que mejor se ajusta a los datos GFMC.

Aquí analizamos cada uno de los 11 aproximantes diferentes aplicándole las condiciones físicas discutidas en el Cap. 3. Las columnas 5 y 6 de la Tabla 7, proporcionan los valores de K_3 y de el *residuo* respectivamente, los cuales se obtienen bajo la hipótesis de que la máxima densidad de empaquetamiento posible es la densidad de Bernal. La columna 7 muestra los valores de la variable x donde los aproximantes tienen polos dentro del intervalo de densidades. En la Fig. 11 mostramos los aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}$ que estuvieron libres de polos. Nótese que el aproximantes B305(x) es idéntico al aproximante B301(x). Es de notar que sólo el aproximante etiquetado con B303(x) cumple con las condiciones requeridas de monotonicidad para la energía y no polos en el intervalo de densidades físicas.

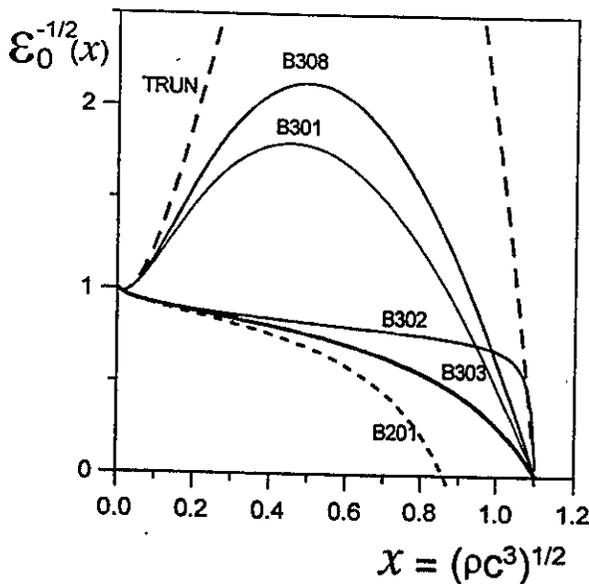


Figura 11. Aproximantes $\epsilon_0^{-1/2}$ a la serie (38) con 3 términos además del trivial, que estuvieron libres de polos.

References

- [1] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, N.Y. 1963).
- [2] K. Huang and C. N. Yang, *Phys. Rev.* **105**, 765 (1957); T. D. Lee, K. Huang and C. N. Yang, *Phys. Rev.* **106**, 1135 (1957).
- [3] T.T. Wu, *Phys. Rev.* **115**, 1390 (1959).
- [4] M. H. Kalos, D. Levesque and L. Verlet, *Phys. Rev. A* **24**, 2178 (1974).
- [5] F London, *Superfluids* (Dover, N.Y., 1964) Vol. II, p. 30.
- [6] V. C. Aguilera-Navarro, Shirley Ho and M. de Llano, *Phys. Rev. A* **36**, 5742 (1987).
- [7] C. Keller, M de Llano, S. Z. Ren, M. A. Solís and G. A. Baker, Jr., *Ann. Phys. (N.Y.)* **251**, 64 (1996).
- [8] D.A. McQuarrie, *Statistical Mechanics* (Harper & Row Publisher, Inc., N.Y. 1976).
- [9] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* 2nd Edición (Pergamon, Oxford, 1996).
- [10] B. H. Bransden, *Atomic Collision Theory* (W. A. Benjamin, Inc. N.Y. 1970).
- [11] M. A. Solís, M. de Llano and R. Guardiola, *Phys. Rev. B* **49**, 13201 (1994).
- [12] N. Hugenholtz and D. Pines, *Phys. Rev.* **116**, 489 (1959).
- [13] G. A. Baker, Jr., G. Gutiérrez and M. de Llano, *Ann. Phys. (N.Y.)* **153**, 283 (1984).
- [14] J. D. Bernal, *Nature (London)* **188**, 910 (1960); J. D. Bernal, *Proc. Roy. Soc. A* **280**, 299 (1964).
- [15] J. D. Finney, *Proc. Roy. Soc. A* **319**, 479 (1970).

- [16] C. H. Bennett, *J. Appl. Phys.* **43**, 2727 (1972).
- [17] J. B. Hubbard, L. Masinter and Z. W. Salsburg, *J. Chem. Phys.* **51**, 4363 (1969).
- [18] R. K. Cole, Jr., *Phys. Rev.* **155**, 114 (1967).
- [19] P. R. Graves-Morris, *Padé Approximants* editado por P. R. Graves-Morris (Institute of Physics, London 1973).
- [20] R. Guardiola, comunicación personal.