

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Desarrollo y Aplicación de Métodos
de Suma de Series Perturbacionales
Parte B

Trabajo de Tesis Doctoral presentado por el Licenciado:

GUSTAVO ALBERTO ARTECA

LA PLATA 1985

PARTE B

"Gaudeamus igitur, juvenes dum sumus

Canto latino tradicional
de las Universidades.

CAPITULO XIII

GENERALIZACION DEL METODO FUNCIONAL (MF) COMO UNA TECNICA DE SUMA
DE SERIES PERTURBATIVAS.

§.42. GENERALIZACION DEL METODO FUNCIONAL (MF): CONEXION ENTRE RELACIONES SEMICLASICAS Y LAS SERIES RENORMALIZADAS.

La aplicación de la TPRS, como ya lo hemos discutido ampliamente, está frecuentemente asociada al problema de sumar series de potencias divergentes. En los capítulos precedentes hemos mostrado cómo el MFV proporciona una vía sistemática para construir diversas expresiones para los autovalores de ciertos sistemas mecanocuánticos. Tales expresiones proveen un esquema de trabajo, apropiadamente adaptado para introducir la información aportada por la TP. Dedicaremos entonces este parágrafo y el resto de la obra, a investigar la generalización del MFV como una técnica de suma de series divergentes de interés físicoquímico.

Al diseñar el nuevo formalismo a partir de la experiencia acumulada con el MFV, nuestra visión del problema de la suma de series perturbacionales es en cierto modo más amplia, y de mayor contenido físico, que la mayoría de las técnicas usualmente utilizadas (ver Cap.V). El formalismo que desarrollaremos en este capítulo, y que aplicaremos en los siguientes, presenta algunas ventajas notables: i) Un rango de aplicabilidad más amplio, no restringido a problemas de autovalores; ii) Una vía general para combinar propiedades analíticas (por ejemplo, desarrollos asintóticos) con la TP; iii) Una unificación de varias técnicas de suma de series perturbacionales presentes en la literatura y iv) Mejores resultados numéricos para un gran número de sistemas.

Los resultados que han sido obtenidos en nuestro laboratorio, y que presentaremos en el resto de la obra, son totalmente originales y en parte aún inéditos. El resto de los resultados son de publicación reciente, y en ese aspecto pueden consultarse las refs./1,2/, en lo que hace al temario del presente parágrafo.

El problema que nos ocupa puede ser planteado en forma bien general del siguiente modo: Sea $E(\lambda)$ la función que estamos interesados en aproximar, de la que sabemos que puede desarrollarse en serie de potencias de la siguiente manera:

$$E(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} E^{(i)} \lambda^i \quad , \quad (42.1)$$

$$E(\lambda) = \lambda^{\beta} e(\lambda) = \lambda^{\beta} \sum_{i=0}^{\infty} e^{(i)} \lambda^{\alpha i} \quad , \quad \alpha < 0 \quad , \quad (42.2)$$

cuando $\lambda \ll 1$ y $\lambda \gg 1$ respectivamente.

Generalizaremos ahora el MFV partiendo de las propiedades (42.1) y (42.2). Los componentes esenciales del MFV son un funcional variacional y su condición de extremo. Ellos determinaban, según vimos, el crecimiento aproximadamente correcto con λ para los autovalores de sistemas mecánico-cuánticos a través del TV y el THF. Parece entonces apropiado asociar a los desarrollos (42.1) y (42.2) un par y sólo un par de ecuaciones que jueguen el papel de un funcional y su condición de extremo.

Sea entonces $F(q)$ un funcional asociado a $E(\lambda)$:

$$F(q) = \frac{A}{q^2} + q^s + \lambda q^t B(\lambda, q) \quad , \quad (42.3)$$

cuya forma representa una simple extensión de los funcionales del tipo (36.2a). Por el momento s y t son dos exponentes desconocidos. La usual condición de extremo sobre q para $F(q)$ ($\partial F / \partial q = 0$):

$$2A = sq^{s+2} + \lambda tq^{t+2}B + \lambda q^{t+3} \left(\frac{\partial B}{\partial q} \right)_{\lambda} \quad , \quad (42.4)$$

nos garantiza que tanto q como $F(q)$ son desarrollables en serie de λ . Nuestro problema es determinar, en primer lugar, a los exponentes s y t a partir de las dos propiedades (42.1) y (42.2).

Podemos hacer aquí una pequeña digresión. Según el esquema de trabajo estudiado en los capítulos precedentes, (42.3) podría asociarse a un hamiltoniano con un potencial de la forma $V(x) = |x|^s + \lambda |x|^t$, cuyo valor medio estaría representado por los últimos términos de F . Por otro lado, el término A/q^2 representaría el valor medio de la energía cinética. Tal analogía es simplemente formal, ya que el problema nos proponemos estudiar está definido, en términos muy generales, por dos desarrollos en serie (42.1) y (42.2). En consecuencia, la función $E(\lambda)$ no corresponde en general al autovalor de un problema cuántico.

Sin embargo dicha analogía resulta un argumento muy cómodo para comprender, desde un punto de vista matemático, cuál es el sentido de nuestra generalización. El razonamiento es el siguiente: Si consideramos un sistema cuántico definido por un potencial suma de dos términos, tal que uno de ellos posea el parámetro perturbacional λ , el mismo tiene asociado un funcional de la forma (42.3). En este caso, y como consecuencia de la condición de extremo (42.4), el funcional admite una descripción única en dos regímenes, correspondientes a $\lambda \rightarrow 0$ y $1/\lambda \rightarrow 0$. Para realizar la generalización hemos razonado en forma inversa: dados los desarrollos característicos asintóticos de una función le hemos asociado un funcional con dos términos como contribución del potencial.

De acuerdo a lo discutido más arriba esperamos que el funcional F sea único y que su estructura esté totalmente determinada por el par de exponentes α y β .

Antes de estudiar la relación entre (s, t) y (α, β) es conveniente que volvamos sobre la ec. (42.4). La condición de extremo del funcional cumple el fundamental papel de vincularnos a las variables q y λ , asegurando

que la función F posee la dependencia asintótica correcta con λ . Por consiguiente, podemos abstraer la estructura más relevante que, desde el punto de vista matemático, posee la ec.(42.4) y transformarla en la ecuación más simple que nos vincule λ con q . La ecuación que logra dicho propósito, manteniendo las características esenciales de la condición de extremo (42.4), es la siguiente:

$$q^{s+2} + \lambda \rho q^{t+2} = 1 \quad , \quad (42.5)$$

donde ρ es un parámetro real, que utilizaremos para mejorar la convergencia de la serie renormalizada que se derive de la utilización del funcional (42.3).

Estamos ahora en condiciones de determinar la forma del funcional $F(q)$. El siguiente teorema nos da una respuesta general:

Teorema 42.1: Sea $F(q)$ el funcional (42.3), donde q es solución de la ec.(42.5). Entonces, si $B(\lambda, q)$ es una función desarrollable en serie de potencias de λ y λ^α , $F(q)$ satisface los desarrollos en serie (42.1) y (42.2) si y sólo si se cumple:

$$s = -\frac{2}{\beta} (\alpha + \beta) \quad , \quad t = \frac{2}{\beta} (1 - \beta) \quad (42.6)$$

Demostración: Realizamos el cambio de variables: $q = q' \lambda^{-1/(t+2)}$ en la ec. (42.3) y obtenemos:

$$\begin{aligned} F(q) &= \lambda^{2/(t+2)} \left\{ \frac{A}{q'^2} + \lambda^{-(s+2)/(t+2)} q'^s + q'^t B(\lambda, q) \right\} \\ &= \lambda^{2/(t+2)} F' \end{aligned} \quad (42.7)$$

Ahora bien, la ec.(42.5) nos asegura que F y q poseen los mismos desarrollos en serie de potencias. Por otro lado por hipótesis $B(\lambda, q)$ es desarrollable en serie de λ y λ^α . En consecuencia, para que se cumplan los desarrollos (42.1) y (42.2) es necesario probar que F se puede escribir como $F = \lambda^\beta F'$, con F' una función desarrollable en serie de λ^α . Lo discutido más arriba y la ec.(42.7) nos aseguran que esto se cumple si:

$$\beta = 2/(t+2) \quad , \quad \alpha = -(s+2)/(t+2) \quad , \quad (42.8)$$

lo que inmediatamente nos lleva a (42.6).

Continuando ahora nuestro análisis, vemos que la ec.(42.5) nos provee el valor de la variable q para cada funcional (esto es, para cada par de exponentes (α, β)), y para cada valor de $\lambda \rho$. Esta ecuación es algebraica siempre que α y β sean racionales, y posee algunas interesantes propiedades que pasaremos a estudiar a continuación:

Lema 42.1: La ec.(42.5) posee una y sólo una raíz (real) q , tal que $q^{2/\beta} \in |0, 1|$ si $\lambda \rho > 0$.

Demostración: Por comodidad reescribamos la ec.(42.5) de la siguiente

manera:

$$v + \lambda \rho v^{(t+2)/(s+2)} = 1, \quad v = q^{s+2}, \quad (42.9a)$$

que por (42.6) es:

$$f(v) = v + \lambda \rho v^{-1/\alpha} - 1 = 0 \quad (42.9b)$$

A partir de (42.5) deducimos las propiedades asintóticas de q:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} q = 1, \quad \text{luego:} \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} v = 1, \quad (42.9c)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} q^{t+2} = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} q^{2/\beta} = 0, \quad \text{luego:} \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} v^{-1/\alpha} = 0, \quad (42.9d)$$

que resulta así una variable acotada. Reemplazando (42.9c) y (42.9d) en (42.9b) obtenemos el siguiente resultado:

$$f(0) = -1, \quad f(1) = \lambda \rho > 0, \quad (42.9e)$$

con lo cual $f(v)$ posee al menos una raíz cuando $v^{-1/\alpha} \in [0,1]$; esto es, cuando $q^{2/\beta} \in [0,1]$. Para que exista más de un cero, $f(v)$ debe poseer al menos un extremo en el intervalo; calculando la derivada primera encontramos:

$$f'(v) = 1 - \frac{\lambda \rho}{\alpha} v^{-(\alpha+1)/\alpha} > 0, \quad \text{para todo } v > 0, \quad (42.9f)$$

luego es evidente que la raíz es única.*

Corolario: Si q es raíz de (42.5), entonces $q^{2/\beta}$ es una función acotada y monótona creciente de λ , para todo $\lambda \rho > 0$.

Lema 42.2: Para todo $\lambda \rho < 0$ y $\alpha \in (-1,0)$, la ec.(42.9a) posee dos raíces reales tal que $q^{2/\beta} \in [1,\infty)$.

Demostración: La ec.(42.9a) se puede reescribir convenientemente como:

$$\lambda \rho = v^{1/\alpha} (1-v) \quad (42.10a)$$

Para estudiar el número de raíces debemos analizar el número de valores v asignados a cada valor de $\lambda \rho$. Estudiando los extremos de $\lambda \rho$ como función de v :

$$\left| \frac{\partial}{\partial v} (\lambda \rho) \right| (v=v_c) = 0, \quad \text{luego:} \quad v_c = \frac{1}{\alpha+1}, \quad (42.10b)$$

veamos que sólo aparece un extremo v_c , luego el número de raíces a lo sumo dos. Veamos que por otro lado para que el funcional (42.3) sea, en general, real se debe cumplir: $q > 0$, luego $v > 0$. En consecuencia, en virtud de la ec.(42.10b), v_c existe si $|\alpha| < 1$, de donde $v_c > 1$ y luego $q_c^{2/\beta} > 1$. En esta condición aparecerán dos raíces v en algún intervalo de valores de $\lambda \rho$ tal que $|\lambda \rho| < |\lambda \rho_c|$. Nos queda por demostrar que en esta caso $\lambda \rho_c < 0$.

A partir de (42.10b) y (42.9a) encontramos:

$$q_c = (\alpha+1)^{\beta/2\alpha} \quad , \quad (42.10c)$$

que introducido en (42.5) nos da:

$$\lambda \rho_c = \alpha(\alpha+1)^{-(\alpha+1)/\alpha} < 0 \quad , \quad \text{para } \alpha \in (-1, 0) \quad (42.10d)$$

Por otro lado, la ec.(42.10a) nos asegura que:

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \lambda \rho = 0 \quad , \quad \alpha \in (-1, 0) \quad (42.10e)$$

Esta última ecuación nos asegura que $\lambda \rho = 0$ es asíntota para v y en consecuencia, dado que v_c es único, existe una única raíz para $\lambda \rho > 0$ (lema 42.1) y dos para $\lambda \rho < 0$ (ec.(42.10d)). La situación se ilustra claramente en la fig.13.1.*

Para otros valores de α ($\alpha \leq -1$) el análisis es más simple que el correspondiente al del lema 42.2. La situación se contempla plenamente en la fig.13.1. Es evidente que si $\alpha \leq -1$, hay un único valor de q para $\lambda \rho < 0$. Podemos notar que si $\alpha = -1$ no hay raíces si $\lambda \rho < -1$, así como no hay raíces para $\rho < \rho_c$ (ec.(42.10d)) si $\alpha \in (-1, 0)$.

Los lemas 42.1 y 42.2 establecen las propiedades esenciales para seleccionar el valor de q del funcional. Notemos desde ahora que la zona de trabajo óptima es $0 \leq \lambda < \infty$ ($\rho > 0$) que es la usual en las series perturbativas.

Como paso siguiente debemos construir la función $B(\lambda, q)$. Para ello utilizaremos el mismo argumento que introdujimos en el §.38, buscando variables que puedan desarrollarse en serie de λ y λ^α , tal como lo exige el teorema 42.1.

De la ec.(42.5) se deduce que tanto q^{s+2} como λq^{t+2} se pueden desarrollar en serie de λ , al igual que q . Por otro lado, utilizando el cambio de variables introducido en el teorema 42.1, la ec.(42.5) se transforma en:

$$\lambda^{-(s+2)/(t+2)} q^{s+2} + \rho q^{t+2} = \lambda^\alpha q^{s+2} + \rho q^{t+2} = 1 \quad , \quad (42.11)$$

lo que nos muestra que tales variables son también desarrollables en serie de potencias de λ^α . Definiendo entonces las variables:

$$u = \lambda q^{t+2} \quad , \quad (42.12)$$

$$v = q^{s+2} \quad , \quad (42.13)$$

tenemos dos posibles representaciones analíticas alternativas para $B(\lambda, q)$:

$$B = \sum_{n=0}^{\infty} b^{(n)} u^n \quad , \quad (42.14)$$

A partir de (42.10b) y (42.9a) encontramos:

$$q_c = (\alpha+1)^{\beta/2\alpha} \quad , \quad (42.10c)$$

que introducido en (42.5) nos da:

$$\lambda \rho_c = \alpha(\alpha+1)^{-(\alpha+1)/\alpha} < 0 \quad , \quad \text{para } \alpha \in (-1, 0) \quad (42.10d)$$

Por otro lado, la ec.(42.10a) nos asegura que:

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \lambda \rho = 0 \quad , \quad \alpha \in (-1, 0) \quad (42.10e)$$

Esta última ecuación nos asegura que $\lambda \rho = 0$ es asíntota para v y en consecuencia, dado que v_c es único, existe una única raíz para $\lambda \rho > 0$ (lema 42.1) y dos para $\lambda \rho < 0$ (ec.(42.10d)). La situación se ilustra claramente en la fig.13.1.*

Para otros valores de α ($\alpha \leq -1$) el análisis es más simple que el correspondiente al del lema 42.2. La situación se contempla plenamente en la fig.13.1. Es evidente que si $\alpha \leq -1$, hay un único valor de q para $\lambda \rho < 0$. Podemos notar que si $\alpha = -1$ no hay raíces si $\lambda \rho < -1$, así como no hay raíces para $\rho < \rho_c$ (ec.(42.10d)) si $\alpha \in (-1, 0)$.

Los lemas 42.1 y 42.2 establecen las propiedades esenciales para seleccionar el valor de q del funcional. Notemos desde ahora que la zona de trabajo óptima es $0 \leq \lambda < \infty$ ($\rho > 0$) que es la usual en las series perturbativas.

Como paso siguiente debemos construir la función $B(\lambda, q)$. Para ello utilizaremos el mismo argumento que introdujimos en el §.38, buscando variables que puedan desarrollarse en serie de λ y λ^α , tal como lo exige el teorema 42.1.

De la ec.(42.5) se deduce que tanto q^{s+2} como λq^{t+2} se pueden desarrollar en serie de λ , al igual que q . Por otro lado, utilizando el cambio de variables introducido en el teorema 42.1, la ec.(42.5) se transforma en:

$$\lambda^{-(s+2)/(t+2)} q^{s+2} + \rho q^{t+2} = \lambda^\alpha q^{s+2} + \rho q^{t+2} = 1 \quad , \quad (42.11)$$

lo que nos muestra que tales variables son también desarrollables en serie de potencias de λ^α . Definiendo entonces las variables:

$$u = \lambda q^{t+2} \quad , \quad (42.12)$$

$$v = q^{s+2} \quad , \quad (42.13)$$

tenemos dos posibles representaciones analíticas alternativas para $B(\lambda, q)$:

$$B = \sum_{n=0}^{\infty} b^{(n)} u^n \quad , \quad (42.14)$$

$$B = \sum_{n=0}^{\infty} b^{(n)} v^n, \quad (42.15)$$

donde los coeficientes $\{b^{(n)}\}$ y $\{b'^{(n)}\}$ pueden ser determinados utilizando la información analítica disponible, por ejemplo, de la TPRS. Las variables u y v están acotadas según se desprende de los lemas 42.1 y 42.2 cuando $\lambda \rho > 0$:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} u = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} u = 1/\rho, \quad (42.16a)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} v = 1, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} v = 0, \quad (42.16b)$$

El procedimiento consiste ahora en resolver la ec.(42.5) determinando u (o v), para luego calcular B mediante la ec.(42.14) (o ec.(42.15)); finalmente, el funcional F se obtiene de la ec.(42.3). Los desarrollos (42.14) y (42.15) generalizan las ecs.(38.4) y (38.5) para los osciladores anarmónicos; luego, una elemental extensión del argumento discutido en el §.38 nos permite saber que es conveniente utilizar (42.14) para introducir los coeficientes de la serie (42.1), en tanto que (42.15) será la apropiada para utilizar los coeficientes de la serie (42.2). Vale la pena sin embargo reiterar que, por construcción, ambos desarrollos, (42.1) y (42.2), pueden ser incorporados a cualquiera de las expresiones para B .

Expresemos ahora las constantes A y $\{b^{(n)}\}$ en función de $\{E^{(n)}\}$. El procedimiento es el siguiente: reemplazando (42.12) en (42.5) logramos escribir a λ en función de u :

$$\lambda = u(1 - \rho u)^{1/\alpha} \quad (42.17)$$

Multiplicando (42.3) por q^2 y utilizando la ec.(42.12), junto con el teorema 42.1, obtenemos:

$$\left(\frac{u}{\lambda}\right)^\beta F = A + \left(\frac{u}{\lambda}\right)^{-\alpha} + uB(u)$$

que, mediante la ec.(42.17), se puede reescribir como sigue:

$$(1 - u)^{-\beta/\alpha} F = A + 1 - \rho u + uB(u) \quad (42.18)$$

Ahora introducimos la siguiente notación para el desarrollo de F y $(1 - u)^{-\beta/\alpha}$ en serie de potencias de u :

$$F = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{F}_n u^n, \quad (42.19)$$

$$(1 - u)^{-\beta/\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{-\beta/\alpha}{n} (-\rho u)^n \quad (42.20)$$

donde $\binom{c}{m}$ es el coeficiente combinatorio:

$$\binom{c}{m} = \frac{c(c-1)(c-2)\dots(c-m+1)}{m!}, \quad (42.21)$$

Reemplazando entonces (42.19) y (42.20) en la ec.(42.18), obtenemos (B está dado por la ec.(42.14)):

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \binom{-\beta/\alpha}{n} (-\rho)^n \tilde{F}_m u^{n+m} = A + 1 - \rho u + \sum_{j=0}^{\infty} b^{(j)} u^j, \quad (42.22a)$$

de donde se deduce el siguiente resultado:

$$\sum_{n=0}^r \binom{-\beta/\alpha}{n} (-\rho)^n \tilde{F}_{r-n} = (A+1)\delta_{r0} - \rho\delta_{r1} + b^{(r-1)}(1-\delta_{r0}) \quad (42.22b)$$

Para expresar los coeficientes \tilde{F}_r en términos de $E^{(i)}$, obligamos al funcional F a generar los primeros coeficientes de la TPRS, es decir hacemos que se cumpla:

$$F = \sum_{i=0}^M E^{(i)} \lambda^i + R_M(\lambda), \quad (42.23)$$

donde R_M es un cierto resto que por el momento no discutiremos; si ahora se introduce (42.17) en (42.23), podemos determinar el coeficiente de u^j para el desarrollo (42.19):

$$\tilde{F}_j = \sum_{m=0}^j E^{(m)} \binom{m/\alpha}{j-m} (-\rho)^{j-m}, \quad j \leq M \quad (42.24)$$

Introduciendo entonces (42.24) en (42.22b) obtenemos una expresión a partir de la cual se pueden determinar los coeficientes $b^{(m)}$:

$$\sum_{j=0}^r \sum_{m=0}^j E^{(m)} \binom{m/\alpha}{j-m} \binom{-\beta/\alpha}{r-j} (-\rho)^{r-m} = (A+1)\delta_{r0} - \rho\delta_{r1} + b^{(r-1)}(1-\delta_{r0}) \quad (42.25)$$

La expresión se puede simplificar aún más notando que:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^r \sum_{m=0}^j E^{(m)} \binom{m/\alpha}{j-m} \binom{-\beta/\alpha}{r-j} (-\rho)^{r-m} = \\ & = \sum_{m=0}^r E^{(m)} \left\{ \sum_{j=m}^r \binom{m/\alpha}{j-m} \binom{-\beta/\alpha}{r-j} \right\} (-\rho)^{r-m} \\ & = \sum_{m=0}^r E^{(m)} \left\{ \sum_{n=0}^{r-m} \binom{m/\alpha}{n} \binom{-\beta/\alpha}{r-m-n} \right\} (-\rho)^{r-m} \end{aligned}$$

$$= \sum_{m=0}^r E^{(m)} \binom{(m-\beta)/\alpha}{r-m} (-\rho)^{r-m} ,$$

con lo cual obtenemos la expresión final:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^r \binom{(m-\beta)/\alpha}{r-m} E^{(m)} (-\rho)^{r-m} &= (A+1)\delta_{r0} - \rho\delta_{r1} + \\ &+ b^{(r-1)}(1-\delta_{r0}) , \quad 0 \leq r \leq M \end{aligned} \quad (42.26)$$

La ec.(42.26) nos proporciona una forma analítica para obtener los coeficientes $b^{(r)}$ en función de ρ . Tomando $r=0$ en dicha ecuación ($b^{(-1)}=0$) obtenemos el valor de A:

$$A = E^{(0)} - 1 \quad (42.27)$$

Merced a la ec.(42.26), los coeficientes $b^{(r)}$ resultan ser polinomios en ρ con la siguiente forma:

$$b^{(r)} = \sum_{j=0}^{r+1} E^{(r+1-j)} b_j^{(r)} \rho^j , \quad (42.28)$$

donde $b_j^{(r)}$ son números racionales que se pueden determinar fácilmente mediante (42.26). En la parte final de esta obra se muestra el Programa VI, con el que se pueden calcular tales coeficientes, dados α y β .

Los coeficientes $b^{(n)}$ se pueden deducir en forma análoga. La ec. (42.10a) nos proporciona la expresión de λ en función de v . Para expresar a F como una función de v , multiplicamos (42.3) por q^2 , y utilizamos el teorema 42.1 y la ec.(42.13) para obtener:

$$v^{-\beta/\alpha} \lambda^\beta F' = A + v + v^{-1/\alpha} B(v) , \quad (42.29)$$

que, introduciendo la ec.(42.10a), nos permite encontrar:

$$(1-v)^\beta \rho^{-\beta} F' = A + v + \frac{1-v}{\rho} B(v) \quad (42.30)$$

De acuerdo al teorema 42.1, F' es una función desarrollable en serie de potencias de λ^α y por lo tanto podemos hacer:

$$\tilde{F}' = \sum_{n=0}^{\infty} F'_n v^n , \quad (42.31)$$

ecuación que, reemplazada en (42.30) e igualando las potencias de v , nos permite obtener:

$$\rho^{-\beta} \sum_{j=0}^r \binom{\beta}{r-j} (-1)^{r-j} \tilde{F}'_j = A\delta_{r0} + \delta_{r1} + \frac{1}{\rho} \{b^{(r)} - b^{(r-1)}\} , \quad r \geq 0 \quad (42.32)$$

Invocando el teorema 42.1, obligamos a F' a satisfacer el desarrollo (42.2) hasta el orden M :

$$F' = \sum_{i=0}^M e^{(i)} \lambda^{\alpha i} + R_M \quad (42.33)$$

Introduciendo (42.10a) en (42.33), obtenemos el término \tilde{F}'_j :

$$\tilde{F}'_j = \sum_{i=0}^j e^{(i)} (-1)^{j-i} \rho^{-i\alpha} \binom{i\alpha}{j-i}, \quad (42.34)$$

que reemplazada en (42.32) nos permite deducir una recurrencia para determinar los coeficientes $b'^{(s)}$:

$$\rho^{-\beta} \sum_{j=0}^r \sum_{i=0}^j \binom{i\alpha}{j-i} \binom{\beta}{r-j} (-1)^{r-i} e^{(i)} \rho^{-i\alpha} = A\delta_{r0} + \delta_{r1} + \frac{1}{\rho} \{b'^{(r)} - b'^{(r-1)}\} \quad (42.35)$$

La expresión se simplifica utilizando el procedimiento discutido más arriba para la ec.(42.26); y nos conduce al siguiente resultado:

$$\sum_{i=0}^r (-1)^{r-i} \rho^{-(\beta+i\alpha)} e^{(i)} \binom{\beta+i\alpha}{r-i} = A\delta_{r0} + \delta_{r1} + \frac{1}{\rho} \{b'^{(r)} - b'^{(r-1)}\}, \quad 0 \leq r \leq M \quad (42.36)$$

Cuando $r=0$ obtenemos una ecuación que nos liga a A , $e^{(0)}$ y $b'^{(0)}$:

$$b'^{(0)} = \rho^{1-\beta} e^{(0)} - A\rho, \quad (42.37)$$

donde A está dada por (42.27). A partir de la ec.(42.36) podemos expresar a los coeficientes $b'^{(r)}$ del modo siguiente:

$$b'^{(r)} = \{\rho^{1-\beta} \sum_{j=0}^r b'_j^{(r)} e^{(j)} \rho^{-j\alpha}\} - (A+1)\rho, \quad (42.38)$$

donde $b'_j^{(r)}$ son números racionales que pueden determinarse fácilmente, para cualquier valor de α y β , mediante un programa de cálculo similar al Programa VI.

Las ecs.(42.26) y (42.36) completan la construcción de la función B . Dado que hemos introducido los coeficientes hasta $E^{(M)}$ (o hasta $e^{(M)}$), es conveniente realizar una ligera modificación en la notación para dar cuenta del número de coeficientes de las series (42.1) y (42.2) involucrados en la construcción del funcional; a tal efecto, utilizaremos la siguiente designación para nuestra aproximación a la función $E(x)$:

$$F^{(M)} = \frac{A}{q^2} + q^s + \lambda q^t B_M \quad , \quad (42.39a)$$

$$B_M = \sum_{n=0}^{M-1} b^{(n)} u^n \quad , \quad (42.39b)$$

$$B_M = \sum_{n=0}^M b^{(n)} v^n \quad (42.39c)$$

La cuestión que se plantea ahora es analizar las condiciones para que $F^{(M)}$ converja a E cuando M aumenta. En este problema jugará un papel fundamental el factor ρ . Como veremos más adelante, ρ es nuestra llave para lograr sumar diversas series de potencias fuera de su dominio de convergencia, utilizando el formalismo desarrollado en este párrafo.

Es conveniente realizar aquí una breve discusión que nos será de particular utilidad posteriormente. En los capítulos precedentes hemos discutido varios modelos de interés físico en los cuales la información de tipo analítico disponible consiste en un conjunto de coeficientes $\{E^{(0)}, E^{(1)}, \dots, E^{(M)}; e^{(0)}\}$; ejemplos de esta situación se encuentran en los osciladores anarmónicos, potenciales de confinamiento y efecto Zeeman, entre otros modelos no triviales de la TPRS. Es, por lo tanto, ventajoso utilizar el funcional definido por las ecs.(42.39a), (42.39b), (42.17) y (42.26) para introducir, mediante el coeficiente $e^{(0)}$, el comportamiento correcto para $\lambda \gg 1$. Esto se consigue haciendo:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{-\beta} F^{(N)} = e^{(0)} \quad , \quad (42.40)$$

para un cierto N . Para alcanzar tal condición podemos tomar $N=M+1$ y fijar $b^{(M)}$ tal que se satisfaga el límite (42.40). Utilizando el teorema 42.1 y la ec.(42.16a) encontramos:

$$\lambda^{-\beta} F^{(M+1)} \approx A \rho^\beta + \rho^{\beta-1} \sum_{n=0}^M b^{(n)} \rho^{-n} + O(\lambda^\alpha) \quad , \quad (42.41)$$

con lo cual tenemos para el coeficiente $b^{(M)}$ el siguiente resultado:

$$b^{(M)} = \rho^M \left\{ \rho^{1-\beta} (e^{(0)} - A \rho^\beta) - \sum_{n=0}^{M-1} b^{(n)} \rho^{-n} \right\} \quad (42.42)$$

En principio podemos esperar que $F^{(M+1)}$, con $b^{(M)}$ dado por (42.42), sea una mejor aproximación a E que aquella establecida por las ecs.(42.39a) y (42.39b), siempre que ρ sea determinado apropiadamente. De aquí en más denominaremos "método funcional" (MF) al procedimiento consistente en aproximar a funciones $E(\lambda)$ mediante funcionales como $F^{(M+1)}$. Como resultará evidente, el nombre del método responde a su vinculación con el MFV, estudiado en la parte A de esta obra.

§.43. RELACION DEL MF CON OTRAS TECNICAS DE SUMA.

En el párrafo anterior hemos formulado desde un punto de vista muy general un método de suma de series perturbacionales por extensión del método del funcional variacional, de naturaleza semiclassical. Dicho método está íntimamente relacionado a otros métodos de suma de series de potencias y dedicaremos este párrafo a estudiar tales conexiones. Esta investigación no es sólo de interés conceptual sino que además nos permitirá resolver algunas de las cuestiones que hemos dejado abiertas en el §.42.

En el Cap.V discutimos varios métodos existentes en la literatura para sumar las series perturbacionales. Los métodos generales como el de Padé o Borel (§§.13 y 14) no pueden compararse directamente con el MF ya que ambos incorporan diferente información. Notemos que el MF ha sido formulado tomando en cuenta el desarrollo (42.2) para $1/\lambda \rightarrow 0$, con $\beta \in \mathbb{R}$; los métodos de Padé y Borel-Padé sólo podrían dar un comportamiento similar para $1/\lambda \rightarrow 0$ si β fuera entero. Es por ello que discutiremos otros métodos de suma, en los que se utilice de algún modo la información de tipo analítico disponible sobre desarrollos asintóticos de la función $E(\lambda)$.

Es conveniente comenzar la discusión por la denominada aproximación geométrica (AG) [3,4], la cual está diseñada para acelerar la convergencia de la TPRS para problemas de autovalores. Consideremos un hamiltoniano H y su ecuación de Schrödinger:

$$H\Psi = E(\lambda)\Psi \quad , \quad H = H_0 + \lambda V \quad , \quad (43.1a)$$

$$H_0\Psi^{(0)} = E^{(0)}\Psi^{(0)} \quad (43.1b)$$

La AG consiste en reescribir a H del siguiente modo:

$$H = H'_0 + V' \quad , \quad H'_0 = \mu H_0 \quad , \quad V' = \lambda V + (1-\mu)H_0 \quad , \quad \mu \in \mathbb{R}_0^+ \quad (43.2)$$

La idea central es simple: aplicar la TPRS a (43.2), para luego ajustar el valor de μ (parámetro libre) de acuerdo a algún criterio apropiado. Aplicando las ecuaciones del §.7 podemos encontrar sin dificultad las tres primeras correcciones perturbacionales debidas a V' :

$$E^{(0)} = \mu E^{(0)} \quad , \quad (43.3a)$$

$$E'(1) = (E^{(1)} + \frac{1-\mu}{\lambda} E^{(0)}) \lambda \quad , \quad (43.3b)$$

$$E'(2) = \frac{\lambda^2}{\mu} E^{(2)} \quad , \quad (43.3c)$$

$$E'(3) = \frac{\lambda^3}{\mu^2} \{E^{(3)} + \frac{\mu-1}{\lambda} E^{(2)}\} \quad (43.3d)$$

La elección usual de μ es de acuerdo a la denominada regla de Wigner, consistente en truncar el desarrollo perturbacional de H' , anulando la corrección de tercer orden:

$$E'(3)_{(\mu=\mu^*)} = 0 \quad , \quad \text{luego:} \quad \mu^* = 1 - \frac{\lambda E^{(3)}}{E^{(2)}} \quad (43.4)$$

Si ahora calculamos el valor de E en la aproximación de tercer orden:

$$E \approx E^{(0)} + E'(1) + E'(2) \quad , \quad (43.5)$$

e introducimos (43.3) y (43.4) en (43.5), obtenemos como resultado:

$$E \approx E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \frac{\lambda E^{(2)}}{1 - \frac{\lambda E^{(3)}}{E^{(2)}}} \quad (43.6)$$

La ec.(43.6) coincide a su vez con un aproximante de Padé $|2/1|$, según se puede comprobar con los resultados del Apéndice D. Vemos así que la AG (íntimamente relacionada al método de dilatación de Feenberg /5,6/) puede reducirse a ciertos tipos de aproximantes de Padé mediante una apropiada elección del parámetro μ . Para discutir la relación de la AG con el MF es conveniente estudiar las ecuaciones anteriores desde un punto de vista diferente. La AG es básicamente una técnica de partición esto es, una técnica en la cual se introducen parámetros en el hamiltoniano y, a través del mismo, en las correcciones perturbacionales. Pero existe otra vía alternativa para introducir un parámetro ajustable en el desarrollo de Rayleigh-Schrödinger, que es a través de la integral $\langle \psi^{(0)} | \psi^{(i)} \rangle$. Por sencillez, en el §.7 habíamos elegido $\langle \psi^{(0)} | \psi^{(i)} \rangle$ igual a δ_{i0} , pero en general podemos hacer:

$$\Gamma_i = \langle \psi^{(0)} | \psi^{(i)} \rangle \quad (43.7)$$

Para introducir el parámetro (43.7) en el desarrollo RS procedemos del siguiente modo: En primer lugar desarrollamos, como es usual, la energía y la función de onda en serie de potencias de λ ; si introducimos la definición siguiente:

$$\psi^{(i)} = \bar{\psi}^{(i)} + \Gamma_i \psi^{(0)} \quad , \quad \langle \bar{\psi}^{(i)} | \psi^{(0)} \rangle = \delta_{i0} \quad . \quad (43.8)$$

y reemplazamos tales desarrollos en la ecuación de Schrödinger (43.1), aplicando $\langle \psi^{(0)} |$ obtenemos sin dificultad la siguiente relación:

$$\langle \psi^{(0)} | V \bar{\psi}^{(i-1)} \rangle = \sum_{s=2}^i E^{(s)} \Gamma_{i-s} ; \quad \Gamma_0 = 1 \quad , \quad (43.9a)$$

$$\langle \psi^{(0)} | V \psi^{(0)} \rangle = E^{(1)} \quad (43.9b)$$

La condición $\Gamma_s = \delta_{s0}$ nos conduce a las ecuaciones estudiadas en el §.7. Utilizando ahora la ec.(43.7), los nuevos coeficientes perturbacionales quedan dados por:

$$E^{(i)} = \langle \psi^{(0)} | V \bar{\psi}^{(i-1)} \rangle \quad (43.10)$$

La aplicación de esta nueva teoría de perturbaciones hasta el segundo orden nos da:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\langle \psi^{(0)} | H \psi \rangle}{\langle \psi^{(0)} | \psi \rangle} \\ &\approx \frac{\langle \psi^{(0)} | H \psi^{(0)} \rangle + \lambda \Gamma_1 \langle \psi^{(0)} | H \psi^{(0)} \rangle + \lambda^2 \langle \psi^{(0)} | V \bar{\psi}^{(1)} \rangle + \dots}{1 + \Gamma_1 \lambda + \dots} \\ &\approx E^{(0)} + E^{(1)} \lambda + \frac{E^{(2)} \lambda^2}{1 + \Gamma_1 \lambda} \end{aligned} \quad (43.11)$$

Podemos ahora hacer uso del grado de libertad que poseemos en Γ_1 , fijando a dicho parámetro de modo tal que se cumpla, en virtud de las ecs.(43.9) y (43.10), la regla de Wigner:

$$E^{(3)} = E^{(3)} + \Gamma_1 E^{(2)} = 0 \quad , \quad \text{luego:} \quad \Gamma_1 = - E^{(3)} / E^{(2)} \quad (43.12)$$

Es evidente la relación existente entre los parámetros μ^* de la partición del hamiltoniano y Γ_1 de la TP; ésta es:

$$\Gamma_1 = \frac{\mu^* - 1}{\lambda} \quad (43.13)$$

La discusión arriba realizada muestra la equivalencia que existe entre una técnica de partición y el empleo como parámetros ajustables de las integrales entre las correcciones perturbacionales. Cabe comentar que elecciones diferentes de Γ_1 nos conducen a otras técnicas de partición u otras aproximaciones para la suma del desarrollo perturbativo /4/.

Estudiemos otra equivalencia particularmente importante. Escribamos la suma parcial de la TP en la AG:

$$S_N E' = \sum_{s=0}^N E^{(s)} \quad , \quad (43.14)$$

que, utilizando (43.3), nos permite encontrar:

$$E = S_3 E' = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} \left\{ \frac{2}{\mu} - \frac{1}{\mu^2} \right\} + \frac{\lambda^3 E^{(3)}}{\mu^2} \quad (43.15)$$

Podemos entonces determinar μ con el siguiente argumento: μ es un parámetro ficticio en el desarrollo de la TP, y por lo tanto los autovalores no pueden depender del mismo. En consecuencia el parámetro μ puede fijarse mediante un criterio de estabilidad o de convergencia. Sabemos que, al no depender E de μ , todas las derivadas $d^j E / d\mu^j$ deberían ser nulas, por lo que un criterio de estabilidad apropiado puede ser:

$$\left(\frac{dE}{d\mu} \right) (\mu = \mu^*) = 0 \quad (43.16a)$$

Si consideramos ahora que la secuencia $S_N E'$ (ec.(43.14)) constituye una aproximación a E , tenemos finalmente:

$$\left(\frac{\partial S_N E'}{\partial \mu} \right) (\mu = \mu^*) = 0 \quad (43.16b)$$

Tomando $N=3$ en la ec.(43.16b), y utilizando (43.15), se obtiene para μ^* el resultado (43.4). Este resultado es altamente significativo: la condición de estabilidad o convergencia respecto de parámetros ficticios introducidos en la TPRS, o TP relacionadas, resulta ser equivalente a la aplicación de una técnica de partición de hamiltonianos (como la AG) más una condición como la regla de Wigner.

El resultado anterior nos permite ahora estudiar la relación con el MF. Observemos en primer lugar que la aplicación del MF al problema de autovalores (43.1) introduce el cambio de variables (42.17) que, de acuerdo a las ecuaciones vistas en el §.42, se puede expresar de la siguiente manera:

$$u = \frac{\lambda}{q^{s-t} + \lambda \rho} \quad (43.17)$$

Estudieemos en qué condición dicha transformación es similar a la introducida a través de la AG. La ec.(43.11) nos sugiere un cambio de variable $\lambda \rightarrow \lambda / (1 + \lambda \Gamma_1)$. Dicho cambio de variable aparece en (43.17) si $s=t$, lo que por el teorema 42.1 corresponde a $\alpha = -1$. Este es un primer resultado de importancia, ya que nos muestra que el MF es una generalización del método de Euler (§.15) al cual se reduce cuando $\alpha = -1$. La generalización que se presenta en esta obra (y que aplicaremos más adelante) es diferente de otras presentadas en la literatura /5-7/.

Apliquemos ahora el MF a una función $E(\lambda)$ que satisface (42.2) con $\alpha = -\beta = -1$. Utilizando el teorema 42.1, y las ecs.(42.39a) y (42.39b) con $M=3$, encontramos:

$$F^{(3)} = \frac{\Lambda}{q^2} + 1 + \lambda b^{(0)} + \lambda^2 b^{(1)} q^2 + \lambda^3 b^{(2)} q^4 \quad (43.18a)$$

siendo:

$$q^2 = 1/(1+\lambda\rho) \quad (43.18b)$$

Por otro lado, la aplicación de las ecs.(42.26)-(42.28) nos permite encontrar que:

$$\begin{aligned} A &= E^{(0)} - 1, \quad b^{(0)} = E^{(1)} - A\rho, \quad b^{(1)} = E^{(2)}, \\ b^{(2)} &= E^{(3)} + E^{(2)}\rho \end{aligned} \quad (43.19)$$

Si ahora introducimos (43.19) en (43.18a) y reordenamos convenientemente la expresión resultante, el funcional $F^{(3)}$ con la información incorporada de la TP de tercer orden queda dado por:

$$F^{(3)} = A + 1 + \lambda E^{(1)} + \frac{\lambda^2 E^{(2)} + 2\rho\lambda^3 E^{(2)} + \lambda^3 E^{(3)}}{(1 + \lambda\rho)^2} \quad (43.20)$$

El funcional nos provee una expresión dependiente del parámetro ρ , del cual no pueden depender los autovalores. Utilizando el argumento discutido más arriba, podemos encontrar el valor óptimo de ρ haciendo:

$$\left(\frac{\partial F^{(3)}}{\partial \rho}\right)_{(\rho=\rho^*)} = 0, \quad (43.21)$$

que, merced a la ec.(43.20), nos da:

$$\rho^* = - E^{(3)}/E^{(2)} \quad (43.22)$$

El resultado (43.22) coincide con (43.12), éste último obtenido a través de un punto de vista totalmente diferente. A partir de la discusión realizada, podemos ya extraer varias conclusiones: i) el MF contiene a la AG para problemas de autovalores como un caso particular para el cual $\alpha=-\beta=-1$; ii) dado que el MF asegura los desarrollos asintóticos correctos para la función $E(\lambda)$ en estudio, podemos concluir que la AG sólo dará la dependencia correcta de $E(\lambda)$ con λ para $\lambda \gg 1$ si $\alpha=-\beta=-1$; iii) el MF promueve sobre la serie de potencias de la TPRS un reordenamiento que, en principio, puede ser vinculado a una partición en el hamiltoniano del sistema; iv) el MF puede ser conectado con otras técnicas perturbativas a través de una adecuada manipulación del parámetro ρ ; v) la constante ρ juega el papel de un parámetro ajustable en el MF, de forma tal de acelerar la convergencia del funcional F a la función E . La optimización de ρ puede lograrse mediante un apropiado criterio de estabilidad o "meseta".

El resto de la sección lo dedicaremos a ahondar en la discusión de las relaciones de otros métodos de suma con el MF, pero es conveniente presentar ya aquí el criterio que utilizaremos para determinar ρ . Según vimos más arriba, ρ es un parámetro respecto del cual no puede depender

$E(\lambda)$; luego, a medida que M crece, cabe esperar que $F^{(M)}$ se transforme en una función independiente de ρ ; concluimos así en que $F^{(M)}$ vs. ρ deberá exhibir una meseta, cuya extensión tendrá que aumentar cuando $M \rightarrow \infty$. El criterio a seguir será obviamente el de elegir a ρ^* tal que pertenezca a dicha meseta; el valor de ρ se determina de acuerdo a las siguientes reglas (que denominaremos Reglas o Criterios de Estabilidad):

1) Punto estacionario (PE): elegiremos a ρ^* tal que $F^{(M)}$ sea un extremo $((\partial F^{(M)} / \partial \rho)_\lambda (\rho = \rho^*) = 0)$. Si existe más de un extremo elegiremos aquél que tenga el menor valor absoluto para la derivada segunda $(\partial^2 F^{(M)} / \partial \rho^2) (\rho = \rho^*)$.

2) Punto de inflexión (PI): en el caso que no existan puntos estacionarios, ρ^* será elegido como el punto de inflexión $((\partial^2 F^{(M)} / \partial \rho^2) (\rho = \rho^*) = 0)$ con menor valor absoluto de la derivada primera $|(\partial F^{(M)} / \partial \rho)_\lambda (\rho = \rho^*)|$, si hubiera más de un punto de inflexión. Estudiaremos también las propiedades de convergencia del funcional $F^{(M)}$ a través de los PI's aún en el caso que existan PE's, de modo de establecer la influencia de unos y otros sobre los resultados numéricos.

3) Inexistencia de PE o PI: en el caso que $F^{(M)}$ como una función de ρ no posea extremos ni puntos de inflexión para ρ real deberá recurrirse a un criterio alternativo. Cuando la sencillez de las ecuaciones lo permita, en esta obra elegiremos ρ^* como: $\rho^* = \text{Re}(\bar{\rho})$, $(\partial F^{(M)} / \partial \rho) (\rho = \bar{\rho}) = 0$, con el menor valor de la derivada segunda.

El MF posee una propiedad muy interesante e importante: los extremos de $F^{(M)}$ son independientes de λ :

$$\left(\frac{\partial F^{(M)}}{\partial \rho}\right)_\lambda (\rho = \rho^*) = 0 \quad , \quad \text{para todo } \lambda \in \mathbb{R}_0^+ \quad (43.23)$$

Una demostración rigurosa de (43.23) es muy engorrosa, si bien directa, y recién la realizaremos en el parágrafo siguiente (§.44) en el marco de un formalismo distinto. No obstante, podemos extraer algunas conclusiones del resultado (43.23). Como primera consecuencia de orden práctico, es importante notar que el resultado anterior nos permite realizar el cálculo de ρ^* una sola vez, digamos para $\lambda=1$.

De acuerdo a lo discutido en el §.42, sabemos que el desarrollo de $F^{(M)}$ en serie de potencias de λ puede escribirse como:

$$F^{(M)} = \sum_{n=0}^M E^{(n)} \lambda^n + \sum_{n=M+1}^{\infty} F_n(\rho^*) \lambda^n \quad , \quad (43.24)$$

y aplicando ahora (43.23) a (43.24), encontramos que:

$$\left(\frac{\partial F_n}{\partial \rho}\right)_\lambda (\rho = \rho^*) = 0 \quad , \quad \text{para todo } n > M \quad (43.25)$$

La ec.(43.25) es equivalente a (43.23), pero es más simple desde el punto de vista del cálculo. Apliquemos ahora este resultado a un problema con $\alpha = -\beta = -1$ (ec.(43.18)); encontramos para el cuarto orden el siguiente

coeficiente:

$$F_4 = - (E^{(2)}_{\rho^2} + 2E^{(3)}_{\rho}) \quad (43.26)$$

Utilizando (43.25) obtenemos para ρ nuevamente (43.22) (que es independiente de λ).

Respecto de la regla 2 cabe notar que los PI dependen de λ aunque varían dentro de un intervalo finito, $\rho^* \in (\rho_1^*, \rho_2^*)$, donde $\rho_1^* = \rho^*(\lambda=0)$ y $\rho_2^* = \rho^*(1/\lambda=0)$. Esta propiedad también será demostrada rigurosamente en el §.44.

Consideremos ahora el método de dilatación variacional (§.21) (SVM) en relación al MF. Si bien el SVM no es un método de suma de series perturbacionales, resulta particularmente importante para nuestro interés. Supongamos para ello que el hamiltoniano (43.1a) tenga la forma siguiente:

$$H_0 = p^2 + |x|^s, \quad p = -i \frac{d}{dx}, \quad (43.27a)$$

$$V = |x|^t, \quad (43.27b)$$

y que estamos interesados en aproximar la energía del estado fundamental. Sabemos que el SVM nos provee una cota superior a la misma (§.21) /8-10/:

$$E(\lambda; a) = \langle \Psi_a^{(0)} | H \Psi_a^{(0)} \rangle \geq E(\lambda), \quad \Psi_a^{(0)} = a^{1/2} \Psi^{(0)}(ax) \quad (43.28)$$

De acuerdo a lo discutido en el §.21 la condición de extremo $\partial E(\lambda; a) / \partial a = 0$ permite que $E(\lambda; a)$ satisfaga el TV, lo que nos lleva al resultado siguiente:

$$\min_{(a)} E(\lambda; a) = \frac{2}{s+2} a^2 E^{(0)} + \frac{s}{s+2} a^{-s} E^{(0)} + \lambda a^{-t} E^{(1)}, \quad (43.29a)$$

donde a se obtiene como solución de:

$$a^{-(s+2)} + \frac{\lambda(s+2)t}{2sE^{(0)}} E^{(1)} a^{-(t+2)} = 1 \quad (43.29b)$$

Apliquemos ahora el MF partiendo de (43.27). Usando las ecs.(42.39a) y (42.39b) con $M=1$, obtenemos:

$$F^{(1)} = \frac{E^{(0)} - 1}{q^2} + q^s + \lambda b^{(0)} q^t, \quad (43.30)$$

donde q queda dado por la ec.(42.5). Utilizando la ec.(42.26) encontramos el coeficiente $b^{(0)}$, que nos asegura el resultado correcto de la TPRS de primer orden; éste es:

$$b^{(0)} = E^{(1)} + \frac{s+2-2E^{(0)}}{s+2} \rho . \quad (43.31)$$

Para determinar ρ^* utilizamos la regla 1 considerando, por sencillez, el resultado (43.25). Para aplicar dicha ecuación desarrollamos (43.30) en serie de λ :

$$F^{(1)} = E^{(0)} + E^{(1)}\lambda + F_2\lambda^2 + \dots , \quad (43.32a)$$

donde un simple cálculo nos da el coeficiente F_2 :

$$F_2 = \frac{sE^{(0)}}{(s+2)^2} \rho^2 - \frac{tE^{(1)}}{(s+2)} \rho \quad (43.32b)$$

Finalmente la ec.(43.25), con $n=2$, nos proporciona el parámetro óptimo ρ^* :

$$\rho^* = \frac{t(s+2)}{2sE^{(0)}} E^{(1)} \quad (43.33)$$

El resultado (43.33) nos asegura que ρ^* es único para todo $\lambda \in R_0^+$. Introduciendo este factor en (42.5), observamos que el valor de q que debe emplearse en el funcional cumple:

$$q^{s+2} + \frac{t(s+2)}{2sE^{(0)}} E^{(1)} \lambda q^{t+2} = 1 \quad (43.34)$$

Es obvio que haciendo $q=1/a$ obtenemos (43.29b). Esto demuestra que el SVM es un caso particular del MF en el que se toma $F^{(1)}$ para la serie en u ($\lambda \rightarrow 0$) y se aplica la regla 1 para determinar ρ^* .

Es muy fácil demostrar que existe una estrecha relación entre el MF y diversas técnicas de reordenamiento de series perturbacionales basadas en particiones de hamiltonianos (§.16) /11-15/, extendiendo así los resultados arriba comentados en relación al SVM. Si tomamos $s=2$, $t=2K$ en (43.27), encontramos los osciladores anarmónicos repetidamente discutidos en esta obra (ver además Apéndices A y B). En este caso la ec.(42.17) nos conduce al siguiente cambio de variables para el funcional (construido utilizando el desarrollo en serie asociado al régimen de acoplamiento pequeño ($\lambda \rightarrow 0$)):

$$\lambda = u(1 - \rho u)^{-(K+1)/2} , \quad (43.35)$$

teniendo en cuenta que $\alpha = -2/(K+1)$ y $\beta = 1/(K+1)$. Esta transformación coincide con la que han utilizado Dmitrieva y Plindov /12,13/ (§.16), quienes determinaron ρ de modo tal que se satisficiera el TV. Si ahora introducimos el cambio de variables $x \rightarrow (1 - \rho u)^{1/4} x$ en Π mediante una dilatación (ver el procedimiento en el Apéndice A), obtenemos:

$$\tilde{H} = (1-\rho u)^{1/2} H = p^2 + x^2 + u (x^{2K} - \rho x^2) \quad , \quad (43.36)$$

que es el tipo de reordenamiento utilizado en las refs./11-13/. Si E es un autovalor de H y \tilde{E} el correspondiente a \tilde{H} ambos quedan relacionados a través de:

$$E = (1-\rho u)^{-1/2} \tilde{E}(u) = (1-\rho u)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{E}^{(n)}(\rho) u^n \quad (43.37)$$

Es importante poner bien en claro la diferencia entre los métodos discutidos en las refs./11-15/, y su relación con el MF. El MF introduce, a partir del hamiltoniano H (que en este caso permite obtener fácilmente los exponentes s y t del funcional), el cambio de variables (43.35) y aproxima a los autovalores mediante un funcional, que, a partir de la ec.(42.18) y el teorema 42.1, resulta ser:

$$F = (1-\rho u)^{-1/2} \{A + 1 - \rho u + u B(u)\} \quad (43.38)$$

Dado que el término entre llaves es una función de u , es evidente, al comparar con (43.37), que dicho término es la aproximación funcional a los autovalores de \tilde{H} . La relación se puede explicitar aún más escribiendo:

$$\tilde{E}^{(0)} = A + 1 \quad , \quad \tilde{E}^{(1)} = b^{(0)} - \rho \quad , \quad \tilde{E}^{(n)} = b^{(n-1)} \quad , \quad \text{si } n \geq 2 \quad .(43.39)$$

Esta equivalencia encontrada entre el MF y las técnicas aplicadas en las refs./11-13/ es muy reveladora: el MF introduce en la TP una transformación que puede ser asociada a un reordenamiento o partición del hamiltoniano. Dicho reordenamiento está determinado por una relación de dilatación de coordenadas y momentos (Apéndice A), y por lo tanto es diferente de otras técnicas de partición como las de Feenberg /16-20/ o Löwdin /21/. A partir de lo discutido al principio de esta sección, podemos decir que el MF puede ser equivalente al método de Feenberg (AG) si $\alpha = -\beta = -1$.

Las conclusiones aquí extraídas pueden extenderse sin inconvenientes a todos los problemas mecanocuánticos con un hamiltoniano de la forma $H=T+V_1+V_2$ con V_1 y V_2 funciones homogéneas de las coordenadas, siempre que las soluciones de $T+V_1$ sean conocidas. Este hecho se sigue inmediatamente de lo discutido en el §.16, al que se remite al lector.

Existen sin embargo importantes diferencias de implementación entre el MF y las técnicas de las referencias /11-13/. Estos autores construyeron la serie (43.37) a partir de la TPRS determinando ρ con el TV, lo que es equivalente a determinarlo de acuerdo al SVM (TP de primer orden). De acuerdo con este método, el valor de ρ es una constante para cada estado cuántico e independiente del orden del polinomio perturbacional empleado en los cálculos. Notemos que en la ec.(43.36) el hamiltoniano queda $\tilde{H}=H_0+uV'(\rho)$, $V'(\rho)=x^{2K}-\rho x^2$, donde u hace las veces de un

parámetro perturbacional acotado (§.42), sin embargo cuando $x \rightarrow \pm\infty$, $V'(\rho)$ es más singular que x^2 si $\rho = \text{cte.}$ y en consecuencia no se satisfacen las hipótesis del teorema 10.1. No es difícil concluir en que el método de las referencias /11-13/ transforma una serie con radio de convergencia nulo (serie en λ) en otra serie asintótica, para todo $0 < u < 1/\rho$. La serie en u (43.37), estudiada por Pascual /11/ y Dmitrieva y Plindov /12,13/ para diversos osciladores, es una serie más lentamente divergente que la original en λ , pero que requiere el empleo de otro método de suma (como los aproximantes de Padé) para poder trabajar a órdenes elevados.

El MF determina ρ^* a través de las reglas de estabilidad, que constituyen un criterio elaborado teniendo en mente la convergencia $F^{(M)} \rightarrow E$ si $M \rightarrow \infty$. Obviamente ρ^* depende de M a través del funcional y por lo tanto no son aplicables los argumentos sobre la singularidad de $V'(\rho)$ discutidos más arriba.

La técnica de las series renormalizadas de Killingbeck y Austin /11, 15/ se basa en un reordenamiento del operador hamiltoniano H similar a (43.36) (ver §.16):

$$H = p^2 + x^2 + \lambda x^{2K} = p^2 + m'^2 x^2 + \lambda(x^{2K} - \rho x^2) \quad , \quad (43.40)$$

tal que la "masa" ficticia m' sea:

$$m'^2 = 1 + \lambda \rho \quad (43.41)$$

Como vimos en el §.16, el método consiste en generar el desarrollo perturbativo en serie de potencias de λ sugerido por la segunda igualdad en (43.40), buscar un criterio de estabilidad para determinar ρ y finalmente determinar m' por (43.41). Según mostramos más arriba, el MF realiza un reordenamiento similar no en H sino en \bar{H} y, además, origina un desarrollo en u y no en λ . Observemos que la relación entre u y λ está determinada por una relación de dilatación del hamiltoniano para todo ρ , lo que no sucede en la ec.(43.41). A consecuencia de esta diferencia, no hay forma de asegurar que la dependencia asintótica ($\lambda \gg 1$) predicha para $E(\lambda)$ sea la correcta si se utiliza el procedimiento perturbativo de las refs./14,15/. De hecho, Austin ha presentado recientemente una extensión al procedimiento de las series renormalizadas /22/, con el fin de obtener resultados razonables para $\lambda > 1$. Dicha investigadora ha hecho notar /23/ (coincidiendo con nuestras conclusiones) que es necesario utilizar un formalismo como el MF para obtener información aceptable sobre el régimen de acoplamiento grande ($1/\lambda \rightarrow 0$).

Teniendo presente las conclusiones anteriores, podemos estudiar ahora la relación entre el MF y el método que discutimos en el §.17, esto es, el ordenamiento normal de operadores /24/. De acuerdo con lo que vimos en §.17, el ordenamiento normal de operadores (Wick-ordering) puede llevarse a cabo sin inconvenientes para el oscilador anarmónico cuártico con sólo definir una masa renormalizada. Aplicando las ecuaciones del §.17 y del Apéndice E al oscilador definido por la ec.(43.40) con $K=2$, sabemos que la relación entre el hamiltoniano H y su reordenamiento normal, $:H:$, es (realizando el cambio de unidades propuesto en el Apéndice

A):

$$H = :H: - \frac{3\lambda}{4M^2} + M \quad , \quad (43.42)$$

donde M es la masa renormalizada. Esta masa fue determinada por Caswell /24/, en términos de la masa real m, mediante una generalización del ordenamiento de Wick consistente en la introducción del parámetro ℓ tal que:

$$m^2 = M^2 - \frac{\ell\lambda}{M} \quad (43.43)$$

El ordenamiento de Wick resulta ser un caso particular con $\ell=3$. El parámetro ℓ se determina mediante un criterio de estabilización de la serie renormalizada (§.17):

$$E = M \sum_{n=0}^{\infty} E_M^{(n)} \left(\frac{\lambda}{M^3}\right)^n \quad , \quad (43.44)$$

donde los coeficientes $E_M^{(n)}$ se determinan de modo tal que (43.44) dé origen a la serie de la TPRS:

$$E = m \sum_{n=0}^{\infty} E_m^{(n)} \left(\frac{\lambda}{m^3}\right)^n \quad (43.45)$$

Las ecs.(43.44) y (43.45) surgen inmediatamente a partir de las relaciones de dilatación que satisfacen H y :H: (§.17).

Para demostrar que el MF contiene como caso particular al método de Caswell /24/, recurrimos a las ecuaciones generales del §.42. A partir de la ec.(42.18) escribimos:

$$F = (1-\rho u)^{\beta/\alpha} \{A + 1 - \rho u + uB(u)\} = (1-\rho u)^{\beta/\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} u^n \quad , \quad (43.46a)$$

y, utilizando las ecs.(42.5), (42.12) y (42.13), la transformamos en la siguiente ecuación:

$$F = v^{\beta/\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} (\lambda v^{-1/\alpha})^n \quad (43.46b)$$

Los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ están dados por (43.39). La ec.(43.46b) tiene una enorme importancia pues revela que el MF puede ser asociado no sólo a una partición del hamiltoniano sino que también a una TP renormalizada. Para los osciladores anarmónicos $\beta/\alpha=-1/2$, lo que en la ec.(43.46b) nos da:

$$F = v^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} \{\lambda v^{(K+1)/2}\}^n \quad (43.47)$$

Cuando $K=2$ las ecs.(43.47) y (43.44) son equivalentes si la masa renormalizada se introduce de la siguiente manera:

$$v = m^2/M^2 \quad (43.48)$$

Si reemplazamos ahora (43.48) en (43.47), obtenemos:

$$F = M \sum_{n=0}^{\infty} \{ \bar{E}^{(n)} m^{3n-1} \} \left(\frac{\lambda}{M^3} \right)^n, \quad (43.49)$$

de donde se sigue que:

$$E_M^{(n)} = \bar{E}^{(n)} m^{3n-1} \quad (43.50)$$

Introduciendo (43.48) en (42.9), completamos la equivalencia al encontrar ($\alpha=-2/3$):

$$v + \lambda \rho v^{-1/\alpha} = \frac{m^2}{M^2} + \lambda \rho \frac{m^3}{M^3} = 1, \quad (43.51a)$$

$$\ell = \rho m^3 \quad (43.51b)$$

Es claro que si ρ y ℓ se determinaran siguiendo el mismo criterio, el MF y el método de Caswell /24/ darían el mismo resultado para los osciladores anarmónicos. Existe sin embargo una diferencia fundamental: Caswell recurre a conceptos de masas renormalizadas y ordenamiento normal para sumar la TP, argumentos que son exclusivamente válidos para el oscilador anarmónico cuártico. Para $K \geq 3$ no existe justificación para mantener las mismas ecuaciones, desde el punto de vista del ordenamiento normal. A diferencia de ello, el MF está basado en desarrollos asintóticos de los autovalores y nos permite obtener en forma simple una ecuación de validez absolutamente general como (43.46b). El análisis que hemos hecho revela, entonces, que el MF generaliza los métodos basados en la renormalización de la serie perturbacional para autovalores de sistemas mecano-cuánticos; la expresión de tal generalización es la ec.(43.46b).

En el §.42 propusimos la ec.(42.5) para determinar q reteniendo la estructura fundamental de la condición de extremo del FV en el formalismo del MFV. La relación establecida aquí con el método basado en la extensión del ordenamiento normal permite tener un diferente punto de vista de la ec.(42.5): dicha ecuación es la generalización de la que determina el parámetro renormalizado (como una masa reducida, etc.). Esta conexión demuestra una vez más que los ingredientes fundamentales, que tienen en común todos estos métodos de suma, están determinados por relaciones de dilatación deducibles del hamiltoniano.

Para completar la presente discusión estudiaremos la relación existente entre el MF y los métodos de suma que fueron ~~estudiados~~ ^{presentados} en el §.18. Las transformaciones dependientes del orden (TDO) /25,26/ han sido emple-

adas para sumar, con gran precisión, los desarrollos perturbativos para osciladores anarmónicos y teorías de campos sencillas /25/ y para el estado fundamental del átomo de hidrógeno en un campo magnético /26/.

El método consiste en realizar un cambio de variable, de la original λ a la nueva g , a través de una transformación como la siguiente (§.18):

$$\lambda = \xi g(1-g)^{-s} \quad , \quad (43.52)$$

donde ξ es un parámetro introducido para minimizar el error de la serie truncada. Cabe notar que la transformación (43.52) fue la utilizada por Sez nec y Zinn-Justin /25/ para estudiar los osciladores anarmónicos, pero es bien diferente de la estudiada por Le Guillou y Zinn-Justin /26/ para el efecto Zeeman. En la ref./25/ se utilizaron diferentes valores de s para comparar la convergencia de la serie de potencias de g , encontrándose que una elección adecuada era $s=3/2$, como podía deducirse de una partición del hamiltoniano (similar a (43.37)).

La ec.(43.52) puede ser inmediatamente vinculada a la transformación $\lambda \rightarrow u$ o $\lambda \rightarrow v$ que introduce el MF. Si realizamos la identificación:

$$\xi = 1/\rho \quad , \quad g = \rho u \quad , \quad s = -1/\alpha \quad , \quad (43.53)$$

la ec.(43.52) resulta ser (42.17). Es evidente entonces que si $\alpha=-2/3$, para el oscilador anarmónico cuártico ($K=2$) obtenemos $s=3/2$ (utilizado en la ref./25/). Es claro, pues, que si s y ξ son elegidos como en (43.53) el MF dará los mismos resultados que la TDO; asimismo el MF provee una vía sistemática para construir dichas transformaciones de acuerdo a las propiedades asintóticas de la función $E(\lambda)$ que se desea aproximar.

Recientemente se ha introducido otra redefinición del parámetro perturbacional para sumar la serie de la TPRS, en conexión con el método de Padé (§.13) y Borel-Padé (§.14). El procedimiento ha sido aplicado a modelos con potenciales coulómicos apantallados cuya importancia hemos discutido en el Apéndice F. Para explicar brevemente en qué consiste el método nos restringimos al hamiltoniano siguiente:

$$H(Z,\lambda) = \frac{1}{2} p^2 - \frac{Z}{r} + \lambda r \quad , \quad (43.54)$$

estudiado en las refs./27-30/. A partir del teorema de Symanzik (ver Apéndice A), conocemos que se cumple la siguiente equivalencia unitaria:

$$H(Z,\lambda) = \lambda^{2/3} H(Z\lambda^{-1/3}, 1) \quad (43.55a)$$

Además en este caso, $E(\lambda)$ se puede desarrollar como:

$$E(\lambda) = \lambda^{2/3} \sum_{n=0}^{\infty} e^{(n)} \lambda^{-n/3} \quad (43.55b)$$

De acuerdo a la transformación (43.55a), se ha utilizado en las refs.

/27-30/ el cambio de variable siguiente:

$$\lambda' = \lambda(1+\gamma\lambda)^{-1/3} \quad , \quad (43.56)$$

para construir un desarrollo en serie de potencias de λ' . Para utilizar (43.56) conforme a la propiedad (43.55), es necesario recurrir a aproximantes de Padé $|N+1/N|$ o de Borel-Padé en la variable λ' . Sin embargo dicha transformación no conduce a un desarrollo en serie de potencias de $\lambda^{-1/3}$ cuando $\lambda \gg 1$, ya que a partir de (43.56) se deduce:

$$\lambda' = \lambda^{2/3} \gamma^{-1/3} \left(1 + \frac{1}{\gamma\lambda}\right)^{-1/3} \approx \lambda^{2/3} \gamma^{-1/3} \left\{1 - \frac{1}{3\gamma\lambda} + O(\lambda^{-2})\right\} \quad , \quad (43.57)$$

que no coincide con (43.55b).

En cierto sentido dicho procedimiento /27-30/ es similar en sus defectos al que presentamos en el §.36 de esta obra.

Aplicando el MF encontramos cuál debe ser la transformación correcta (ecs.(42.17) y (43.55b)):

$$\lambda = u(1-\rho u)^{-3} \quad (43.58)$$

La ec.(43.58) será empleada en un capítulo próximo para demostrar las ventajas de la aplicación de MF.

En resumen, hemos visto en este parágrafo de qué manera una variedad de métodos desarrollados para sumar series perturbacionales pueden describirse en forma unificada como ciertos casos límite del MF. Asimismo el MF permite revelar en forma transparente qué poseen en común todos esos métodos. A lo largo de esta sección hemos resaltado cómo el MF formulado en el §.42, a partir de desarrollos asintóticos de $E(\lambda)$, conducía a relaciones de dilatación; dichas relaciones pueden ser deducidas a partir del hamiltoniano del cual $E(\lambda)$ es un autovalor. Esto nos sugiere que el MF puede ser reformulado partiendo de relaciones de dilatación en lugar de desarrollos asintóticos. Este punto será objeto del siguiente parágrafo.

§.44. FORMULACION DEL MF A TRAVES DE LAS RELACIONES DE DILATACION.

Presentaremos aquí una formulación del MF diferente de aquélla estudiada en los §§.42 y 43. Este formalismo es el más apropiado para llevar a cabo las aplicaciones numéricas de los siguientes capítulos, y por ello lo desarrollaremos detalladamente. Algunos resultados que discutiremos en esta sección pueden verse en nuestros trabajos de las refs./32, 33/, pero buena parte de los mismos se exponen en forma completa y exhaustiva por primera vez en esta obra.

Sea $E(Z, \lambda)$ la función real desconocida que deseamos aproximar, que depende de las dos variables reales $0 \leq Z, \lambda < \infty$. Nuestra aproximación es totalmente general y $E(Z, \lambda)$ no debe ser entendido como un autovalor de un cierto hamiltoniano.

Nuestro punto de partida es el desarrollo en serie de potencias de λ (desarrollo Taylor):

$$E(1, \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n, \quad (44.1)$$

al que deseamos transformar en una secuencia convergente. Para lograr esto consideremos que existe la relación siguiente:

$$E(Z, \lambda) = \lambda^\beta E(Z\lambda^\alpha, 1), \quad \alpha < 0, \quad (44.2)$$

donde α y β son constantes reales. Denominaremos a (44.2) "relación de dilatación" o "relación de reescalado", ya que es una propiedad que permite un cambio de escala (o unidades) en la expresión de E . Dado que estamos considerando un problema general, la ec.(44.2) no implica necesariamente la existencia de un desarrollo en serie de potencias de λ^α , alrededor de $1/\lambda=0$. Para que dicho desarrollo en serie exista es necesario que $E(Z, \lambda)$ sea desarrollable en serie de potencias de Z , alrededor de $Z=0$; utilizando (44.2) es inmediato verificar que si la función $E(Z, 1)$ es desarrollable en serie de potencias de Z con coeficientes $\{e^{(n)}\}$ entonces $E(1, \lambda)\lambda^{-\beta}$ es desarrollable en serie de potencias de λ^α con los mismos coeficientes.

Podemos realizar aquí un breve comentario para definir la naturaleza de la aproximación del MF. El MF es apropiado para aproximar funciones $E(1, \lambda)$ que son desarrollables en series de potencias de λ , alrededor de $\lambda=0$, y λ^α , alrededor de $1/\lambda=0$. Este es el caso de los osciladores anarmónicos y modelos con potenciales de confinamiento (Apéndices A y F, res-

pectivamente). Si el problema en consideración satisface una relación de dilatación como (44.2) pero no admite un desarrollo en serie de potencias de Z , los resultados no serán, en principio, tan aceptables ya que por construcción el funcional poseerá un desarrollo en serie de potencias de λ^α . Esta situación aparece por ejemplo para el efecto Zeeman del átomo de hidrógeno (ver Apéndice H).

Podemos reescribir la ec.(44.2) de otro modo. A tal efecto hacemos:

$$\lambda = bc \quad , \quad (44.3a)$$

con b y c dos constantes arbitrarias. Introduciendo (44.3a) en (44.2) encontramos:

$$\begin{aligned} E(Z, \lambda) &= E(Z, bc) = b^\beta c^\beta E(Zb^\alpha c^\alpha, 1) \\ &= b^\beta E((Zb^\alpha), c) \end{aligned} \quad (44.3b)$$

Eligiendo en (44.3b) la constante b tal que:

$$Zb^\alpha = 1 \quad , \quad \text{esto es, } b = Z^{-1/\alpha} \quad , \quad (44.3c)$$

se llega a:

$$E(Z, \lambda) = Z^{-\beta/\alpha} E(1, Z^{1/\alpha}) \quad (44.4)$$

Las ecs.(44.2) y (44.4) son equivalentes y se obtienen como casos particulares de (44.3b).

Definamos ahora, por conveniencia, la siguiente función:

$$\bar{E}(k, w) = E(k(1-w), w) \quad , \quad (44.5)$$

donde k y w son dos variables reales. Apliquemos la relación de dilatación (44.3) (equivalente a (44.2)) a (44.5); el resultado que se obtiene es:

$$\bar{E}(k, w) = \{k(1-w)\}^{-\beta/\alpha} E(1, w(k(1-w))^{1/\alpha}) \quad (44.6)$$

Para construir una secuencia convergente a $E(1, \lambda)$ procedemos del siguiente modo: a partir de la ec.(44.6) definimos:

$$\lambda = wk^{1/\alpha} (1-w)^{1/\alpha} \quad , \quad (44.7)$$

lo que nos da:

$$E(1, \lambda) = k^{\beta/\alpha} (1-w)^{\beta/\alpha} \bar{E}(k, w) \quad (44.8a)$$

$$= \lambda^\beta w^{-\beta} \bar{E}(k, w) \quad (44.8b)$$

Antes de proseguir analicemos la ec.(44.7). Esta determina el valor de la variable w como función de k y λ . Es inmediato probar que la sustitución en (44.7) de:

$$w = \rho u \quad , \quad (44.9a)$$

$$k = \rho^{-\alpha} \quad , \quad (44.9b)$$

nos conduce a la ec.(42.17) para la variable u:

$$\lambda = u \{1 - \rho u\}^{1/\alpha}$$

Esta equivalencia es muy ilustrativa y nos certifica que el cambio de variables sugerido en el §.42 (ver ec.(42.5)) realmente expresa toda la información relevante contenida en la condición de extremo del funcional. Vista esta equivalencia, valen para las raíces w de la ec.(44.7) los mismos resultados que encontramos en el §.42 para (42.5); por completitud escribiremos los resultados en términos de w pero no es necesario demostrarlos.

Lema 44.1: Existe una única raíz w, tal que $(wk^{1/\alpha} \lambda^{-1}) \in |0,1|$ si $\lambda k^{-1/\alpha} > 0$.*

Lema 44.2: La variable w está acotada: $\lim_{\lambda \rightarrow 0} w = 0$, $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} w = 1$, si $\rho > 0$.*

Debe notarse que, a partir de las ecs.(42.5), (42.12), (42.13) y (44.9a), se tiene además:

$$w = 1 - v \quad (44.10)$$

Aplicando el lema 42.2 (y los resultados resumidos en la fig.13.1) concluimos en que $w < 0$ si $\lambda k^{-1/\alpha} < 0$. Esta condición cae afuera de las establecidas en los lemas 44.1 y 44.2, por lo que podemos agregar, usando el lema 42.2 y las ecs.(44.9), el siguiente resultado (ver también la fig.13.1):

Lema 44.3: i) Cuando $-1 < \alpha < 0$ existen dos raíces $w \in (-\infty, 0|$ si y sólo si: $\alpha(\alpha+1)^{-(\alpha+1)/\alpha} \leq \lambda k^{-1/\alpha} \leq 0$. Una de dichas raíces varía entre $-\infty$ y $\alpha/(\alpha+1)$, si $0 \geq \lambda k^{-1/\alpha} \geq \alpha(\alpha+1)^{-(\alpha+1)/\alpha}$, y la otra entre $\alpha/(\alpha+1)$ y 0, si $\alpha(\alpha+1)^{-(\alpha+1)/\alpha} \leq \lambda k^{-1/\alpha} < 0$.

ii) Existe una única raíz $w \in (-\infty, 1|$ si $\lambda k^{-1/\alpha} \geq -1$ y $\alpha = -1$.*

Para satisfacer la condición (i) del lema 44.3 deberíamos tener $\lambda < 0$ y $k > 0$ ya que sólo en casos muy particulares podríamos tener $k^{-1/\alpha} < 0$.

Para poder construir la secuencia que aproxima a $E(1, \lambda)$ debemos encontrar una expresión adecuada para $\bar{E}(k, w)$. Supondremos aquí que \bar{E} es desarrollable en serie de potencias de w:

$$\bar{E}(k, w) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} w^n \quad , \quad \bar{E}^{(n)} = \bar{E}^{(n)}(k) \quad , \quad (44.11)$$

lo que nos conduce a una expresión de $E(1, \lambda)$ en serie de potencias de w. En consecuencia, los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ pueden ser expresados en términos de los $E^{(n)}$ del desarrollo (44.1).

Para lograr esto introducimos (44.1) en (44.8a) y escribimos:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} w^n = k^{-\beta/\alpha} (1-w)^{-\beta/\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n, \quad (44.12)$$

y utilizando (44.7) llegamos a la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} w^n &= k^{-\beta/\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} k^{n/\alpha} w^n (1-w)^{(n-\beta)/\alpha} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} k^{(n-\beta)/\alpha} (-1)^j E^{(n)} \binom{(n-\beta)/\alpha}{j} w^{j+n}. \end{aligned} \quad (44.13)$$

Igualando los coeficientes de w^m en ambos miembros de (44.13), deducimos la expresión buscada para $\bar{E}^{(m)}$:

$$\bar{E}^{(m)} = \sum_{j=0}^m (-1)^{m-j} \binom{(j-\beta)/\alpha}{m-j} E^{(j)} k^{(j-\beta)/\alpha} \quad (44.14)$$

Si comparamos las ecs.(44.14) y (42.26) es evidente que los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ pueden ser relacionados a los $b^{(n)}$ del MF en su formulación original. Para encontrar dicha relación hacemos simplemente uso de (44.9b) en (44.14):

$$k^{\beta/\alpha - m/\alpha} \bar{E}^{(m)} = \sum_{j=0}^m (-1)^{m-j} \rho^{m-j} \binom{(j-\beta)/\alpha}{m-j} E^{(j)}, \quad (44.15)$$

y por (42.26) encontramos:

$$\bar{E}^{(m)} = k^{(m-\beta)/\alpha} \{ (A+1) \delta_{m0} - k^{-1/\alpha} \delta_{m1} + b^{(m-1)} (1 - \delta_{m0}) \} \quad (44.16)$$

Esta relación nos muestra que $\bar{E}^{(m)}$ puede ser construido numéricamente utilizando el Programa VI para los números racionales $b_j^{(n)}$ (ec.(42.28)). Podemos derivar de la ec.(44.14) otra ecuación particularmente útil, utilizando las propiedades de los números combinatorios (ec.(42.21)); ésta es:

$$\bar{E}^{(m)} = \sum_{j=0}^m \frac{(a+bj+m-j-1)!}{(m-j)!(a+bj-1)!} E^{(j)} k^{-a-bj}, \quad a=\beta/\alpha, \quad b=-1/\alpha \quad (44.17)$$

La equivalencia encontrada hasta el momento entre los formalismos desarrollados en los §.42 y §.44 revela la relación estrecha que existe entre la utilización de desarrollos asintóticos para aproximar la función $E(1, \lambda)$ (ecs.(42.1) y (42.2)) y de relaciones de dilatación (ecs.(44.2) y (44.4)). La relación establecida completa la discusión que hicimos en el §.43 respecto del método de la ref./24/ (ec.(43.47)), a la vez que ahonda en el significado de dicha conexión.

La secuencia que aproxima a $E(1, \lambda)$ puede obtenerse truncando el desarrollo (44.11) y, en consecuencia, escribimos:

$$SE_N = k^{\beta/\alpha} (1-w)^{\beta/\alpha} S_N(k,w) ; \quad S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N E^{(n)}(k)w^n, \quad (44.18)$$

donde $N=1,2,\dots$ es el número de coeficientes RS incorporados en la secuencia SE_N (cf.ec.(44.14)). Para la convergencia de la secuencia SE_N tenemos la siguiente condición:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} SE_N = E(1,\lambda) , \quad \text{sii: } \lim_{N \rightarrow \infty} S_N(k,w) = \bar{E}(k,w) \quad (44.19)$$

El parámetro k juega un papel esencial en el MF, como surge de la discusión hecha para ρ en el §.43, para garantizar la convergencia de la secuencia SE_N a $E(1,\lambda)$. Para establecer un criterio de convergencia que nos permita elegir k procedemos del siguiente modo: Tomando el límite en (44.8b) y utilizando el lema 44.2 encontramos:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \{\lambda^{-\beta} E(1,\lambda)\} = \bar{E}(k,1) \quad (44.20)$$

Por otro lado de la relación de dilatación deducimos:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \{\lambda^{-\beta} E(1,\lambda)\} = E(0,1) , \quad (44.21)$$

con lo cual llegamos al siguiente resultado:

$$\bar{E}(k,1) = E(0,1) \quad (44.22)$$

La ec.(44.22) muestra que $\bar{E}(k,1)$ debe ser independiente de k . Esta ecuación junto a la ec.(44.19) obligan a que el gráfico de $S_N(k,1)$ vs. k posea una meseta cuya extensión debería aumentar con N .

El criterio apropiado será entonces tomar $k=k^*$ tal que k^* pertenezca a dicha meseta; el valor de k^* así determinado es, en general, dependiente de N .

El criterio a elegir es simplemente el dictado por las reglas de estabilidad del §.43:

1) PE: Se elige $k^*=k_N^S$ tal que: $(\partial S_N / \partial k)(k=k_N^S, w=1) = 0$, y el valor de $(\partial^2 S_N / \partial k^2)(k=k_N^S, w=1)$ sea mínimo.

2) PI: Se elige $k^*=k_N^I$ tal que: $(\partial^2 S_N / \partial k^2)(k=k_N^I, w=1) = 0$ con el mínimo valor de $(\partial S_N / \partial k)(k=k_N^I, w=1)$.

3) Inexistencia de PI o PE: Se elegirá $k^*=\text{Re}(k_N^S)$ con el menor valor absoluto de la derivada segunda o $k^*=\text{Re}(k_N^I)$ con el menor valor absoluto de la derivada primera.

Estamos ya en condiciones de probar algunas propiedades importantes que presentan los extremos de la secuencia SE_N y extraer de ese modo conclusiones sobre los valores de k_N^S y k_N^I en las reglas de estabilidad antes comentadas. Además, dado que SE_N es nuestra aproximación a $E(1,\lambda)$, las conclusiones a obtener se extienden inmediatamente a $\Gamma^{(N)}$ (§.42),

vista la conexión (44.9) y (44.16).

Para continuar necesitamos un resultado auxiliar, referido a la dependencia de la variable w con el parámetro k . Derivando la expresión (44.7), manteniendo λ constante, encontramos:

$$0 = w^\alpha(1-w) + \{k\alpha w^{\alpha-1}(1-w) - kw^\alpha\} \left(\frac{\partial w}{\partial k}\right)_\lambda, \quad (44.23)$$

que reordenado se transforma en la relación buscada:

$$\left(\frac{\partial w}{\partial k}\right)_\lambda = w(1-w)/\{k[(\alpha+1)w - \alpha]\} \quad (44.24)$$

Teorema 44.1: Los extremos k_N^S de la secuencia SE_N , como una función de k , son independientes de λ .

Demostración: Partimos de la ec.(44.18) convenientemente reescrita como:

$$SE_N = (1-w)^{\beta/\alpha} \sum_{n=0}^N \bar{\varepsilon}^{(n)} w^n; \quad \bar{\varepsilon}^{(n)} = k^{\beta/\alpha} \bar{E}^{(n)}, \quad (44.25a)$$

donde a partir de (44.14):

$$\bar{\varepsilon}^{(n)} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{(j-\beta)/\alpha}{n-j} E^{(j)} k^{j/\alpha} \quad (44.25b)$$

Tomando ahora la derivada respecto de k (manteniendo λ constante) en (44.25a):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial SE_N}{\partial k}\right)_\lambda &= -\frac{\beta}{\alpha} (1-w)^{\beta/\alpha-1} \left(\frac{\partial w}{\partial k}\right)_\lambda \sum_{n=0}^N \bar{\varepsilon}^{(n)} w^n + \\ &+ (1-w)^{\beta/\alpha} \sum_{n=0}^N n w^{n-1} \bar{\varepsilon}^{(n)} \left(\frac{\partial w}{\partial k}\right)_\lambda \\ &+ (1-w)^{\beta/\alpha} \sum_{n=0}^N w^n \frac{\partial \bar{\varepsilon}^{(n)}}{\partial k} \end{aligned} \quad (44.26a)$$

Luego de un simple reordenamiento utilizando la ec.(44.24), llegamos al siguiente resultado:

$$\begin{aligned} P_N(w) &= (1-w)^{-\beta/\alpha} k \{(\alpha+1)w - \alpha\} \left(\frac{\partial SE_N}{\partial k}\right)_\lambda = -\frac{\beta}{\alpha} w \sum_{n=0}^N \bar{\varepsilon}^{(n)} w^n \\ &+ (1-w) \sum_{n=0}^N n w^n \bar{\varepsilon}^{(n)} + k \{(\alpha+1)w - \alpha\} \sum_{n=0}^N w^n \frac{\partial \bar{\varepsilon}^{(n)}}{\partial k} \end{aligned} \quad (44.26b)$$

La ecuación anterior puede ser escrita del siguiente modo:

$$P_N(w) = \sum_{n=0}^N \left\{ (-\beta/\alpha+n) \bar{\epsilon}^{(n)} w^{n+1} + n \bar{\epsilon}^{(n)} w^n + k(\alpha+1) w^{n+1} \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(n)}}{\partial k} - \alpha k w^n \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(n)}}{\partial k} \right\} \quad (44.26c)$$

esto es:

$$P_N(w) = \sum_{n=0}^{N+1} P_N^{(n)} w^n, \quad (44.27a)$$

donde:

$$P_N^{(n)} = \left\{ (-\beta/\alpha+1-n) \bar{\epsilon}^{(n-1)} + (\alpha+1)k \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(n-1)}}{\partial k} + n \bar{\epsilon}^{(n)} - \alpha k \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(n)}}{\partial k} \right\}, \quad n \leq N, \quad (44.27b)$$

$$P_N^{(N+1)} = - (N+\beta/\alpha) \bar{\epsilon}^{(N)} + k(\alpha+1) \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(N)}}{\partial k} \quad (44.27c)$$

Analizamos cuidadosamente los coeficientes (44.27b). A tal efecto reemplazaremos los coeficientes $\bar{\epsilon}^{(n)}$ por las expresiones dadas en la ec. (44.25b). Utilizando, por conveniencia, las siguientes relaciones auxiliares:

$$\bar{\epsilon}^{(n)} = k^{n/\alpha} E^{(n)} + \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^{n-j} \binom{(j-\beta)/\alpha}{n-j} E^{(j)} k^{j/\alpha}, \quad (44.28a)$$

$$k \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(n)}}{\partial k} = \frac{n}{\alpha} k^{n/\alpha} E^{(n)} + \sum_{j=0}^{n-1} \frac{j}{\alpha} (-1)^{n-j} \binom{(j-\beta)/\alpha}{n-j} E^{(j)} k^{j/\alpha} \quad (44.28b)$$

es fácil ver que la contribución a $E^{(n)}$ se cancela. Luego obtenemos:

$$P_N^{(n)} = \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^{n-j} E^{(j)} k^{j/\alpha} \left\{ \binom{(j-\beta)/\alpha}{n-j-1} (n-1+\beta/\alpha-j-j/\alpha) + \binom{(j-\beta)/\alpha}{n-j} (n-j) \right\} \quad (44.29a)$$

Utilizando la siguiente propiedad de los números combinatorios:

$$\begin{aligned} \binom{(j-\beta)/\alpha}{n-j} &= \frac{\binom{(j-\beta)/\alpha}{n-j} \binom{(j-\beta)/\alpha-1}{n-j} \dots \binom{(j-\beta)/\alpha-n+j+1}{n-j}}{(n-j)!} \\ &= \binom{(j-\beta)/\alpha}{n-1-j} \frac{\binom{(j-\beta)/\alpha-n+j+1}{n-j}}{n-j} \end{aligned} \quad (44.29b)$$

deducimos a partir de la ec.(44.29a):

$$P_N^{(n)} = 0, \quad 0 \leq n \leq N \quad (44.30)$$

Encontramos entonces que la única contribución a $P_N(w)$ proviene de (44.27c), con lo cual la expresión para la derivada de la secuencia SE_N queda:

$$\left(\frac{\partial SE_N}{\partial k}\right)_\lambda = \frac{(1-w)^{\beta/\alpha} w^{N+1}}{k\{(\alpha+1)w-\alpha\}} P_N^{(N+1)}(k) \quad (44.31)$$

Utilizando los lemas 44.1 y 44.2 es inmediato ver que:

$$\left(\frac{\partial SE_N}{\partial k}\right)_\lambda (k=k_N^S) = 0, \quad \text{sii: } P_N^{(N+1)}(k_N^S) = 0, \quad \text{para todo } \lambda, w \quad (44.32)$$

con lo cual los puntos estacionarios de la secuencia SE_N quedan determinados por las N raíces del polinomio (ecs.(44.27c), (44.28a) y (44.28b)):

$$\sum_{j=0}^N (-1)^{N-j} E^{(j)} (k_N^S)^{j/\alpha} \{j+j/\alpha-(N+\beta/\alpha)\} = 0, \quad (44.33)$$

independientemente del valor de λ .*

Este teorema tiene una importancia fundamental ya que nos asegura que los extremos de SE_N no cambian aún cuando $\lambda \rightarrow \infty$. En consecuencia, si observamos que a partir de las ecs.(44.18), (44.8b) y el lema 44.2 se cumple que:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{-\beta} SE_N = S_N(k, 1), \quad (44.34)$$

luego la aplicación del teorema 44.1 nos permite conmutar el límite y la derivada respecto de k a λ constante, y obtener:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \{\lambda^{-\beta} \left(\frac{\partial SE_N}{\partial k}\right)_\lambda\} = \left(\frac{\partial S_N(k, 1)}{\partial k}\right) \quad (44.35)$$

Esta ecuación nos asegura que los extremos de la secuencia SE_N (ec. (44.33)) son los mismos que los de la secuencia $S_N(k, 1)$, sobre la que hemos establecido la regla 1 de estabilidad:

$$\left(\frac{\partial S_N(k, 1)}{\partial k}\right)(k=k_N^S) = \left(\frac{\partial SE_N}{\partial k}\right)(k=k_N^S) = 0, \quad \lambda < \infty \quad (44.35)$$

A partir del resultado anterior podemos decir que si $S_N(k_N^S, 1)$ converge a $E(0, 1)$ (ec.(44.22)) entonces SE_N converge a $E(1, \lambda)$ para todo λ , ya que $w < 1$ si $\lambda < \infty$. Debe tenerse presente que la convergencia de $S_N(k, 1)$ a través de (44.36) constituye el caso más desfavorable para sumar la serie (44.1) alrededor de $\lambda=0$, ya que corresponde al estudio de la convergencia en el límite $1/\lambda \rightarrow 0$. Esta nueva formulación del MF es particularmente apropiada para estudiar la convergencia de la secuencia SE_N en todo el rango de valores de λ y por ello es la que utilizaremos en los siguientes capítulos para realizar diferentes aplicaciones.

Podemos agregar que el teorema 44.1 demuestra además la relación (43.23) para la secuencia $F^{(N)}$ (ver §.43).

Para los PI de la secuencia SE_N tenemos también algunas importantes propiedades de tipo general.

Teorema 44.2: Los puntos de inflexión k_N^I de la secuencia SE_N varían en un intervalo finito cuando λ crece de 0 a ∞ .

Demostración: Comenzamos derivando la ec.(44.31) respecto de k :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 SE_N}{\partial k^2}\right)_\lambda &= \left\{ \frac{(N+1)w^N(1-w)^{\beta/\alpha}}{k\{(\alpha+1)w-\alpha\}} P_N^{(N+1)} - \frac{\beta w^{N+1}(1-w)^{\beta/\alpha-1}}{\alpha k\{(\alpha+1)w-\alpha\}} P_N^{(N+1)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{(\alpha+1)w^{N+1}(1-w)^{\beta/\alpha}}{k\{(\alpha+1)w-\alpha\}^2} P_N^{(N+1)} \right\} \left(\frac{\partial w}{\partial k}\right)_\lambda \\ &\quad - \frac{w^{N+1}(1-w)^{\beta/\alpha}}{k^2\{(\alpha+1)w-\alpha\}} P_N^{(N+1)} \\ &\quad + \frac{w^{N+1}(1-w)^{\beta/\alpha}}{k\{(\alpha+1)w-\alpha\}} \frac{\partial P_N^{(N+1)}}{\partial k} \end{aligned} \quad (44.37)$$

Utilizando ahora las ecs.(44.24) y (44.31), la ec.(44.37) se puede escribir en forma mucho más compacta haciendo aparecer $(\partial SE_N / \partial k)_\lambda$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 SE_N}{\partial k^2}\right)_\lambda &= \left\{ \left(\frac{N+1}{w} - \frac{\beta}{\alpha(1-w)} - \frac{\alpha+1}{(\alpha+1)w-\alpha} \right) \frac{w(1-w)}{k\{(\alpha+1)w-\alpha\}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{P_N^{(N+1)}} \frac{\partial P_N^{(N+1)}}{\partial k} - \frac{1}{k} \right\} \left(\frac{\partial SE_N}{\partial k}\right)_\lambda \end{aligned} \quad (44.38)$$

Por la ec.(44.38) vemos que los PE y PI no pueden coincidir, en general, ya que por el teorema 44.1 los PE son los ceros de $P_N^{(N+1)}$. En consecuencia los PI quedan determinados por los ceros del término entre llaves, el cual se puede reescribir (multiplicando por $P_N^{(N+1)}$) como:

$$\begin{aligned} \{ N\alpha(\alpha+1)(w-w^2) - (N+1)\alpha^2(1-w) - \frac{\beta w^2}{\alpha} (\alpha+1) + \beta w \} P_N^{(N+1)} \\ + k\alpha\{(\alpha+1)w-\alpha\}^2 \frac{\partial P_N^{(N+1)}}{\partial k} - P_N^{(N+1)} \alpha\{(\alpha+1)w-\alpha\}^2 = 0 \end{aligned} \quad (44.39)$$

La ec.(44.39) representa un polinomio de grado N cuyas raíces son k_N^I . Observemos que los coeficientes del polinomio dependen de w y no de λ ; luego por el lema 44.2 los coeficientes están acotados para $0 \leq \lambda < \infty$, y por lo tanto lo mismo sucede con las raíces del polinomio.*

El resultado anterior nos asegura que k_N^I depende de λ ; observemos entonces que los PI de $S_N(k,1)$ (regla 2) son los PI de $\lambda^{-\beta} SE_N$ sólo cuando $\lambda \rightarrow \infty$. Estos valores de k son los que utilizaremos para estudiar la convergencia de la secuencia SE_N , para $N \rightarrow \infty$

Podemos realizar ahora algunos comentarios de tipo general sobre la aplicación del MF tal como lo hemos presentado aquí. La aproximación a la función $E(1,\lambda)$ se obtiene estudiando la convergencia de la secuencia $SE_N = SE_N(k,w)$ al incrementar el número de términos N; dado que la función SE_N es una función de w, construída tomando en cuenta ciertas propiedades analíticas de la función $E(1,\lambda)$, es de esperar que constituya una mejor aproximación a la serie original. Debido a esto denominaremos a SE_N "secuencia o serie renormalizada", por extensión de las series renormalizadas de la TPRS (§.43). Por otro lado, por aplicación de las reglas de estabilidad, la investigación de la convergencia se reduce a estudiar los puntos críticos (PI y PE) de $S_N(k,1)$, que denominaremos también secuencia renormalizada ya que está vinculada al límite de acoplamiento infinito de la secuencia SE_N .

Podemos analizar desde otro punto de vista porqué $SE_N(k,w)$ y $S_N(k,w)$ son secuencias renormalizadas. Supongamos que $H(Z,\lambda)$:

$$H(Z,\lambda) = p^2 + ZV_1 + \lambda V_2 \quad , \quad (44.40)$$

es un hamiltoniano cuyos autovalores son $E(Z,\lambda)$. Si $H(Z,\lambda)$ satisface una relación de dilatación (equivalencia unitaria):

$$H(Z,\lambda) = \lambda^\beta H(Z \lambda^\alpha, 1) \quad , \quad \alpha < 0 \quad , \quad (44.41)$$

lo mismo sucede con sus autovalores (ec.(44.2)). En consecuencia $\bar{E}(k,w)$ (ec.(44.5)) es un autovalor del operador siguiente:

$$H(k(1-w),w) = p^2 + kV_1 + w(V_2 - kV_1) \quad (44.42)$$

que es un hamiltoniano particionado y renormalizado, a través de la relación existente entre las variables λ y w. Luego, podemos ver que $S_N(k,w)$ es una secuencia renormalizada que aproxima los autovalores de (44.42), en tanto que $SE_N(k,w)$ aproxima los de (44.40).

Cabe agregar que el hamiltoniano $H(Z,\lambda)$ satisface una relación de dilatación como (44.41) si V_1 y V_2 son funciones homogéneas de las coordenadas de grado $s = -2(\alpha + \beta)/\beta$ y $t = 2(1 - \beta)/\beta$, respectivamente (Teorema 42.1).

Observemos además que el MF involucra también una transformación dependiente del orden ya que k se determina usando (44.33) o (44.39), y

la función $E(1,\lambda)$ queda aproximada por $SE_N(k_N^*,w)$. Si bien las reglas de estabilidad determinan totalmente el valor de k a elegir, la dependencia analítica de k con el orden N es un problema muy interesante que abordaremos en capítulos próximos.

El problema que por el momento queda abierto es determinar bajo qué condiciones $S_N(k,1)$ converge a $E(0,1)$ para $N \rightarrow \infty$. Este problema es muy complicado matemáticamente, y no podemos dar al presente una respuesta completa y rigurosa. Sin embargo estudiaremos un gran número de ejemplos, algunos de los cuales podemos analizar en forma completa debido a su sencillez, y obtendremos así suficiente información como para extraer conclusiones de tipo general sobre la convergencia de la secuencia renormalizada SE_N . Veremos entonces, desde un punto de vista numérico, las ventajas de la utilización del MF frente a otros métodos de suma de series de potencias.

Completaremos esta sección con una breve discusión sobre una posible extensión del MF. Supongamos que la función (44.1) que deseamos aproximar satisface una relación más general que (44.2), como la siguiente:

$$E(Z,\lambda) = f(\lambda^\beta) E(Z\lambda^\alpha,1) \quad (44.43)$$

Procederemos en forma análoga a como lo hicimos al principio de la sección; partimos de la siguiente relación:

$$E(Z,bc) = f(c^\beta b^\beta) E(Zc^\alpha b^\alpha,1) \quad , \quad \lambda=bc \quad (44.44a)$$

Multiplicando por $f(c^\beta)$ y utilizando (44.43) encontramos:

$$f(c^\beta) E(Z,\lambda) = f(c^\beta b^\beta) E(Zb^\alpha,c) \quad (44.44b)$$

Eligiendo $Zb^\alpha=1$ y usando (44.44a), obtenemos finalmente:

$$E(Z,\lambda) = f(\lambda^\beta) \{f(\lambda^\beta Z^{\beta/\alpha})\}^{-1} E(1,\lambda Z^{1/\alpha}) \quad (44.45)$$

Podemos ahora construir la serie renormalizada haciendo uso de (44.45):

$$\bar{E}(k,w) = E(k(1-w),w) = f(w^\beta) \{f(w^\beta k^{\beta/\alpha} (1-w)^{\beta/\alpha})\}^{-1} E(1,wk^{1/\alpha} (1-w)^{1/\alpha}) \quad (44.46a)$$

y definiendo el parámetro λ como:

$$\lambda = w k^{1/\alpha} (1-w)^{1/\alpha} \quad , \quad (44.46b)$$

encontramos:

$$E(1,\lambda) = \{f(w^\beta)\}^{-1} f(w^\beta k^{\beta/\alpha} (1-w)^{\beta/\alpha}) \bar{E}(k,w) \quad (44.46c)$$

El MF puede ser aplicado a partir de las ecs.(44.46b) y (44.46c) si se cumplen dos condiciones: i) $E(Z,\lambda)$ es desarrollable en serie de Taylor

alrededor de $\lambda=0$; ii) $1/f(w^\beta)$ y $f(w^\beta k^{\beta/\alpha}(1-w)^{\beta/\alpha})$ son desarrollables en serie de potencias de w .

Las relaciones de dilatación (44.43) no son las más usuales por lo que no dedicaremos más tiempo a ellas; sin embargo un problema de autovalores de gran interés fisicoquímico que es discutido en el §.61 cumple:

$$E(1,\lambda) = e^{-\lambda} E(\lambda^{-1},1) \quad , \quad (44.47a)$$

$$\alpha=-1 \quad , \quad \beta=1 \quad , \quad f(\lambda) = e^{-\lambda} \quad (44.47b)$$

En el caso que no se conozca una relación de dilatación como (44.2) o (44.43) se puede recurrir directamente a los desarrollos asintóticos de la función para $\lambda \ll 1$ y $\lambda \gg 1$ (ecs.(42.1) y (42.2)). Según vimos en este parágrafo las ecuaciones del MF son equivalentes a las deducidas en el §.42, por lo que los exponentes α y β pueden obtenerse de tales desarrollos asintóticos para luego utilizar el formalismo que hemos presentado aquí. Veremos ejemplos de esta situación en algunos de los capítulos siguientes.

Podemos finalmente resumir nuestro esquema de trabajo para los capítulos próximos: las diferentes aplicaciones que nos proponemos estudiar serán analizadas con el formalismo desarrollado en esta sección ya que es el más compacto y mejor adaptado para los estudios sistemáticos de convergencia. Sólo haremos referencia al MF presentado en el §.42 para introducir simultáneamente información referente a ambos regímenes de λ (cf.ec.(42.42)).

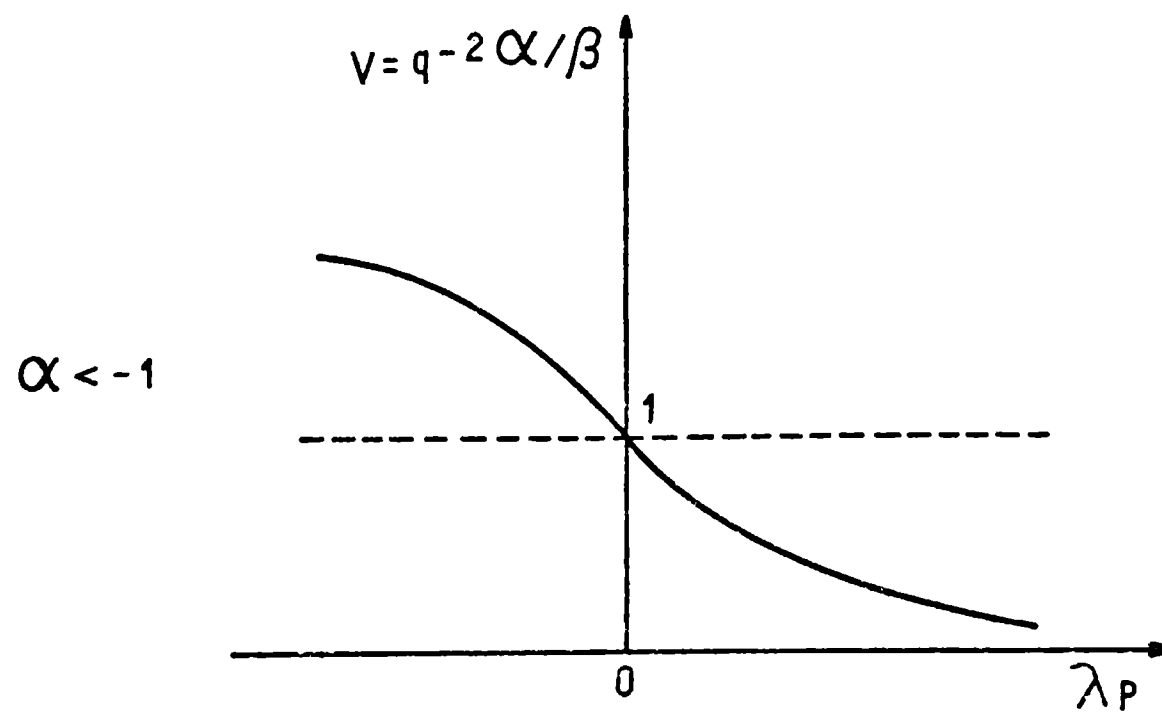
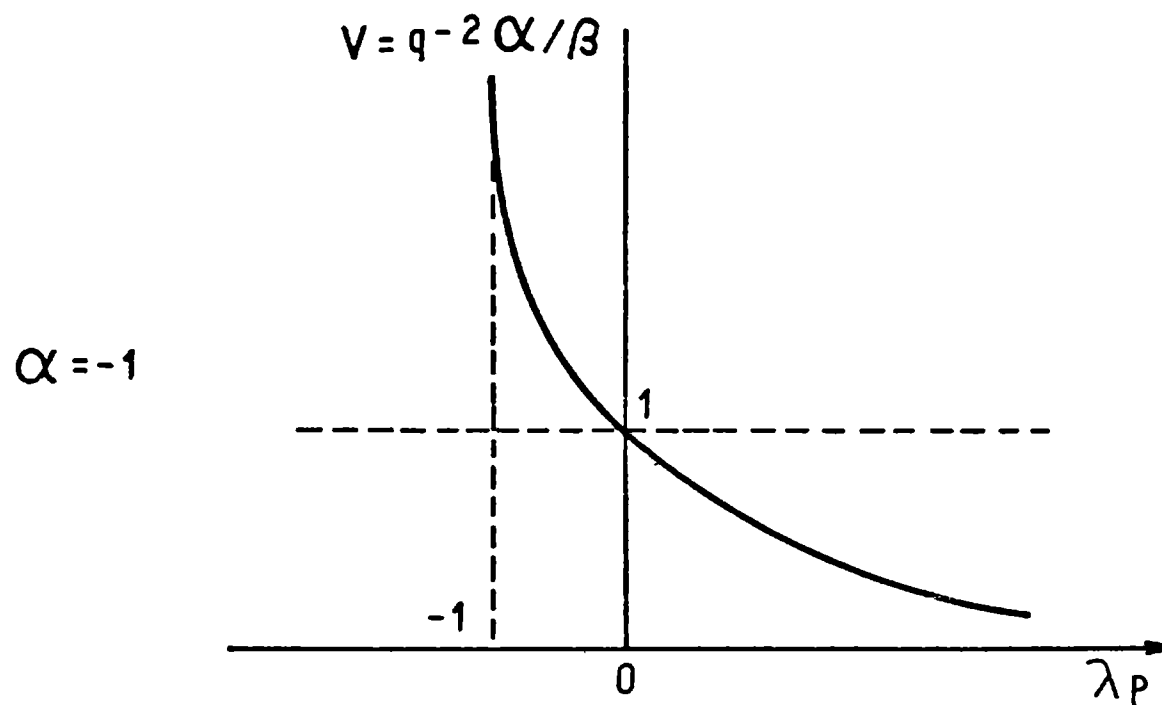
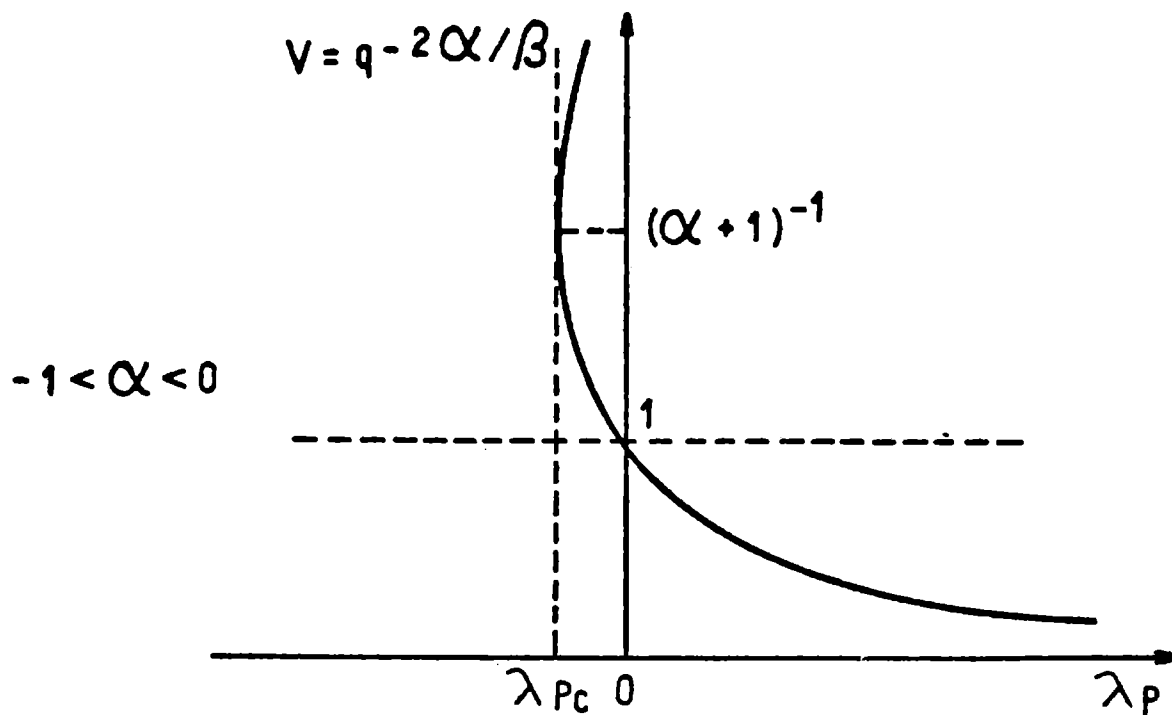
REFERENCIAS DEL CAPITULO XIII.

- /1/ G.A. Arteca, F.M. Fernández y E.A. Castro, Folia Chim. Theor. Lat. 10 (1982) 153.
- /2/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Math. Phys. 25 (1984) 2377.
- /3/ K. Bhattacharyya, J. Phys. B 14 (1981) 783.
- /4/ K. Bhattacharyya, Int. J. Quantum Chem. 20 (1981) 1273.
- /5/ G.H. Hardy, Divergent Series, Oxford University Press, Oxford, 1949.
- /6/ K. Bhattacharyya, Int. J. Quantum Chem. 22 (1982) 307.
- /7/ J.N. Silverman, Phys. Rev. A 28 (1983) 498.
- /8/ F.M. Fernández and E.A. Castro, Phys. Rev. A 27 (1983) 663.
- /9/ F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Chem. Phys. 79 (1983) 321.
- /10/ C.C. Gerry and S. Silverman, Phys. Rev. A 29 (1984) 1574.
- /11/ P. Pascual, An. Fís. 75 (1979) 77.
- /12/ I.K. Dmitrieva and G.I. Plindov, Phys. Lett. A 79 (1980) 47.
- /13/ I.K. Dmitrieva and G.I. Plindov, Phys. Scr. 22 (1980) 386.
- /14/ J. Killingbeck, J. Phys. A 14 (1981) 1005.
- /15/ E.J. Austin and J. Killingbeck, J. Phys. A 15 (1982) L 443.
- /16/ E. Feenberg and P. Goldhammer, Phys. Rev. 105 (1957) 750.
- /17/ E. Feenberg, Ann. Phys. (NY) 3 (1958) 292.
- /18/ A.T. Amos, J. Chem. Phys. 52 (1970) 603.
- /19/ A.T. Amos, Int. J. Quantum Chem. 6 (1972) 125.
- /20/ A.T. Amos, J. Phys. B 11 (1978) 2055.
- /21/ P.-O. Löwdin, Int. J. Quantum Chem. 21 (1982) 69.
- /22/ E.J. Austin, J. Phys. A 17 (1984) 367.
- /23/ E.J. Austin, Comunicación privada, 1983.
- /24/ W.E. Caswell, Ann. Phys. (NY) 123 (1979) 153.
- /25/ R. Seznec and J. Zinn-Justin, J. Math. Phys. 20 (1979) 1398.
- /26/ J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Ann. Phys. (NY) 147 (1983) 57.
- /27/ V.M. Vainberg, V.L. Eletskii and V.S. Popov, Sov. Phys.-JETP 54 (1981) 833.
- /28/ V.S. Popov and V.M. Weinberg, Phys. Lett. A 90 (1982) 107.
- /29/ V.M. Vainberg and V.S. Popov, Sov. Phys. Dokl. 27 (1982) 386.
- /30/ V.S. Popov and V.M. Weinberg, Preprint ITEP-101, Moscow, 1982.
- /31/ B. Simon, Ann. Phys. (NY) 58 (1970) 76.
- /32/ F.M. Fernández, G.A. Arteca, S.A. Maluendes and E.A. Castro, Phys. Lett. A 103 (1984) 19.
- /33/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, "Summation of Strongly Divergent Perturbation Series", J. Math. Phys. ~~(in press)~~ 25 (1984) 3492.

LEYENDA PARA LA FIGURA (Capítulo XIII)

Fig.13.1: Dependencia cualitativa de las raíces de la ec.(42.9) con $\lambda\rho$, para diferentes valores del exponente α .

Fig. 13.1



CAPITULO XIV

PROPIEDADES DEL MF: SERIES CON RADIO DE CONVERGENCIA NO NULO.

§.45. MODELOS SENCILLOS DE PROBLEMAS DE AUTOVALORES QUE PRESENTAN PUNTOS DE RAMIFICACION.

El propósito de este capítulo es analizar las posibilidades del MF para aumentar los radios de convergencia de los desarrollos en serie de potencias de algunas funciones sencillas. A tal efecto consideraremos en este primer parágrafo funciones que presentan puntos de ramificación de tipo radical; tales funciones conducen a desarrollos en serie de potencias con radio de convergencia finito no nulo.

Consideraremos, en primer lugar, un modelo simple de dos niveles que ha sido estudiado por otros autores por su interés en física atómica y molecular /1-3/. Este modelo resulta de utilidad ya que sus autovalores dependen de un parámetro λ y presentan un cruce de niveles en el plano complejo λ . Como es bien conocido, este problema se presenta con frecuencia en el estudio de los niveles electrónicos de moléculas diatómicas en el contexto de la aproximación de Born-Oppenheimer /4/. En consecuencia el modelo puede aplicarse para simular la interacción entre dos estados electrónicos, despreciando el efecto debido a los restantes.

El modelo está definido por la siguiente representación matricial del hamiltoniano:

$$H(Z, \lambda) = \begin{bmatrix} 3\lambda/2 & 2\lambda \\ 2\lambda & 4Z-3\lambda/2 \end{bmatrix} \quad (45.1)$$

Los elementos de matriz han sido elegidos de modo tal de tener un acoplamiento fuerte entre ambos autovalores /2,3/, esto es, de forma tal que los dos niveles se crucen para valores no reales de λ .

El modelo (45.1) ha sido recientemente analizado en nuestro laboratorio /5/ en el contexto del formalismo del §.42. En esta sección utilizaremos el formalismo del §.44 para introducir el MF, y ampliaremos las discusiones.

Para comenzar a aplicar el método necesitamos una relación de dilatación, la que se obtiene inmediatamente de la matriz (45.1):

$$H(Z, \lambda) = \lambda \begin{bmatrix} 3/2 & 2 \\ 2 & 4Z\lambda^{-1}-3/2 \end{bmatrix} = \lambda H(Z\lambda^{-1}, 1) \quad (45.2)$$

Esto nos proporciona la siguiente relación para los autovalores de H:

$$E_n(1, \lambda) = \lambda E_n(\lambda^{-1}, 1) \quad , \quad n=1,2 \quad , \quad (45.3)$$

y los correspondientes exponentes $\beta = -\alpha = 1$, de acuerdo a lo visto en el §.44.

De acuerdo a lo discutido en el §.43, la ec.(45.3) nos asegura que, para este problema, el MF constituye una generalización del método de Euler /6,7/ y de la aproximación geométrica /8,9/.

Los dos autovalores de H están dados por las raíces de la ecuación característica:

$$\det(H - EI) = 0 \quad , \quad (45.4)$$

lo que inmediatamente nos da:

$$E_{1,2}(1, \lambda) = 2 \pm \frac{1}{2} (25\lambda^2 - 24\lambda + 16)^{1/2} \quad (45.5)$$

Utilizaremos el subíndice 1 para el estado fundamental (signo -) y 2 para el restante (signo +).

Las funciones $E_{1,2}(1, \lambda)$ son funciones analíticas de λ dentro de un dominio finito determinado por las singularidades de punto de ramificación. Dichas singularidades λ_b están determinadas por el cruce de niveles:

$$E_1(1, \lambda_b) = E_2(1, \lambda_b) \quad , \quad (45.6)$$

esto es:

$$\lambda_b = \frac{12}{25} \pm i \frac{16}{25} \quad (45.7)$$

Según vimos en el §.14, el desarrollo Taylor de (45.5) converge dentro de un disco de radio R donde:

$$R = |\lambda_b| = \frac{4}{5} \quad (45.8)$$

Nuestro objetivo es ahora estudiar los cambios que el MF produce sobre el dominio de convergencia dado por (45.8). Para ello comenzamos determinando el cambio de variable que introduce el MF; introduciendo (45.3) en(44.7) deducimos:

$$\lambda = wk^{-1}(1-w)^{-1} \quad , \quad \text{luego:} \quad w = \frac{\lambda k}{1+\lambda k} \quad (45.9)$$

Utilizando la ec.(44.8a), sabemos que el MF representa a la función $E(1, \lambda)$ del modo siguiente:

$$E(1, \lambda) = \frac{1}{k(1-w)} \tilde{E}(k, w) \quad , \quad (45.10a)$$

que puede escribir como una serie de potencias en w:

$$E(1, \lambda) = \frac{1}{k(1-w)} \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} w^n \quad (45.10b)$$

La ec.(45.10b) nos asegura que $E(1, \lambda)$ puede ser descripta por medio de una función de la variable w . De acuerdo con esto escribiremos $E(1, \lambda)$ en términos de w y estudiaremos el dominio de convergencia del desarrollo Taylor en potencias de w .

Calculemos en primer lugar las singularidades de punto de ramificación de $E(1, \lambda(w))$. Dichas singularidades están dadas por los ceros de la raíz cuadrada en (45.5); utilizando (45.9), obtenemos las singularidades w_b asociadas a λ_b (ec.(45.7)):

$$w_b = \frac{k\lambda_b}{1+k\lambda_b} = \frac{k\lambda_b + k^2|\lambda_b|^2}{1+2k\text{Re}\lambda_b + k^2|\lambda_b|^2} \quad (45.11a)$$

de donde:

$$|w_b| = \frac{|k||\lambda_b|}{(1+2k\text{Re}\lambda_b + k^2|\lambda_b|^2)^{1/2}} \quad (45.11b)$$

En nuestro caso los puntos de ramificación (45.7) establecen que las singularidades w_b están ubicadas en un disco de radio R' , cuyo valor es:

$$R' = |w_b| = |k| \frac{(400+384k+256k^2)^{1/2}}{16k^2+24k+25} \quad (45.12)$$

Para la serie de potencias en w existe, además, otra singularidad que es el polo:

$$w_p = 1 \quad (45.13)$$

el cual corresponde a $1/\lambda=0$.

Para determinar la región de convergencia asociada al MF debemos analizar por separado los dos casos siguientes:

(i) Si $R' < |w_p|=1$ entonces (45.10b) converge en un disco de radio R' , esto es:

$$- R' < w < R' \quad (45.14a)$$

Reemplazando (45.9) en (45.14a), y reordenando la desigualdad, encontramos:

$$- \frac{R'}{1+R'} < \lambda k < \frac{R'}{1+R'} + \frac{2\lambda k R'}{1+R'} \quad (45.14b)$$

Analizando por separado la desigualdad de la derecha obtenemos la región de convergencia siguiente:

$$-\frac{R'}{1+R'} < \lambda k < \frac{R'}{1-R'} \quad , \quad (45.14c)$$

esto es:

$$-\frac{R'}{k(1+R')} < \lambda < \frac{R'}{k(1-R')} \quad , \quad \text{si } k > 0$$

$$-\frac{R'}{(1-R')|k|} < \lambda < \frac{R'}{(1+R')|k|} \quad , \quad \text{si } k < 0 \quad (45.14d)$$

(ii) Si $R' > |w_p| = 1$ entonces $E(1, \lambda(w))$ converge como una serie de potencias de w en un disco de radio $|w_p|$:

$$-1 < w < 1 \quad (45.15a)$$

Para encontrar el dominio de convergencia en términos de λ , simplemente se debe tomar el límite $R' \rightarrow 1$ en las ecs.(45.14d). Encontramos así:

$$-\frac{1}{2k} < \lambda < \infty, \quad \text{si } k > 0; \quad -\infty < \lambda < \frac{1}{2|k|}, \quad \text{si } k < 0 \quad (45.15b)$$

En resumen, vemos que al aplicar el MF obtenemos una serie de potencias de w que converge dentro de un disco, tal que el intervalo finito de w real se corresponde con un intervalo finito de λ real en el caso que el par de puntos de ramificación w_b determine el dominio de convergencia, y semiinfinito en el caso que dicho dominio esté determinado por el polo w_p .

La transición entre ambas situaciones está determinada por el valor de k para el cual se cumple $R'=1=|w_p|$. A partir de la ec.(45.12) esta última condición nos conduce a:

$$384k^3 + 976k^2 + 1200k + 625 = 0 \quad , \quad (45.16)$$

cuya única raíz real es:

$$k = -\frac{25}{24} \quad (45.17)$$

El resultado (45.17) nos muestra que el MF permite sumar el desarrollo Taylor (45.10b) en un intervalo semiinfinito $-\infty < \lambda < 1/2|k|$ si $k < -25/24$. En la fig.14.1 se ve el plano $k-\lambda$ (real), indicándose en el mismo (mediante el área sombreada) los intervalos de convergencia obtenidos a partir de las ecs.(45.14d), (45.15b) y (45.12). La figura revela claramente que el MF permite extender en forma apreciable la convergencia respecto del desarrollo original de los autovalores en serie de potencias de λ (recojamos que el desarrollo Taylor para λ real converge en el intervalo $(-4/5, 4/5)$). Asimismo en la figura se aprecia que el MF permite sumar más eficazmente la serie cuando $\lambda < 0$.

Analicemos algunas condiciones límites de los intervalos de convergencia (45.14d) y (45.15b). Si observamos que $\lim_{k \rightarrow 0} R'/k = 4/5$, la ec. (45.14d) nos permite deducir que:

$$-\frac{4}{5} < \lambda < \frac{4}{5} \quad , \quad \text{si } k \rightarrow 0 \quad , \quad (45.18)$$

esto es, el desarrollo Taylor original corresponde al límite $k \rightarrow 0$.

Por otro lado a partir de (45.15b) encontramos que:

$$-\infty < \lambda < 0 \quad , \quad \text{si } k \rightarrow -\infty \quad (45.19)$$

Si observamos ahora que (45.12) conduce a:

$$R' \approx 1 - \frac{3}{4k} + O(k^{-2}) \quad , \quad \text{si } |k| \gg 1 \quad , \quad (45.20)$$

encontramos inmediatamente, utilizando la ec.(45.14d), otra importante propiedad asintótica para el intervalo de convergencia:

$$0 < \lambda < \frac{4}{3} \quad , \quad \text{si } k \rightarrow \infty \quad (45.21)$$

Las tres condiciones límites (45.18), (45.19) y (45.21) se aprecian claramente en la fig.14.1.

La desigualdad (45.21) es particularmente interesante. Si utilizamos las ecs.(14.11) y (14.12), es fácil ver que, a partir de las singularidades (45.7), la función (45.5) es sumable mediante el método de Borel (§.14) en el intervalo siguiente:

$$-\infty < \lambda < \frac{|\lambda_b|^2}{\text{Re}(\lambda_b)} = \frac{4}{3} \quad (45.22)$$

La comparación de (45.22) con las ecs.(45.19) y (45.21) nos muestra que el MF permite sumar el desarrollo de (45.5) en la misma región en que es analítica la transformada de Borel. Este es un importante resultado y que además posee características generales. Para explicitar este punto consideremos una función arbitraria que tenga como únicas singularidades al par de puntos de ramificación (λ_b, λ_b^*) , donde:

$$\lambda_b = \lambda_1 + i\lambda_2 \quad , \quad \lambda_1 \neq 0 \quad , \quad \lambda_2 \neq 0 \quad (45.23)$$

De acuerdo a lo discutido en el §.14 sabemos que la transformada de Borel de esta función con singularidades es analítica en una región Ω dada por las ecs.(14.11) y (14.12); en consecuencia, el método de Borel permite "sumar" el desarrollo Taylor en potencias de λ en los intervalos siguientes:

$$-\infty < \lambda < \frac{|\lambda_b|^2}{\text{Re}(\lambda_b)} \quad , \quad \text{si } \text{Re}(\lambda_b) > 0 \quad , \quad (45.24a)$$

$$-\frac{|\lambda_b|^2}{\text{Re}(\lambda_b)} < \lambda < \infty \quad , \quad \text{si } \text{Re}(\lambda_b) < 0 \quad (45.24b)$$

Podemos estudiar a continuación cuál sería el resultado de una combina-

ción entre el método de Borel y el MF, aplicando dicha transformación al desarrollo (45.10b) en serie de potencias de w .

Analícemos qué sucede si realizamos el cambio de variable (45.9) impuesto por el MF; las singularidades en la variable w están localizadas en:

$$w_b = \frac{\lambda_b k}{1 + \lambda_b k}, \quad w_b^* = \frac{\lambda_b^* k}{1 + \lambda_b^* k}, \quad w_p = 1 \quad (45.25)$$

Por otro lado, es fácil encontrar la correspondencia del intervalo en w para la transformada de Borel, determinado por (45.25), con un intervalo en λ ; para ello vemos que a partir de (45.9) se cumple:

$$\lim_{w \rightarrow -\infty} \lambda = -\frac{1}{k}, \quad (45.26)$$

con lo cual deducimos la siguiente conexión:

$$\text{si } k > 0 \quad w \in (-\infty, 1|, \text{ y } \lambda \in |-\frac{1}{|k|}, \infty) \quad (45.27a)$$

$$\text{si } k < 0 \quad w \in (-\infty, 1|, \text{ y } \lambda \in (-\infty, \frac{1}{|k|}| \quad (45.27b)$$

De acuerdo a las singularidades (45.25), sabemos que el método de Borel permitiría sumar la representación de $E(1, \lambda)$ en serie de potencias de w en el intervalo $(-\infty, 1|$; en consecuencia mediante tal combinación entre la transformada de Borel y el MF tendremos convergencia para λ en los intervalos (45.27). Ahora bien, para que los intervalos (45.27) y (45.24) coincidan se debe elegir k apropiadamente. Es fácil demostrar que el valor adecuado de k ($k = \bar{k}$) es aquél que ubica a w_b y w_b^* como singularidades sobre el eje imaginario del plano w : hacemos $w_b = i\gamma$ y reemplazamos en (45.25):

$$\lambda_1 \bar{k} + \bar{k} i \lambda_2 = -\frac{\gamma^2}{1 + \gamma^2} + i \frac{\gamma}{1 + \gamma^2} \quad (45.28)$$

Igualando las partes reales e imaginarios obtenemos el resultado buscado:

$$\gamma = -\lambda_1 / \lambda_2 = -\text{Re}(\lambda_b) / \text{Im}(\lambda_b) \quad (45.29a)$$

$$\bar{k} = -\lambda_1 / (\lambda_2^2 + \lambda_1^2) = -\text{Re}(\lambda_b) / |\lambda_b|^2 \quad (45.29b)$$

La fig.14.2 muestra el plano complejo w y la ubicación de las singularidades.

El valor \bar{k} posee asimismo la interesante propiedad de hacer máximo el módulo de $|\gamma_j|^2 / k^2 = u_b^2$ (ecs.(44.9a) y (44.9b)). Podemos verificarlo inmediatamente observando que:

$$\frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{|w_b|^2}{k^2} \right) = - \frac{1}{k} |w_b|^2 (w_b + w_b^*) \quad , \quad (45.30a)$$

y por lo tanto:

$$\frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{|w_b|^2}{k^2} \right) (k=\bar{k}) = 0 \quad , \quad \text{sii: } (w_b + w_b^*)(k=\bar{k}) = 2\text{Re}(w_b(k=\bar{k})) = 0 \quad , \quad (45.30b)$$

ya que $|w_b| > 0$.

El análisis anterior nos permite extraer las siguientes conclusiones: i) El MF permite lograr, bajo ciertas condiciones, convergencia dentro de la región de convergencia del método de Borel para un problema con un par de singularidades (λ_b, λ_b^*) . Este resultado es de importancia si tomamos en cuenta que el MF es más fácil de aplicar que el basado en la transformada de Borel. ii) Si $\alpha = -1$, el MF permite transformar (mediante una apropiada elección de k) el dominio de analiticidad de la transformada de Borel determinado por (λ_b, λ_b^*) en otro, determinado por singularidades puramente imaginarias (w_b, w_b^*) , relacionadas a las anteriores. Este último punto es de interés pues revela, en un caso simple, el tipo de transformación conforme que introduce la aplicación del MF. Cabe añadir sobre este punto que recientes investigaciones llevadas a cabo en nuestro laboratorio nos sugieren que otras transformaciones conformes pueden dar mejores resultados que los obtenidos mediante el método de Borel, logrando sumar el desarrollo Taylor para todo λ .

La aplicación de la ec.(45.29b) al modelo (45.5) nos da el valor de k para que las singularidades (distintas de w_p) sean imaginarias puras:

$$\bar{k} = - \frac{3}{4} \quad (45.31)$$

La fig.14.1 revela que cuando k está dado por (45.31) el MF converge en un intervalo finito de λ , si bien mayor que el de Taylor.

La discusión realizada más arriba no nos dice nada respecto de la velocidad con que convergen los diferentes métodos, MF, Borel, Padé, etc. En el párrafo siguiente se estudiará numéricamente este punto, utilizando el modelo sencillo dado por (45.5).

§.46. DISCUSION DE LOS RESULTADOS NUMERICOS PARA MODELOS SIMPLES.

En esta sección utilizaremos nuevamente el modelo sencillo (45.1), cuyos autovalores están dados por (45.5), para verificar numéricamente algunas consideraciones de tipo general que hemos realizado en secciones precedentes. En el §.45 vimos que el MF permite sumar el desarrollo Taylor de (45.5) en la misma región en la que el mismo es sumable por el método de Borel; verificaremos en esta sección que la velocidad de convergencia es mayor cuando se emplea nuestro método.

Consideraremos sólo el estado fundamental E_1 :

$$E_1(1,\lambda) = 2 - 2\left(1 - \frac{3}{2}\lambda + \frac{25}{16}\lambda^2\right)^{1/2}, \quad (46.1)$$

si bien las conclusiones son exactamente las mismas si se emplea E_2 . Para construir el desarrollo Taylor de (46.1) sólo debemos tomar en cuenta que:

$$\begin{aligned} (1+a\lambda + b\lambda^2)^{1/2} &= (1+a\lambda\{1+\frac{b\lambda}{a}\})^{1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{1/2}{n} a^n \lambda^n (1+\frac{b\lambda}{a})^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \binom{1/2}{n} \binom{n}{m} a^{n-m} b^m \lambda^{n+m}, \end{aligned} \quad (46.2)$$

donde los coeficientes combinatorios están dados por la ec.(42.21). Utilizando el resultado (46.2) es inmediato encontrar los coeficientes del desarrollo en serie de potencias de λ de (46.1) (que hacen las veces de coeficientes de la TPRS para este modelo sencillo); éstos son:

$$E_1^{(0)} = 0, \quad (46.3a)$$

$$E_1^{(n)} = -2 \left(-\frac{24}{25}\right)^n \sum_{s=0}^n \binom{1/2}{s} \binom{s}{n-s} \left(\frac{36}{25}\right)^s, \quad n \geq 1 \quad (46.3b)$$

Dado que el modelo es muy elemental sólo haremos una aplicación demostrativa del MF reteniendo un pequeño número de términos. Si utilizamos (46.3) encontramos para los primeros cinco términos el siguiente resultado:

$$E_1(1,\lambda) = \frac{3}{2}\lambda - \lambda^2 - \frac{3}{4}\lambda^3 - \frac{5}{16}\lambda^4 + \frac{9}{64}\lambda^5 + \quad (46.4)$$

Para construir la secuencia renormalizada $SE_N(k,w)$ utilizamos las ecuaciones del §.44: Por la ec.(45.2) sabemos que para este modelo $\beta=-\alpha=1$, con lo cual tenemos el siguiente conjunto de ecuaciones (ecs.(44.7), (44.8), (44.11) y (44.14)) que permiten aplicar el MF:

$$E_1(1,\lambda) = k^{-1} (1-w)^{-1} \bar{E}(k,w) \quad , \quad (46.5a)$$

$$w = \frac{\lambda k}{1+\lambda k} \quad , \quad (46.5b)$$

$$\bar{E}(k,w) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} w^n \quad , \quad (46.5c)$$

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{1-j}{n-j} E_1^{(j)} k^{1-j} \quad (46.5d)$$

Las secuencias truncadas hasta el orden N resultan ser entonces (ec. (44.18)):

$$SE_N = k^{-1} (1-w)^{-1} S_N(k,w) \quad , \quad (46.6a)$$

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad (46.6b)$$

Utilizando los primeros términos en la ec.(46.4), podemos obtener los primeros coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ mediante la ec.(46.5d):

$$\begin{aligned} \bar{E}^{(0)} &= 0 \quad , \quad \bar{E}^{(1)} = \frac{3}{2} \quad , \quad \bar{E}^{(2)} = -\frac{1}{k} \quad , \quad \bar{E}^{(3)} = -\left(\frac{1}{k} + \frac{3}{4k^2}\right) \quad , \\ \bar{E}^{(4)} &= -\left(\frac{1}{k} + \frac{3}{2k^2} + \frac{5}{16k^3}\right) \quad , \quad \bar{E}^{(5)} = -\frac{1}{k} - \frac{9}{4k^2} - \frac{15}{6k^3} + \frac{9}{64k^4} \end{aligned} \quad (46.7)$$

Si ahora la serie renormalizada se trunca hasta el tercer orden se obtiene el resultado siguiente:

$$SE_3 = \frac{\lambda^3(3k^2/2 - 2k - 3/4) + \lambda^2(3k-1) + 3\lambda/2}{1 + 2k\lambda + \lambda^2k^2} \quad (46.8)$$

Un cálculo simple nos muestra que SE_3 posee un único PE como función de k:

$$\left(\frac{\partial SE_3}{\partial k}\right)_{\lambda} (k=k_3^S) = 0 \quad , \quad k_3^S = -3/4 \quad , \quad (46.9)$$

donde k_3^S es el valor de k óptimo de acuerdo con las reglas de estabilidad del §.44. El resultado (46.9) confirma el teorema 44.1 que nos asegura que los PE son independientes de λ . Si ahora reemplazamos (46.9)

en (46.8) obtenemos:

$$E_1(1, \lambda) = SE_3(k_3^S) = \frac{3\lambda}{2} \left(\frac{1 - 17\lambda/21}{1 - 3\lambda/4} \right), \quad (46.10)$$

que es el aproximante de Padé $|2/1|$ correspondiente al desarrollo en serie de potencias de λ (ver Apéndice D). Este resultado verifica las conclusiones a las que habíamos arribado en el §.43 al discutir la relación entre el MF y la AG. Si aplicamos la ec.(43.22) en nuestro caso:

$$k^* = - E^{(3)}/E^{(2)} = - 3/4, \quad (46.11)$$

obtenemos (46.9) lo que completa la conexión entre ambos procedimientos. Cabe notar que el valor de k es negativo, lo que nos asegura un intervalo de convergencia ampliado respecto del desarrollo Taylor (ver fig.14.1). Asimismo cabe recordar que en este caso $k^* = \bar{k}$ (ec.(45.31)), lo que ubica las singularidades de punto de ramificación en el eje imaginario de la variable w .

Con los coeficientes (46.7) es muy simple construir la serie renormalizada y determinar sus PE para $N=4,5$. En la fig.14.3 se comparan las secuencias SE_3 , SE_4 , y SE_5 como funciones de k ; en la gráfica se ha agregado el resultado exacto (ec.(45.5)) para mayor claridad.

Una atenta observación de la figura nos permite verificar que nuestras predicciones son confirmadas: (i) La secuencia $SE_N(k, w(\lambda))$, como función de k , presenta una meseta que tiende a ampliarse al crecer N ; (ii) La meseta corresponde a una función oscilante alrededor del resultado exacto; (iii) La amplitud de la oscilación de la meseta disminuye cuando N aumenta; (iv) Las oscilaciones se ubican mayormente en la zona $k < 0$, para la cual el intervalo de convergencia de la serie renormalizada es mayor si $\lambda < 0$ ($\lambda = -1/2$ en nuestro ejemplo).

Las secuencias SE_4 y SE_5 presentan los siguientes PE:

$$k_4^S = - 5/4, \quad (46.12a)$$

$$k_5^S = - 3/4, \quad k_5^S = - 1,61602540378. \quad (46.12b)$$

El segundo valor en (46.12b) es el que debe ser elegido de acuerdo a las reglas de estabilidad (§.44).

Con los resultados anteriores hemos calculado $SE_N(k_N^S, w)$ como función de λ , y comparado tales valores con los de la serie (46.4) y con los resultados exactos (Tabla 14.1). Los resultados que se ven en dicha tabla revelan que la serie renormalizada converge más rápidamente que la serie Taylor dentro de su intervalo de convergencia y que fuera del mismo el MF permite obtener resultados muy aceptables, pese al pequeño número de términos tomados en cuenta.

La Tabla 14.2 compara los resultados obtenidos utilizando diferentes métodos con el mismo número de coeficientes $E^{(n)}$. Hemos agregado así el

aproximante de Padé $|3/2|$ (ver Apéndice D):

$$E_1^{3/2} = \frac{3\lambda}{2} \left\{ \frac{1 - 13\lambda/6 + 21\lambda^2/16}{1 - 3\lambda/2 + 13\lambda^2/16} \right\}, \quad (46.13)$$

y el aproximante de Borel-Padé $|3/2|$ (construido según se vió en el §.14):

$$E_1^{3/2} = \frac{3\lambda}{2} \int_0^\infty \left\{ \frac{1 - 121x\lambda/210 + 31x^2\lambda^2/960}{1 - 17x\lambda/70 + 233x^2\lambda^2/6720} \right\} x e^{-x} dx \quad (46.14)$$

Para calcular numéricamente (46.14) hemos utilizado el método de integración de Romberg, verificando que el número deseado de cifras significativas fuera estable. Los resultados que se ven en la Tabla 14.2 han sido calculados tomando en cuenta valores de 25 a 45 para el límite superior de la integral, y completan los resultados que aparecen en la ref./2/. Cabe notar que hemos escogido en (46.13) y (46.14) aproximantes de la forma $|N+1/N|$ de forma tal de asegurar el comportamiento correcto para $1/\lambda \rightarrow 0$ según la ec.(45.3). Podemos decir entonces que ambas expresiones (46.13) y (46.14) son perfectamente comparables a nuestro SE_5 , ya que satisfacen la misma relación de dilatación y poseen el mismo número de coeficientes $E^{(n)}$. Para realizar una comparación más completa hemos agregado ambos valores de k en (46.12b) para calcular SE_5 . Los resultados nos muestran que no sólo el MF es más fácil de aplicar sino que da mejores resultados que Borel-Padé. Asimismo es notorio que SE_5 y $E^{3/2}$ son de precisión comparable.

Para completar esta primera discusión de las propiedades numéricas del MF, mostraremos cómo los resultados pueden ser mejorados mediante el agregado del coeficiente dominante del desarrollo en serie de potencias de $1/\lambda$. En nuestro caso utilizaremos la siguiente ecuación:

$$e^{(0)} = \lim_{|\lambda| \rightarrow \infty} |\lambda|^{-1} E_1(1, \lambda) = \lim_{|\lambda| \rightarrow \infty} |\lambda|^{-1} SE_N(k_N^S, w(\lambda)), \quad (46.15)$$

que es equivalente a escribir:

$$e^{(0)} = S_N(k, 1) \quad (46.16)$$

Para satisfacer la ecuación anterior seguiremos el procedimiento que indicamos en la parte final del §.42. Para ello agregamos el coeficiente $\bar{E}^{(6)}$ en la secuencia $S_N(k, v)$. virtud de (46.16) tenemos en nuestro caso ($N=6$):

$$\bar{E}^{(6)} = e^{(0)} - \sum_{n=0}^5 E^{(n)} \quad (46.17)$$

Podríamos haber llegado al mismo resultado a través de la utilización de las ecs.(42.42) y (44.16).

Para el ejemplo en cuestión, tenemos a partir de (46.1):

$$e^{(0)} = -\frac{5}{2} \frac{\lambda}{|\lambda|} \quad , \quad (46.18)$$

y en virtud de (46.7), la ec.(46.17) resulta:

$$\begin{aligned} \bar{E}^{(6)} = - \left\{ \frac{5}{2} \frac{\lambda}{|\lambda|} + \sum_{n=0}^5 \bar{E}^{(n)} \right\} = - \frac{5}{2} \frac{\lambda}{|\lambda|} - \frac{3}{2} + \frac{4}{k} + \frac{9}{2k^2} + \frac{45}{16k^3} \\ - \frac{9}{64k^4} \end{aligned} \quad (46.19)$$

La función $E_1(1, \lambda)$ puede ser aproximada por la secuencia $SE'_6(k, w)$, donde el símbolo prima ha sido agregado para recordar que $\bar{E}^{(6)}$ está dado por (46.19) y no por (44.14).

Dado que el MF es más apropiado para sumar $E_1(1, \lambda)$ con $\lambda < 0$, hemos tomado $e^{(0)} = 5/2$. Calculando los PE de SE'_6 hemos encontrado el valor apropiado de $k = k^*$:

$$k^* = k_N^S \approx -1,201 \quad (46.20)$$

Con la modificación que hemos realizado se cumple:

$$S_6(k, 1) = 5/2 \quad , \quad \text{para todo } k \text{ real} \quad (46.21)$$

y por lo tanto, en este caso, los extremos de SE'_6 no coinciden con los de $S_6(k, 1)$ (que de hecho no posee ninguno). Igualmente hemos verificado numéricamente que (46.20) es un PE de SE'_6 , para todo valor de λ . Esto no es sorprendente en virtud del teorema 44.1, que asegura la invariancia de los PE independientemente de los coeficientes $E^{(n)}$. Luego este resultado debe valer aún en el caso en que $\bar{E}^{(N)}$ se ajuste con $e^{(0)}$.

Utilizando la ec.(46.20) para SE'_6 hemos obtenido los resultados numéricos que se ven en la quinta columna de la Tabla 14.2. Es evidente que los resultados son los más precisos de cuantos hemos presentados en esta sección. Esto sugiere fuertemente que la convergencia puede ser mejorada si se introduce en el MF el coeficiente $e^{(0)}$ asociado al límite (46.15).

§.47. TRATAMIENTO DE LA SERIE GEOMETRICA MEDIANTE EL MF.

En esta sección estudiaremos la aplicación del MF a un desarrollo en serie de potencias muy simple: la serie geométrica. El problema es realmente muy elemental y es utilizado como primer test para todos los métodos de suma de series /6/. Para nosotros este problema será particularmente útil pues, precisamente por su sencillez, permitirá analizar algunas propiedades del MF antes de aplicarlo a la TPRS.

Consideremos entonces la función

$$E(Z, \lambda) = \frac{1}{Z + \lambda} \quad , \quad (47.1)$$

que evidentemente cumple la siguiente relación de dilatación:

$$E(Z, \lambda) = \lambda^{-1} E(Z\lambda^{-1}, 1) \quad , \quad (47.2)$$

y nos proporciona los exponentes $\alpha=\beta=-1$ (ec.(44.2)).

La función $E(1, \lambda)$ es desarrollable en serie de potencias de λ (serie geométrica):

$$E(1, \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n, \quad E^{(n)} = (-1)^n \quad , \quad (47.3)$$

que es convergente para $|\lambda| < 1$. La función posee una singularidad en $\lambda = -1$ por lo que nuestro trabajo se reducirá a investigar la región de valores $\lambda \geq 0$.

Nuestro propósito es utilizar el formalismo del §.44 para reconstruir la función (47.1) a partir de (47.3).

Con los exponentes antes encontrados podemos escribir, utilizando la ec.(44.18), la secuencia que aproxima a $E(1, \lambda)$:

$$SE_N = k(1-w) S_N(k, w) = w\lambda^{-1} S_N(k, w) \quad , \quad (47.4a)$$

$$\lambda = \frac{w}{k(1-w)} \quad , \quad (47.4b)$$

$$S_N(k, w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad (47.4c)$$

Los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ pueden calcularse en forma cerrada utilizando la ec.(44.17):

$$\begin{aligned} \bar{E}^{(n)} &= \sum_{j=0}^n \frac{(1+j+n-j-1)!}{(n-j)!(1+j-1)!} (-1)^j k^{-1-j} = \frac{1}{k} \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} \left(-\frac{1}{k}\right)^j \\ &= \frac{1}{k} y^n, \end{aligned} \quad (47.5)$$

donde:

$$y = 1 - \frac{1}{k} \quad (47.6)$$

Para aplicar el MF, según se vió en el §.44, se debe estudiar la convergencia de la secuencia (47.4c) para $N, \lambda \rightarrow \infty$. De acuerdo a las reglas de estabilidad analizamos los puntos críticos de la secuencia $S_N(k,1)$:

$$S_N(k,1) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} = \frac{1}{k} \sum_{n=0}^N y^n \quad (47.7)$$

Para efectuar todos los cálculos en forma analítica podemos darle una forma cerrada a la suma indicada en (47.7). Para ello invocamos la siguiente igualdad auxiliar, por cuestiones de sencillez y sin perder generalidad:

$$\frac{1}{1-y} = \sum_{n=0}^N y^n + y^{N+1} \frac{1}{1-y}, \quad (47.8)$$

mediante la cual obtenemos (utilizando (47.6)):

$$S_N(k,1) = \frac{1}{k} \left(\frac{1-y^{N+1}}{1-y} \right) = 1 - y^{N+1} \quad (47.9)$$

La ec.(47.9) representa el límite de la secuencia $S_N(k,w)$ para $\lambda \rightarrow \infty$, como una función explícita del orden N y del parámetro k . Analizando los PE de (47.9) encontramos:

$$\frac{\partial}{\partial k} S_N(k,1) = - \frac{N+1}{k^2} y^N = 0, \quad (47.10)$$

de donde se deduce:

$$y = 1 - \frac{1}{k^S} = 0, \text{ para todo } N \geq 1, \text{ luego: } k^S = 1 \quad (47.11)$$

Notemos que el valor de k^S es independiente del orden N . Si reemplazamos ahora (47.11) y (47.9) encontramos:

$$S_N(k^S,1) = 1, \text{ para todo } N \geq 1 \quad (47.12)$$

que es el resultado correcto, como se deduce de (47.1):

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda E(1,\lambda) = 1 \quad (47.13)$$

El resultado (47.12) significa que la serie geométrica es sumable para $\lambda \rightarrow \infty$ ($w=1$) a través de la secuencia $S_N(k^S, 1)$. Este resultado y el teorema 44.1 nos aseguran que la serie también es sumable por el MF para todo $\lambda > 0$ ($0 \leq w \leq 1$).

Por otro lado, si estudiamos el radio de convergencia de la serie (47.4c) mediante el teorema de D'Alembert (ec.(11.2a)) encontramos:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left| \frac{\bar{E}(N+1)}{\bar{E}(N)} \right| = y = \frac{k-1}{k} = \frac{1}{R}, \quad k = \text{cte.}, \quad (47.14)$$

de donde se deduce que el radio de convergencia R es máximo (infinito) para $k \rightarrow 1$. Si ahora tomamos en cuenta que, por (47.4b), la singularidad que posee $E(1, \lambda)$ en $\lambda = -1$ es enviada a infinito en $E(1, \lambda(w))$:

$$\lim_{w \rightarrow \infty} \lambda = -1, \quad k=1, \quad (47.15)$$

y que por la ec.(47.14), para $k=1$, el desarrollo (47.4c) converge para $w < \infty$, luego es posible sumar la serie original para $\lambda > -1$ y no sólo para $\lambda > 0$.

Calculamos ahora los PI de (47.9):

$$\frac{\partial^2 S_N(k, 1)}{\partial k^2} = \frac{N+1}{k^4} y^{N-1} \{2yk - N\} = 0, \quad (47.16)$$

de donde se deducen dos posibles resultados:

$$y = 0, \quad \text{para } N \geq 2, \quad (47.17a)$$

$$2yk - N = 0, \quad \text{para } N \geq 1 \quad (47.17b)$$

La condición (47.17a) nos conduce nuevamente a que el MF suma la serie geométrica para $\lambda > -1$:

$$S_N(k^I, 1) = 1, \quad \text{para } N \geq 2, \quad k^I = 1 \quad (47.18)$$

La ec.(47.17b) introduce una importante novedad ya que nos conduce a:

$$k^I = k_N^I = \frac{N}{2} + 1 \quad (47.19)$$

Esta ecuación nos muestra que k^I depende de N , por lo que el MF cambia a la variable λ en w , mediante una transformación dependiente del orden.

Analícemos ahora a dónde converge $S_N(k_N^I, 1)$ cuando se sigue la secuencia de PI dados por (47.19). Reemplazando (47.19) en (47.9) tenemos:

$$S_N(k_N^I, 1) = 1 - \left(1 - \frac{2}{N+2}\right)^{N+1}, \quad (47.20)$$

y tomando el límite se deduce:

$$\begin{aligned}
 \lim_{N \rightarrow \infty} S_N(k_N^I, 1) &= 1 - \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{2}{N+2}\right)^{N+1} \\
 &= 1 - \exp\left\{\lim_{N \rightarrow \infty} (N+1) \ln\left(1 - \frac{2}{N+2}\right)\right\} \\
 &= 1 - \exp\left\{\lim_{N \rightarrow \infty} \left(-2 \frac{N+1}{N+2}\right)\right\} = 1 - e^{-2} \quad , \quad (47.21)
 \end{aligned}$$

y concluimos entonces en que la serie converge a:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} S_N(k_N^I, \lambda) = 0,8646647\dots < 1 \quad , \quad (47.22)$$

lo que es una cota inferior al resultado exacto.

En resumen, observemos que por las ecs.(47.10) y (47.18) la secuencia $S_N(k, 1)$ tiene PE y PI coincidentes en $k^S = k^I = 1$. La secuencia construida con estos puntos críticos converge al valor correcto de la suma. Por otro lado existe otra secuencia construida a partir de k_N^I (ec.(47.19)) que no converge al valor correcto. Para decidir cuál secuencia de PI debe elegirse aplicamos las reglas de estabilidad. Calculando la derivada primera en el PI (47.19) encontramos:

$$\left| \frac{\partial}{\partial k} S_N(k_N^I, 1) \right| = 4 \frac{N+1}{(N+2)^2} \left(1 - \frac{2}{N+2}\right)^N \quad , \quad (47.23)$$

que resulta ser mayor que el correspondiente a la derivada primera en $k^I = 1$. De este modo las reglas que establecimos para el k^* óptimo nos eliminan la secuencia que converge al lugar incorrecto.

El resultado que encontramos más arriba, estudiando la serie geométrica, es un importante llamado de atención: el MF genera para algunas funciones $E(1, \lambda)$, secuencias dependientes del orden con la forma siguiente:

$$k_N = \delta N + \delta' \quad , \quad (47.24)$$

que converge a un valor incorrecto. Tales secuencias deben ser eliminadas mediante las reglas de estabilidad para que el MF permita sumar el desarrollo en serie de potencias de λ . Volveremos sobre este punto en secciones siguientes para discutir la importancia de las secuencias SE_N con k dependiente del orden.

Creemos conveniente hacer notar nuevamente al lector que, cuando discutimos la convergencia incorrecta a través de una secuencia con k dado por (47.19), estamos hablando de convergencia para $1/\lambda \rightarrow 0$ de un desarrollo alrededor de $\lambda = 0$ (que es el caso más desfavorable). Es así que para valores de λ intermedios (fuera del radio de convergencia si éste fuera finito no nulo) los resultados pueden ser numéricamente bastante próximos a los de la función $E(1, \lambda)$.

Los resultados obtenidos para la serie geométrica con $k^S = k^I = 1$ nos conduce al cambio de variables (ec.(47.4b)):

$$w = \frac{\lambda}{1+\lambda} \quad , \quad (47.25)$$

que no es más que la transformación de Euler /6/. Este resultado no es en absoluto sorprendente ya que sabemos que el desarrollo Taylor de $E(1,\lambda)$ converge para $|\lambda|<1$ y el de Laurent para $|\lambda|>1$. El método de Euler provee una transición continua del desarrollo Taylor al de Laurent, con lo cual la serie converge para $\lambda \geq 0$.

Puede notarse asimismo que el criterio de anulación del último coeficiente de la serie renormalizada:

$$\bar{E}^{(N)} = \frac{1}{k} y^N = 0 \quad , \quad (47.26)$$

nos conduce nuevamente a $k=1$, y por lo tanto a la suma exacta para $1/\lambda \rightarrow 0$. Este criterio ha sido utilizado por otros autores al aplicar transformaciones dependientes del orden para sumar series divergentes /10,11/. Dicho criterio conduce en este caso exactamente al mismo resultado que nuestras reglas de estabilidad.

Podemos agregar finalmente que los diferentes valores de k_N^S obtenidos en el §.46 para el modelo (45.1) no configuran una dependencia con el orden del tipo (47.21), sino que simplemente corresponden a casos de diferente velocidad de convergencia, dentro de la región en la cual la serie que origina el MF es convergente.

§.48. ALGUNOS COMENTARIOS ADICIONALES SOBRE OTROS PROBLEMAS CON RADIO DE CONVERGENCIA FINITO NO NULO.

Las conclusiones alcanzadas en el §.45 al discutir el MF en relación a las series de potencias con radio de convergencia no nulo (modelo de dos niveles), son igualmente válidas para otros desarrollos en serie de potencias con radios de convergencia determinados por puntos de ramificación. Por ejemplo, un problema de autovalores con características similares a las discutidas en el §.45, es el determinado por el llamado potencial de Pöschl-Teller /12/, descrito por el siguiente hamiltoniano:

$$H(Z,\lambda) = p^2 + Z\{\text{sen}(\frac{x}{\sqrt{2}})\}^{-2} + \lambda\{\text{cos}(\frac{x}{\sqrt{2}})\}^{-2} \quad (48.1)$$

Si indicamos con $E(Z,\lambda)$ a los autovalores de $H(Z,\lambda)$, el estado fundamental es /12/:

$$E(1,\lambda) = \frac{1}{8} \{26 + 8\lambda + 10(1+8\lambda)^{1/2}\} \quad , \quad (48.2)$$

que muestra claramente una singularidad de tipo radical.

El modelo anterior es de interés ya que el mismo contiene como casos particulares al oscilador armónico y al modelo de la partícula en la caja. Sin embargo el hamiltoniano (48.1) resulta de interés para nosotros por otras razones. A diferencia de los otros modelos que hemos descrito previamente, el operador anterior no es "dilatable" por una transformación unitaria. En otras palabras, no podemos deducir a partir del mismo a los exponentes α y β . Obviamente esto es debido a la presencia de funciones trigonométricas en el hamiltoniano.

A consecuencia de la no-dilatabilidad, los hamiltonianos que poseen tales características deben tratarse de un modo diferente, si se desea aplicar el MF para sumar las series perturbativas asociadas a sus autovalores.

Existe una amplia variedad de modelos de interés fisicoquímico que poseen las características arriba mencionadas. Entre ellos tenemos a los que describen sistemas rotacionales en campos externos, los que han recibido recientemente una gran atención en el campo de la TP /13-19, y referencias citadas allí/. Tales modelos incluyen a los rotores moleculares (trompos o lineales) dipolares en campos eléctricos /13-15/, y el efecto Zeeman rotacional /16/, esto es, el corrimiento de los niveles rotacionales moleculares debido a la presencia de un campo magnético externo.

Todos los modelos rotacionales introducen problemas con condiciones de contorno periódicas. En este caso, y debido a la presencia de funciones trigonométricas en el hamiltoniano, se debe recurrir a desarrollos asintóticos del mismo operador para establecer los desarrollos asintóticos de la energía. Veremos un sencillo ejemplo para fijar ideas, y tener así presente una alternativa diferente por la que puede ser obtenida la información necesaria para aplicar el MF.

Los autovalores $E_{J,m}$ para el efecto Stark rotacional de una molécula diatómica dipolar, bajo las aproximaciones de Born-Oppenheimer y del rotor rígido, se determinan a partir de la siguiente ecuación de Schrödinger /13/:

$$\left\{ -\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \sin\theta \frac{d}{d\theta} + \frac{m^2}{\sin^2\theta} - g \cos\theta \right\} \Psi(\theta) = E_{J,m} \Psi(\theta) \quad , \quad (48.3a)$$

donde:

$$g = 2\mu IF\hbar^{-2} \quad , \quad E_{J,m} = 2IW_{J,m}\hbar^{-2} \quad , \quad (48.3b)$$

siendo μ el momento dipolar permanente de la molécula, I su momento de inercia y F la intensidad del campo eléctrico. El ángulo θ es el ángulo entre la dirección del campo eléctrico y el eje molecular. Las energías rotacionales están representadas por $W_{J,m}$ siendo $J=0,1,2,\dots$ y $m=0,\pm 1,\dots,\pm J$, los dos números cuánticos que definen el estado del sistema, en tanto que $E_{J,m}$ son los autovalores adimensionales. El campo adimensional está representado por g .

Podemos notar que el cambio de variables $\theta \rightarrow \theta + \pi$, nos introduce un cambio de signo en el parámetro perturbacional g contenido en el hamiltoniano. Por otro lado, cabe notar que todos los estados de este sistema son no degenerados /19/. En consecuencia, aplicando el teorema 7.1, podemos concluir en que las correcciones perturbacionales de orden impar en g son nulas para el desarrollo en serie de la energía. Por consiguiente, los autovalores se pueden escribir de la siguiente manera:

$$E_{J,m} = \sum_{n=0}^{\infty} E_{J,m}^{(n)} \lambda^n \quad , \quad \lambda = g^2 \quad (48.4)$$

Para obtener el desarrollo asintótico de los autovalores para $g \gg 1$, debemos buscar el desarrollo asintótico del hamiltoniano. Básicamente el procedimiento consiste en considerar que, cuando el campo es infinitamente intenso ($g \rightarrow \infty$), la molécula tiende a orientarse con el mismo, esto es, $\theta \rightarrow 0$. En ese límite disminuye la amplitud de las oscilaciones y crece el valor absoluto de la energía comportándose el sistema como un oscilador isotrópico bidimensional perturbado, cuya constante de fuerza aumenta con el campo externo /20/. Desarrollando al hamiltoniano en el límite $\theta \rightarrow 0$, el mismo adopta la siguiente forma /20/:

$$\left\{ z \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{dz} - \frac{a_m}{z} - \frac{z}{4} + \frac{\sigma}{16} - a_m \sum_{s=0}^{\infty} A_s \sigma^{s+1} z^s + \frac{1}{2} \sum_{s=0}^{\infty} L_s \sigma^{s+1} z^{s+2} \right\} \chi(z) = \xi_{J,m} \chi(z) \quad (48.5a)$$

donde:

$$a_m = \frac{4m^2 - 1}{16}, \quad L_s = (-1)^s \frac{1}{(2s+4)!} \quad (48.5b)$$

$$A_s = 2c_s - \sum_{i=0}^{s-1} c_i c_{s-1-i}, \quad s \geq 1; \quad A_0 = 2c_0, \quad c_s = 2 |B_{2s+2}| \frac{2^{2s+1} - 1}{(2s+2)!} \quad (48.5c)$$

siendo B_{2s+2} los números de Bernoulli. La variable z de la ecuación diferencial (48.5a) está dada por:

$$\theta = (\sigma z)^{1/2}, \quad \sigma = (2/g)^{1/2} \quad (48.5d)$$

en términos del nuevo parámetro σ , que tiende a cero cuando $1/g \rightarrow 0$. Los autovalores $\xi_{J,m}$ se encuentran ligados a los originales de la siguiente manera:

$$\xi_{J,m} = -\frac{\sigma}{4} (E_{J,m} + g) \quad (48.5e)$$

El hamiltoniano que aparece en el término izquierdo de la ec.(48.5a) posee un polinomio en potencias de σ , y, por lo tanto, nos asegura que para sus autovalores existe el siguiente desarrollo formal en serie de potencias:

$$\xi_{J,m} = \sum_{n=0}^{\infty} \xi_{J,m}^{(n)} \sigma^n = \sum_{n=0}^{\infty} \{2^{n/2} \xi_{J,m}^{(n)}\} \varepsilon^{-n/2} \quad (48.6)$$

Combinando las ecs.(48.5e) y (48.6) obtenemos el desarrollo asintótico buscado para la función $E_{J,m}$ que, escrito en términos de λ , resulta:

$$E_{J,m} = \lambda^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} e_{J,m}^{(n)} \lambda^{-1/4} \quad (48.7a)$$

donde:

$$e_{J,m}^{(0)} = -1, \quad e_{J,m}^{(n)} = -2^{(n+1)/2} \xi_{J,m}^{(n-1)}, \quad n \geq 1 \quad (48.7b)$$

El par de ecs.(48.4) y (48.7a) constituyen el punto de partida para aplicar el MF a este sistema rotacional, ya que nos proporcionan los exponentes $\beta=1/2$ y $\alpha=-1/4$.

Cabe señalar que recientemente han podido calcularse un gran número de

coeficientes $\{E_{J,m}^{(n)}\}$ y $\{e_{J,m}^{(n)}\}$ para varios sistemas rotacionales /13-19/, por lo que se posee la información necesaria para realizar investigaciones sobre la convergencia de las series perturbacionales. Estas han comenzado a realizarse recientemente /16-19/, aplicando tanto el formalismo visto en el §.42 /16/ como el del §.44 /17/. No nos detendremos aquí a exponer los resultados obtenidos, ya que nuestro mayor interés está centrado en las series con radio de convergencia nulo; no obstante, cabe comentar que el MF ha resultado ser una excelente herramienta para tratar los sistemas rotacionales, en el marco de la TPRS /19/.

El modelo (48.3a) ha sido escogido como un ejemplo para ilustrar cómo se determinan los exponentes α y β para los autovalores de hamiltonianos "no dilatables". Otros ejemplos aparecen en problemas de autovalores relacionados a la ecuación de Mathieu. Esta familia de problemas conducen a desarrollos de Taylor con la forma (48.4), con radios de convergencia no nulos. Los mismos están determinados por pares conjugados de puntos de ramificación que, en el caso de la ecuación de Mathieu para funciones de período π , son puramente imaginarias. Si indicamos con g_s el valor del parámetro perturbacional en la singularidad, éste tiene, pues, la forma siguiente:

$$g_s = \pm i |g_s| \quad (48.8)$$

Cuando se conoce el valor de $|g_s|$ se puede utilizar la transformación que introduce el MF de forma tal de remover convenientemente la singularidad. La transformación de Euler generalizada resulta muy apropiada ($\alpha=-1$ en la ec.(44.7)). En este caso, el MF cambia la variable λ del desarrollo (48.4) por la siguiente:

$$w = \frac{\lambda k}{1+\lambda k}, \quad k \geq 0 \quad (48.9)$$

La singularidad (48.8) se traslada ahora a w_s :

$$w_s = \frac{g_s^2 k}{g_s^2 k - 1}, \quad (48.10)$$

y el parámetro k puede ser elegido de forma tal que $|w_s|=1$ ($w_s=-1$):

$$k^* = 1/2g_s^2 \quad (48.11)$$

Tomando $k=k^*$, el MF nos proporciona un desarrollo Taylor en potencias de w , convergente para $|w|<1$. De acuerdo a la ec.(48.9), el intervalo $-k < w < 1$ se corresponde con $-1/g_s^2 < \lambda < \infty$. En consecuencia, el MF permitiría sumar el desarrollo (48.4) para $-\infty < g < \infty$ mediante la remoción de la singularidad g_s .

Recientes investigaciones llevadas a cabo en nuestro laboratorio /19/ han demostrado que los resultados obtenidos con el procedimiento arriba mencionado son similares en calidad a los derivados por la estricta a-

plicación del formalismo del §.44, determinando k mediante las reglas de estabilidad.

Otros modelos rotacionales están descriptos por la ecuación de Mathieu para funciones de período 2π . En este caso el tratamiento a seguir debe ser diferente, debido a la presencia de singularidades de la forma:

$$g_s = g_1 \pm i g_2, \quad g_1 \neq 0, \quad (43.12)$$

que no pueden ser tratadas por la transformación de Euler. Recientes investigaciones llevadas a cabo en nuestro laboratorio /21/ han mostrado que las dificultades planteadas pueden resolverse mediante la utilización de ciertas transformaciones conformes, apropiadamente diseñadas.

REFERENCIAS DEL CAPITULO XIV.

- /1/ P.J. Ellis and E.Osnes, Phys. Lett. B 45 (1973) 425.
- /2/ J.M. Leinaas and E.Osnes, Phys. Scr. 22 (1980) 193.
- /3/ K. Bhattacharyya, Int. J. Quantum Chem. 20 (1981) 1273.
- /4/ E.E. Nikitin, Theory of Non-Adiabatic Transitions, en: H. Hartman (Ed.), Chemische Elementarprozesse, Springer Verlag, Berlin, 1968.
- /5/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Math. Phys. 25 (1984) 2377.
- /6/ G.H. Hardy, Divergent Series, Oxford University Press, Oxford, 1949.
- /7/ P.M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, vol.2, McGraw-Hill, New York, 1953.
- /8/ J. Killingbeck, Rep. Prog. Phys. 40 (1977) 963.
- /9/ K. Bhattacharyya, J. Phys. B 14 (1981) 783.
- /10/ R. Seznec and J. Zinn-Justin, J. Math. Phys. 20 (1979) 1398.
- /11/ J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Ann. Phys. (NY) 147 (1983) 57.
- /12/ S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer Verlag, International Student Edition, Berlin, 1979.
- /13/ S.A. Maluendes, F.M. Fernández y E.A. Castro, Folia Chim. Theor. Lat. 11 (1983) 23.
- /14/ S.A. Maluendes, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Mol. Spectrosc. 100 (1983) 24.
- /15/ S.A. Maluendes, F.M. Fernández and E.A. Castro, Match 16 (1984) 95.
- /16/ S.A. Maluendes, F.M. Fernández and E.A. Castro, Phys. Rev. A 28 (1983) 2059.
- /17/ S.A. Maluendes, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Mol. Spectrosc. 104 (1984) 380.
- /18/ S.A. Maluendes, F.M. Fernández, ^{A.M Mesón} and E.A. Castro, Phys. Rev. A (~~en Prensa~~) ^{30 (1984)} 2227
- /19/ S.A. Maluendes, Tesis Doctoral (~~en preparación~~) ^{PHD THESIS}
- /20/ R. Propin, J. Phys. B 11 (1978) 257. ^{La Plata University, 1956}
- /21/ F.M. Fernández y E.A. Castro, ~~resultados no publicados.~~
^{Phys Lett A 107 (1985) 83}

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XIV)

Tabla 14.1

Menor autovalor del modelo de dos niveles (45.1), estudiado por medio de las secuencias SE_N para varios valores de λ .^{a)}

$-\lambda$	$-SE_3$	$-SE_4$	$-SE_5$	$-E^{b)}$	$-E_1(1, \lambda)^{c)}$
0,5	0,9318	0,9275	0,9267	0,9302	0,9262
1,0	2,0714	2,0432	2,0367	2,2031	2,0311
1,5	3,3088	3,2368	3,2195	4,6186	3,2022
2,0	4,6000	4,4694	4,4375	10,5000	4,4031
2,5	5,9239	5,7243	5,6753	24,2212	5,6199

a) Los resultados tabulados corresponden a los puntos estacionarios $SE_N(k_N^S, w)$.

b) Serie (46.4) hasta el quinto orden.

c) Resultado exacto (ec.(46.1)).

Tabla 14.2

Menor autovalor del modelo de dos niveles (45.1) calculado utilizando diferentes métodos.

$-\lambda$	$-SE_5^a)$	$-E 3/2 b)$	$-E' 3/2 c)$	$-SE_6^d)$	$-E_1(1, \lambda)^e)$
0,5	0,9258 0,9267	0,9260	0,9257	0,9263	0,9262
1,0	2,0248 2,0367	2,0283	2,0216	2,0326	2,0311
1,5	3,1769 3,2195	3,1915	3,1604	3,2059	3,2022
2,0	4,3440 4,4375	4,3793	4,2978	4,4097	4,4031
2,5	5,5130 5,6753	5,5783	5,4174	5,6293	5,6199

a) Resultados obtenidos mediante el MF. El primer valor corresponde a $k_5^S = -3/4$ y el segundo a $k_5^S = -1,61602540378$.

b) Calculado mediante la ec.(46.13) (método de Padé).

c) Calculado mediante la ec.(46.14) (método de Borel-Padé).

d) Resultados obtenidos mediante el MF utilizando las ecs. (46.19) y (46.20).

e) Resultado exacto (ec.(46.1)).

LEYENDAS PARA LAS FIGURAS (Capítulo XIV)

Fig.14.1: Plano $k-\lambda$ (real) para el estado fundamental del sistema de dos niveles (ec.(45.5)).

(La zona sombreada indica la región donde hay convergencia al aplicar el MF).

Fig.14.2: Plano complejo w para una función $E(1, \lambda)$ con un par de singularidades conjugadas de punto de ramificación: $\lambda = \lambda_1 \pm i \lambda_2$.

(El valor de k se eligió de acuerdo a la ec.(45.29). El área sombreada indica el dominio de analiticidad de la transformada de Borel).

Fig.14.3: Aproximación al autovalor más bajo del sistema de dos niveles (para $\lambda=-1/2$) mediante diversas secuencias renormalizadas $SE_N(k, w)$.

- $N = 3$.
- $N = 4$
- .-.-.-. $N = 5$

Fig. 14.1

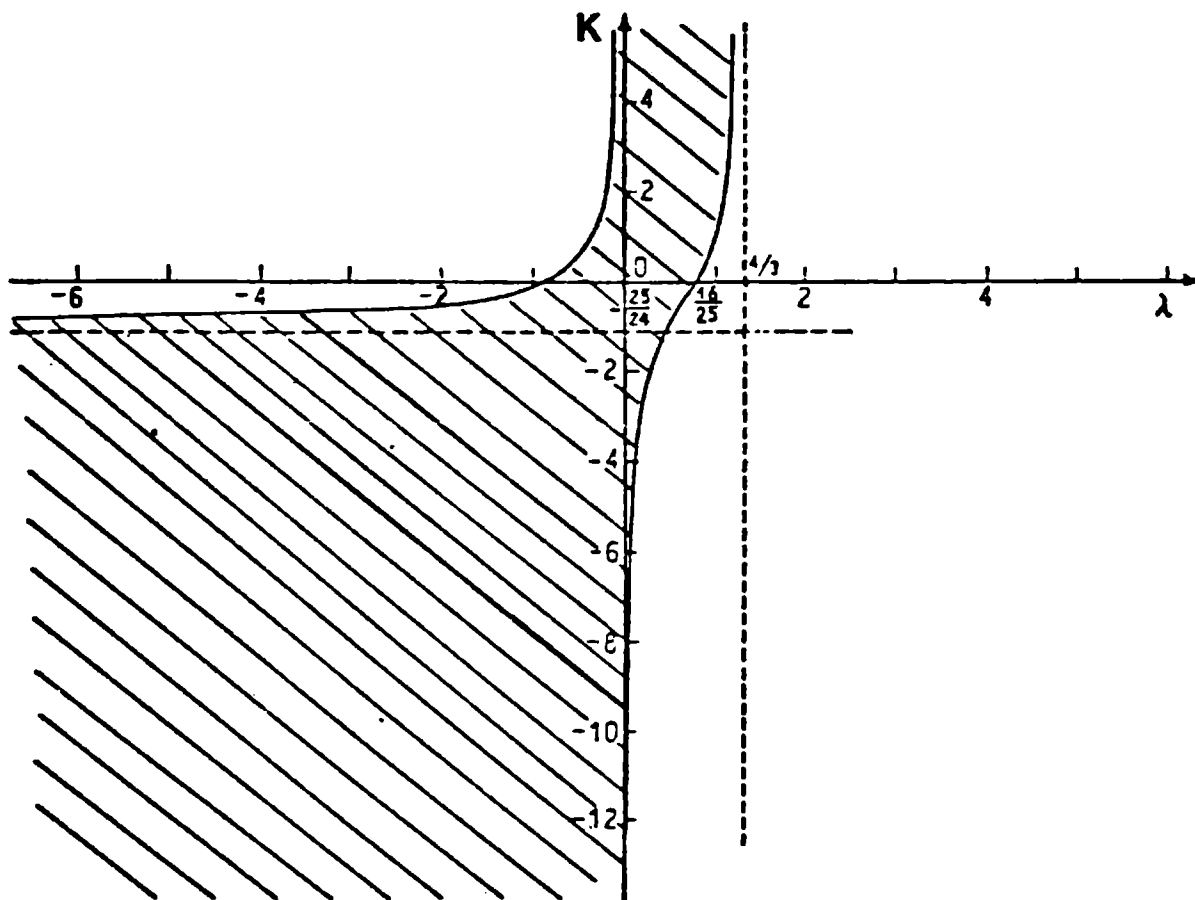


Fig. 14.2

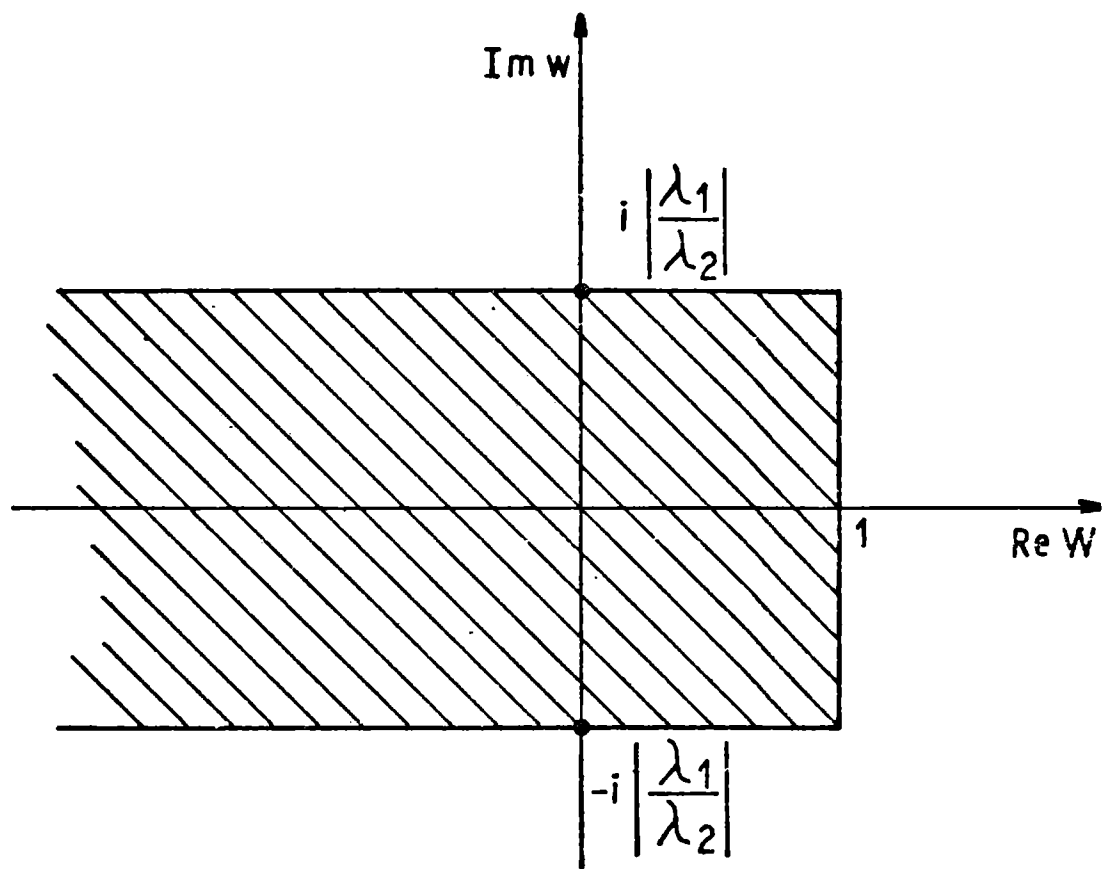
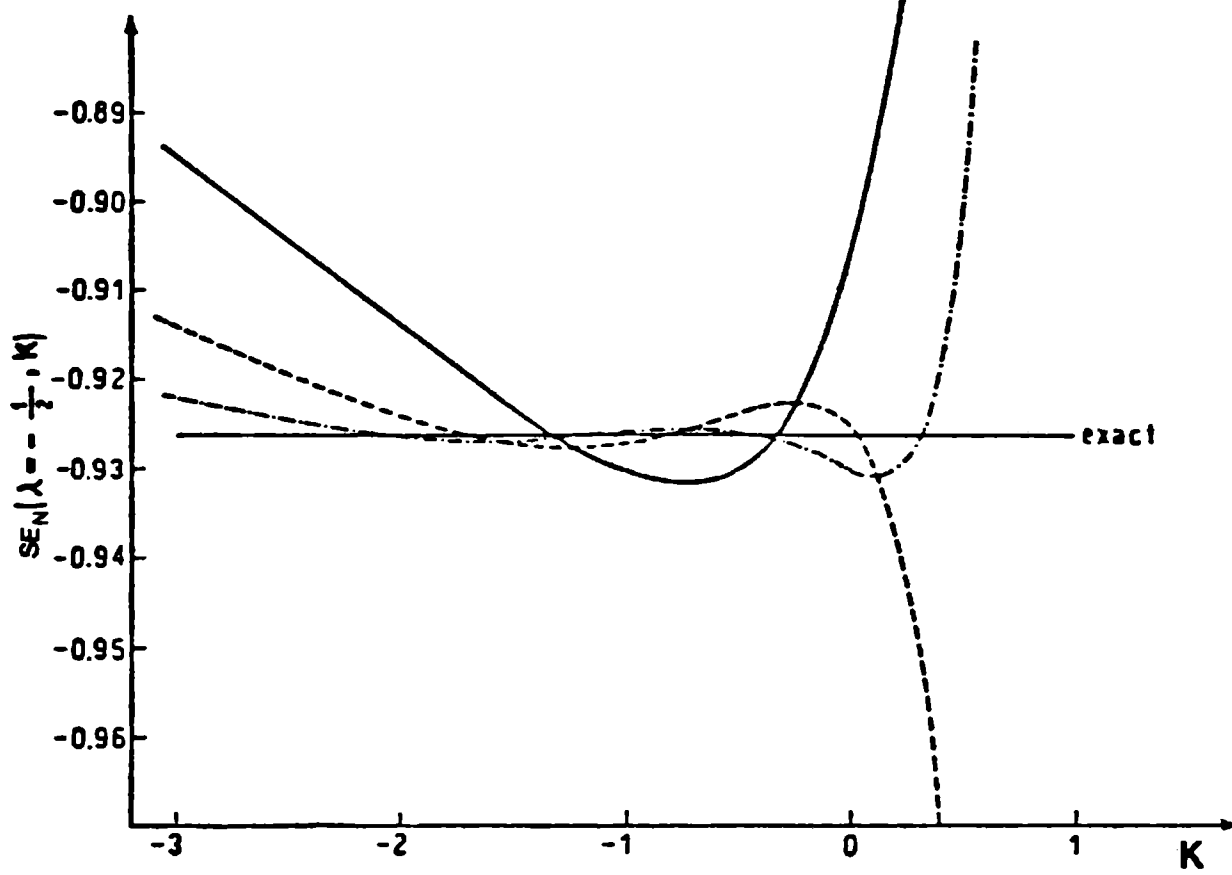


Fig. 14.3



CAPITULO XV

PROPIEDADES DEL MF: SERIES CON RADIO DE CONVERGENCIA NULO.

§.49. MF Y PROPIEDADES ASINTOTICAS DE LOS COEFICIENTES DE UNA SERIE DE TAYLOR CON RADIO DE CONVERGENCIA NULO.

Comenzaremos en esta sección el análisis de modelos con desarrollos en serie de potencias con radio de convergencia nulo. Nuestro propósito es en primer lugar aplicar el formalismo del §.44 a un problema sencillo, con las características arriba mencionadas, y determinar las condiciones en las cuales el MF permite construir una secuencia convergente.

Consideremos el modelo de teoría de campos cero-dimensional introducido en la ec.(11.14):

$$E(g,\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-gx^2 - \lambda x^4} dx, \quad (49.1)$$

cuyo desarrollo en serie de potencias de λ posee coeficientes con el comportamiento asintótico que se ve en la ec.(11.21). Se remite al lector al §.11 para consultar la bibliografía referente a la importancia y aplicaciones del modelo (49.1).

Para aplicar el MF buscamos en primer lugar la relación de dilatación; inmediatamente encontramos:

$$E(g,\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \lambda^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-g\lambda^{-1/2}x^2 - x^4} dx = \lambda^{-1/4} E(g\lambda^{-1/2},1) \quad (49.2)$$

lo que nos da los exponentes $\beta=-1/4$ y $\alpha=-1/2$. Aplicando las ecs.(44.7) y (44.8) encontramos nuestro punto de partida para construir la secuencia que converge a $E(1,\lambda)$:

$$E(1,\lambda) = k^{1/2} (1-w)^{1/2} \bar{E}(k,w) ; \quad \bar{E}(k,w) = E(k(1-w),w), \quad (49.3a)$$

$$\lambda = wk^{-2}(1-w)^{-2} \quad (49.3b)$$

El cambio de variables (49.3b) ha sido estudiado por Sez nec y Zinn-Justin para introducir una transformación dependiente del orden /1/. La conexión entre ambos procedimientos ha sido investigada preliminarmente en nuestro laboratorio utilizando el formalismo del §.42 /2/.

De acuerdo a la forma de la función (49.1) obtenemos para $\bar{E}(k,w)$ (ec. (49.3a)) el resultado:

$$\bar{E}(k,w) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2 + w(kx^2 - x^4)} dx \quad , \quad (49.4)$$

lo que puede ser expresado como una serie de potencias en w:

$$\bar{E}(k,w) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} w^n \quad (49.5a)$$

cuyos coeficientes son:

$$\bar{E}^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{\pi n!}} \int_{-\infty}^{\infty} (kx^2 - x^4)^n e^{-kx^2} dx \quad (49.5b)$$

De acuerdo a lo discutido en el §.43 sabemos que k debe ser dependiente del orden (número de términos $\bar{E}^{(n)}$ utilizados) dado que $E(1,\lambda)$ posee radio de convergencia nulo. Para realizar una primera investigación sobre dicha dependencia con el orden, utilizaremos el argumento introducido en la ref./1/. El parámetro k fue determinado por Sez nec y Zinn-Justin /1/ anulando el último término retenido en la serie renormalizada.

Apliquemos el método del punto de ensilladura (Apéndice C) para calcular $\bar{E}^{(n)}$. Para ello reescribimos la ec.(49.5b) de la siguiente manera:

$$\bar{E}^{(N)} = \frac{1}{\sqrt{\pi N!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{F(x)} dx ; \quad F(x) = -kx^2 + N \ln(kx^2 - x^4) \quad (49.6)$$

La ecuación que determina los extremos x^* de $F(x)$ es:

$$2k x^{*4} - x^{*2} (2k^2 + 4N) + 2Nk = 0 \quad , \quad (49.7)$$

que se puede reescribir de la siguiente manera:

$$t^2 - (\delta + 2)t + \delta = 0 \quad , \quad (49.8)$$

mediante la definición:

$$x^{*2} = \alpha t \quad , \quad \delta = k/\alpha = k^2/N > 0 \quad (49.9)$$

Las dos raíces de (49.8) son:

$$t_{\pm} = \frac{\delta + 2}{2} \pm \frac{1}{2} (\delta^2 + 4)^{1/2} \quad , \quad (49.10)$$

donde $0 < t_- < \delta$ y $\delta < t_+ < \infty$.

Si ahora reemplazamos (49.9) en (49.6), obtenemos el valor extremo de $F(x)$:

$$F(x^*) = F(t) = -Nt + N \ln N + N \ln\left(t - \frac{t_-^2}{\delta}\right) \quad , \quad (49.11)$$

expresión que se puede reescribir, tomando en cuenta que t debe cumplir (49.8), para llegar a:

$$e^{F(t)} = e^{-Nt} N^N \left(1 - \frac{2t}{\delta}\right)^N \quad (49.12)$$

Considerando la raíz t_- en (49.10) encontramos:

$$1 - \frac{2t_-}{\delta} = t_- - \frac{t_-^2}{\delta} > 0, \quad \text{pues } \delta > t_-, \quad (49.13a)$$

de donde:

$$e^{F(t_-)} = e^{-Nt_-} N^N \left(1 - \frac{2t_-}{\delta}\right)^N > 0 \quad (49.13b)$$

Por otro lado la segunda raíz nos conduce a:

$$1 - \frac{2t_+}{\delta} = - \left\{ \frac{2}{\delta} + \left(1 + \frac{4}{\delta^2}\right)^{1/2} \right\} < 0, \quad (49.14a)$$

de donde se sigue que $e^{F(t_+)}$ es alternante en signo:

$$e^{F(t_+)} = (-1)^N e^{-Nt_+} N^N \left(\frac{2t_+}{\delta} - 1\right)^N \quad (49.14b)$$

De acuerdo al criterio de la ref./1/, debemos elegir k tal que $\bar{E}^{(N)} = 0$; para lograr esto se deben cancelar las contribuciones a la integral provenientes de los extremos t_+ y t_- , esto es:

$$e^{F(t_-)} = \gamma e^{F(t_+)} \quad , \quad \gamma = e^{im\pi} \quad , \quad m=0, \pm 1 \quad , \quad (49.15)$$

eligiendo $m=0$ para N impar y $m=\pm 1$ cuando N es par. Reemplazando (49.13b) y (49.14b) en (49.15) encontramos la siguiente igualdad:

$$e^{-Nt_-} \left(1 - \frac{2t_-}{\delta}\right)^N = \gamma e^{-Nt_+} \left(\frac{2t_+}{\delta} - 1\right)^N \quad (49.16)$$

Podemos tomar la raíz N -ésima de (49.16), notando que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \gamma^{1/N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \cos\left(\frac{m\pi}{N}\right) + i \sin\left(\frac{m\pi}{N}\right) \right\} = 1 \quad , \quad (49.17)$$

con lo cual encontramos, para valores grandes de N , la siguiente ecuación:

$$e^{-(t_- - t_+)} = \frac{2t_+ - \delta}{\delta - 2t_-} \quad (49.18)$$

Introduciendo la ec.(49.10) en la ec.(49.18) se obtiene una ecuación trascendente que permite determinar el valor de δ :

$$e^{(4+\delta^2)^{1/2}} = \frac{2+(\delta^2+4)^{1/2}}{-2+(\delta^2+4)^{1/2}} \quad (49.19)$$

Utilizando una calculadora programable TI-59P hemos resuelto (49.19) y encontrado como única raíz real:

$$\delta = 1,3254868387 \quad . \quad (49.20)$$

Esto nos permite completar la determinación de la dependencia de k con el orden N, para $N \gg 1$, ya que a partir de la ec.(49.9) obtenemos:

$$k^2 \approx \delta N \quad , \quad \delta \neq \delta(N) \quad . \quad (49.21)$$

La ec.(49.21) es válida para $N \gg 1$ ya que ha sido determinada de acuerdo con la aproximación del punto de ensilladura para $\bar{E}(k,w)$.

Para calcular ahora la forma asintótica del coeficiente $\bar{E}^{(N)}$ empleamos la ec.(C.7), que nos permite escribir:

$$\bar{E}^{(N)} \rightarrow \frac{1}{N! \sqrt{\pi}} e^{F(t_-)} \left(\frac{2\pi}{-F''(t_-)} \right)^{1/2} \quad , \quad (49.22)$$

donde por comodidad hemos utilizado $t=t_-$.

Calculamos ahora la derivada segunda a partir de (49.6):

$$F''(x) = -2k + 2N \frac{k-6x^2}{kx^2-x^4} - 2Nx^2 \left(\frac{k-2x^2}{kx^2-x^4} \right)^2 \quad , \quad (49.23a)$$

y utilizando (49.7):

$$F''(x) = -2k + 2N \left(\frac{k-6x^2}{x^2 k-x^4} \right) - \frac{4}{N} k^2 x^2 \quad (49.23b)$$

Si introducimos (49.9) en (49.23b) obtenemos el resultado buscado:

$$F''(t_-) = N^{1/2} \left\{ -2\delta^{1/2} - 4t_- \delta^{1/2} + 2\delta^{1/2} \left(\frac{1-6t_-/\delta}{t_- - t_-^2/\delta} \right) \right\} \quad (49.24)$$

Las ecs.(49.20) y (49.10) nos permiten determinar numéricamente:

$$F''(t_-) = -A N^{1/2} \quad , \quad A=11,870553667 \quad (49.25)$$

Introduciendo ahora (49.25) y (49.13b) en (49.22) obtenemos el resultado siguiente:

$$\bar{E}^{(N)} \rightarrow 2^{1/2} A^{-1/2} N^{-1/4} \frac{N^N}{N!} e^{(1-t_-)N} \left(1 - \frac{2t_-}{\delta} \right)^N \quad , \quad (49.26)$$

que puede reescribirse, utilizando la aproximación de Stirling (ec. (C.21)), en una forma más conveniente:

$$\bar{E}^{(N)} \rightarrow (\pi A)^{-1/2} N^{-3/4} B^N \quad , \quad B = 0,5154353378 \quad (49.27)$$

El resultado (49.27) es muy importante y nos permite deducir las siguientes propiedades:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |\bar{E}^{(N)}| = 0 \quad , \quad (49.28a)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |\bar{E}^{(N)} / \bar{E}^{(N-1)}| = B \quad (49.28b)$$

Si bien en nuestro caso la propiedad (49.28b) no nos permite evaluar el radio de convergencia en w (ya que no estamos frente a una serie sino a una sucesión dependiente del orden), el análisis llevado a cabo demuestra que (49.5a) converge para $w=1$. Por otro lado, el lema 44.1 nos asegura que si la sucesión converge para $w=1$, lo hace para $1/\lambda \rightarrow 0$. En otras palabras, el MF permite sumar la serie de potencias de λ asociada a (49.1) para todo $\lambda \geq 0$; recordemos que la serie alrededor de $\lambda=0$ que hemos utilizado es una serie asintótica divergente ($E^{(n)} \propto (n-1)!$).

La expresión (49.27) nos permite realizar una estimación del error cometido al truncar la serie hasta el orden N . Este debe ser del orden del último término retenido; esto es:

$$\epsilon_N = \bar{E}^{(N)} w^N \quad (49.29)$$

El término w^N puede determinarse a partir de la transformación (49.3b). Si notamos que $k \rightarrow \infty$ si $N \rightarrow \infty$, (ec.(49.21)), la ec.(49.3b) nos conduce a:

$$w \approx 1 - \frac{1}{k \lambda^{1/2}} + \dots, \quad k \gg 1, \quad (49.30)$$

de donde se deduce:

$$\begin{aligned} w^N &= e^{N \ln w} \approx \exp\left\{N \ln\left(1 - \frac{1}{k \lambda^{1/2}} + \dots\right)\right\} \approx e^{-N/k \lambda^{1/2}} \\ &= e^{-(N/\delta \lambda)^{1/2}} \end{aligned} \quad (49.31)$$

La expresión completa para el error queda entonces:

$$\epsilon_N = (\pi A)^{-1/2} N^{-3/4} B^N e^{-(N/\delta \lambda)^{1/2}} \quad (49.32)$$

Tal como lo discutimos en el §.44 el mayor error cometido corresponde a $1/\lambda \rightarrow 0$, que es la condición en la cual hemos estudiado la convergencia.

Debe tenerse presente que, para llevar a cabo con sencillez el análisis de la convergencia, hemos utilizado el criterio de Sez nec y Zinn-Justin y la aproximación del punto de ensilladura tal como lo hicieron dichos autores /1/. Ahora bien, según lo discutido en el §.44 el valor de $k(=k^*)$ para el MF debe elegirse de acuerdo a las reglas de estabilidad. En consecuencia es de importancia fundamental verificar si las conclusiones extraídas en este parágrafo se obtienen también por aplicación de las reglas de estabilidad para las secuencias de PI y PE. La respuesta es afirmativa tal como se verá en el parágrafo siguiente. Algunas conclusiones se han adelantado en nuestro trabajo de la ref./3/.

Es muy importante notar que el valor de k utilizado para demostrar la convergencia de (49.5a) presenta una dependencia con el orden que

no es lineal (ec.(47.21)) sino que está dado por (49.21). Nuestro análisis revela que tal dependencia, $k^2 = \delta N$, es esencial para lograr que el error ϵ_N tienda a cero cuando $N \rightarrow \infty$.

Generalicemos ahora el procedimiento seguido al principio de esta sección para obtener la dependencia con el orden que cabe esperar para k . Consideremos una función con un desarrollo formal asintótico divergente en serie de potencias de λ tal que (ec.(11.93)):

$$E(1, \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n, \quad E^{(n)} \rightarrow a n^b c^n (pn+q)! \quad (49.33)$$

Supongamos que la función (49.33) satisface una relación de dilatación en la forma usual:

$$E(1, \lambda) = \lambda^\beta E(\lambda^\alpha, 1) \quad (49.34)$$

Sabemos que el MF asocia a $E(1, \lambda)$ una secuencia $S_N(k, w)$,

$$S_N(k, w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n, \quad (49.35a)$$

donde (ver ec.(44.14)):

$$\bar{E}^{(N)} = \sum_{s=0}^N (-1)^{N-s} \binom{(s-\beta)/\alpha}{N-s} E^{(s)} k^{(s-\beta)/\alpha} \quad (49.35b)$$

Si ahora recurrimos al argumento de anular el último coeficiente en (49.35a) obtenemos, usando (49.35b), una condición aproximada para k :

$$k^{N/\alpha} E^{(N)} \approx \text{cte. } k^{(N-1)/\alpha} E^{(N-1)} \quad (49.36)$$

Introduciendo (49.33) en (49.36) deducimos la dependencia de k con el orden:

$$\rho = k^{-1/\alpha} \approx \delta N \quad (49.37)$$

Si $\alpha = -1/2$ obtenemos la ec.(49.21). La ec.(49.37) es sumamente importante pues nos indica el tipo de dependencia de k con N que debemos esperar para obtener una secuencia $S_N(k, 1)$ (y de aquí SE_N) convergente. Como hemos puesto de manifiesto tal dependencia k vs. N queda determinada a través de una relación de dilatación y del conocimiento del comportamiento asintótico aproximado de los coeficientes $E^{(n)}$.

Dado que para aplicar el MF a un problema arbitrario (cuya complicación nos impide utilizar el procedimiento introducido al principio de esta sección) debemos recurrir a las reglas de estabilidad, la ec.(49.37) nos señala que es conveniente buscar rectas de la forma anterior para k , de modo de encontrar la secuencia que aproxime a $E(1, \lambda)$ más adecuadamente.

§.50. APLICACION DEL MF A INTEGRALES DE TEORIA DE CAMPOS Y MECANICA ESTADISTICA.

Consideremos nuevamente el modelo elemental de teoría de campos (49.1), y apliquemos en forma directa el MF para estudiar numéricamente la convergencia de la serie de potencias de λ .

El modelo definido por la integral:

$$E(1,\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2 + x^4)} dx = \lambda^{-1/4} E(\lambda^{-1/2}, 1) \quad , \quad (50.1)$$

tiene asociados dos desarrollos en serie de potencias:

$$E(1,\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n \quad ; \quad E^{(n)} = (-1)^n \frac{(4n)!}{n! 2n! 2^{4n}} \quad , \quad \lambda \rightarrow 0 \quad , \quad (50.2a)$$

$$E(1,\lambda) = \lambda^{-1/4} \sum_{n=0}^{\infty} e^{(n)} \lambda^{-n/2} \quad ; \quad e^{(n)} = (-1)^n (2n - \frac{3}{4})! / (2\pi^{1/2} n!) \quad , \quad 1/\lambda \rightarrow 0 \quad , \quad (50.2b)$$

Tomaremos aquí el desarrollo (50.2a) y estudiaremos la convergencia de la serie renormalizada cuando $1/\lambda \rightarrow 0$. De acuerdo a las ecuaciones del §.44 el MF aproxima a $E(1,\lambda)$ por la secuencia:

$$E(1,\lambda) \approx SE_N = k^{1/2} (1-w)^{1/2} S_N(k,w) \quad , \quad (50.3a)$$

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N E^{(n)} w^n \quad , \quad (50.3b)$$

donde w es una raíz de la ec.(44.7), es decir:

$$\lambda k^2 w^2 - w(1+2\lambda k^2) + \lambda k^2 = 0 \quad (50.3c)$$

De acuerdo al lema 44.2 la raíz que debe ser elegida es:

$$w = \frac{1}{2\lambda k^2} \{1 + 2\lambda k^2 - (1+4\lambda k^2)^{1/2}\} \quad (50.3d)$$

Los coeficientes $E^{(n)}$ están determinados por la ec.(44.14), que para el modelo (50.1) resultan:

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} \binom{-(4s+1)/2}{n-s} E^{(s)} k^{-(4s+1)/2} \quad (50.3e)$$

El valor de k debe determinarse de acuerdo a las reglas de estabilidad estudiando los puntos críticos de la secuencia $S_N(k,1)$:

$$S_N(k,1) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} \quad (50.4)$$

Al estudiar la convergencia de la secuencia SE_N a la función $E(1,\lambda)$, la situación más desfavorable corresponde al caso $1/\lambda \rightarrow 0$. En esta situación debemos esperar que $S_N(k,1)$ converja a $\lambda^{1/4} E(1,\lambda)$, esto es:

$$S_N(k,1) \rightarrow e^{(0)} = \Gamma(1/4)/2\pi^{1/2} = 1,022765672... \quad (50.5)$$

El procedimiento numérico que hemos seguido es muy simple. Las derivadas primera y segunda de (50.4) se obtienen inmediatamente a partir de (50.3e):

$$\frac{d}{dk} S_N(k,1) = -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} (4s+1) \binom{-(4s+1)/2}{n-s} E^{(s)} k^{-(4s+3)/2} \quad (50.6a)$$

$$\frac{d^2}{dk^2} S_N(k,1) = \frac{1}{4} \sum_{n=0}^N \sum_{s=0}^n (-1)^{n-s} (4s+1)(4s+3) \binom{-(4s+1)/2}{n-s} E^{(s)} k^{-(4s+5)/2} \quad (50.6b)$$

Con el Programa VII para computadora HP-1000 que se ve al final del trabajo se determinan todos los ceros de (50.6a) y (50.6b) para $N=1,2,\dots$. Dichos ceros nos proporcionan los parámetros óptimos k_N^S y k_N^I , una vez que se aplican las reglas de estabilidad, y con los mismos es posible estudiar la convergencia (50.5). Finalmente las ecs. (50.3a), (50.3b) y (50.3d) nos proporcionan nuestra aproximación a la función $E(1,\lambda)$.

Antes de discutir los resultados obtenidos creemos oportuno realizar algunos comentarios generales sobre el procedimiento numérico: i) El programa utilizado es totalmente general, esto es, cambiando el conjunto de coeficientes $\{E^{(n)}\}$ y los exponentes α y β podemos describir un problema $E(1,\lambda)$ cualquiera. Este programa (Programa VII) será el que utilizaremos en el resto de la obra para estudiar otros modelos de interés fisicoquímico. ii) Hemos reducido los errores propios de nuestro cálculo hasta donde fue posible determinando k_N a 15 decimales y realizando todas las operaciones en doble precisión. iii) Se utiliza un algoritmo dicotómico para determinar los ceros de (50.6a) y (50.6b), ya que, si bien es más lento que otros procedimientos de aproximación, no presenta problema alguno de convergencia. iv) La mayor limitación en lo que hace a la exactitud de los resultados para $S_N(k,1)$ radica en la precisión con que se introducen los coeficientes $E^{(n)}$. Hemos observado

en todos nuestros cálculos que se verifica con bastante aproximación una regla comentada por Le Guillou y Zinn-Justin /4/ al estudiar el EZAH. Esta regla puede ser enunciada del siguiente modo: para aproximar en forma eficiente la función en cuestión mediante el empleo de un método de suma y $2N$ términos de la TPRS, entonces los coeficientes RS se deben conocer con N cifras significativas.

Para el modelo (50.1) los coeficientes $E^{(n)}$ se conocen en forma exacta y con la precisión deseada para todo n , luego se presenta sólo el error de redondeo y truncación de la computadora utilizada (HP-1000). Dicha computadora puede manejar números reales $x < 0(10^{37})$, por lo que se pueden calcular muy pocos coeficientes $E^{(n)}$ utilizando la ec.(50.2a). Es más conveniente calcularlos en forma recursiva:

$$E^{(n)} = - \frac{(4n-1)(4n-3)}{4n} E^{(n-1)}, \quad n \geq 1 \quad (50.7)$$

La ec.(50.7) nos permite calcular hasta $E^{(24)} \approx 1,6 \times 10^{37}$ sin realizar otra modificación ulterior. El número máximo $N=24$ es suficientemente grande para nuestros estudios de convergencia.

En la Tabla 15.1 se ven los resultados para k_N^* y $S_N(k_N^*, 1)$ obtenidos cuando $1 \leq N \leq 24$. Es importante notar que si N es par la función $S_N(k, 1)$ presenta sólo dos PI, y un PI y un PE si N es impar. Obtenemos así dos secuencias convergentes a través de PI y una a través de PE, que pueden ordenarse de acuerdo a su dependencia con el orden N .

Utilizando un análisis de regresión /5/ hemos ajustado numéricamente la dependencia de k_N^* con N para las diferentes secuencias obtenidas. Denominaremos A, B y C a la secuencia a través de PE y las dos secuencias que siguen los PI, respectivamente.

Utilizando los 6 últimos valores para la secuencia A encontramos la siguiente dependencia (para N impar):

$$(k_N^S)^2 = (1,169 \pm 0,001) + (1,3253 \pm 0,0003) N, \quad (50.8a)$$

$$r=0,9999999952, \quad (50.8b)$$

donde r es el coeficiente de correlación /5/. Cabe comentar que para obtener los errores accidentales (50.8a) hemos utilizado un intervalo de confianza del 99%.

El resultado obtenido con los 6 últimos valores de la secuencia B (N par) es el siguiente:

$$(k_N^I)^2 = (1,958 \pm 0,008) + (1,323 \pm 0,002) N, \quad (50.9a)$$

$$r=0,999999971 \quad (50.9b)$$

Finalmente la secuencia C (para todo N) nos da con los últimos 12 valores una dependencia diferente:

$$k_N^I = (0,912 \pm 0,003) + (1,1534 \pm 0,0007) N, \quad (50.10a)$$

$$r=0,999999984 \quad (50.10b)$$

Los resultados (50.8), (50.9) y (50.10) son muy significativos y nos permiten extraer importantes conclusiones, que enumeraremos a continuación:

i) El método nos permite obtener, a partir del desarrollo Taylor con radio de convergencia nulo, secuencias convergentes dependientes del orden. La estructura de dicha dependencia con el orden está determinada en forma natural por las reglas de estabilidad para los puntos críticos de $S_N(k,1)$.

ii) De las tres secuencias obtenidas, dos predicen una perfecta correlación lineal entre k^2 y N , que es la que está de acuerdo con lo que se esperaba para este modelo según la ec.(49.37). Tal como lo comentamos en el §.47 aparece una secuencia con correlación lineal entre k y N .

iii) El ajuste numérico que hemos realizado para las correlaciones lineales $k^2 = \delta N$ en las secuencias A y B, nos permite obtener como resultado más preciso:

$$\delta = 1,3253 \pm 0,0003 \quad , \quad (50.11)$$

que está en excelente acuerdo con la ec.(49.20). Recordemos que esta última ecuación fue obtenida utilizando un procedimiento totalmente diferente como es la anulación del último coeficiente de la serie renormalizada./1/

iv) Las secuencias A y B convergen uniformemente por debajo al resultado exacto (50.5). La Tabla 15.1 nos permite extraer los siguientes resultados:

$$S_{23}(k_{23}^S, 1) = 1,022765666 \quad , \quad \text{secuencia A} \quad , \quad (50.12a)$$

$$S_{24}(k_{24}^I, 1) = 1,022765669 \quad , \quad \text{secuencia B} \quad (50.12b)$$

Para $N=24$ encontramos un error del orden de 3×10^{-9} respecto del resultado exacto. A modo de comparación, la ec.(49.32) nos da el siguiente error para $1/\lambda \rightarrow 0$, predicho por el argumento del punto de ensilladura:

$$\epsilon_{24} = 1,9 \times 10^{-9} \quad (50.13)$$

El acuerdo es excelente, lo que revela que el MF permite obtener, a través de sus secuencias de puntos críticos, la velocidad de convergencia esperada. Podemos notar además que nuestras predicciones respecto de la condición de estabilidad (o de "meseta") para $S_N(k,1)$ como función de k se cumplen perfectamente: las derivadas segundas decrecen permanentemente siguiendo una secuencia de PE y lo mismo sucede para la derivada primera siguiendo una secuencia de PI.

v) La secuencia C (que posee una dependencia lineal k vs. N) converge a un resultado incorrecto por debajo del exacto. Podemos estimar aproximadamente:

$$S_N(k_N^I, 1) \approx 0,9203 \pm 0,0001 \quad , \quad \text{secuencia C} \quad , \quad N \gg 1 \quad (50.14)$$

Si bien el modelo (50.1) ha sido estudiado por diversos autores, con transformaciones dependientes del orden, las tres secuencias (50.12a), (50.12b) y (50.14) se muestran por primera vez en este trabajo (ver también ref./3/).

vi) Los resultados (50.12) nos aseguran que para $\lambda \ll \infty$ tendremos una aproximación al resultado exacto $E(1, \lambda)$ con, al menos, 9 decimales. Para realizar este cálculo presentamos en la Tabla 15.2 los coeficientes $E^{(n)}$ obtenidos mediante k_{24}^S de la secuencia B. Observemos que el MF permite evaluar $E(1, \lambda)$ en forma muy simple ya que los coeficientes $E^{(n)}$ se determinan una sola vez. Utilizando las ecs.(50.3a), (50.3b) y (50.3d) hemos calculado SE_{24} como una aproximación a $E(1, \lambda)$ en un amplio rango de valores de λ . Los resultados obtenidos se ven en la Tabla 15.3 comparados los exactos (calculados con el método de integración numérica de Romberg). Una observación de la Tabla 15.3 permite ver que todas nuestras predicciones se han verificado. Los resultados obtenidos con el MF son enormemente superiores, en precisión y velocidad de convergencia, a los derivados mediante la aplicación de los métodos de Padé y Borel-Padé /6/. Si recordamos que el modelo (50.1) describe (a menos de una constante) a la función de partición clásica de un oscilador anarmónico cuártico /7/, podemos concluir en que el MF permite obtener en forma muy precisa dicha función para todo valor de la temperatura (que es proporcional a λ).

Un problema muy relacionado a (50.1) es el determinado por la función de desplazamiento cuadrático medio anarmónico:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\infty x^2 e^{-\beta' V(x)} dx / \int_0^\infty e^{-\beta' V(x)} dx \quad , \quad (50.15)$$

donde $V(x)$ es un potencial del tipo anarmónico cuártico:

$$V(x) = v_2 x^2 + v_4 x^4 \quad , \quad (50.16a)$$

y:

$$\beta' = (k'T)^{-1} \quad , \quad (50.16b)$$

siendo k' la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta. La función (50.15) ha sido muy estudiada ya que resulta útil para interpretar diversos datos experimentales tales como la respuesta dinámica de los materiales ferroeléctricos del tipo orden-desorden y del tipo de desplazamiento /8/, y la dependencia con la temperatura de la polarizabilidad dieléctrica isocórica de algunos líquidos /9,10/. En el Apéndice I se discute cómo se relaciona la función (50.15) con la polarizabilidad de un medio material.

Debido al interés de la expresión (50.15) se han propuesto diversas alternativas para derivar simples y precisas expresiones para evaluarla

en función de la temperatura /10,11/. El MF es particularmente apropiado para obtener expresiones analíticas para dicha función, dada su similitud con (50.1). Dedicaremos el resto del presente parágrafo para mostrar que el MF permite obtener resultados altamente precisos.

La función (50.15) ha sido estudiada recientemente en nuestro laboratorio /12,13/, utilizando el formalismo del §.42.

Para aplicar el MF es conveniente reescribir (50.15) del siguiente modo (ver Apéndice I):

$$E(1,\lambda) = 2\beta'v_2 \langle x^2 \rangle = \int_0^\infty x^2 e^{-(x^2+\lambda x^4)} dx / \int_0^\infty e^{-(x^2+\lambda x^4)} dx, \quad (50.17a)$$

$$\lambda = v_4 / (\beta'v_2^2) \quad (50.17b)$$

Observemos que nuevamente el estudio del comportamiento $1/\lambda \rightarrow 0$ en $E(1,\lambda)$ corresponde a la función (50.15) en el límite $T \rightarrow \infty$.

La función (50.17) satisface una relación de dilatación:

$$E(1,\lambda) = \lambda^{-1/2} E(\lambda^{-1/2}, 1), \quad (50.18)$$

que se deduce inmediatamente al hacer el cambio de variables $y^4 = \lambda x^4$.

La ec.(50.18) nos proporciona los exponentes $\alpha = \beta = -1/2$. Para aplicar el MF tenemos a disposición los desarrollos de (50.17) en serie de potencias de λ y $\lambda^{-1/2}$; reteniendo los primeros coeficientes obtenemos /11-13/

$$E(1,\lambda) = 1 - 3\lambda + 24\lambda^2 - 297\lambda^3 + 4896\lambda^4 - 100278\lambda^5 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n, \quad (50.19a)$$

$$\begin{aligned} \lambda^{1/2} E(1,\lambda) &= 0,6759782399 - 0,2715267096 \lambda^{-1/2} \\ &+ 0,07722148863 \lambda^{-1} - 0,0155666445 \lambda^{-3/2} \\ &+ 0,00178008354 \lambda^{-2} - \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{(n)} \lambda^{-n/2} \end{aligned} \quad (50.19b)$$

El desarrollo (50.19a) tiene radio de convergencia nulo, si bien se ha demostrado que reescrito como una fracción continuada es convergente /10/ (ver también Apéndice I). Sin embargo el empleo de la fracción continuada es poco práctico ya que converge con extrema lentitud para $\lambda \gg 1$. Por ejemplo, para obtener un resultado razonable para $\lambda=10$ es necesario utilizar unos 200 términos en la fracción continuada /10/.

Hemos introducido sólo los primeros términos de los desarrollos

(50.19) de modo tal de efectuar una comparación directa con los resultados obtenidos por Booth /11/, que hasta el momento son las expresiones analíticas más precisas que se ven en la literatura. En la ref./11/ se utilizó una expresión de la forma siguiente para aproximar (50.17):

$$E(1,\lambda) \approx \sum_{i=0}^n a_i (\lambda + c_i^2)^{-1/2} \quad (50.20)$$

Los $2n$ parámetros a_i y c_i se ajustan de modo tal que (50.20) satisfaga las siguientes relaciones:

$$\frac{1}{i!} \left(\frac{d^i E}{d\lambda^i} \right) (\lambda=0) = E^{(i)} \quad , \quad i=0,1,2,\dots,2n-1 \quad (50.21a)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{1/2} E = e^{(0)} \quad (50.21b)$$

Observemos que la expresión (50.20) permite utilizar la información combinada de ambos desarrollos en serie de λ (ecs.(50.19)). Sin embargo la función (50.20) posee como defecto que no conduce a un desarrollo en serie de potencias de $\lambda^{-1/2}$ cuando $\lambda \rightarrow \infty$, tal como lo exige la función $E(1,\lambda)$. Como sabemos el MF permite en forma natural incorporar ambos desarrollos.

Utilizando las ecs.(44.8) y (44.18), y los coeficientes α y β , encontramos la aproximación que da el MF a la función (50.17):

$$SE_N = k(1-w) S_N(k,w) \quad , \quad (50.22a)$$

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad (50.22b)$$

La variable w está dada por (50.3d) ya que los modelos (50.1) y (50.17) poseen $\alpha = -1/2$. La ec.(44.17) nos proporciona los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$:

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{j=0}^n \binom{j+n}{2j} E^{(j)} k^{-(2j+1)} \quad (50.22c)$$

Para realizar una comparación plena con la expresión (50.20) hemos decidido incorporar $e^{(0)}$ en nuestros cálculos, antes de determinar k^* de acuerdo a las reglas de estabilidad. La introducción del coeficiente $e^{(0)}$ puede lograrse en forma análoga a como lo hicimos en la ec.(46.17), utilizando el procedimiento que desarrollaremos al final del §.42. Los pasos necesarios son los siguientes: i) Utilizando los 5 coeficientes en (50.19a) determinamos $\bar{E}^{(0)}, \bar{E}^{(1)}, \dots, \bar{E}^{(5)}$. ii) Agregamos $e^{(0)}$ mediante $\bar{E}^{(6)}$, utilizando la ec.(46.16); en nuestro caso ésta adopta la forma siguiente:

$$\bar{E}^{(6)} = e^{(0)} - \sum_{n=0}^5 \bar{E}^{(n)} \quad (50.23)$$

Nuestra aproximación a (50.17) se puede escribir como SE'_6 , donde hemos colocado el símbolo prima para indicar que $E^{(6)}$ en la secuencia (50.22b) está dado por la ec.(50.23). El valor de k óptimo (k^*) se elige igual a un PI o PE de SE'_6 . En este caso particular encontramos un punto estacionario en $k^*=3,2628$, independientemente de λ . Todos los cálculos se han efectuado con el Programa VIII para calculadora programable TI-59P, que se ve al final de la obra.

Con estos resultados hemos calculado $SE'_6(k^*,w)$ y los valores obtenidos se comparan en la Tabla 15.4 con los exactos (calculados mediante el método de integración numérica de Romberg) y con los de Booth /11/ (obtenidos utilizando el mismo número de coeficientes). Es evidente que nuestros resultados son de muy superior calidad en todo el rango de valores de λ .

Hemos mostrado, en resumen, que el MF permite aproximar con gran precisión (cinco o más cifras significativas en la Tabla 15.4) el valor medio estadístico clásico del cuadrado del desplazamiento de un oscilador anarmónico cuártico para una temperatura arbitraria. Los resultados han sido obtenidos a partir del desarrollo en serie de potencias de T , que posee radio de convergencia nulo.

Dado que en determinadas circunstancias es necesario contar con expresiones analíticas precisas para $E(1,\lambda)$ escribiremos aquí la que nos proporciona el MF, y con la que hemos elaborado la Tabla 15.4:

$$E(1,\lambda) \approx SE'_6 = 3,2628 (1-w) \{ 0,3064852274 + 0,2201178179 w \\ + 0,1122851323 w^2 + 0,0373476866 w^3 \\ + 0,0050596001 w^4 - 0,0032274428 w^5 \\ - 0,0020897815 w^6 \} , \quad (50.24)$$

donde w está dado por (50.3d) con $k=k^*=3,2628$. La comparación de (50.24) con la serie original (50.19a) revela claramente las ventajas en la utilización del MF, ya que la función resulta representada como una serie de potencias en un parámetro $|w|<1$, con coeficientes decrecientes en módulo a medida que el orden aumenta.

Cabe comentar que recientemente hemos mostrado /12,13/ que la aplicación del formalismo desarrollado en el §.42 a la serie (50.19b) da también excelentes resultados para aproximar $\langle x^2 \rangle$ (ec.(50.15)) en función de la temperatura. Sin embargo la serie (50.19b) posee radio de convergencia finito no nulo /14/ por lo que no la discutiremos aquí.

§.51. CONDICIONES PARA LA CONVERGENCIA A TRAVES DEL MF: DISCUSION DE INTEGRALES CON DIVERGENCIA DE TIPO FACTORIAL.

En las secciones anteriores hemos discutido algunas funciones de interés fisicoquímico que tienen asociados desarrollos en serie de potencias con radio de convergencia nulo. Tales problemas podían aproximarse con gran precisión utilizando el MF a partir del conocimiento de una ley de dilatación. Sin embargo las funciones estudiadas en los §§.49 y 50 satisfacen una condición adicional a la de dilatación, esto es, poseen desarrollos en serie de potencias en ambos regímenes del parámetro λ .

El propósito de esta sección es estudiar las propiedades de convergencia cuando se emplea el MF para sumar los desarrollos en serie alrededor de $\lambda=0$, de funciones que no son desarrollables en serie de potencias alrededor de $1/\lambda=0$.

Utilizaremos en este parágrafo algunas funciones sencillas, de forma tal que todos los cálculos puedan llevarse a cabo en forma analítica. Sin embargo las conclusiones que se obtendrán mantienen su validez al analizar problemas más complicados.

Consideremos una función $E(Z, \lambda)$ analítica para $|\arg(\lambda)| < \pi$ y que posea un desarrollo en serie de potencias de λ asintótico divergente:

$$E(Z, \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n, \quad E^{(n)} = E^{(n)}(Z), \quad (51.1)$$

tal que se cumpla además:

$$\lim_{|\lambda| \rightarrow \infty} E(Z, \lambda) = 0 \quad (51.2)$$

Por el momento no discutiremos el papel del parámetro Z , al que podemos elegir igual a la unidad.

La función $E(1, \lambda)$ puede representarse mediante una integral de Cauchy utilizando el camino de integración de la fig.4.2:

$$E(1, \lambda) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{E(1, x)}{x-\lambda} dx, \quad (51.3)$$

donde C evita la singularidad en $|\arg(x)| = \pi$. Utilizando la nomenclatura indicada en la fig.4.2 y la propiedad (51.2), la ec.(51.3) se transforma en:

$$E(1, \lambda) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\substack{r \rightarrow 0 \\ R \rightarrow \infty}} \oint_C \frac{E(1, x)}{x - \lambda} dx = - \int_0^{\infty} \frac{D(x)}{x - \lambda} dx, \quad (51.4a)$$

donde:

$$D(x) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{E(1, x+i\epsilon) - E(1, x-i\epsilon)\} = \frac{\text{Im}E(1, x)}{\pi} \quad (51.4b)$$

La ec.(51.4a) se puede ahora reescribir en una forma más conveniente de modo tal de obtener una representación integral para $E(1, \lambda)$:

$$E(1, \lambda) = - \int_0^{\infty} \frac{D(-x)}{x + \lambda} dx = \int_0^{\infty} \frac{G(t)}{1 + \lambda t} dt, \quad (51.5a)$$

donde:

$$t = x^{-1}, \quad G(t) = - D(-t^{-1}) t^{-1} \quad (51.5b)$$

La ec.(51.5a) es una representación integral de $E(1, \lambda)$ y puede ser utilizada como generatriz del desarrollo en serie de potencias de λ . Desarrollando el denominador de (51.5a) en serie de potencias de λ e igualando término a término con la ec.(51.1) encontramos:

$$E^{(n)} = (-1)^n \int_0^{\infty} t^n G(t) dt \quad (51.6)$$

De particular interés resultan para nosotros las funciones $E(1, \lambda)$ cuyos desarrollos (51.1) divergen de la siguiente manera:

$$E^{(n)} = (-1)^n \Gamma(A_n + B) = (-1)^n (A_n + B - 1)! = (-1)^n \int_0^{\infty} t^{A_n + B - 1} e^{-t} dt \quad (51.7)$$

donde como es usual $\Gamma(x) = (x-1)!$.

Igualando (51.7) y (51.6) obtenemos la representación para la función $E(1, \lambda)$ cuyo desarrollo en serie posee la propiedad (51.7):

$$E(1, \lambda) = \int_0^{\infty} \frac{t^{(A-1)n+B-1}}{1 + \lambda t} e^{-t} dt \quad (51.8)$$

Para comenzar nuestro análisis consideraremos una serie cuyos coeficientes sean:

$$E^{(n)} = (-1)^n n!, \quad A=B=1, \quad (51.9)$$

que puede generarse a partir de una función de la forma siguiente:

$$E(Z, \lambda) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-t}}{Z + \lambda t} dt \quad (51.10)$$

La función $E(Z, \lambda)$ satisface evidentemente la relación de dilatación:

$$E(Z, \lambda) = \lambda^{-1} E(Z\lambda^{-1}, 1) = Z^{-1} E(1, \lambda Z^{-1}) \quad (51.11)$$

Sin embargo la integral (51.10) no es desarrollable en serie de potencias de λ^{-1} . Además $\lambda E(1, \lambda)$ no se mantiene finita cuando $1/\lambda \rightarrow 0$, por lo que dicho comportamiento no puede describirse con el MF del §.44. Analicemos la forma en que diverge (51.10) para $1/\lambda \rightarrow 0$. Realizando el cambio de variables $y=(1+\lambda t)/\lambda$ en (51.10), obtenemos:

$$E(1, \lambda) = \frac{e^{1/\lambda}}{\lambda} \int_{1/\lambda}^{\infty} \frac{e^{-y}}{y} dy \quad (51.12)$$

Es conveniente reescribir la ec.(51.12). Para ello, partimos de la relación siguiente:

$$\int_{1/\lambda}^{\infty} \frac{e^{-y}}{y} dy = \int_1^{\infty} \frac{e^{-y}}{y} dy + \int_1^{1/\lambda} \frac{1-e^{-y}}{y} dy - \int_1^{1/\lambda} \frac{dy}{y}, \quad (51.13a)$$

que, al desarrollar en serie, nos conduce a:

$$\int_{1/\lambda}^{\infty} \frac{e^{-y}}{y} dy = -\ln\left(\frac{1}{y}\right) - C_1 - C_2 + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(1/\lambda)^{n+1}}{(n+1)(n+1)!}, \quad (51.13b)$$

donde C_1 y C_2 son dos constantes dadas por:

$$C_1 = \int_1^{\infty} e^{-y} y^{-1} dy, \quad C_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n+1)(n+1)!} \quad (51.13c)$$

Introduciendo (51.13b) en (51.12a), obtenemos el comportamiento asintótico para la función $E(1, \lambda)$:

$$E(1, \lambda) \rightarrow e^{1/\lambda} \frac{\ln \lambda}{\lambda} + \frac{e^{1/\lambda}}{\lambda} \left\{ -(C_1 + C_2) + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda^{-(n+1)}}{(n+1)(n+1)!} \right\}. \quad (51.14)$$

Debido a la presencia de $\frac{\ln \lambda}{\lambda}$ en (51.14) el MF no puede aplicarse para estudiar la convergencia de la secuencia SE_N para $1/\lambda \rightarrow 0$.

Para poder aplicar el MF necesitamos que $E(1, \lambda)$ se mantenga finita para $1/\lambda \rightarrow 0$. Para lograr ello consideremos un desarrollo con coeficientes:

$$E^{(n)} = (-1)^n (n+1)! \quad , \quad A=1, B=2 \quad , \quad (51.15)$$

generado por la función siguiente (con $Z=1$):

$$E(Z, \lambda) = \int_0^{\infty} \frac{te^{-t}}{Z+\lambda t} dt \quad (51.16)$$

La función (51.16) cumple la misma relación de dilatación (51.11) que (51.10), pero en este caso:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda E(1, \lambda) = 1 \quad (51.17)$$

Estudiamos ahora como el MF permite aproximar el límite (51.17) utilizando la serie de potencias en λ . Comenzamos analizando la serie renormalizada escribiendo a partir de la ec.(51.16), la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \bar{E}(k,w) = E(k(1-w),w) &= \int_0^\infty \frac{x e^{-x}}{k-kw+wx} dx \\ &= \frac{1}{k} \int_0^\infty \frac{x e^{-x}}{1+\frac{w}{k}(x-k)} dx \quad , \end{aligned} \quad (51.18a)$$

y su desarrollo en serie de potencias:

$$\bar{E}(k,w) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} w^n \quad , \quad \bar{E}^{(n)} = \frac{1}{k} \int_0^\infty x \left(1-\frac{x}{k}\right)^n e^{-x} dx \quad , \quad (51.18b)$$

donde la variable w es:

$$w = \lambda k / (1 + \lambda k) \quad (51.18c)$$

Determinemos las condiciones en las cuales $\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{E}^{(N)} = 0$. Para ello escribimos el coeficiente N -ésimo de la siguiente manera:

$$\bar{E}^{(N)} = I_1 + I_2 \quad , \quad (51.19a)$$

$$I_1 = \frac{1}{k} \int_0^k x \left(1-\frac{x}{k}\right)^N e^{-x} dx \quad ; \quad I_2 = \frac{1}{k} \int_k^\infty x \left(1-\frac{x}{k}\right)^N e^{-x} dx \quad (51.19b)$$

Considerando que $(1-\gamma)^N < e^{-N\gamma}$ para todo $\gamma < 1$, podemos encontrar una cota para la integral I_1 ($x < k$):

$$\begin{aligned} 0 < I_1 < \frac{1}{k} \int_0^k x e^{-(1+N/k)x} dx < \frac{1}{k} \int_0^\infty x e^{-(1+N/k)x} dx \\ &= k / (N+k)^2 \end{aligned} \quad (51.20a)$$

Para la integral I_2 es conveniente cambiar el intervalo de integración a $(0, \infty)$ haciendo $y = x - k$:

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{e^{-k}}{k} \int_0^\infty (-1)^N \left(\frac{y}{k}\right)^N (y+k) e^{-y} dy \\ &= \frac{e^{-k}}{k} \left\{ \left(-\frac{1}{k}\right)^N \int_0^\infty y^{N+1} e^{-y} dy - \left(-\frac{1}{k}\right)^{N-1} \int_0^\infty y^N e^{-y} dy \right\} \\ &= (-1)^N k^{-(N+1)} (N+1)! e^{-k} \left\{ 1 + \frac{k}{N+1} \right\} \quad , \end{aligned} \quad (51.20b)$$

de donde deducimos la cota siguiente:

$$|I_2| < \frac{(N+1)!}{k^{N+1}} \left\{ 1 + \frac{k}{N+1} \right\} \quad (51.20c)$$

Finalmente para el coeficiente $\bar{E}^{(N)}$ obtenemos:

$$0 < |E^{(N)}| = |I_1 + I_2| < |I_1| + |I_2| < \frac{(N+1)!}{k^{N+1}} \left(1 + \frac{k}{N+1}\right) + \frac{k}{(N+k)^2} \quad (51.21)$$

Es evidente de la ec.(51.21) que $\bar{E}^{(N)}$ se mantendrá finito cuando $N \rightarrow \infty$ si k dependiera apropiadamente del orden N . Propongamos una dependencia con el orden de la forma:

$$k = \delta N^r, \quad r > 0, \quad (51.22)$$

y analicemos para qué valores del exponente r se anula $\bar{E}^{(N)}$ cuando $N \rightarrow \infty$. Introduciendo (51.22) en (51.20b) y aplicando la aproximación de Stirling (Apéndice C) encontramos:

$$|I_2| \rightarrow N^{N(1-r)} \delta^{-(N+1)} \{1 + \delta N^{r-1}\} e^{-(N+1+\delta N^r)}, \quad N \gg 1, \quad (51.23)$$

lo que inmediatamente nos da:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |I_2| = 0, \quad \text{si } r \geq 1, \quad (51.24a)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |I_2| = \infty, \quad \text{si } 0 < r < 1 \quad (51.24b)$$

Por otro lado al reemplazar (51.22) en (51.20a) encontramos:

$$|I_1| < \frac{\delta N^r}{(N + \delta N^r)^2}, \quad (51.25)$$

de donde deducimos:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |I_1| = 0, \quad r > 0 \quad (51.26)$$

Utilizando (51.24) y (51.26) en (51.21) encontramos la relación buscada:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |\bar{E}^{(N)}| = 0, \quad \text{si } r \geq 1, \quad (51.27a)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |\bar{E}^{(N)}| = \infty, \quad \text{si } 0 < r < 1 \quad (51.27b)$$

La ec.(51.27b) nos asegura que la serie (51.18b) no converge para $1/\lambda \rightarrow 0$ ($w \rightarrow 1$) si $r < 1$.

Para estudiar la convergencia cuando $r \geq 1$ construimos la secuencia renormalizada $S_N(k, w)$ truncando (51.18b); es decir:

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n = \frac{1}{k} \int_0^\infty x e^{-x} \sum_{n=0}^N w^n \left(1 - \frac{x}{k}\right)^n dx \quad (51.28)$$

Utilizando la suma parcial de la serie geométrica (ec.(47.8)), la ec. (51.28) se puede transformar en:

$$S_N(k,w) = \frac{1}{k} \int_0^\infty x \frac{1 - (1-x/k)^{N+1} w^{N+1}}{1 - (1-x/k)w} e^{-x} dx \quad (51.29)$$

La secuencia renormalizada (51.29) debería convergir a $\bar{E}(k,w)$ si $N \rightarrow \infty$. Para estudiar ello escribimos la ecuación anterior de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} S_N(k,w) &= \int_0^\infty \frac{x e^{-x}}{k(1-w) + wx} dx - \frac{w^{N+1}}{k} \int_0^\infty x e^{-x} \frac{(1-x/k)^{N+1}}{1-w(1-x/k)} dx \\ &= \bar{E}(k,w) - R_N(k,w) \end{aligned} \quad (51.30)$$

donde R_N es el resto que deberemos investigar:

$$\begin{aligned} R_N(k,w) &= \frac{w^{N+1}}{k} \int_0^\infty x e^{-x} \frac{(1-x/k)^{N+1}}{1-w(1-x/k)} dx \\ &= w^{N+1} \int_0^\infty x e^{-x} \frac{(1-x/k)^{N+1}}{k+w(x-k)} dx \end{aligned} \quad (51.31)$$

Merced a la ec.(51.30) el análisis de la convergencia de $S_N(k,w)$ para $\lambda, N \rightarrow \infty$ se reduce a estudiar $R_N(k,1)$ en el límite $N \rightarrow \infty$. Realizamos la discusión procediendo en forma análoga a como estudiamos $\bar{E}^{(N)}$. Tenemos así:

$$R_N(k,1) = A_1 + A_2 \quad (51.32a)$$

$$A_1 = \int_0^k e^{-x} \left(1 - \frac{x}{k}\right)^{N+1} dx ; \quad A_2 = \int_k^\infty e^{-x} \left(1 - \frac{x}{k}\right)^{N+1} dx \quad (51.32b)$$

Encontramos sin inconvenientes la siguiente cota para A_1 :

$$A_1 \leq \int_0^k e^{-x} e^{-x(N+1)/k} dx \leq \int_0^\infty e^{-x(\frac{N+1}{k}+1)} dx = \frac{k}{N+1+k} \quad (51.33a)$$

donde la igualdad se alcanza cuando $N, k \rightarrow \infty$. Para A_2 obtenemos:

$$A_2 = e^{-k} \int_0^\infty e^{-y} \left(-\frac{y}{k}\right)^{N+1} dy = \left(-\frac{1}{k}\right)^{N+1} e^{-k} (N+1)! \quad (51.33b)$$

con lo cual el resto puede ser expresado, usando (51.22), de la siguiente manera:

$$R_N(k,1) \leq \left(-\frac{1}{N^\Gamma}\right)^{N+1} \delta^{-(N+1)} e^{-\delta N^\Gamma} (N+1)! + \frac{\delta N^\Gamma}{N+1+\delta N^\Gamma} \quad (51.34)$$

Cuando $N \rightarrow \infty$, el primer término del miembro derecho de la desigualdad (51.34) es infinito si $r < 1$, y nulo si $r > 1$. Este resultado es coherente con (51.27). Finalmente tomando el límite $N \rightarrow \infty$ encontramos para el resto:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} R_N(k,1) = \delta/(1+\delta) , \text{ si } r=1 , \quad (51.35a)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} R_N(k,1) = 1 , \text{ si } r > 1 \quad (51.35b)$$

La ec.(51.35) es muy significativa pues muestra que el resto R_N no es nulo cuando $w=1$ ($1/\lambda \rightarrow 0$) y por lo tanto $S_N(k,w)$ no converge a $\bar{E}(k,w)$ cuando $N \rightarrow \infty$. Observemos que, dado que $\delta > 0$, el menor resto se obtiene cuando $r=1$, esto es, cuando la dependencia con el orden es la establecida por la ley de dilatación ($\alpha=-1$ en la ec.(49.37)). La situación aquí encontrada es similar a la discutida en el §.47 para la serie geométrica, en el sentido que las secuencias dependientes del orden con correlación lineal $k-N$ no convergen al resultado exacto. Sin embargo hemos encontrado un hecho nuevo: si consideramos una función con $\alpha=-1$ y desarrollo en serie de potencias alrededor de $\alpha=0$ asintótico divergente, las secuencias del tipo $k=\delta N$ son las que convergen más cerca del resultado exacto.

De acuerdo con el MF el parámetro δ debe determinarse encontrando primero las secuencias de PI y PE de $S_N(k,1)$ para luego ajustarlos linealmente con N . El resultado (51.35a) asegura que el error cometido será menor cuanto menor sea la pendiente δ .

Estamos ahora en condiciones de encontrar el valor de $S_N(k,w)$ cuando $N \rightarrow \infty$. Para tomar el límite $N \rightarrow \infty$ en (51.31) necesitamos algunos resultados auxiliares: a partir de la ec.(51.18c) obtenemos:

$$\ln w = - \ln(1 + \frac{1}{\lambda k}) \approx - \frac{1}{\lambda k} , \text{ si } k \gg 1 \text{ y } \lambda > 1 , \quad (51.36)$$

de la cual deducimos (usando (51.22) con $r=1$) el siguiente resultado:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} w^{N+1} = e^{-1/\delta\lambda} \quad (51.37)$$

Por otro lado sabemos que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \{k+w(x-k)\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\delta N(1+\lambda x)}{1+\lambda \delta N} \right\} = \frac{1}{\lambda} + x , \quad (51.38a)$$

y además:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (1-\frac{x}{k})^{N+1} = \lim_{N \rightarrow \infty} (1-\frac{x}{\delta N})^{N+1} = e^{-x/\delta} \quad (51.38b)$$

Introduciendo ahora (51.37) y (51.38) en (51.30) se obtiene:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(k,w) = \bar{E}(k,w) - e^{-1/\delta\lambda} \int_0^\infty \frac{x e^{-x(1+1/\delta)}}{x+1/\lambda} dx , \quad (51.39a)$$

que con el cambio de variables $y=(\delta+1)x/\delta$, resulta:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} S_N(k,w) &= \bar{E}(k,w) - \lambda e^{-1/\delta\lambda} \left(\frac{\delta}{\delta+1}\right)^2 \int_0^\infty \frac{ye^{-y}}{1+\frac{\lambda\delta}{1+\delta}y} dy \\ &= \bar{E}(k,w) - \lambda e^{-1/\delta\lambda} \left(\frac{\delta}{1+\delta}\right)^2 E(1, \lambda\delta/(1+\delta)) \end{aligned} \quad (51.40)$$

Finalmente la ec.(44.8b) con $\beta=-1$ (ver ec.(51.11)) nos permite encontrar la aproximación que el MF nos da para $E(1,\lambda)$:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} SE_N = E(1,\lambda) - e^{-1/\delta\lambda} \left(\frac{\delta}{1+\delta}\right)^2 E(1, \delta\lambda/(1+\delta)) \quad (51.41)$$

El resto que aparece en la ec.(51.41) es no nulo para $\lambda>0$, y revela que el MF permite construir una secuencia convergente a una cota inferior a la función $E(1,\lambda)$. Dicha secuencia está determinada por una transformación dependiente del orden con k linealmente creciente con N . La aplicación directa del MF y las reglas de estabilidad conduce en forma natural a la misma transformación.

Antes de verificar numéricamente nuestras predicciones, mostraremos que se pueden obtener las mismas conclusiones respecto del resto $R_N(k,1)$ mediante una manipulación totalmente algebraica de las ecuaciones del MF.

Utilizando la ec.(44.8a) para la función (51.16) encontramos:

$$E(1,\lambda) = k^{-1}(1-w)^{-1} \bar{E}(k,w) = k^{-1}(1-w)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}^{(n)} w^n, \quad (51.42)$$

donde, por la ec.(44.18), tenemos:

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{j=0}^n \frac{n!}{(n-j)!j!} E^{(j)} k^{-(1+j)} \quad (51.43)$$

Introduciendo ahora los coeficientes (51.15) en (51.43), y haciendo $k=\delta N$, obtenemos:

$$\bar{E}^{(n)} = \frac{1}{k} \sum_{j=0}^n \frac{n!(j+1)}{(n-j)!j!} \left(-\frac{1}{\delta N}\right)^j = \frac{1}{k} \left\{ 1 - \frac{2n}{\delta N} + \frac{3n(n-1)}{\delta^2 N^2} - \dots \right\}. \quad (51.44a)$$

Calculando la suma parcial para $N \gg 1$:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} &= \frac{1}{k} \left\{ N - \frac{2}{\delta N} \binom{N^2}{2} + \frac{3}{\delta^2 N^2} \binom{N^3}{3} - \dots \right\} \\ &= \left\{ \frac{1}{\delta} - \frac{1}{\delta^2} + \frac{1}{\delta^3} - \dots \right\}, \end{aligned} \quad (51.44b)$$

obtenemos finalmente:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N E^{(n)} = - \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{\delta}\right)^n = - \left(-1 + \frac{1}{1+1/\delta}\right) = \frac{1}{1+\delta} \quad , \quad (51.45)$$

que se reduce al resultado (51.40) para $1/\lambda \rightarrow 0$.

Para completar esta sección verificaremos que las reglas de estabilidad permiten derivar la secuencia convergente obtenida previamente. Hemos utilizado el programa general (Programa VII), que se ve al final de la obra, para efectuar todos los cálculos introduciendo los valores correspondientes para α , β , y $\{E^{(n)}\}$. Al determinar los puntos críticos de $S_N(k,1)$ hemos encontrado sólo un PE y un PI para N impar y ninguno para N par. Los resultados correspondientes a k_N^S y $S_N(k_N^S,1)$ se ven en la Tabla 15.5 para $N \leq 31$. La secuencia de PE es perfectamente lineal, como surge del ajuste de cuadrados mínimos que hemos realizado con los últimos 6 puntos:

$$k_N^S = (1,91 \pm 0,03) + (0,287 \pm 0,001) N \quad , \quad r=0,99999911 \quad , \quad (51.46)$$

siendo r el coeficiente de correlación. De acuerdo a nuestras ecuaciones, $S_N(k_N^S,1)$ debería convergir a $1/(1+\delta) \approx 0,78$ para $N \rightarrow \infty$; nuestra última aproximación con la Tabla 15.5 da $S_{31}(k_{31}^S,1) \approx 0,75$, lo que es un acuerdo aceptable.

Cabe añadir que en varios problemas de interés físico y fisicoquímico se presenta una situación análoga a la discutida en esta sección, esto es, se tienen funciones que satisfacen una relación de dilatación pero que no son desarrollables en serie de potencias alrededor de $1/\lambda=0$. Estos problemas se discutirán en próximos capítulos.

REFERENCIAS DEL CAPITULO XV.

- /1/ R. Seznec and J.Zinn-Justin, J. Math. Phys. 20 (1979) 1398.
- /2/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, "A Method for Summation of Perturbation Series", Physica A (~~en prensa~~). 128 (1984) 589
- /3/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, "Summation of Strongly Divergent Perturbation Series", J. Math. Phys. (~~en prensa~~) 25 (1984) 3492
- /4/ J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Ann. Phys. (NY) 147 (1983) 57.
- /5/ V.P. Spiridonov y A.A. Lopatkin, Tratamiento Matemático de Datos Fisicoquímicos, Mir, Moscú, 1973.
- /6/ V.L. Eletskii and V.S. Popov, Sov. J. Nucl. Phys. 28 (1978) 570.
- /7/ W. Witschel, Z. Naturforsch. a36 (1981) 481.
- /8/ Y. Onodera, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 44 (1970) 1477.
- /9/ J.K. Vij and W.G.S. Scaife, J. Chem. Phys. 64 (1976) 226.
- /10/ A. Morita and D.G. Frood, J. Phys. D 11 (1978) 2409.
- /11/ A.D. Booth, J. Comput. Phys. 46 (1982) 423.
- /12/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Math. Phys. 25 (1984) 2377.
- /13/ G.A. Arteca, F.M. Fernández y E.A. Castro, Folia Chim. Theor. Lat. 10 (1982) 153.
- /14/ F. Röscheisen and W. Witschel, J. Mol. Struct. THEOCHEM 87 (1982) 301.

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XV)

Tabla 15.1

Secuencias renormalizadas convergentes para el modelo constituido por la integral (50.1), obtenidas mediante el MF.

N	k_N^S a)	$S_N(k_N^S, 1)$ a)	k_N^S b)	$S_N(k_N^S, 1)$ b)
1	1,5811388301	0,954325		
2			2,2750692867	0,988061
3	2,2686203055	1,01093		
4			2,7262835278	1,01714
5	2,7921625419	1,02036		
6			3,1595269728	1,02163
7	3,2320935106	1,02224		
8			3,5477633258	1,02252
9	3,6189740554	1,02265		
10			3,9000505775	1,02271
11	3,9683323435	1,02274		
12			4,2241693568	1,02275
13	4,2893393194	1,02275898		
14			4,5257119252	1,02276249
15	4,5879464926	1,02276405		
16			4,8087160792	1,02276490
17	4,868275699	1,02276528		
18			5,0761745862	1,02276548
19	5,1333196163	1,02276557		
20			5,3303680520	1,02276563
21	5,3853608114	1,02276565		
22			5,5729670487	1,022765661
23	5,6259528357	1,022765666		
24			5,8062772752	1,022765669

a) Secuencia A.

b) Secuencia B.

Tabla 15.1 (continuación)

Secuencias renormalizadas convergentes para el modelo constituido por la integral (50.1), obtenidas mediante el MF.

N	k_N^I c)	$S_N(k_N^I, 1)$ c)
1	2,41522945772	0,882458
2	3,34026841135	0,911606
3	4,45010636123	0,915744
4	5,57824977631	0,917569
5	6,71611510403	0,918499
6	7,85917109226	0,919037
7	9,00532549791	0,919377
8	10,1534807862	0,919605
9	11,3030048228	0,919766
10	12,4535072544	0,919884
11	13,6047337191	0,919972
12	14,7565112320	0,920041
13	15,9087179817	0,920095
14	17,0612656726	0,920138
15	18,2140887189	0,920173
16	19,3671373726	0,920202
17	20,5203732075	0,920227
18	21,6737660678	0,920247
19	22,8272919532	0,920265
20	23,9809315232	0,920280
21	25,1346690179	0,920293
22	26,2884914640	0,920304
23	27,4423880853	0,920314
24	28,5963498558	0,920323

c) Secuencia C.

Tabla 15.2

Coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ de la serie renormalizada para el modelo (50.1), hasta el orden 24.

n	$\bar{E}^{(n)}$ a)	n	$\bar{E}^{(n)}$
0	0,415002883507 (0)	13	0,40476199785 (-3)
1	0,198268994508 (0)	14	0,18336771682 (-3)
2	0,133743080530 (0)	15	0,7958303026 (-4)
3	0,943947765661 (-1)	16	0,3312447890 (-4)
4	0,659163380150 (-1)	17	0,132364863 (-4)
5	0,446492425652 (-1)	18	0,50834208 (-5)
6	0,290791541167 (-1)	19	0,18782714 (-5)
7	0,181312788840 (-1)	20	0,6683984 (-6)
8	0,108006956255 (-1)	21	0,229294 (-6)
9	0,61416078404 (-2)	22	0,7595 (-7)
10	0,33332446288 (-2)	23	0,2416 (-7)
11	0,17272408240 (-2)	24	0,784 (-8)
12	0,85509054517 (-3)		

a) $k_{24}^I = 5,80627727523$ (secuencia B). Entre paréntesis se indica la potencia de 10 por la que debe multiplicarse al coeficiente tabulado. Se han redondeado los resultados para $\bar{E}^{(n)}$ de acuerdo al número de cifras significativas con que se ha expresado k_{24}^I

Tabla 15.3

Resultados obtenidos para la función (50.1) en un rango amplio de valores de λ .

λ	$E(1, \lambda)$ exacto a)	SE_{24} b)
10^{-4}	0,9999250328	0,9999250328
10^{-3}	0,9992532545	0,9992532545
10^{-2}	0,9928039079	0,9928039080
10^{-1}	0,9445018017	0,9445018016
1	0,7720521778	0,7720521778
10	0,5201607637	0,5201607634
10^2	0,3128864550	0,3128864541
10^3	0,1799548854	0,1799548843

a)

Determinado numéricamente por el método de integración de Romberg (utilizando una calculadora programable TI-59P).

b)

Calculado con los coeficientes de la Tabla 15.2.

Tabla 15.4

Resultados comparados para el valor medio estadístico clásico del desplazamiento cuadrático en el oscilador anarmónico cuártico, ec.(50.17), en un rango amplio de valores de λ .

λ	^{a)} E(1, λ) exacto	E(1, λ) ^{b)}	SE' ₆ ^{c)}
10^{-4}	0,9997002	0,99970	0,9997002
10^{-3}	0,997024	0,99702	0,997024
10^{-2}	0,972144	0,97214	0,972144
10^{-1}	0,817561	0,81858	0,817558
1	0,467919	0,48921	0,467901
10	0,188902	0,20276	0,188896
10^2	0,064958	0,06721	0,064957
10^3	0,0211072	0,02136	0,0211071

a) Resultados obtenidos por integración numérica mediante el método de Romberg (utilizando un calculadora programable TI-59P).

b) Ec.(50.20) con $n=3$ (Ref./11/).

c) Resultados obtenidos con el MF (ec.(50.24) , $k^*=3,2628$).

Tabla 15.5

Secuencia renormalizada convergente para la función (51.16).

N	k_N^S	$S_N(k_N^S, 1)$	N	k_N^S	$S_N(k_N^S, 1)$
1	2,0000	0,4959	17	6,7794	0,7264
3	2,6258	0,6037	19	7,3594	0,7310
5	3,2371	0,6496	21	7,9377	0,7349
7	3,8392	0,6757	23	8,5145	0,7381
9	4,4349	0,6928	25	9,0901	0,7409
11	5,0238	0,7048	27	9,6646	0,7434
13	5,6131	0,7138	29	10,2381	0,7456
15	6,1975	0,7208	31	10,8107	0,7475

CAPITULO XVI

APLICACION DEL MF AL OSCILADOR ANARMONICO.

"I had stated,... Solutions of physical problems must always be in finite terms or convergent series, otherwise nonsense is made... Then came a partial removal of ignorant blindness. In some physical problems divergent series are actually used".

O. Heaviside, Electromagnetic Theory, 1899.

§.52. RENORMALIZACION DE LA TPRS UTILIZANDO EL MF: CONVERGENCIA AL MENOR AUTOVALOR DEL OSCILADOR CUARTICO.

Estudiaremos en este parágrafo la aplicación del MF, desarrollado en el §.44, a una serie de potencias con radio de convergencia nulo de gran relevancia en física y fisicoquímica: la TPRS para los osciladores anarmónicos. Como ya lo hemos discutido previamente, el modelo de los osciladores anarmónicos está íntimamente relacionado a una teoría de campos del tipo $\lambda\phi^{2M}$ (Apéndice B) y es además un modelo que aparece naturalmente en la descripción de las vibraciones moleculares, procesos de difusión, teorías de laser, etc (Apéndice A). En más de una oportunidad en capítulos anteriores hicimos uso de este modelo, pero recién ahora estamos en condiciones de obtener resultados muy precisos en relación al mismo.

Una situación muy frecuente en física, cuando se estudian desarrollos en serie de potencias en un parámetro λ , es que las propiedades de interés se encuentran asociadas al límite $1/\lambda \rightarrow 0$. Precisamente éste es el caso que se presenta cuando se aplica la TP a modelos de teorías de campos. El MF está especialmente adaptado para realizar dicho tipo de investigación, pues nos permite construir secuencias convergentes que aproximan el límite $1/\lambda \rightarrow 0$ de la función en cuestión, manteniendo la correcta estructura analítica asintótica con λ . De acuerdo a estas consideraciones, esta sección está dedicada a estudiar la convergencia de la TPRS cuando $1/\lambda \rightarrow 0$ para el estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico.

Nuestro punto de partida es el teorema de Symanzik, que para los osciladores anarmónicos /1/ (ecs.(23.3)) nos da la siguiente equivalencia unitaria (ver Apéndice A):

$$H(g, \lambda) = p^2 + gx^2 + \lambda x^{2K} \quad , \quad (52.1a)$$

$$H(g, \lambda) = \lambda^{1/(K+1)} H(g\lambda^{-2/(K+1)}, 1) \quad , \quad (52.1b)$$

que nos proporciona la siguiente relación de dilatación para los autovalores $E(g, \lambda)$:

$$E(g, \lambda) = \lambda^{1/(K+1)} E(g\lambda^{-2/(K+1)}, 1) \quad (52.2)$$

Debe recordarse que $E(1, \lambda)$ puede desarrollarse en serie de potencias de λ y $\lambda^{-2/(K+1)}$ alrededor de $\lambda=0$ y $1/\lambda=0$ respectivamente. Este último de-

desarrollo en serie tiene un radio de convergencia finito /1/. La existencia de ambos desarrollos Taylor hace particularmente apropiado este modelo para aplicar el MF (comparar con el §.51).

En el caso del oscilador anarmónico cuártico, $K=2$, obtenemos los exponentes α y β de (52.2):

$$\alpha = -2/3, \quad \beta = 1/3 \quad (52.3)$$

Los exponentes (52.3) y la ec.(44.7) nos proporcionan el siguiente cambio de variables para construir la secuencia renormalizada:

$$k^3 \lambda^2 (1-w)^3 - w^2 = 0 \quad (52.4)$$

La ec.(52.4) es de tercer grado en la variable w y la raíz real que satisface los lemas 44.1-44.3 está dada por /2/:

$$\left(\frac{w}{\lambda k^{3/2}}\right)^{1/3} = \frac{1}{3\lambda k^{3/2}} (2 \cos(\frac{\pi-\phi}{3}) - 1), \quad \lambda k^{3/2} < 2/3^{3/2}, \quad (52.5a)$$

$$\phi = \arccos\left(1 - \frac{27}{2}\lambda^2 k^3\right), \quad (52.5b)$$

y:

$$\left(\frac{w}{\lambda k^{3/2}}\right)^{1/3} = -\frac{1}{3\lambda k^{3/2}} \left(1 + \frac{2}{\sin(2\chi)}\right), \quad \lambda k^{3/2} > 2/3^{3/2}, \quad (52.6a)$$

$$\chi = \arctg(\operatorname{tg}^{1/3}(\psi/2)), \quad \psi = \arcsen(1/\cos\phi) \quad (52.6b)$$

La ec.(44.18) nos proporciona la secuencia SE_N con la que podemos aproximar el estado fundamental $E(1, \lambda)$ para $\lambda > 0$:

$$E(1, \lambda) = (\lambda/w)^{1/3} \bar{E}(k, w) = (\lambda/w)^{1/3} E(k(1-w), w) \approx SE_N, \quad (52.7a)$$

$$SE_N = (\lambda/w)^{1/3} S_N(k, w), \quad (52.7b)$$

$$\bar{E}(k, w) \approx S_N(k, w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad (52.7c)$$

Cabe acotar que $\bar{E}(k, w)$ resulta ser (utilizando la relación de dilatación (51.1b)) un autovalor del hamiltoniano particionado $H(k(1-w), w) = p^2 + kx^2 + w(x^4 - kx^2)$, tal como lo discutimos en el §.43, siempre que k no sea dependiente del orden.

La ec.(44.14) nos proporciona los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ en términos de los coeficientes $\{E^{(n)}\}$ de la TPRS:

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{(1-3j)/2}{n-j} k^{(1-3j)/2} E^{(j)} \quad (52.8)$$

El valor de k se determina de acuerdo a las reglas de estabilidad (§.44).

El algoritmo a seguir para completar los cálculos es idéntico al que estudiamos en el §.50, consistente en determinar la convergencia de las secuencias $S_N(k_N^I, 1)$ y $S_N(k_N^S, 1)$ al aumentar N . Como sabemos, éstas deben convergir al autovalor en el régimen de autoacoplamiento infinito. Para el estado fundamental esto se expresa del siguiente modo/3/:

$$S_N(k^*, 1) \rightarrow \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{-1/3} E(1, \lambda) = E(0, 1) = 1,06036209048418... \quad (52.9)$$

Antes de verificar si la conjetura (52.9) se satisface, creemos conveniente recordar al lector la discusión del §.43, donde mostramos que la transformación (52.4) coincide con la utilizada por Caswell /4/ y por Sez nec y Zinn-Justin /5/, si el parámetro ajustable se determina en cada caso de acuerdo al mismo criterio. El MF introduce un criterio de estabilidad y convergencia para hallar k^* que es diferente al utilizado por los otros autores.

Para realizar los cálculos numéricos con (52.7) debemos tener como datos de entrada a los coeficientes $E^{(n)}$. En este trabajo hemos utilizado los coeficientes de la TPRS obtenidos por Bender y Wu /6/, con doce cifras significativas. Estos resultados no son los más precisos pues varios autores reclaman haber obtenido otros de calidad superior /7,8/; sin embargo sólo los de Bender y Wu /6/ han sido publicados con un número suficientemente grande de cifras significativas. Si recordamos la regla de Le Guillou y Zinn-Justin comentada en el §.49, la utilización de coeficientes $E^{(n)}$ con 12 cifras significativas nos permitirá manejar en forma numéricamente estable unos 24 coeficientes RS. Tomando en cuenta este hecho hemos utilizado los primeros 24 coeficientes de la ref./6/ para hacer los cálculos.

Los cálculos numéricos de los extremos y puntos de inflexión de $S_N(k, 1)$ se llevaron a cabo con el Programa VII (para HP-1000) que se ve al final de la obra. Los resultados muestran una importante novedad respecto del análisis que hicimos en capítulos previos: el número de PI y PE crece rápidamente con N , incrementando por consiguiente el número de secuencias convergentes.

Utilizando la TPRS hasta el orden 24 hemos encontrado 4 secuencias de PI y 3 secuencias de PE. Los resultados para $S_N(k^*, 1)$, usando ambas secuencias se ven en las Tablas 16.1 y 16.2 respectivamente. La fig.16.1 muestra además el plano $k^{3/2}-N$ con las 4 secuencias de PI; para las secuencias de PE la situación es análoga, razón por la cual no las discutiremos.

Las 4 secuencias de PI, que hemos llamado A_I, B_I, C_I y D_I (fig.16.1), y las correspondientes a los PE de la serie renormalizada, que llamaremos A_S, B_S y C_S , poseen una perfecta dependencia lineal de k^* con N . En consistencia con lo que hemos visto en secciones previas, la secuencia renormalizada $S_N(k_N^*, 1)$ no converge al resultado exacto si k^* depende linealmente con N . Si bien el número de coeficientes no es suficientemente elevado, las Tablas 16.1 y 16.2 nos permiten realizar una esti-

mación del límite de cada una de dichas secuencias, que detallamos a continuación:

- i) Secuencia A_I , $S_N(k^*,1) = 1,30 \pm 10^{-2}$.
- ii) Secuencias B_I y A_S , $S_N(k^*,1) = 1,06035 \pm 10^{-5}$.
- iii) Secuencias C_I y B_S , $S_N(k^*,1) = 1,0603622 \pm 10^{-7}$.
- iv) Secuencias D_I y C_S , $S_N(k^*,1) = 1,06036209 \pm 10^{-8}$. (52.10)

Claramente se aprecia que la secuencia de límites (52.10) aproxima cada vez más al resultado exacto (52.9).

Este último hecho puede ser explicado desde el punto de vista del MF si aplicamos las reglas de estabilidad a los PI y PE que se ven en las Tablas 16.1 y 16.2. Es posible notar que cada nueva secuencia de PI que aparece al incorporar un número creciente de correcciones perturbacionales (y en la cual k^I crece linealmente con N) posee PI con menores valores absolutos de la derivada primera, que las correspondientes a las otras secuencias que existen para un N dado. Análogamente cada nueva secuencia de PE que surge al crecer N, corresponde a extremos con menor valor absoluto de la derivada segunda respecto de extremos de otras secuencias presentes.

En consecuencia, al aplicar las reglas de estabilidad a las sucesiones de PE y PI, deberemos cambiar de secuencia a medida que N aumenta de modo de mejorar la convergencia al resultado exacto. De esta manera esperamos alcanzar convergencia a través de una nueva sucesión "envolvente" de aquéllas con dependencia lineal $k-N$.

Las secuencias de PI y PE construídas por aplicación de las reglas de estabilidad se ven en la Tabla 16.3 en función del número de términos N. Podemos estimar el límite de dichas secuencias como:

$$S_N(k_N^*,1) = 1,060362090 \pm 10^{-9}, \quad N \gg 1 \quad (52.11)$$

El acuerdo obtenido con el resultado exacto es de 1 en 10^9 para la secuencia de PI y de 1 en 10^8 para la secuencia de PE, con $N=24$ y $N=23$ respectivamente. Nuestros resultados son de enorme precisión, y constituyen junto a los de las refs./4,5/ los mejores que se han obtenido hasta el día de hoy utilizando la TPRS. Es de notar asimismo que los resultados obtenidos aplicando el MF se comparan favorablemente, en lo que hace a sencillez, con los obtenidos mediante la utilización de diversos métodos variacionales, ya que para aproximar satisfactoriamente los autovalores del oscilador cuártico se requieren bases muy extendidas.

La Tabla 16.3 nos revela un hecho interesante: la convergencia a $E(0,1)$ no es monótona, sino que se producen "saltos" al cambiar de secuencia. Este hecho ha sido notado por Caswell /4/ y Sez nec y Zinn-Justin /5/, si bien estos autores no analizaron la causa de tal característica de la convergencia.

Por otro lado la fig.16.1 muestra que la pendiente de las rectas $k-N$ es menor a medida que aumenta N y aparecen nuevas secuencias. De hecho podemos notar que los primeros valores de k en las secuencias de PI

y PE se alinean aproximadamente en una recta $k^{3/2} = N\delta$. Dado que para este modelo $\alpha = -2/3$, cabe esperar que la convergencia de $S_N(k_N^*, 1)$ a $E(0, 1)$ ocurra a través de una transformación dependiente del orden de este tipo (ver §.49). Nuevamente los resultados confirman que las sucesiones dadas por el MF convergen al resultado correcto siguiendo la dependencia con el orden impuesto por la ley de dilatación.

Hemos realizado una estimación de la dependencia con el orden de $k^{3/2}$, seleccionando los menores puntos de inflexión para $N=15, 18$ y 20 , y ajustando la recta que se ve en la fig.16.1. El análisis de regresión nos da la siguiente correlación lineal:

$$(k_N^I)^{3/2} = (6,5 \pm 0,9) + (0,42 \pm 0,05) N ; r=0,99999957 \quad (52.12)$$

El resultado (52.12) está de acuerdo con el valor de $\delta \approx 0,377$ obtenido numéricamente por Sez nec y Zinn-Justin /5/, al derivar una transformación dependiente del orden analizando los ceros del último coeficiente de la serie renormalizada. Sin embargo la concordancia no es tan buena como la obtenida en el §.50 (ec.(50.8)) ya que la correlación lineal $k^{3/2} - N$ no se establece en forma directa sino que se construye superponiendo secuencias con correlación lineal $k - N$.

La Tabla 16.4 presenta los resultados numéricos para los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ de la sucesión $S_N(k, w)$ obtenidos con k_{24}^I y k_{23}^S de acuerdo a las reglas de estabilidad. Dichos coeficientes nos permiten obtener una excelente aproximación al menor autovalor en todo el rango de valores de $\lambda > 0$, y nos proporcionan además una expresión implícita en λ para la función $E(1, \lambda)$. Determinando el valor de w a partir de las ecs.(52.5) y (52.6), hemos calculado $SE_N(k_{24}^I, w)$ y $SE_N(k_{23}^S, w)$. Los resultados obtenidos se comparan con los "exactos" /13/ en la Tabla 16.5. Como era de esperar, tenemos un excelente acuerdo a 9 cifras significativas para todo $\lambda > 0$, ya que, por la discusión hecha previamente, teníamos convergencia a 9 cifras significativas para el autovalor $E(0, 1)$, que es el caso más desfavorable porque corresponde formalmente al límite $\lambda \rightarrow \infty$.

En conclusión, hemos mostrado que los autovalores del oscilador anarmónico cuártico pueden ser aproximados con gran precisión para $\lambda > 0$ sumando la TPRS mediante el MF.

Para cerrar esta sección creemos oportuno realizar una breve discusión del problema con $g < 0$. En este caso el hamiltoniano (52.1a) describe un potencial con dos mínimos que ha recibido enorme aplicación en el estudio de vibraciones moleculares, barreras rotacionales, transiciones de fase, etc (ver por ejemplo la ref./14/ y las allí citadas). Es conveniente reescribir el hamiltoniano (52.1a)($K=2$) en términos del parámetro $Z = -g > 0$:

$$H(-Z, \lambda) = p^2 - Zx^2 + \lambda x^4 \quad (52.13)$$

Nuevamente aplicamos el procedimiento del Apéndice A para deducir la relación de dilatación que satisface el operador $H(-Z, \lambda)$:

$$H(-z, \lambda) = z^{-1/2} H(-1, \lambda z^{-3/2}) \quad (52.14)$$

Para construir la serie renormalizada partimos de la relación (52.14) de la cual se obtiene:

$$H(k(1-w), w) = k^{1/2} (w-1)^{1/2} H(-1, wk^{-3/2} (w-1)^{-3/2}) \quad (52.15)$$

Es evidente que en este caso debe cumplirse $w \geq 1$ para poder aplicar el método funcional. Si definimos entonces:

$$\lambda = wk^{-3/2} (w-1)^{-3/2} \quad , \quad (52.16)$$

obtenemos, para los autovalores de (52.13), la siguiente relación:

$$E(-1, \lambda) = k^{-1/2} (w-1)^{-1/2} \bar{E}(k, w) \quad (52.17)$$

La función $\bar{E}(k, w)$ es un autovalor de $H(k(1-w), w)$. La ec.(52.16) proporciona el cambio de variable de λ a w y revela además cuál es la dificultad que involucra la aplicación del MF a este modelo: el intervalo $0 \leq \lambda < \infty$ se transforma en $\infty > w \geq 1$. Luego, resultará muy difícil aproximar los autovalores del problema con potencial de doble mínimo si $\lambda \ll 1$ ya que en tal caso $w \gg 1$. Es fácil ver por qué esta situación es la más complicada de describir: cuando $\lambda \rightarrow 0$ el potencial posee mínimos infinitamente profundos y separados.

§.53. ALGUNOS RESULTADOS COMPLEMENTARIOS PARA LOS AUTOVALORES DEL OSCILADOR ANARMONICO CUARTICO.

Dedicaremos este parágrafo a la discusión de algunos otros aspectos del problema de autovalores del oscilador anarmónico cuártico que pueden ser abordados por el MF.

En primer lugar creemos importante mostrar cuál es el efecto sobre los resultados obtenidos mediante el MF, del ajuste del coeficiente responsable del crecimiento de $E(1, \lambda)$ cuando $1/\lambda \rightarrow 0$. En la sección anterior obtuvimos dicho coeficiente:

$$E(0,1) = e^{(0)} \quad , \quad (53.1)$$

con gran precisión utilizando la TPRS hasta el orden 24. Si ahora deseamos incorporar dicho coeficiente en el MF podemos utilizar el procedimiento indicado en el §.42 y aplicado en el §.50.

A tal efecto aproximamos el autovalor $E(1, \lambda)$ por la siguiente secuencia:

$$SE'_N = (\lambda/w)^{1/3} S'_N(k,w) \quad , \quad (53.2a)$$

donde:

$$S'_N(k,w) = \sum_{n=0}^{N-1} \bar{E}^{(n)} w^n + \bar{E}'^{(N)} w^N \quad (53.2b)$$

Hemos separado la secuencia $S'_N(k,w)$ en dos partes de modo tal que los $(N-1)$ primeros coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ puedan ser calculados con la TPRS hasta el orden $(N-1)$ (ec.(52.8)) y el N -ésimo de modo tal de introducir (53.1). Esto último se puede conseguir en forma análoga a la ec.(50.23)):

$$\bar{E}'^{(N)} = e^{(0)} - \sum_{n=0}^{N-1} \bar{E}^{(n)} \quad (53.3)$$

Introduciendo (53.3) en (53.2) obtenemos la secuencia que aproxima a $E(1, \lambda)$:

$$SE'_N = (\lambda/w)^{1/3} \{e^{(0)} w^N + \sum_{n=0}^{N-1} \bar{E}^{(n)} (w^n - w^N)\} \quad (53.4)$$

Nuestra intención es utilizar (53.4) para obtener una expresión analíti-

ca sencilla para aproximar el menor autovalor como función de λ . En consiguiente consideraremos sólo dos coeficientes de la TPRS alrededor de $\lambda=0$ (ec.(36.20)):

$$E^{(0)} = 1, \quad E^{(1)} = 3/4, \quad E^{(2)} = -21/16, \quad (53.5)$$

además del coeficiente $e^{(0)}$. Utilizando la ec.(52.8) se encuentra inmediatamente:

$$\bar{E}^{(0)} = k^{1/2} E^{(0)}, \quad (53.6a)$$

$$\bar{E}^{(1)} = k^{-1} \left\{ E^{(1)} - \frac{1}{2} k^{3/2} E^{(0)} \right\}, \quad (53.6b)$$

$$\bar{E}^{(2)} = k^{-5/2} \left\{ E^{(2)} + E^{(1)} k^{3/2} - \frac{1}{8} k^3 E^{(0)} \right\}, \quad (53.6c)$$

lo que nos proporciona la forma de SE'_N como una función de k . El valor de k puede ahora determinarse mediante las reglas de estabilidad; por ejemplo:

$$\left(\frac{\partial SE'_N}{\partial k} \right) (k=k^*) = 0 \quad (53.7)$$

Numéricamente hemos encontrado el extremo en:

$$k^* \cong 2,9096, \quad (53.8)$$

que es independiente de λ . Introduciendo (53.8) en (53.4) obtenemos una expresión analítica compacta válida para todo λ :

$$SE'_3 = (\lambda/w)^{1/3} \left\{ 1,7057549648 - 0,5951100917 w - 0,04634197750 w^2 - 0,003940805138 w^3 \right\} \quad (53.9)$$

Recordemos que la variable w está dada por las ecs.(52.5) y (52.6).

A pesar de su sencillez la ec.(53.9) es muy precisa, tal como surge de su comparación con los resultados exactos (numéricos) en la Tabla 16.6. Los resultados muestran un error máximo de $\pm 3 \times 10^{-5}$ en la zona de valores intermedios de λ , lo que hace que la ec.(53.9) sea la expresión más sencilla y precisa que se haya presentado para la energía del estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico. Algunos resultados previos sobre la utilidad del agregado de $e^{(0)}$ en el marco del MF aparecen en nuestro artículo de la ref./10/.

Podemos resaltar aún más la utilidad de la expresión (53.9) calculando la aproximación al coeficiente $e^{(1)}$ del desarrollo en serie de potencias de $\lambda^{-2/3}$ (ec.(23.36)). Cuando $1/\lambda \rightarrow 0$, la ec.(52.4) nos conduce inmediatamente a:

$$w \cong 1 - \frac{1}{k} \lambda^{-2/3} + O(\lambda^{-4/3}), \quad (53.10)$$

tras lo cual, introduciendo (53.10) en (53.9) y agrupando las potencias

de λ , obtenemos:

$$\begin{aligned} SE'_3 &= \lambda^{1/3} \left\{ \sum_{n=0}^3 \bar{E}^{(n)} + \lambda^{-2/3} \frac{1}{3k} \sum_{n=0}^3 \bar{E}^{(n)} (1-3n) + \dots \right\} \\ &= \lambda^{1/3} \{ e^{(0)} + \tilde{e}^{(1)} \lambda^{-2/3} + \dots \} \end{aligned} \quad (53.11)$$

donde el coeficiente $\tilde{e}^{(1)}$,

$$\tilde{e}^{(1)} = \frac{1}{3k} \sum_{n=0}^3 \bar{E}^{(n)} (1-3n) \quad , \quad (53.12)$$

es nuestra aproximación a $e^{(1)}$ Utilizando (53.8) y (53.9) encontramos el resultado numérico siguiente:

$$\tilde{e}^{(1)} = 0,361930 \quad , \quad (53.13)$$

que es una excelente aproximación al resultado exacto obtenido numéricamente por Hioe y col. /15/: $e^{(1)}=0,362022$. Este acuerdo es una manifestación más de la conveniencia de utilizar una transformación que asegure la correcta estructura analítica de la función cuyo desarrollo perturbativo desea sumarse.

Hasta el momento no hemos realizado ningún comentario respecto de los autovalores superiores del oscilador anarmónico cuártico. Estos estados no han recibido una gran atención desde el punto de vista de la TPRS, y es así que no se ha determinado hasta el presente un número suficientemente grande y preciso de coeficientes perturbacionales. Utilizando la técnica MPH (§.8) hemos podido calcular en forma confiable unos 10 u 11 coeficientes RS, por lo que un estudio completo de convergencia utilizando el MF no puede llevarse a cabo. Sin embargo puede obtenerse información útil e importante acerca de los estados excitados por aplicación de las secuencias renormalizadas. Dedicaremos el resto de esta sección a la discusión de este punto.

Sabemos que cuando el número cuántico m es suficientemente grande, los autovalores pueden ser aproximados a través del método JWKB (Cap.II). Es de esperar entonces que la utilización del MF para sumar el desarrollo perturbativo correspondiente al oscilador anarmónico cuártico, para números cuánticos grandes, permita aproximar los autovalores del oscilador cuártico en el límite semiclásico. Para verificar esta conjetura, podemos realizar un estudio preliminar de tipo analítico.

Consideremos por el momento, para evitar operaciones engorrosas, la siguiente secuencia:

$$S_3(k,1) = \sum_{n=0}^3 E_m^{(n)} \quad , \quad (53.14)$$

que aproxima a $\tilde{E}_m(k,1)=E_m(0,1)$, m -ésimo autovalor del oscilador cuártico.

Debemos agregar el coeficiente $\bar{E}_m^{(3)}$ a los listados en (53.6), el cual se deduce de la ec.(52.8):

$$\bar{E}_m^{(3)} = k^{-4} \{E_m^{(3)} + \frac{5}{2} k^{3/2} E_m^{(2)} + k^3 E_m^{(1)} - \frac{1}{16} k^{9/2} E_m^{(0)}\}. \quad (53.15)$$

El coeficiente perturbacional $E_m^{(3)}$ se presenta en la literatura /4/ y completa los que mostramos en el §.36:

$$E_m^{(3)} = \frac{375}{1024} (2m+1)^4 + \frac{1707}{512} (2m+1)^2 + \frac{4617}{3072} \quad (53.16)$$

Introduciendo (53.6) y (53.15) en (53.14), encontramos:

$$S_3(k,1) = \frac{5}{16} k^{1/2} E_m^{(0)} + 3 k^{-1} E_m^{(1)} + \frac{7}{2} k^{-5/2} E_m^{(2)} + k^{-4} E_m^{(3)}. \quad (53.17)$$

Para obtener una expresión analítica sencilla elegiremos k en la aproximación usada por Pascual /16/ y Dmitrieva y Plindov /17,18/, que está íntimamente vinculada con el SVM (ver §§.16 y 21); esto es:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial k} S_1(k,1) \right\} (k=k^*) = 0, \quad (53.18a)$$

donde:

$$S_1(k,1) = \frac{1}{2} k^{1/2} E_m^{(0)} + k^{-1} E_m^{(1)} \quad (53.18b)$$

Introduciendo las ecs.(39.20) en (53.18), obtenemos para k^* el siguiente valor:

$$k_m^* = \left\{ \frac{3}{2} (2m+1 + \frac{1}{2m+1}) \right\}^{2/3} \quad (53.19)$$

Este no es apropiado para estudiar el estado fundamental $m=0$ (ver §.43), pero para los estados superiores permite obtener una serie renormalizada asintótica, con la característica de que dicha secuencia es suavemente divergente y su rango de utilidad (ver §.11) es mayor a medida que m crece.

Reemplazando (39.20), (53.16) y (53.19) en (53.17) se llega al siguiente resultado para la secuencia $S_3(k^*,1)$:

$$\begin{aligned} S_3(k^*,1) = & \frac{5}{16} \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} (2m+1)^{4/3} \left(1 + \frac{1}{(2m+1)^2}\right)^{1/3} \\ & + \frac{9}{8} \left(\frac{2}{3}\right)^{2/3} (1+(2m+1)^2) \left(2m+1 + \frac{1}{2m+1}\right)^{-2/3} \\ & - \frac{7}{16} \left(\frac{2}{3}\right)^{5/3} (2m+1) \left\{ \frac{67}{8} + \frac{17}{8} (2m+1)^2 \right\} \left\{ 2m+1 + \frac{1}{2m+1} \right\}^{-5/3} \\ & + \left(\frac{2}{3}\right)^{8/3} \left\{ \frac{4617}{3072} + \frac{1707}{512} (2m+1)^2 + \frac{375}{1024} (2m+1)^4 \right\} \left\{ 2m+1 + \frac{1}{2m+1} \right\}^{-8/3} \bullet \end{aligned} \quad (53.20)$$

Reteniendo los dos términos más importantes cuando $m \gg 1$ la ecuación anterior se puede reescribir en una forma conveniente para comparar con la ec.(36.28):

$$S_3(k^*, 1) = \frac{291}{64} (9^{-1/3}) \left\{ (m+1/2) + \frac{65}{2328(m+1/2)} + O(m^{-2}) \right\}^{4/3}. \quad (53.21)$$

La ec.(53.21) es una extraordinaria aproximación a los autovalores del oscilador cuártico ($H(0,1)=p^2+x^4$) en el límite semiclásico (ec.(36.28)):

$$E_m(0,1) = e_m^{(0)} = (3\sqrt{2})^{4/3} (\Gamma(\frac{1}{4}))^{-8/3} \pi^2 \left\{ (m+1/2) + \frac{1}{12\pi(m+1/2)} + O(m^{-2}) \right\}^{4/3} \quad (53.22)$$

La comparación de (53.21) y (53.22) nos muestra que el error cometido empleando el MF hasta tercer orden perturbacional es de 0,038% para el coeficiente JWKB de primer orden y de 5,3% para el siguiente.

Para extender los resultados aquí presentados, hemos procedido en forma numérica agregando los coeficientes RS hasta el orden 11. Con tal fin se utilizó el Programa VII para el MF, pero por sencillez hemos calculado en todo momento k^* según (53.19). Los resultados para $S_{11}(k_m^*, 1)$ con $m=10, 20, 30, \dots, 100$ se ven en la Tabla 16.7 truncadas hasta el número de cifras con que coinciden con los resultados exactos numéricos /3/ para $e_m^{(0)}$. Los coeficientes JWKB aproximados se pueden determinar escribiendo la igualdad:

$$\frac{S_{11}(k_m^*, 1)}{(m+1/2)^{4/3}} = C + \frac{4}{3} D C (m+1/2)^{-2}, \quad (53.23)$$

y obteniendo los coeficientes C y D mediante un ajuste de cuadrados mínimos para $m=10, 20, 30, \dots, 100$. El análisis de regresión nos da la siguiente estimación de las constantes C y D:

$$\begin{aligned} C &= 2,185069 \pm 10^{-6} \\ D &= 0,0264 \pm 10^{-4}, \end{aligned} \quad (53.24)$$

con un coeficiente de correlación $r=0,99979$. La constante C arroja un error de $1,4 \times 10^{-5}\%$ en la estimación del primer coeficiente JWKB:

$$(3\sqrt{2})^{4/3} \pi^2 (\Gamma(\frac{1}{4}))^{-8/3} = 2,1850693013... \quad (53.25a)$$

y el coeficiente D un error de 0,47% al estimar el segundo coeficiente JWKB:

$$\frac{1}{12\pi} = 0,0265258238... \quad (53.25b)$$

En conclusión, los autovalores del oscilador anarmónico pueden aproximarse exitosamente usando el MF para grandes o pequeños valores tanto de λ como de m .

REFERENCIAS DEL CAPITULO XVI.

- /1/ B. Simon, Ann. Phys. (NY) 58 (1970) 76.
- /2/ M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1970.
- /3/ K. Banerjee, S.P. Bhatnagar, V. Choudhry and S.S. Kanwal, Proc. R. Soc. London Ser. A 360 (1978) 575.
- /4/ W.E. Caswell, Ann. Phys. (NY) 123 (1979) 153.
- /5/ R. Seznec and J. Zinn-Justin, J. Math. Phys. 20 (1979) 1398.
- /6/ C.M. Bender and T.T. Wu, Phys. Rev. 189 (1969) 1231.
- /7/ C.K. Au, G.W. Rogers and Y. Aharonov, Phys. Lett. A 95 (1983) 287.
- /8/ M.F. Marziani, J. Phys. A 17 (1984) 547.
- /9/ G.A. Arteca, F.M. Fernández y E.A. Castro, Folia Chim. Theor. Lat. 10 (1982) 153.
- /10/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Math. Phys. 25 (1984) 2377.
- /11/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, "Summation of Strongly Divergent Perturbation Series", J. Math. Phys. (~~25~~). 25(1984)3492
- /12/ F.M. Fernández, G.A. Arteca, S.A. Maluendes and E.A. Castro, Phys. Lett. A 103 (1984) 19.
- /13/ K. Banerjee, Proc. R. Soc. London Ser. A 364 (1978) 265.
- /14/ E.M. Harrell, Commun. Math. Phys. 75 (1980) 239.
- /15/ F.T. Hioe, D. MacMillen and E. Montroll, J. Math. Phys. 17 (1976) 1320.
- /16/ P. Pascual, An. Fís. 75 (1979) 77.
- /17/ I.K. Dmitrieva and G.I. Plindov, Phys. Lett. A 79 (1980) 47.
- /18/ I.K. Dmitrieva and G.I. Plindov, Phys. Scr. 22 (1980) 386.

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XVI)

Tabla 16.1

Secuencias convergentes $S_N(k_N^I, 1)$ para el estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico, obtenidas mediante el MF.

N	$S_N(k_N^I, 1)$ a)	$S_N(k_N^I, 1)$ b)	$S_N(k_N^I, 1)$ c)	$S_N(k_N^I, 1)$ d)
1	1,28780			
2	1,29185	1,062210554		
3	1,29507			
4	1,29705	1,060313985		
5	1,29836			
6	1,29929	1,060324170		
7	1,29998			
8		1,060333114		
9		1,060334450	1,060360734	
10		1,060335690		
11		1,060336848	1,060362090	
12		1,060337896		
13		1,060338836	1,060362197	
14		1,060339676		
15		1,060340426	1,060362165	
16		1,060341098		
17		1,060341700	1,060362143	
18		1,060342243	1,060362108	
19		1,060342734	1,060362136	
20		1,060343179	1,060362134	1,060362095
21		1,060343584	1,060362132	
22		1,060343955	1,060362130	1,060362090
23		1,060344294	1,060362129	
24		1,060344606	1,060362127	1,060362089

a) Secuencia lineal k_N^I-N, A_I .

b) Secuencia lineal k_N^I-N, B_I .

c) Secuencia lineal k_N^I-N, C_I .

d) Secuencia lineal k_N^I-N, D_I .

Tabla 16.2

Secuencias convergentes $S_N(k_N^S, 1)$ para el estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico.

N	$S_N(k_N^S, 1)$ a)	$S_N(k_N^S, 1)$ b)	$S_N(k_N^S, 1)$ c)
1	1,081687177		
3	1,060811607		
5	1,060321330		
6	1,060313826	1,060333510	
7	1,060314156		
8	1,060315655	1,060356803	
9	1,060317570		
10	1,060319528	1,060361337	
11	1,060321379		
12	1,060323073	1,060362084	
13	1,060324600		
14	1,060325971	1,060362171	
15	1,060327198	1,060362173	1,060362158
16	1,060328299	1,060362169	
17	1,060329288	1,060362166	1,060362118
18	1,060330180	1,060362163	
19	1,060330987	1,060362160	1,060362100
20	1,060331788	1,060362158	
21	1,060332385	1,060362155	1,060362091
22	1,060332994	1,060362153	
23	1,060333552	1,060362150	1,060362083

a) Secuencia lineal k_N^S-N, A_S .

b) Secuencia lineal k_N^S-N, B_S .

c) Secuencia lineal k_N^S-N, C_S .

Tabla 16.3

Secuencias convergentes para el estado fundamental del oscilador anarmónico calculadas de acuerdo a las reglas de estabilidad.*

N	$S_N(k_N^I, 1)$ a)	N	$S_N(k_N^S, 1)$ b)
1	1,28780	1	1,081687177
2	1,062210554	3	1,060811607
4	1,060313985	5	1,060321330
6	1,060324170	6	1,060333510
8	1,060333114	8	1,060356803
9	1,060360734	10	1,060361337
11	1,060362090	12	1,060362084
13	1,060362197	14	1,060362171
15	1,060362165	15	1,060362158
17	1,060362143	17	1,060362118
18	1,060362108	19	1,060362100
19	1,060362136	21	1,060362091
20	1,060362095	23	1,060362083
22	1,060362090		
24	1,060362089		

*

Las secuencias poseen una dependencia aproximadamente lineal $k_N^{3/2-N}$.

a)

La secuencia pasa sucesivamente por las secuencias denominadas A_I , B_I , C_I y D_I , en las cuales k crece linealmente con N .

b)

La secuencia pasa sucesivamente por las secuencias denominadas A_S , B_S y C_S , en las cuales k crece linealmente con N .

Tabla 16.4

Coefficientes $\bar{E}^{(n)}$ de la serie renormalizada para el estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico.*

n	$\bar{E}^{(n)}$ a)	$\bar{E}^{(n)}$ b)
0	0,26299075623 (1)	0,24834781510 (1)
1	-0,12065160816 (1)	-0,11201371151 (1)
2	-0,23073344992 (0)	-0,20272585839 (0)
3	-0,7973954570 (-1)	-0,6475236479 (-1)
4	-0,3156580069 (-1)	-0,2316902959 (-1)
5	-0,1289080748 (-1)	-0,8346935524 (-2)
6	-0,5188328005 (-2)	-0,2871727967 (-2)
7	-0,1993422009 (-2)	-0,896253152 (-3)
8	-0,704179802 (-3)	-0,229737068 (-3)
9	-0,212621616 (-3)	-0,315338694 (-4)
10	-0,426727923 (-4)	0,131430977 (-4)
11	0,59401082 (-5)	0,150942966 (-4)
12	0,136778476 (-4)	0,925515192 (-5)
13	0,104972047 (-4)	0,448324468 (-5)
14	0,618161805 (-5)	0,182771227 (-5)
15	0,312235206 (-5)	0,61449906 (-6)
16	0,138426736 (-5)	0,14617288 (-6)
17	0,52764284 (-6)	0,71101 (-9)
18	0,1566400 (-6)	-0,274356 (-7)
19	0,1951216 (-7)	-0,219329 (-7)
20	-0,1861024 (-7)	-0,133016 (-7)
21	-0,2140450 (-7)	-0,57500 (-8)
22	-0,1524550 (-7)	-0,6854 (-8)
23	-0,9363708 (-8)	-0,2776 (-8)
24	-0,65154 (-8)	

*

- i) Entre paréntesis se indica la potencia de 10 por la que debe multiplicarse el resultado tabulado.
- ii) El número de cifras significativas de $\bar{E}^{(n)}$ se ha ajustado de acuerdo al número de cifras con el que se expresa k_N^* .

a) Calculado con $k_{24}^I = 6,9164137863$.

b) Calculado con $k_{23}^S = 6,1676637268$.

Tabla 16.5

Energía del estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico $H(1,\lambda)=p^2+x^2+\lambda x^4$, para varios valores de λ .

λ	$E(1,\lambda)$ a)	$SE_{24}(k_{24}^I, w)$ b)	$SE_{23}(k_{23}^S, w)$ c)
10^{-4}	1,0000749869	1,0000749857	1,0000749912
10^{-3}	1,0007486927	1,0007486931	1,0007486922
10^{-2}	1,0073736721	1,0073736721	1,0073736721
10^{-1}	1,0652855095	1,0652855098	1,0652855095
1	1,3923516415	1,3923516426	1,3923516412
10	2,4491740721	2,4491740728	2,4491740638
10^2	4,9994175451	4,9994175437	4,9994175130
10^3	10,6397887113	10,6397887073	10,6397886342
10^4	22,861608870	22,861608862	22,861608681

a) Resultados "exactos", obtenidos variacionalmente (ref./13/).

b) Calculado con la serie renormalizada hasta el orden 24 (utilizando la secuencia de PI, con los coeficientes dados en la Tabla 16.4).

c) Calculado con la serie renormalizada hasta el orden 23 (utilizando la secuencia de PE, con los coeficientes dados en la Tabla 16.4).

Tabla 16.6

Energía del estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico, obtenida mediante la ec.(53.9).

λ	$SE'_3(k^*, w)$ a)	$E(1, \lambda)$ b)
10^{-4}	1,0000750	1,0000750
10^{-3}	1,0007487	1,0007487
10^{-2}	1,0073736	1,0073737
10^{-1}	1,0652807	1,0652855
1	1,3923160	1,3923516
10	2,4491391	2,4491741
10^2	4,9993984	4,9994176
10^3	10,639779	10,639789
10^4	22,861605	22,861609

a) Calculado con la ec.(53.9).

b) Ref./13/, resultados truncados a 8 cifras significativas.

Tabla 16.7

Resultados para los autovalores superiores del oscilador puramente cuártico, obtenidos mediante el procedimiento del §.53.

m a)	$S_{11}(k_m^*, 1)$ b)	m	$S_{11}(k_m^*, 1)$
10	50,2562	60	518,971
20	122,6046	70	636,386
30	208,2323	80	759,502
40	303,912	90	887,834
50	407,874	100	1020,990

a)
Número cuántico.

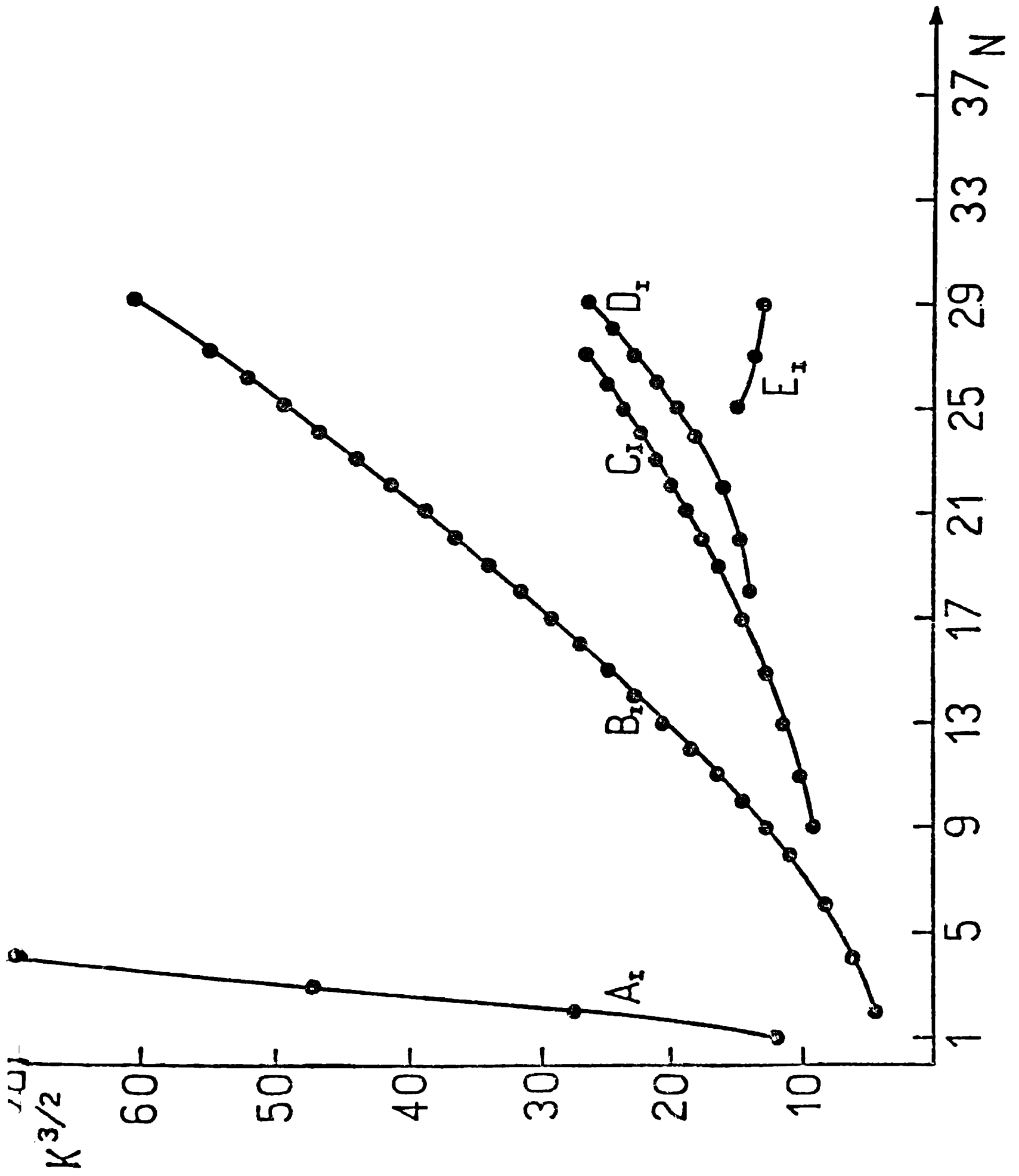
b)
Secuencia renormalizada, con k_m^* determinado con la ec.(53.19).
Los resultados se han truncado hasta retener el número de cifras significativas donde hay coincidencia con los resultados "exactos" (ref./13/).

LEYENDA PARA LA FIGURA (Capítulo XVI)

Fig.16.1: Plano $(k_N^I)^{3/2}-N$ para los puntos de inflexión de la secuencia renormalizada $S_N(k,1)$ para el estado fundamental del oscilador anarmónico cuártico.

(Con línea llena se indican secuencias en las que k_N^I crece linealmente con N).

Fig. 16.1



CAPITULO XVII

APLICACION DEL MF A LOS MODELOS CON POTENCIALES DE CONFINAMIENTO.

§.54. CONVERGENCIA DE LA SERIE RENORMALIZADA EN EL REGIMEN DE AUTOACOPPLAMIENTO INFINITO.

El estudio de los modelos mecanocuánticos con potenciales confinantes ha recibido un fuerte impulso en años recientes, debido a que resultan muy convenientes como fuente de potenciales fenomenológicos para explicar la espectroscopía de hadrones, en el contexto de la teoría de quarks. Nuestro propósito en este capítulo es utilizar el MF para aproximar numéricamente los autovalores de uno de dichos modelos y derivar expresiones analíticas precisas para los mismos. En consiguiente, no discutiremos aquí la validez o aplicabilidad del modelo porque esto cae fuera del objetivo de esta obra y porque no somos especialistas en el tema. No obstante remitimos al lector al Apéndice F para detalles adicionales sobre la importancia y utilidad de los modelos de confinamiento de partículas elementales.

El problema que aquí nos ocupa está determinado por el siguiente operador hamiltoniano (modelo con potencial lineal confinante):

$$H(Z,\lambda) = \frac{1}{2} p^2 - \frac{Z}{r} + \lambda r \quad , \quad p \doteq -i\nabla \quad , \quad (54.1)$$

cuyos autovalores pueden asociarse a las resonancias de masas correspondientes a la aniquilación de estados ligados de pares quark-antiquark. El modelo (54.1) fue discutido en relación al "charmonium" (sistema de quark-antiquark con número cuántico de encanto) por Eichten y col. /1/ en un trabajo ya clásico.

El operador $H(Z,\lambda)$ cumple una ley de dilatación, que puede deducirse inmediatamente a partir de una transformación unitaria (Teorema de Symanzik /2/), tal como lo mostramos en el Apéndice A. El resultado es la siguiente equivalencia unitaria:

$$H(Z,\lambda) = \lambda^{2/3} H(Z\lambda^{-1/3}, 1) = Z^2 H(1, \lambda Z^{-3}) \quad , \quad (54.2)$$

lo que nos proporciona la relación para sus autovalores $E(Z,\lambda)$:

$$E(Z,\lambda) = \lambda^{2/3} E(Z\lambda^{-1/3}, 1) = Z^2 E(1, \lambda Z^{-3}) \quad , \quad (54.3)$$

y los exponentes $\alpha=-1/3$ y $\beta=2/3$.

$E(1,\lambda)$ posee un desarrollo Taylor alrededor de $\lambda=0$:

$$E(1,\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n \quad , \quad (54.4)$$

que es asintótico divergente para todo λ . El comportamiento asintótico de los coeficientes RS ($E^{(n)}$) ha sido estudiado /3/ y nos revela que (54.4) es un desarrollo más fuertemente divergente que el correspondiente a la TPRS para el oscilador anarmónico (ver §.11):

$$E^{(n)} \rightarrow - \left(-\frac{3}{2}\right)^n (18/\pi e^3)^n n (n!) \quad (54.5)$$

El resultado (54.5) nos permite intuir que la aplicación de la TPRS deberá ser más dificultosa en este modelo que en el oscilador anarmónico cuártico.

Desde el punto de vista analítico existen importantes coincidencias entre los autovalores de (54.1) y los estudiados en el Cap.XVI, ya que ambos admiten un desarrollo en serie de potencias de λ^α alrededor de $1/\lambda=0$, además del desarrollo RS alrededor de $\lambda=0$ /4/. De acuerdo a lo discutido en el Cap.XV dicha característica hace a ambos modelos particularmente apropiados para tratarlos con el MF.

Las aplicaciones físicas exigen conocer los autovalores de (54.1) para valores del parámetro perturbacional $\lambda > 1$, y usualmente para valores de λ tan grandes como $\lambda=500$. Para ese rango de valores de λ resulta difícil contar con resultados variacionales sencillos ya que por un lado las autofunciones de $H(0,1)$ son de difícil manejo y, por otro lado, el espectro discreto de $H(1,0)$ no constituye un conjunto completo.

Frente a esta situación, la TPRS puede constituir una alternativa de suma importancia práctica para conocer los autovalores.

Dado que el estado fundamental de (54.1) es el que ha recibido mayor atención en la literatura, nos restringiremos al mismo en esta obra. Para aplicar la TPRS es necesario contar con los coeficientes $E^{(n)}$; Privman /5/ ha calculado con gran precisión los 20 primeros para el estado fundamental utilizando el método de la derivada logarítmica (ver §.9), y tales coeficientes son los que utilizaremos en este capítulo. Existen diversos antecedentes en la aplicación de técnicas de suma a las series perturbativas de este modelo que resumiremos a continuación: i) Los aproximantes de Padé (§.13) deben convergir /4/ y por ello han sido bastante estudiados en la literatura /6-8/. Sin embargo, los resultados numéricos muestran que utilizando hasta unos 20 coeficientes RS no es posible obtener una aproximación confiable para los autovalores cuando $\lambda > 1$. De hecho para $\lambda=1$ el acuerdo es de sólo tres cifras significativas respecto del resultado "exacto" obtenido por integración numérica de la ecuación de Schrödinger. ii) La aplicación de las series renormalizadas, a partir de la partición del hamiltoniano (54.1), tampoco permite obtener resultados aceptables para $\lambda > 1$ /9,10/. Como lo hemos discutido en el §.43 el método de Killingbeck /9/ y Austin y Killingbeck /10/ no toma en cuenta la relación de dilatación (54.3), por lo que los resultados desmejoran rápidamente a medida que λ crece. iii) Antecedentes más exitosos en la aplicación de la TPRS provienen de la utilización del método de Borel-Padé (§.14), combinado con una transformación para remover la

singularidad más cercana al origen en la transformada de Borel /11-13/. Popov y Weinberg /11-13/ han combinado el método de Borel y la TPRS hasta el orden 40, utilizando los coeficientes de la ref./14/ (que los autores no publican en forma completa). En las refs./11-13/ se estudió por primera vez la convergencia de la TPRS para $1/\lambda \rightarrow 0$; el resultado obtenido para $E(0,1)$, utilizando los 40 coeficientes perturbacionales y el cambio de variable (43.57) en la transformada de Borel, tiene un error del 5% respecto del resultado numérico exacto. Pese a lo formidable de la tarea (se deben construir secuencias $|N/N-1|$ en la variable (43.57) y luego realizar integraciones numéricas) sabemos por lo discutido en el §.43 que el procedimiento no asegura la forma correcta del desarrollo de $E(1,\lambda)$ en serie de potencias de $\lambda^{-1/3}$.

Teniendo presente estos antecedentes, mostraremos a continuación que el MF permite obtener los resultados más precisos que se presentan al día de hoy, utilizando un número relativamente pequeño de coeficientes perturbacionales. Algunos de los resultados que presentaremos en este párrafo aparecerán en nuestros artículos, utilizando tanto el formalismo del §.42 /15/, como el del §.44 /16,17/.

Aplicando las ecuaciones del §.44 al modelo que aquí nos ocupa, encontramos que el autovalor $E(1,\lambda)$ puede ser aproximado por la secuencia renormalizada SE_N :

$$E(1,\lambda) = (\lambda/w)^{2/3} \bar{E}(k,w) \approx SE_N, \quad (54.6)$$

donde:

$$SE_N = (\lambda/w)^{2/3} S_N(k,w), \quad (54.7)$$

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad (54.8)$$

Los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ de la secuencia $S_N(k,w)$ se obtienen inmediatamente a partir de la ec.(44.14), en términos de los coeficientes RS:

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{2-3j}{n-j} E^{(j)} k^{2-3j} \quad (54.9)$$

La ec.(44.7) nos permite determinar a la variable w como una raíz de la ecuación

$$\lambda k^3 (1-w)^3 - w = 0 \quad (54.10)$$

La raíz de (54.10) que satisface los lemas 44.1-44.3 es:

$$(w/\lambda k^3)^{1/3} = -2(3\lambda k^3)^{-1/2} / \text{tg}(2\chi), \quad (54.11a)$$

$$\chi = \text{arctg}(\text{tg}^{1/3}(\phi/2)) \quad (54.11b)$$

$$\phi = \text{arctg}(-2/(27\lambda k^3)^{1/2}) \quad (54.11c)$$

La ec.(54.11) nos permite obtener w en función de λ , una vez que k haya sido determinado ($k=k^*$) de acuerdo a las reglas de estabilidad.

Estamos ya en condiciones de estudiar la convergencia de la serie re-normalizada cuando $1/\lambda \rightarrow 0$. De acuerdo a lo que sabemos $S_N(k,1)$ debería convergir a $\bar{E}(k,1)=E(0,1)$ cuando $N \rightarrow \infty$. La función $E(0,1)$ es un autovalor de $H(0,1)=(p^2/2)+r$. Cuando el autovalor del operador momento angular L^2 es nulo, esto es, $l=0$, el hamiltoniano se reduce a $H(0,1)=(-1/2)(d^2/dr^2)+r$ y por lo tanto sus autovalores pueden vincularse a los ceros de la función de Airy $A_i(\xi)$. Esta satisface la ecuación diferencial:

$$-A_i''(\xi) + \xi A_i(\xi) = 0 \quad , \quad (54.12)$$

y sus ceros $A_i(\xi_0)=0$, están relacionados a los autovalores $E(0,1)$ mediante:

$$E(0,1) = \xi_0/2^{1/3} \quad (54.13)$$

Para el estado fundamental, que es el que estudiaremos aquí, encontramos /18/:

$$E(0,1) = 1,855757081... \quad (54.14)$$

Para determinar la convergencia de la sucesión $S_N(k,1)$ al valor (54.14), hemos procedido a determinar la secuencia de PI, $S_N(k_N^I,1)$, y de PE, $S_N(k_N^S,1)$, de acuerdo a las reglas de estabilidad. Nuevamente hemos utilizado el Programa VII, introduciendo los coeficientes $E^{(n)}$ de la ref./5/ con doce cifras significativas.

Una de las propiedades más interesantes del MF es que la distribución de los puntos críticos de $S_N(k,1)$ en función de N , parece ser la misma para diferentes modelos de series de potencias con radio de convergencia nulo. Esto se manifiesta comparando las figs.16.1 y 17.1. Esta última muestra el plano $(k_N^S)^3-N$ de los PE de $S_N(k,1)$ para el modelo (54.1). La estructura del plano $(k_N^I)^3-N$ es análoga, por lo que no es necesario discutirlo aquí.

Las líneas continuas que hemos indicado con A_S, B_S, C_S, D_S y E_S corresponden a rectas en un plano k_N-N . De acuerdo a lo que hemos discutido ampliamente en capítulos anteriores, sabemos que tales secuencias ($k_N \approx \delta N$) hacen que S_N converja a resultados erróneos. Para este modelo la convergencia es más lenta que la correspondiente al oscilador anarmónico cuártico, por lo que no podemos realizar una estimación tan precisa del límite de las secuencias con dependencia lineal con el orden.

Una diferencia manifiesta que surge al comparar las figs.16.1 y 17.1, es que para el modelo con confinamiento lineal aparece un número mayor de secuencias del tipo antes mencionado para el mismo número N . Este hecho parece estar ligado a la mayor divergencia de la TPRS, y como regla general la serie perturbacional resulta más difícil de sumar con el MF cuanto mayor sea el número de secuencias en el plano $k^{-1/\alpha}-N$.

La fig.17.1 muestra asimismo una línea que hemos indicado con F que posee pendiente negativa. Esta dependencia es poco razonable y probablemente es debida a inestabilidades numéricas atribuibles a la falta de precisión en los coeficientes de entrada. Para evitar posibles errores hemos truncado nuestros cálculos hasta el valor de N para el cual aparece una dependencia con las características antes mencionadas. En la fig.17.1 esto corresponde a N=13.

El estudio del plano $(k_N^S)^3 - N$ nos revela asimismo que la pendiente de las rectas $k_N^S \approx \delta N$ es menor a medida que aparecen nuevas secuencias. Este hecho parece indicar que las secuencias tienden a acomodarse en una recta $(k_N^S)^3 \approx \delta N$, que según la ec.(49.37) es lo que cabe esperar para obtener convergencia usando el MF para este modelo.

La Tabla 17.1 nos muestra las secuencias $S_N(k_N^S, 1)$ y $S_N(k_N^I, 1)$ obtenidas por aplicación de las reglas de estabilidad a los múltiples puntos críticos de $S_N(k, 1)$. En coincidencia con lo comentado más arriba, las reglas de estabilidad nos permiten construir una secuencia que interseca sucesivamente las secuencias con dependencia lineal $k-N$. Los resultados de la Tabla 17.1 revelan claramente la lentitud de la convergencia para este modelo y señalan la necesidad de utilizar un número mayor de correcciones perturbacionales para obtener una aproximación mejor. Pese a dicha lentitud podemos realizar la siguiente estimación utilizando la TPRS hasta el orden 13 con ambas secuencias:

$$S_N(k_N^*, 1) \approx 1,86 \pm 0,03 \quad , \quad (54.15)$$

lo que representa, aproximadamente, un error relativo de 1,6% respecto del resultado exacto (54.14). Este es el mejor resultado que se haya obtenido hasta el presente al describir en forma perturbativa el límite $1/\lambda \rightarrow 0$.

La Tabla 17.1 muestra dos secuencias adicionales construidas con $S_N(k_N^S, 1)$ y $S_N(k_N^I, 1)$, respectivamente, de modo de tener una mejor correlación lineal de la forma $(k_N^*)^3 \approx \delta N$. Esta nueva secuencia se indica en la fig.17.1 con la recta a. La dependencia de k con el orden, siguiendo la recta a, se puede estimar mediante un análisis de regresión:

$$(k_N^S)^3 = (0,4 \pm 0,1)N + (1,3 \pm 0,9) \quad , \quad r=0,998 \quad (54.16)$$

Mediante la discusión realizada, podemos ahora aproximar el autovalor $\bar{E}(1, \lambda)$ utilizando $S_{13}(k_{13}^S, 1)$. El valor del parámetro óptimo k para la secuencia de extremos de la Tabla 17.1 es:

$$k_N^S = 1,8307185377 \quad , \quad (54.17)$$

y con él se han calculado los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ que se ven en la Tabla 17.2. Dichos coeficientes permiten entender porqué la convergencia es tan lenta en este modelo, ya que todos ellos son prácticamente iguales en módulo en lugar de disminuir con el aumento de N.

Utilizando los coeficientes de la Tabla 17.2 y las ecs.(54.7), (54.7) y (54.11) hemos calculado SE_{13} , nuestra aproximación al autovalor $E(1,\lambda)$, en un amplio rango de valores de λ . Los resultados se ven en la Tabla 17.3 comparados con los exactos obtenidos por integración numérica de la ecuación de Schrödinger /1/. Los valores aparentemente exóticos de λ que se ven en la Tabla 17.3 corresponden a valores de $(4/\lambda)^{1/3}$ desde 0,2 a 1,8 variando de a 0,2. Para completar la comparación hemos agregado los resultados obtenidos mediante aplicación del método de Borel-Padé (con la transformación (43.57)) utilizando la TPRS de orden 31 /12/. Pese a su enorme sencillez el MF es tan preciso como el de Borel-Padé en el rango de valores de λ pequeño e intermedio, y mejor que éste para valores grandes de λ . Los resultados que se ven en la Tabla 17.2 son los más precisos obtenidos hasta hoy utilizando la TPRS hasta el orden indicado.

§.55. RESULTADOS COMPLEMENTARIOS PARA LOS AUTOVALORES DE MODELOS CON POTENCIALES DE CONFINAMIENTO.

En este párrafo estudiaremos algunas cuestiones misceláneas sobre aplicaciones del MF a los modelos con potenciales de confinamiento.

Resulta de interés discutir, al igual que como lo hicimos en párrafos anteriores, el efecto del agregado del coeficiente $e^{(0)}=E(0,1)$ en los resultados obtenidos por aplicación del MF. El procedimiento que se debe seguir para incorporar dicho coeficiente ya fue explicado en el §.50, por lo que aquí no abundaremos en detalles.

El autovalor $E(1,\lambda)$ puede ser aproximado por medio de la secuencia:

$$E(1,\lambda) \approx SE'_N = (\lambda/w)^{2/3} S'_N(k,w) \quad , \quad (55.1a)$$

donde:

$$S'_N(k,w) = \sum_{n=0}^{N-1} \bar{E}^{(n)} w^n + \bar{E}'(N) w^N \quad , \quad (55.1b)$$

$$\bar{E}'(N) = e^{(0)} - \sum_{n=0}^{N-1} \bar{E}^{(n)} \quad (55.1c)$$

Las magnitudes $\bar{E}^{(n)}$, $n \leq N-1$, y w están dadas por las ecs.(54.9) y (54.11), respectivamente. El valor de k óptimo puede fijarse utilizando un criterio de convergencia, por ejemplo:

$$\left(\frac{\partial SE'_N}{\partial k} \right)_\lambda (k=k_N^*) = 0 \quad (55.2)$$

Para demostrar las ventajas que reporta la introducción de $e^{(0)}$ en la secuencia renormalizada SE'_N , hemos trabajado con la mitad de los coeficientes perturbacionales $E^{(n)}$ usados previamente ($n \leq 6$). Nuestros resultados numéricos muestran (ec.(55.2)):

$$k_N^* = 1,5465 \quad (55.3)$$

Con k_N^* y las ecs.(55.1) hemos calculado los resultados que se ven la última columna de la Tabla 17.3. Tal como surge de la comparación de SE'_7 con los resultados exactos para $E(1,\lambda)$, el acuerdo es excelente a pesar del menor número de términos utilizados.

Si bien todas las aplicaciones numéricas que hemos estudiado en este

capítulo se relacionan sólo con el modelo de confinamiento lineal, el mismo puede considerarse como perteneciente a una serie de modelos definidos a través del operador de Hamilton siguiente:

$$H = \frac{1}{2} p^2 - \frac{Z}{r} f(r) \quad , \quad (55.4)$$

y que han sido ampliamente estudiados. El modelo de confinamiento lineal corresponde a:

$$f(r) = 1 - \frac{\lambda}{Z} r^2 \quad (55.5)$$

Otro modelo de confinamiento, que ha sido recientemente investigado, está definido por:

$$f(r) = 1 - \frac{\lambda}{Z} r^3 \quad (55.6)$$

y es denominado "coulómbico-armónico". El mayor interés en el modelo (55.6) radica en que posee algunas características similares al efecto Zeeman para el átomo de hidrógeno, pero configura un problema mucho más simple /19/. Para dicho modelo se han calculado un gran número de coeficientes RS correspondientes al estado fundamental /5/ y se ha determinado también su comportamiento asintótico /19/:

$$E^{(n)} \rightarrow - \frac{1}{512\pi^3} \left(\frac{64}{\pi^2} \right)^n (2n+1)! \quad , \quad Z=1 \quad (55.7)$$

El hamiltoniano correspondiente al modelo (55.6) satisface una relación de dilatación conocida /19/ y sus autovalores poseen un desarrollo en serie de potencias de $\lambda^{-1/4}$ con radio de convergencia finito no nulo /19/. Esta situación nos permite aplicar sin inconvenientes el MF en forma totalmente análoga a como lo hicimos en el §.54. Esta investigación se está llevando a cabo actualmente en nuestro laboratorio y por lo tanto no presentaremos aquí ningún resultado; sin embargo en virtud de nuestra experiencia debemos esperar que, debido al carácter más fuerte de la divergencia (ec.(55.7), la serie renormalizada converja más lentamente para el modelo (55.6) que para el modelo (55.5).

Existen otros potenciales de confinamiento estudiados en la bibliografía y que podrían tratarse con el MF; entre estos podemos nombrar el dado por:

$$f(r) = 1 - \left(\frac{\lambda}{Z} r^2 + \frac{g}{Z} r^3 \right) \quad , \quad 0 < \lambda, g < \infty \quad , \quad (55.8)$$

investigado por varios autores /20,21/. Cabe añadir que en relación a la aplicación de la TPRS para los modelos (55.6) y (55.8), sólo se ha estudiado hasta el momento la convergencia a través de los métodos de Padé y Borel-Padé /13/, la cual resulta muy lenta. ⊗

Otra serie de modelos pueden ser incluidos en la familia definida

⊗ Some new results about Hamiltonians with functions $f(r)$ similar to (55.8) have been presented by Bessis et al. /21a/ and Ursay /21b/.

por (55.4) (si bien no son estrictamente de confinamiento): los potenciales de apantallamiento coulombico.

El más difundido de tales potenciales es el de Yukawa o de Debye-Hückel:

$$f(r) = e^{-\lambda r} \quad , \quad (55.9)$$

que es de gran interés en física atómica y nuclear, teoría del estado sólido y física y fisicoquímica de plasmas. Desde el punto de vista de la TPRS, se han realizado diversas investigaciones que involucran al modelo (55.9). Para el estado fundamental /5,22/ y diversos estados excitados /23/ se han determinado un gran número de coeficientes perturbacionales; el desarrollo RS en potencias de λ para los autovalores es divergente, siendo el comportamiento asintótico de los coeficientes /3/:

$$E^{(n)} \rightarrow - (-2 \ln n)^{-n} n! \quad (55.10)$$

El comportamiento que se ve en la ec.(55.10) es diferente a todos los que hemos estudiado previamente en esta obra, y define una serie más lentamente divergente que la correspondiente al modelo de confinamiento lineal (ec.(54.5)). Debido a la información disponible, el MF es fácilmente aplicable a este sistema y nuestra experiencia nos permite conjeturar que los resultados han de ser de mejor calidad que los derivados en el §.54. El punto de partida para aplicar el MF es la equivalencia unitaria que satisface el hamiltoniano:

$$H(Z, \lambda) = p^2 - \frac{Z}{r} e^{-\lambda r} = \lambda^2 H(Z\lambda^{-1}, 1) \quad , \quad (55.11)$$

según se deduce fácilmente de introducir una dilatación en las coordenadas (ver Apéndice A).

Cabe comentar que el parámetro de mayor interés para los sistemas coulombicos apantallados no es el autovalor en sí mismo, sino el valor λ_c para el cual $E(\lambda_c)=0$ /24,25/.

Otros modelos coulombicos apantallados que podrían tratarse mediante el MF son el definido por:

$$f(r) = e^{-\lambda r} \cos \lambda r \quad , \quad (55.12)$$

de utilidad para describir las propiedades electrónicas de metales y semiconductores con impurezas iónicas /26/, y el potencial de Thomas-Fermi /27/:

$$f(x)^{3/2} = x^{1/2} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \quad , \quad x = 2 \left(\frac{4}{3\pi} \right)^{2/3} Z^{1/3} r \quad , \quad (55.13)$$

que constituye la teoría más simple de un funcional de la densidad.

REFERENCIAS DEL CAPITULO XVII.

- /1/ E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, K.D. Lane and T.-M. Yan, Phys. Rev. D 17 (1978) 3090, y referencias citadas allí.
- /2/ B. Simon, Ann. Phys. (NY) 58 (1970) 76.
- /3/ V.M. Vainberg, V.L. Eletskii and V.S. Popov, Sov. Phys.-JETP 54 (1981) 833.
- /4/ S. Graffi, V. Grecchi and M. Maioli, J. Math. Phys. 20 (1979) 685.
- /5/ V. Privman, Phys. Rev. A 22 (1980) 1833.
- /6/ E.J. Austin, Mol. Phys. 40 (1980) 893.
- /7/ E.J. Austin, Mol. Phys. 42 (1981) 1391.
- /8/ J.R. Silva and S. Canuto, Phys. Lett. A 88 (1982) 282.
- /9/ J. Killingbeck, J. Phys. A 14 (1981) 1005.
- /10/ E.J. Austin and J. Killingbeck, J. Phys. A 15 (1982) L 443.
- /11/ V.M. Vainberg and V.S. Popov, Sov.Phys. Dokl. 27 (1982) 386.
- /12/ V.S. Popov and V.M. Weinberg, Phys. Lett. A 90 (1982) 107.
- /13/ V.S. Popov and V.M. Weinberg, "Higher Orders of the Perturbation Theory and Summation of Perturbational Series in Quantum Mechanics", Preprint ITEP-101, Moscow, 1982.
- /14/ V.L. Eletsky, V.S. Popov and V.M. Weinberg, Phys. Lett. A 84 (1981) 235.
- /15/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, "A Method for Summation of Perturbation Series", Physica A (~~en prensa~~). 128 (1984) 589.
- /16/ F.M. Fernández, G.A. Arteca, S.A. Maluendes and E.A. Castro, Phys. Lett. A 103 (1984) 19.
- /17/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, "Summation of Strongly Divergent Perturbation Series", J. Math. Phys. (~~en prensa~~). 25 (1984) 3492
- /18/ M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1970.
- /19/ J.E. Avron, Ann. Phys. (NY) 131 (1981) 73.
- /20/ D.P. Datta and S. Mukherjee, J. Phys. A 13 (1980) L 221.
- /21/ J. Killingbeck, J. Phys. A 13 (1980) L 393. ⊕
- /22/ V. Privman, Phys. Lett. A 81 (1981) 326.
- /23/ A.V. Sergeev and A.I. Sherstyuk, Sov. Phys.-JETP 55 (1982) 625.
- /24/ F. Rogers, H. Graboske and D. Harwood, Phys. Rev. A 1 (1970) 1577.
- /25/ G. Iafrate, Phys. Rev. A 8 (1973) 1138.
- /26/ P.P. Ray and A. Ray, Phys. Lett. A 78 (1980) 443, y referencias citadas allí.
- /27/ S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer Verlag, International Student Edition, Berlin, 1979.
- ⊕ /21a) D. Bessis, E.R. Urrscay and C.R. Handy, J Phys. A 20 (1987) 419
- /21b) E.R. Urrscay, "Rayleigh-Schrödinger Perturbation Expansion for a Hydrogen Atom in a Polynomial Perturbation", Preprint, Waterloo (Canada). 1987).

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XVII)

Tabla 17.1

Secuencias convergentes $S_N(k_N^S, 1)$ y $S_N(k_N^I, 1)$ calculadas mediante el MF, para el estado fundamental del modelo con potencial de confinamiento lineal.

N	$S_N(k_N^S, 1)$ ^{a)}	N	$S_N^-(k_N^I, 1)$ ^{a)}	N ^{b)}	$S_N(k_N^S, 1)$ ^{c)}	N ^{b)}	$S_N(k_N^I, 1)$ ^{c)}
1	1,9656	3	1,9086	1(A)	1,9656	3(B)	1,9086
2	1,7858	4	1,8499	2(A)	1,7858	4(C)	1,8499
3	1,9008	6	1,8324	3(B)	1,9008	7(D)	1,8762
5	1,8210	7	1,8762	7(D)	1,8722	11(F)	1,8793
6	1,8621	9	1,8735	10(E)	1,8571		
7	1,8722	10	1,8397	13(E)	1,8582		
9	1,8329	11	1,8793				
10	1,8571	13	1,8820				
12	1,8926						
13	1,8582						

a) Secuencia construída mediante la aplicación de las reglas de estabilidad.

b) Entre paréntesis se indica el tipo de secuencia con dependencia lineal k-N a la que pertenece el punto crítico.

c) Secuencia construída buscando rectas en el plano $(k_N^*)^3-N$.

Tabla 17.2

Coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ de la serie renormalizada para el estado fundamental del modelo con potencial de confinamiento lineal.

n	$\bar{E}^{(n)} \text{ a)}$	n	$\bar{E}^{(n)}$
0	-1,675765182	8	0,0262887052
1	4,170880783	9	-0,0464438718
2	-0,989952787	10	-0,0216668149
3	0,383136662	11	0,0425081413
4	0,052040299	12	0,0178521079
5	-0,0989791961	13	-0,0264276612
6	-0,033934645		
7	0,0586310572		

a)
Calculados con $k_{13}^S = 1,8307185377$ Los resultados tabulados se han truncado hasta retener la última cifra que permanece inalterada por una variación de 10^{-10} en k_{13}^S .

Tabla 17.3

Energía del estado fundamental del modelo con potencial de confinamiento lineal para distintos valores de λ .

λ	$SE_{13}(k_{13}^S, w)^{a)}$	$E 16/15 ^{b)}$	$E(1, \lambda)^{c)}$	$SE_7^{d)}$
500,000000000	108,46643	106,9	108,36580	108,35487
62,500000000	24,87047	24,792	24,85630	24,85268
18,518518519	10,009187		10,005967	10,004464
7,812500000	5,014643		5,013781	5,013090
4,000000000	2,796003	2,79573	2,795754	2,795423
2,314814815	1,640123		1,640050	1,639885
1,457725948	0,972105		0,972086	0,972003
0,976562500	0,556771	0,556764	0,556767	0,556724
0,685871056	0,284113		0,284115	0,284093

a)

Secuencia renormalizada obtenida utilizando los coeficientes tabulados en la Tabla 17.2 (ver §.54).

b)

Método de Borel-Padé con la TPRS hasta el orden 31 (utilizando además una transformación para remover la singularidad más cercana al origen) (ref./12/).

c)

Resultado "exacto" obtenido por integración numérica de la ecuación de Schrödinger (ref./1/).

d)

Secuencia renormalizada obtenida utilizando la TPRS hasta el orden sexto, con el agregado del coeficiente $e^{(0)}$ (ver §.55).

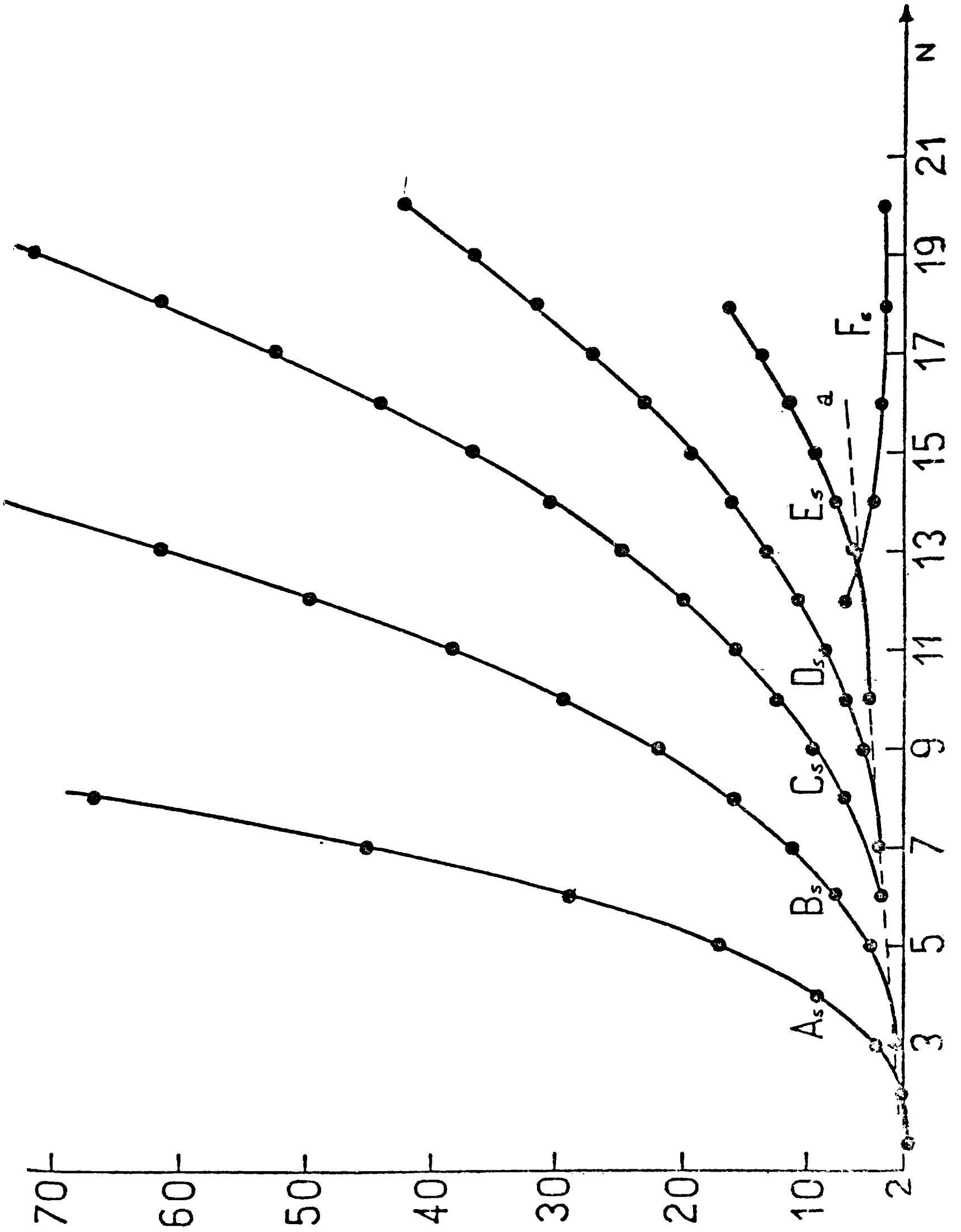
Para estos cálculos se utilizó $k_7^* = 1,5465$.

LEYENDA PARA LA FIGURA (Capítulo XVII)

Fig.17.1: Plano $(k_N^S)^3-N$ para los puntos estacionarios de la secuencia renormalizada $S_N(k,1)$ para el estado fundamental del modelo con potencial de confinamiento lineal.

(Con línea llena se indican secuencias en las cuales k_N^S crece linealmente con N).

Fig. 17.1



CAPITULO XVIII

APLICACION DEL MF AL EFECTO ZEEMAN EN EL ATOMO DE HIDROGENO.

§.56. CONVERGENCIA DE LA SERIE RENORMALIZADA EN EL REGIMEN DE LANDAU.

El efecto Zeeman sobre el átomo de hidrógeno (EZH) es un problema de enorme interés en diversos campos de la física y la química, y ha sido exhaustivamente estudiado en el Cap.IX de esta obra. Por otro lado, en el Cap.X hemos aplicado el MFV (desarrollado en el Cap.V) para investigar algunas propiedades del EZH, obteniendo excelentes resultados mediante el aprovechamiento de las propiedades asintóticas de los autovalores del hamiltoniano que describe al modelo.

El objetivo de este capítulo es aplicar el MF para aproximar los autovalores del EZH utilizando toda la información disponible a través de la TPRS alrededor del límite de campo magnético nulo. Los coeficientes de la TPRS han sido calculados por diversos autores /1-3/ para los primeros estados; en las Tablas 9.1 y 9.2 se presentan nuestros propios resultados para 5 de los primeros estados y serán éstos los valores que utilizaremos en el resto de este capítulo. Cabe comentar que algunos resultados de la aplicación del MF aparecen en nuestros artículos /3,4/ utilizando los formalismos de los §§.44 y 42 respectivamente.

La parte del hamiltoniano del EZH que es relevante para nuestra discusión es (comparar con (31.1)):

$$H(Z,\lambda) = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{Z}{r} + \frac{1}{8} \lambda^2 (x^2 + y^2), \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad (56.1)$$

donde hemos utilizado las unidades atómicas apropiadas para describir este sistema (Apéndice G).

Para aplicar el MF necesitamos introducir una relación de dilatación para los autovalores $E(Z,\lambda)$ de (56.1). La misma puede extraerse de las relaciones de dilatación que satisface el hamiltoniano, y de hecho en el Apéndice G encontramos la siguiente equivalencia unitaria:

$$H(Z,\lambda) = \lambda H(Z\lambda^{-1/2}, 1) \quad (56.2)$$

De acuerdo a la formulación del MF (§.44), la relación de dilatación para la función que se desea estudiar debe escribirse en términos de aquel parámetro en el cual la función es desarrollable en serie de potencias; en el caso presente el desarrollo está dado en potencias de λ^2 (ec. (32.10)), ya que el hamiltoniano $H(Z,\lambda)$ depende del campo a través de λ^2 .

$$E(Z, \gamma) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \gamma^n, \quad \gamma = \lambda^2 \quad (56.3)$$

De este modo, utilizando la equivalencia (56.2), la relación de dilatación para los autovalores $E(Z, \gamma)$ toma la siguiente forma:

$$E(Z, \gamma) = \gamma^{1/2} E(Z\gamma^{-1/4}, 1), \quad (56.4)$$

y nos proporciona los exponentes $\alpha = -1/4$ y $\beta = 1/2$.

El EZAH presenta una diferencia fundamental respecto de los sistemas que hemos estudiado en los capítulos precedentes y que debe tomarse en cuenta antes de aplicar el MF: $E(Z, \gamma)$ no es desarrollable en serie de potencias alrededor de $Z=0$. Esto significa que $E(Z, \gamma)$ satisface (56.4) pero no presenta una serie de potencias de $\gamma^{-1/4}$, y ello es debido a los términos logarítmicos en el campo que son característicos de la energía de unión (Apéndice H). Debido a esta diferencia podemos predecir que los resultados obtenidos mediante el MF no serán para este modelo de la misma calidad que los derivados para los osciladores anarmónicos y sistemas con potenciales confinantes. En cierto modo puede decirse que, cualitativamente, valen para el EZAH las conclusiones que encontramos en el §.51.

Una conjetura razonable que sin embargo podemos sostener es que, para los estados muy excitados del EZAH, el MF debería dar mejores resultados ya que, como lo demostramos en el §.31, los autovalores en el límite semiclásico poseen un desarrollo en $\gamma^{-1/4}$.

Utilizando los exponentes antes encontrados y las ecuaciones del §.44, los autovalores $E(Z, \gamma)$ pueden ser aproximados mediante las secuencias SE_N según las siguientes relaciones:

$$E(1, \gamma) = (\gamma/w)^{1/2} \bar{E}(k, w) \approx SE_N, \quad (56.5)$$

$$SE_N = (\gamma/w)^{1/2} S_N(k, w), \quad (56.6)$$

$$\bar{E}(k, w) \approx S_N(k, w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n, \quad (56.7)$$

donde la nueva variable w queda determinada por una raíz de la ecuación:

$$k^4 \gamma (1-w)^4 - w = 0. \quad (56.8)$$

Los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ están relacionados con los $E^{(n)}$ de la TPRS a través de la ec.(44.14), que en este caso es:

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{2-4j}{n-j} E^{(j)} k^{2-4j} \quad (56.9)$$

Debemos notar aquí que la transformación (56.8) difiere de las utilizadas hasta el momento para sumar el desarrollo RS del EZAH /5,6/, tanto

de las basadas en una transformación dependiente del orden /5/ construida sobre la base de las propiedades asintóticas de la energía de unión /7,8/, como de la transformada de Borel /5/ y de la generalización de la transformación de Euler /6/. El MF introduce a través de (56.8) una transformación dependiente del orden, ya que k depende de N al aplicar las reglas de estabilidad (§.44) a la secuencia $S_N(k,1)$. Sin embargo nuestra transformación dependiente del orden requiere conocer mucha menos información de tipo analítico sobre $E(Z,\gamma)$, respecto de la transformación utilizada por Le Guillou y Zinn-Justin /5/, pues sólo hemos invocado la propiedad (56.4).

Todos los cálculos pueden llevarse a cabo en forma analítica para este modelo ya que la raíz real de (56.8) que satisface los lemas 44.1-44.3 puede determinarse en forma cerrada. El resultado que se encuentra es el siguiente /9/:

$$(w/\gamma k^4)^{1/4} = \frac{1}{2} \left\{ \left(4\left(\frac{1}{4}\psi^2 + \frac{1}{\gamma k^4}\right)^{1/2} - \psi \right)^{1/2} - \psi^{1/2} \right\}, \quad (56.10a)$$

$$\psi = -4(3\gamma k^4)^{-1/2} \{ \text{tg}(2\chi) \}^{-1}, \quad (56.10b)$$

$$\chi = \text{arctg} \{ \text{tg}^{1/3}(\phi/2) \}, \quad (56.10c)$$

$$\phi = \text{arctg} \left\{ -\frac{16}{3} \left(\frac{\gamma k^4}{3} \right)^{1/3} \right\}. \quad (56.10d)$$

Para aproximar un autovalor $E(Z,\gamma)$ por medio de la secuencia SE_N , debemos determinar el k óptimo, $k=k^*$, mediante la investigación de los puntos críticos de la secuencia renormalizada $S_N(k,1)$. De acuerdo a la ec.(56.7), $S_N(k,1)$ debería aproximarse a $\bar{E}(k,1)=E(0,1)$ cuando $N \rightarrow \infty$, siendo (ver Apéndice G):

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma^{-1/2} E(1,\gamma) = E(0,1) = \frac{M+1}{2}, \quad (56.11)$$

donde $M=0,1,2,\dots$ es el número cuántico que numera los estados del oscilador isotrópico bidimensional a que tiende el sistema, en el plano perpendicular al campo magnético aplicado, cuando el campo es infinitamente intenso (o equivalentemente $Z \rightarrow 0$). La ec.(56.11) describe entonces la parte del espectro de Landau correspondiente a la eliminación del continuo y de los términos paramagnéticos (Apéndice G).

Dado que la correlación entre los estados en el régimen de Coulomb ($\gamma \rightarrow 0$) y el régimen de Landau ($1/\gamma \rightarrow 0$) es conocida /10,11/, estamos en condiciones de verificar si, dado un estado cuántico cualquiera, el MF permite sumar la TPRS en el límite $1/\gamma \rightarrow 0$.

La aplicación de métodos de suma a la TPRS del EZAH ha estado principalmente restringida al estado fundamental, que corresponde al estado coulombico $1s$ si $\gamma \rightarrow 0$ /2,4-6/. En esta obra estudiaremos los estados $1s$, $2p_{\pm 1}$ y $2s$. Los estados $1s$ y $2p_{\pm 1}$ se correlacionan, cuando $Z=0$, con el

estado fundamental de Landau (Apéndice G) y poseen como característica especial un aumento constante de la energía de unión con γ (Apéndice H). Dichos estados, denominados "fuertemente ligados" (tight bound), están asociados a los siguientes valores de M:

$$M(1s) = 0, \quad M(2p_{-1}) = 1 \quad (56.12)$$

El estado 2s se correlaciona con el tercer estado de Landau y el $2p_{+1}$ con el siguiente; los correspondientes valores de M son:

$$M(2p_{+1}) = 1, \quad M(2s) = 0 \quad (56.13)$$

El estado 2s presenta características bien diferentes respecto de los estados 1s y $2p_{+1}$, ya que su energía de unión presenta un máximo para un valor finito de γ [12]. Esta propiedad redundante en una dificultad adicional cuando se pretende sumar la serie RS para este estado.

De acuerdo a nuestras posibilidades de cálculo hemos determinado los puntos críticos de $S_N(k,1)$ para los 3 estados, desde $N=0$ hasta $N=20$, 15 y 13 para 1s, $2p_{+1}$ y 2s respectivamente. Para determinar la secuencia convergente hemos analizado el plano $(k_N)^{4-N}$ para cada uno de los casos, habida cuenta de la ec.(49.37) y de que $\alpha = -1/4$ para el EZAH. Discutiremos a continuación los resultados obtenidos mediante la aplicación del Programa VII:

i) Caso I (1s):

La estructura del plano $(k_N^*)^{4-N}$ para el EZAH es similar a la encontrada para otros planos $k_N^{-1/\alpha-N}$. La fig.18.1 muestra el resultado obtenido para $(k_N^I)^{4-N}$ mediante el empleo de la TPRS hasta el orden 20 (Tabla.9.1); el resultado es similar para el plano $(k_N^S)^{4-N}$. Como era de esperar aparecen un gran número de PI, que originan secuencias con dependencia lineal $k_N^I \approx \delta N$, indicadas en la figura con A_I, B_I, C_I, D_I y E_I . Tales secuencias no convergen al resultado exacto, según fue discutido previamente; nos ha sido imposible determinar en forma precisa el valor al que convergen, debido a la lentitud con que lo hacen. Las secuencias de PE parecen ser aún más lentas, por lo que sólo discutiremos de aquí en más a los PI.

De acuerdo a la relación de dilatación (56.4) el límite correcto debería alcanzarse a través de dependencias con el orden de la forma $(k_N^I)^{4 \sim \delta N}$. La fig.18.1 nos muestra que para obtener una dependencia lineal entre $(k_N^I)^4$ y N es necesario generar una sucesión que involucre PI pertenecientes a diferentes secuencias del tipo $k_N \approx \delta N$. En los modelos estudiados en los Caps.XVI y XVII la aplicación de las reglas de estabilidad conducía en forma natural a secuencias con las características requeridas. Este no parece ser el caso al estudiar el EZAH, al menos con el número de coeficientes RS considerados. En otras palabras, la elección (para cada N) del PI con menor derivada primera no conduce a una recta en el plano $(k_N^I)^{4-N}$.

Para eliminar la dificultad comentada más arriba, hemos procedido en

forma inversa, esto es, buscamos una recta en el plano $(k_N^I)^4 - N$ y a partir de ella generamos la secuencia $S_N(k_N^I, 1)$. Para encontrar la recta apropiada hemos procedido del siguiente modo: a) mediante una recta dividimos el plano $(k_N^I)^4 - N$ en dos regiones tal que en una de ellas no aparezcan PI. Esta recta se ha construido con el primer PI de las secuencias B_I y C_I , y se encuentra indicado como "a" en la fig.18.1. Dicha recta es aproximadamente la envolvente de los primeros valores de las secuencias $A_I - E_I$. b) Buscamos una segunda recta aproximadamente paralela a la primera tal que pase por la mayor cantidad de PI pertenecientes a diferentes secuencias. Dicha recta se encuentra indicada en la fig.18.1 como "b", y contiene un PI de cada secuencia del tipo $k_N \approx \delta N$, correspondientes a $N=4, 8, 12, 16$.

La dependencia lineal puede ser evaluada mediante un análisis de regresión, obteniendo el siguiente resultado:

$$(k_N^I)^4 = (0,8 \pm 0,3) N + (13 \pm 4) , \quad r=0,9991 \quad (56.14)$$

Las secuencias $S_N(k_N^I, 1)$ que se obtienen siguiendo las rectas "a" y "b" (ec.(56.14)) se ven en la Tabla 18.1. Los resultados obtenidos confirman la importancia de las dependencias lineales en el plano $(k_N^I)^{-1/\alpha} - N$, ya que en este caso, pese a la lentitud de la convergencia de la secuencia $S_N(k, 1)$, podemos hacer la estimación:

$$S_N(k_N^I, 1) \approx 0,50N + 0,05 , \quad N \gg 1 , \quad (56.15)$$

que presenta un acuerdo muy razonable con $M=0$ en la ec.(56.11). Puede notarse que la oscilación es suficientemente grande como para que los resultados no sean de una gran precisión en el rango de valores de campo muy intenso, pero sin embargo debe tenerse presente que se han utilizado sólo 16 coeficientes de la TPRS para lograr estimar la correlación del estado $1s$ (a campo nulo) con un estado de Landau (a campo infinito).

Para probar la bondad de la aproximación para el menor autovalor en todo el rango de valores de λ , hemos utilizado el valor de k^* que se obtiene con el último PI de la recta "b" en la fig.18.1:

$$k_{16}^I = 2,24699417869 \quad (56.16)$$

Los resultados obtenidos para los coeficientes $E^{(n)}$ de la serie renormalizada hasta el orden $N=16$ se ven en la Tabla 18.2. Mediante dichos coeficientes y las ecs.(56.6), (56.7), (56.10) y (56.16) podemos expresar nuestra aproximación a los autovalores en términos de SE_{16} . Los resultados se comparan en la Tabla 18.3 con los determinados por Wunner y col. /12,13/ que pueden considerarse exactos para nuestros fines. Dichos resultados han sido obtenidos en forma variacional, utilizando tanto orbitales coulómicos como de Landau (ver §.31 para mayor información).

Nuestra aproximación al estado fundamental del EZAH es perfectamente comparable con los resultados obtenidos por Silverman /6/ mediante la aplicación de la transformación de Euler a la TPRS de orden 35 /2/. De hecho, en el rango de valores de campo $10 \lesssim \lambda \lesssim 100$ nuestros resultados son más precisos. Esto muestra claramente las ventajas del MF sobre la transformación de Euler ya que es más sencillo y permite incorporar una mayor cantidad de información analítica sobre $E(1, \gamma)$.

Cabe acotar que nuestros resultados no proporcionan un buen acuerdo para la energía de unión si $\lambda \gtrsim 100$, debido a las propiedades que ya explicamos antes. En consecuencia, nuestros resultados no pueden compararse con los obtenidos por Le Guillou y Zinn-Justin /5/ para la magnitud arriba mencionada, quienes utilizaron una complicada transformación dependiente del orden.

ii) Caso II ($2p_{\pm 1}$):

La fig.18.2 muestra el plano $(k_N^I)^4 - N$ para los PI de la secuencia $S_N(k, 1)$ correspondiente al estado $2p_{\pm 1}$. Dado que las figs.18.1 y 18.2 son muy similares, sólo indicaremos las principales diferencias. El hecho que la serie RS para el estado $2p_{\pm 1}$ es más fuertemente divergente que la correspondiente al estado $1s$ (ver Tabla 9.1), se manifiesta en un mayor número de secuencias de PI con dependencia lineal $k_N^I - N$ en el primer caso. Dichas secuencias se han indicado en la fig.18.2 con las líneas llenas denominadas A_I, B_I, C_I, D_I y E_I . Para $N=15$ parece surgir una nueva secuencia indicada con F_I .

Para construir una secuencia que aproxime a $E(0, 1)$ se procede en forma análoga a como hicimos en el caso I, esto es, buscando dependencias lineales en el plano $(k_N^I)^4 - N$. En este caso hemos podido encontrar tres rectas, que se han indicado con "a", "b" y "c" en la fig.18.2. Estas contienen un PI perteneciente a cada una de las ramas con dependencia $k_N \approx \delta N$; la secuencia asociada a la recta "c" involucra 5 PI correspondientes a $N=3, 6, 9, 12$ y 15 , y nos ha permitido obtener la siguiente correlación lineal:

$$(k_N^I)^4 = (10 \pm 4) N + (222 \pm 42) \quad (56.17)$$

Los resultados obtenidos para las secuencias asociadas a las rectas "a", "b" y "c" se ven en la Tabla 18.4. La estimación que podemos realizar para la convergencia de la secuencia S_N es menos precisa que la correspondiente al estado $1s$ (ec.(56.15)), y está dada por:

$$S_N(k_N^I, 1) \approx 1,0 \pm 0,2 \quad , \quad N \gg 1 \quad (56.18)$$

Pese a la gran oscilación el acuerdo es muy aceptable, pues muestra que con sólo 15 coeficientes RS el MF permite correlacionar el estado $2p_{\pm 1}$ al límite correcto para campo infinito ($M=1$ en la ec.(56.11)).

Para obtener una aproximación a los autovalores $E(1, \gamma)$ en todo el rango de valores de λ , hemos utilizado el N máximo siguiendo la recta "c"

(N=15), que corresponde a un valor de k dado por:

$$k_{15}^I = 4,39082096726 \quad (56.19)$$

Los coeficientes de la serie renormalizada se ven en la Tabla 18.5, y los autovalores en la Tabla 18.6, comparados con los "exactos" de las refs./12,13/. Nuestros resultados perturbacionales para este estado pueden considerarse prácticamente los primeros que se obtienen, ya que sólo existe en la literatura el antecedente del empleo de la TPRS hasta el orden tercero /1,4,14/. Cabe acotar que hasta el momento tampoco se habían realizado para este estado estudios, mediante el uso exclusivo de la TPRS, para valores de λ superiores a 0,01.

Los resultados que se muestran en la Tabla 18.6 para $\lambda \leq 20,0$ son suficientemente precisos para la mayoría de las aplicaciones. Además son muy superiores en calidad a los obtenidos por Patil /14/ utilizando información correspondiente al comportamiento asintótico de la energía de unión.

iii) Caso III (2s):

Este estado resulta de mucho menor interés que los dos estados fuertemente ligados discutidos previamente, y por ende ha sido menos estudiado. Sin embargo, dado que hemos encontrado grandes dificultades en la aplicación del MF, creemos oportuno realizar algunos comentarios sobre el mismo.

La estructura del plano $(k_N^*)^{4-N}$ es similar a los que encontramos previamente, pero para el estado 2s la oscilación es mucho mayor y por lo tanto no puede realizarse ninguna estimación razonable de la convergencia para $1/\gamma \rightarrow 0$, utilizando la TPRS de orden 13. El resultado no es sorprendente ya que las propiedades asintóticas de la energía del estado 2s son totalmente diferentes de las correspondientes a los estados 1s y $2p_{\pm 1}$: la energía de unión posee un máximo para un valor finito del campo, y tiende a un valor finito cuando el campo magnético tiende a infinito.

Para obtener resultados útiles para este estado se debe proceder en una forma diferente que veremos en el próximo parágrafo.

§.57. ALGUNOS RESULTADOS COMPLEMENTARIOS PARA LOS AUTOVALORES.

En este parágrafo estudiaremos cuál es la mejora que se introduce en las series renormalizadas si se toma en cuenta el coeficiente dominante del comportamiento de un autovalor $E(1, \lambda)$ del EZAH para $1/\lambda \rightarrow 0$.

La introducción del coeficiente $E(0,1)$ puede realizarse de varias maneras. Una particularmente simple, y que es apropiada para nuestros propósitos, consiste en determinar el parámetro k tal que:

$$S'_N(k^*, 1) = \sum_{n=0}^N E^{(n)} = E(0,1) \quad (57.1)$$

La ec.(57.1) puede satisfacerse en forma muy simple para cada uno de los estados cuánticos considerados en el §.56. Los cálculos han sido realizados utilizando el mayor número de términos que hemos podido manejar para los diferentes estados, esto es, $N=20$ para el $1s$, $N=15$ para el $2p_{\pm 1}$ y $N=13$ para el $2s$.

Para el estado fundamental $1s$ hemos obtenido:

$$k_{20}^* = 2,756838835 \quad (57.2)$$

Con el parámetro k^* , los autovalores pueden ser aproximados por:

$$E(1, \gamma) \approx SE'_N = (\gamma/w)^{1/2} S'_N(k^*, w) \quad , \quad (57.3)$$

donde w está dado por (56.10).

Los resultados obtenidos utilizando (57.2), con $N=20$, se ven en la tercera columna de la Tabla 18.3. La comparación de dichos resultados con los exactos /12,13/, muestra que la ec.(57.3) constituye una mejor aproximación a $E(1, \gamma)$ que la estudiada en el §.56, sólo si $\lambda > 200,0$. La conclusión que podemos extraer es que, si el MF conduce a una secuencia con una gran amplitud de oscilación, el agregado de $E(0,1)$ no introduce una gran mejora en los resultados para valores intermedios de λ .

Para el estado $2p_{\pm 1}$, esto es, el segundo estado fuertemente ligado, hemos obtenido el siguiente valor de k^* :

$$k_{15}^* = 4,41293433 \quad (57.4)$$

En la tercera columna de la Tabla 18.6 se presentan los valores obtenidos para SE'_{15} utilizando (57.4). Una atenta observación de la tabla nos

revela que cuando $\lambda \gg 20,0$, SE'_{15} es una mejor aproximación que SE_{15} (ver §.56). Para este estado la introducción del coeficiente $E(0,1)$ representa una mejora mucho más importante que para el estado fundamental.

La utilidad de la incorporación de $E(0,1)$ se hace aún más manifiesta cuando se analiza el estado $2s$. Recordemos que en el §.56 no presentamos ningún resultado para dicho estado debido a la gran oscilación que presentaba la secuencia $S_N(k_N,1)$. La ec.(57.1) nos permite encontrar en este caso:

$$k_{13}^* = 8,0498714 \quad , \quad (57.5)$$

y los resultados obtenidos para SE'_{13} se ven en la Tabla 18.7 comparados con los "exactos" /12,13/. Para este estado la secuencia SE'_N tiende al comportamiento correcto en el límite infinito por arriba, lo que nos da una cota superior demasiado grosera para los autovalores en la zona de campos intermedios. Dado que para este estado debe cumplirse:

$$E(1,\gamma) \leq \lambda/2 \quad , \quad \lambda \geq 0 \quad , \quad (57.6)$$

la Tabla 18.7 sólo contiene resultados para $\lambda \leq 1$, a partir de donde la desigualdad (57.6) no se satisface. A pesar de este hecho, SE'_{13} es una aproximación muy razonable para el autovalor si $\lambda < 0,1$. Debe remarcarse que la suma parcial de la TPRS para $\lambda=0,1$ hasta el orden 13 da aproximadamente 10^6 , en tanto que SE'_{13} da sólo un error relativo del 0,4% para el autovalor.

Una alternativa diferente para incluir el comportamiento correcto en el límite $1/\gamma \rightarrow 0$ es la utilizada en los §§.53 y 55 y que fue introducida por primera vez en el §.42. El procedimiento consiste en utilizar un coeficiente adicional $\bar{E}^{(N+1)}$ en la serie renormalizada tal que:

$$\bar{E}^{(N+1)} = E(0,1) - \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} \quad , \quad (57.7)$$

para luego determinar k^* mediante las reglas de estabilidad. Este procedimiento se puede ver en la ref./4/, y aporta resultados de la misma calidad que los aquí obtenidos. La fig.18.3 es bastante representativa de los resultados alcanzados utilizando $N=5$ y $N=6$ en (57.7) para el estado fundamental. Como comparación hemos colocado los resultados exactos (círculos) y diversos aproximantes de Padé mejorados /2/, que involucran un número mucho mayor de correcciones perturbacionales. La fig.18.3 nos exime de mayores comentarios.

§.58. APROXIMACION DE LA ENERGIA DE UNION UTILIZANDO LA TPRS Y EL MF.

En las secciones anteriores obtuvimos resultados muy aceptables para diversos autovalores del EZAH basando la construcción de la serie renormalizada en una relación de dilatación. Entre los resultados obtenidos por medio de la TPRS que aparecen en la literatura, sólo los de Le Guillou y Zinn-Justin /5/ son de precisión mayor que los nuestros. Sin embargo, como ya lo comentamos en el §.56, ambos procedimientos no son comparables ya que en nuestro tratamiento no se ha tenido en cuenta hasta el momento la complicada dependencia que posee la energía de unión con el campo magnético /7,8,15/ (Apéndice H).

Para lograr una mejor aproximación a la energía de unión, debe incorporarse indefectiblemente al MF la apropiada información de tipo analítico. El propósito de este párrafo es mostrar cómo puede adaptarse el MF para describir correctamente el comportamiento del átomo de H en campos magnéticos muy intensos. El procedimiento que presentaremos aquí es muy promisorio y se continúa investigando actualmente en nuestro laboratorio, por lo que los resultados aparecen por primera vez en esta obra.

Utilizando la notación introducida en secciones anteriores, la energía de unión asociada a un estado con número cuántico magnético m está definida por:

$$\epsilon_m = \frac{M+1}{2} \lambda - E_m(1, \gamma) , \quad \gamma = \lambda^2 \quad (58.1)$$

Los estados fuertemente ligados están caracterizados por la condición $m = -\ell$, siendo ℓ el número cuántico azimutal del estado coulombico con el que están correlacionado a campo nulo. Para estos estados ϵ_m posee una forma asintótica para campos grandes que es bien conocida /7,8,15/, y que en nuestras unidades se puede expresar como lo mostramos en el Apéndice H:

$$\begin{aligned} \epsilon_m = & \frac{1}{2} \ln^2\left(\frac{\lambda}{8}\right) - 2\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) \ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2(C_\ell + \ln 2) \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2(\ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right))^2 \\ & - 4(C_\ell - 1 + \ln 2) \ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + O(1) , \quad m = -\ell , \end{aligned} \quad (58.2a)$$

donde:

$$C_\ell = -\frac{1}{2}(C_E + q_\ell) , \quad q_\ell = \frac{1}{\ell} + q_{\ell-1} , \quad \ell \neq 0 ; \quad q_0 = 0 , \quad (58.2b)$$

siendo $C_E = 0,5772156649\dots$ la constante de Euler-Mascheroni /9/.

Nuestro propósito es obtener una expresión de la intensidad de campo magnético λ en términos de la energía de unión ϵ_m . Esta transformación nos proporcionará el punto de partida para aplicar el MF.

Para invertir la ec.(58.2a) procedemos de la siguiente manera: definamos la variable u_m :

$$u_m^2 = 2\epsilon_m \quad , \quad - \quad (58.3)$$

que nos permite escribir la ec.(58.2a) en una forma mucho más compacta:

$$u_m^2 = \left\{ \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) - 2 \ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2G_\ell \right\}^2 + 8 \ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + O(1) \quad , \quad (58.4)$$

donde:

$$G_\ell = C_\ell + \ln 2 \quad (58.5)$$

La ec.(58.4) coincide con la ec.(58.2a) hasta el último término presentado, esto es, ambas expresiones difieren en un término del orden de la unidad.

La expresión (58.4) se puede reescribir como:

$$u_m = \left\{ \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) - 2\ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2G_\ell \right\} \left\{ 1 + \frac{8\ln\ln(\lambda/8)}{\left(\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) - 2\ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2G_\ell \right)^2} \right\}^{1/2} + O(1) \quad , \quad (58.6)$$

que a su vez puede desarrollarse, reteniendo los términos más importantes en el límite de campos grandes, para dar:

$$u_m \approx \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) - 2\ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2G_\ell + 4\ln\ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) / \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + O\left(\left\{\frac{\ln\ln\lambda}{\ln\lambda}\right\}^2\right) \quad (58.7)$$

La expresión anterior se puede presentar en una forma más compacta, si escribimos:

$$u_m = \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2G_\ell - 2 \ln u_m \quad (58.8)$$

Es inmediato comprobar que la solución iterativa de (58.8), cuando $\lambda \gg 1$, origina todos los términos presentes en la ec.(58.7). La ec.(58.8) es particularmente interesante pues nos permite obtener una expresión muy simple para λ en términos de u_m :

$$\frac{\lambda}{2} = u_m^2 e^{u_m + C_E + G_\ell} \quad (58.9)$$

La ec.(58.9) posee las características de la transformación de variables propuesta por el MF, donde el parámetro original del desarrollo RS (λ)

queda vinculado a u_m que haría las veces de la variable en la que queda escrita la secuencia convergente.

La Tabla 18.8 muestra el grado de aproximación que la solución de la ec.(58.9) representa respecto de la ecuación original (58.2a). Tal como se aprecia, la ec.(58.9) provee una excelente descripción para campos muy intensos, tanto desde el punto de vista numérico como analítico.

Para obtener una razonable aproximación a los autovalores fuertemente ligados del EZAH, la ecuación debe modificarse de forma tal que u_m posea el comportamiento correcto para $\lambda \rightarrow 0$. Si bien la ec.(58.9) no es precisa para $\lambda < 10$, la misma constituye un excelente punto de partida, pues u_m se mantiene finita para todo λ y $u_m(\lambda=0)=0$. Por el contrario, la ecuación original (ec.(58.2a)) no es válida si $\lambda < 8$, lo cual muestra claramente las ventajas de utilizar expresiones implícitas para derivar u_m .

Para introducir la información disponible a partir de la TPRS en una expresión del tipo de la ec.(58.9) existen varios posibles caminos que pueden seguirse. Estudiaremos aquí una formulación sencilla que nos permita analizar las posibilidades del método. La TPRS nos proporciona el desarrollo en serie de potencias:

$$E_m(1, \gamma) = \sum_{n=0}^{\infty} E_m^{(n)} \lambda^{2n} \quad , \quad (58.10)$$

y la ec.(58.1) nos conduce al desarrollo de u_m en serie de potencias de λ :

$$u_m = \{-2E_m^{(0)} + (M+1)\lambda - 2 \sum_{n=1}^{\infty} E_m^{(n)} \lambda^{2n}\}^{1/2} \quad (58.11)$$

La introducción de (58.11) en el miembro derecho de (58.9) proporciona un desarrollo en potencias de λ . Esto nos sugiere que la siguiente ecuación:

$$F(1, \lambda) = u_m^2 e^{u_m + C_E + q_\ell} \quad , \quad (58.12)$$

será una adecuada representación para la energía de unión u_m , habida cuenta que se cumpla:

$$F(1, \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} F^{(n)} \lambda^n \quad , \quad (58.13a)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{-1} F(1, \lambda) = 1/2 \quad (58.13b)$$

Las relaciones (58.13) nos permiten aplicar el MF para encontrar una expresión analítica para $F(1, \lambda)$ en lugar de $E(1, \lambda)$. La ec.(58.12) nos asegura el correcto comportamiento asintótico para u_m si $\lambda \gg 1$.

Para aplicar el MF se deben determinar los exponentes α y β ; la ec.

(58.13b) nos da $\beta=1$. Para encontrar α estudiamos el comportamiento asintótico de la energía de unión; para términos superiores del desarrollo, aparecen en la ec.(58.2a) potencias de $\lambda^{-1/2}$ /7,8,15/. Dichos términos son los que forzosamente hemos introducido en los autovalores mediante el procedimiento seguido en los §§.56 y 57, y son los que nos permiten ahora obtener α . Para generar dichos términos en u_m^2 , basta con asignar a $F(1,\lambda)$ el siguiente desarrollo asintótico:

$$F(1,\lambda) = \lambda \sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)} \lambda^{-n/2} \approx \frac{\lambda}{2} + f^{(1)} \lambda^{1/2}, \quad \lambda \gg 1 \quad (58.14)$$

Si tomamos logaritmos en (58.14):

$$\ln F(1,\lambda) \approx \ln\left(\frac{\lambda}{2}\right) + 2f^{(1)} \lambda^{-1/2}, \quad (58.15)$$

y luego introducimos (58.15) en (58.12), es evidente que obtenemos los términos buscados en la energía de unión. Luego el desarrollo en serie (58.14) nos proporciona el coeficiente $\alpha=-1/2$, al invocar los resultados de los §§.42 y 44.

Utilizando los exponentes hallados y las ecs.(44.7), (44.8), (44.14) y (44.18), encontramos la siguiente expresión aproximada para $F(1,\lambda)$:

$$F(1,\lambda) \approx SF_N = (\lambda/w) S_N(k,w), \quad (58.16a)$$

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{F}^{(n)} w^n, \quad (58.16b)$$

$$\bar{F}^{(n)} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{2-2j}{n-j} F^{(j)} k^{2-2j}, \quad (58.16c)$$

donde w es la nueva variable del desarrollo, relacionada con el campo λ por:

$$\lambda = wk^{-2}(1-w)^{-2} \quad (58.16d)$$

La raíz de la ec.(58.16d) que satisface los lemas 44.1-44.3 es:

$$w = \frac{1}{2\lambda k^2} \{1 + 2\lambda k^2 - (1 + 4\lambda k^2)^{1/2}\} \quad (58.16e)$$

Nuestra intención en este párrafo es mostrar la utilidad de esta nueva forma de aplicar el MF, y por ello sólo introduciremos unos pocos términos perturbacionales $\{F^{(n)}\}$. Por otro lado, para que (58.12) se transforme en (58.9) para $\lambda \gg 1$ es necesario introducir en $F(1,\lambda)$ el primer término del desarrollo asintótico (58.14) (esto es, $f^{(0)}=1/2$, ec.(58.13b)) además de los primeros términos en (58.13a).

Para que nuestros cálculos sean lo más simple posible, determinaremos k de modo tal de ajustar $f^{(0)}$; el procedimiento es el seguido en el §.57

y consiste en hacer (ec.(57.1)):

$$S_N(k_N^*, 1) = f^{(0)} = 1/2 \quad (58.17)$$

Reuniendo las ecs.(58.12), (58.16a) y (58.17), podemos finalmente determinar u_m a partir de la siguiente ecuación trascendente:

$$u_m^2 e^{u_m + C_E + q_l} = (\lambda/w) S_N(k_N^*, w) \quad , \quad (58.18)$$

y a partir de u_m obtener el autovalor $E_m(1, \lambda^2)$ (ecs.(58.3) y (58.1)).

Para aplicar el método a un estado fuertemente ligado (ec.(58.2a)) sólo es menester determinar los coeficientes $\{F^{(n)}\}$. Dado que el cálculo es simple pero engorroso, sólo obtendremos $F^{(n)}$ con $n \leq 4$. Partimos para ello de la ec.(58.11), que nos da:

$$u_m^2 = -2E_m^{(0)} + (M+1)\lambda - 2E_m^{(1)}\lambda^2 - 2E_m^{(2)}\lambda^4 + O(\lambda^6) \quad (58.19)$$

Tomando la raíz cuadrada en (58.19) y desarrollando en serie de λ hasta retener los términos del orden de λ^4 , obtenemos el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} u_m = \{-2E_m^{(0)}\}^{1/2} & \left\{ 1 - \frac{M+1}{4E_m^{(0)}}\lambda + \lambda^2 \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) \right. \\ & + \lambda^3 \left(-\frac{(M+1)^3}{128E_m^{(0)3}} + \frac{(M+1)E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)2}} \right) \\ & + \lambda^4 \left(\frac{E_m^{(2)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{E_m^{(1)2}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{5}{2048} \frac{(M+1)^4}{E_m^{(0)4}} \right) \left. \right\} \\ & + O(\lambda^5) \quad (58.20) \end{aligned}$$

La exponencial de u_m (ec.(58.20), genera 4 exponenciales desarrollables en serie de potencias de λ . Reteniendo hasta los términos de orden λ^4 tenemos:

$$\begin{aligned}
 e^{u_m} = e^{(-2E_m^{(0)})^{1/2}} & \left\{ 1 + \frac{M+1}{2(-2E_m^{(0)})^{1/2}} \lambda - \frac{(M+1)^2}{16E_m^{(0)}} \lambda^2 \right. \\
 & + \frac{(M+1)^3}{48(-2E_m^{(0)})^{3/2}} \lambda^3 + \left. \frac{(M+1)^4}{1536E_m^{(0)4}} \lambda^4 \right\} \\
 & \times \left\{ 1 + (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) \lambda^2 \right. \\
 & \quad \left. - E_m^{(0)} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) \lambda^4 \right\} \\
 & \times \left\{ 1 + (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{(M+1)E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{(M+1)^3}{128E_m^{(0)3}} \right) \lambda^3 \right\} \\
 & \times \left\{ 1 + (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(2)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{E_m^{(1)2}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{5}{2048} \frac{(M+1)^4}{E_m^{(0)4}} \right) \lambda^4 \right\} \\
 & + O(\lambda^5)
 \end{aligned} \tag{58.21}$$

Realizando los productos indicados en (58.21) y reteniendo nuevamente hasta el orden λ^4 obtenemos:

$$\begin{aligned}
 e^{u_m} = e^{(-2E_m^{(0)})^{1/2}} & \left\{ 1 + \frac{M+1}{2(-2E_m^{(0)})^{1/2}} \lambda + (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \right. \right. \\
 & - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} - \left. \frac{(M+1)^2}{16E_m^{(0)}} \right) \lambda^2 + \left(\frac{(M+1)^3}{48(-2E_m^{(0)})^{3/2}} + \frac{M+1}{2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} \right. \right. \\
 & - \left. \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) + (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{(M+1)E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{(M+1)^3}{128E_m^{(0)3}} \right) \lambda^3 \\
 & + \left(\frac{(M+1)^4}{1536E_m^{(0)4}} + \frac{(M+1)^2}{8(-2E_m^{(0)})^{1/2}} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) - E_m^{(0)} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} \right. \right. \\
 & - \left. \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) + \frac{M+1}{2} \left(\frac{(M+1)E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{(M+1)^3}{128E_m^{(0)3}} \right) + (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(2)}}{2E_m^{(0)}} \right. \\
 & \left. \left. - \frac{E_m^{(1)2}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{5(M+1)^4}{2048E_m^{(0)4}} \right) \lambda^4 + O(\lambda^5) \right\}
 \end{aligned} \tag{58.22}$$

Reemplazando ahora (58.19) y (58.22) en (58.12), y realizando los productos correspondientes, se deducen las siguientes expresiones para los coeficientes $F^{(n)}$:

$$F^{(0)} = -2E_m^{(0)} \Omega_\ell, \tag{58.23a}$$

$$F^{(1)} = \{2 + (-2E_m^{(0)})^{1/2}\} \frac{M+1}{2} \Omega_\ell, \quad (58.23b)$$

$$F^{(2)} = \left\{ \frac{(M+1)^2}{8} + (-2E_m^{(0)})^{3/2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) + \frac{(M+1)^2}{2(-2E_m^{(0)})^{1/2}} - 2E_m^{(1)} \right\} \Omega_\ell, \quad (58.23c)$$

$$F^{(3)} = \left\{ \frac{(M+1)^3}{48(-2E_m^{(0)})^{1/2}} - (M+1)E_m^{(0)} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) + (-2E_m^{(0)})^{3/2} \left(\frac{(M+1)E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{(M+1)^3}{128E_m^{(0)3}} \right) - \frac{(M+1)E_m^{(1)}}{(-2E_m^{(0)})^{1/2}} + (M+1)(-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) - \frac{(M+1)^3}{16E_m^{(0)}} \right\} \Omega_\ell, \quad (58.23d)$$

$$F^{(4)} = \left\{ -2E_m^{(2)} - 2E_m^{(1)}(-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) + \frac{(M+1)^2 E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)}} + \frac{(M+1)^4}{48(-2E_m^{(0)})^{3/2}} + \frac{(M+1)^2}{2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) + (M+1)(-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{(M+1)E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{(M+1)^3}{128E_m^{(0)3}} \right) - \frac{(M+1)^4}{768E_m^{(0)}} + \frac{(M+1)^2}{8} (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) + 2E_m^{(0)2} \left(\frac{E_m^{(1)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{(M+1)^2}{32E_m^{(0)2}} \right) - (M+1)E_m^{(0)} \left(\frac{(M+1)E_m^{(1)}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{(M+1)^3}{128E_m^{(0)3}} \right) + (-2E_m^{(0)})^{1/2} \left(\frac{E_m^{(2)}}{2E_m^{(0)}} - \frac{E_m^{(1)2}}{8E_m^{(0)2}} - \frac{5}{2048} \frac{(M+1)^4}{E_m^{(0)4}} \right) \right\} \Omega_\ell, \quad (58.23e)$$

donde Ω_ℓ indica:

$$\Omega_\ell = \exp \{ (-2E_m^{(0)})^{1/2} + C_E + q_\ell \} \quad (58.24)$$

Los coeficientes arriba calculados nos permiten obtener los coeficientes $\{\bar{F}^{(n)}\}$ de la secuencia renormalizada SF_N . Para los primeros tenemos:

$$\bar{F}^{(0)} = k^2 F^{(0)}, \quad (58.25a)$$

$$\bar{F}^{(1)} = -2k^2 F^{(0)} + F^{(1)} \quad , \quad (58.25b)$$

$$\bar{F}^{(2)} = k^2 F^{(0)} + k^{-2} F^{(2)} \quad , \quad (58.25c)$$

$$\bar{F}^{(3)} = 2k^{-2} F^{(2)} + k^{-4} F^{(3)} \quad , \quad (58.25d)$$

$$\bar{F}^{(4)} = 3k^{-2} F^{(2)} + 4k^{-4} F^{(3)} + k^{-6} F^{(4)} \quad . \quad (58.25e)$$

Para determinar k , haremos uso aquí de la ec.(58.17) para $N=2$ y $N=4$, de forma tal de estudiar el efecto del agregado de correcciones perturbacionales en la ec.(58.18). Para el primer caso tenemos la ecuación:

$$F^{(1)} + (k_2^*)^{-2} F^{(2)} = 1/2 \quad , \quad (58.26)$$

y en el segundo:

$$F^{(1)} + 6(k_4^*)^{-2} F^{(2)} + 5(k_4^*)^{-4} F^{(3)} + (k_4^*)^{-6} F^{(4)} = 1/2 \quad (58.27)$$

Hemos aplicado el procedimiento descrito arriba a los cuatro estados fuertemente ligados más bajos, y a continuación se discuten los resultados obtenidos.

Ejemplo 1:

El estado más bajo corresponde al estado $1s$. Utilizando los resultados tabulados en la Tabla 9.1 y tomando $m=M=0$ en las ecs.(58.23) obtenemos:

$$F^{(0)} = \Omega_0 \quad ; \quad F^{(1)} = \frac{3}{2}\Omega_0 \quad ; \quad F^{(2)} = -\frac{1}{4}\Omega_0 \quad ; \quad F^{(3)} = -\frac{23}{48}\Omega_0 \quad ;$$

$$F^{(4)} = \frac{49}{64}\Omega_0 \quad , \quad (58.28a)$$

donde:

$$\Omega_0 = e^{1+C_E} = 4,841456789 \quad (58.28b)$$

Con los coeficientes (58.28) podemos determinar los valores de k óptimos; la ec.(58.26) nos proporciona la raíz:

$$k_2^* = 0,4230722162 \quad , \quad (58.29)$$

y la ec.(58.27) nos da:

$$k_4^* = 1,357649309 \quad (58.30)$$

Utilizando (58.29) y (58.30) se pueden construir las aproximaciones a $F(1,\lambda)$ designadas por SF_2 y SF_4 , respectivamente. Para cada una de dichas aproximaciones hemos resuelto numéricamente la ec.(58.18) mediante el Programa IX para calculadora TI-59P, que se ve al final de la obra.

Los resultados obtenidos se ven en la Tabla 18.9 en un amplio rango de valores del campo λ . Una observación cuidadosa de la Tabla 18.9 nos revela que SF_2 nos da resultados algo mejores para $\lambda > 100$, respecto de SF_4 ; sin embargo en la zona de campos $\lambda < 100$ la exactitud es mucho mayor cuando se usa SF_4 . Si comparamos los resultados de la Tabla 18.9 con los obtenidos en los §§.56 y 57 (Tabla 18.3), se concluye también que la ec. (58.18) da mejores autovalores para $1 \lesssim \lambda \lesssim 100$. El resultado es notable ya que en SF_4 sólo se han introducido las 2 primeras correcciones de la TPRS. La ec.(58.18) con $N=4$ constituye en consecuencia la expresión más simple, precisa y de mayor validez que se presenta en la literatura. Por completitud agregamos los coeficientes $F^{(n)}$ calculados con k_4^* :

$$\begin{aligned} \bar{F}^{(0)} &= 8,923829538 ; & \bar{F}^{(1)} &= - 10,58547389 ; & \bar{F}^{(2)} &= 8,267169084 \\ \bar{F}^{(3)} &= - 1,996150364 ; & \bar{F}^{(4)} &= - 4,109374367 \end{aligned} \quad (58.31)$$

Para hacer más notorias las ventajas del empleo de la transformación (58.9) hemos tomado un campo $\lambda^2/8=10^{60}$, exageradamente intenso, para el estado $1s$. El método de Le Guillou y Zinn-Justin (con 60 coeficientes RS; extrapolando a infinito, y ajustando los tres primeros términos en (58.2a)) permite estimar $60 \lesssim u_0 \lesssim 61$. El MF con 4 coeficientes RS (TPRS de segundo orden en γ) nos da: $u_0=60,64$ siendo el resultado exacto $u_0=60,69/5/$.

Ejemplo 2:

El siguiente estado fuertemente ligado es el $2p_{-1}$. En este caso, mediante la utilización de los coeficientes tabulados en la Tabla 9.1 y tomando $m=M=1$ en las ecs.(58.23) obtenemos:

$$\begin{aligned} F^{(0)} &= \frac{1}{4}\Omega_1 ; & F^{(1)} &= \frac{5}{2}\Omega_1 ; & F^{(2)} &= - 4\Omega_1 ; & F^{(3)} &= - \frac{68}{3}\Omega_1 ; \\ F^{(4)} &= \frac{10877}{24}\Omega_1 \end{aligned} \quad (58.32a)$$

donde:

$$\Omega_1 = e^{C_E+3/2} = 7,982212789 \quad (58.32b)$$

Con los coeficientes (58.32) podemos determinar los valores de k óptimos; la ec.(58.26) nos proporciona la raíz:

$$k_2^* = 1,281061829 \quad (58.33)$$

y la ec.(58.27) nos da:

$$k_4^* = 3,519732541 \quad (58.34)$$

eligiendo la raíz con mayor módulo. Utilizando las constantes (58.33) y (58.34), hemos construido las aproximaciones SF_2 y SF_4 para $F(1, \lambda)$, para luego reemplazarlas en (58.18) y calcular los autovalores $E(1, \lambda^2)$.

Los cálculos se llevaron a cabo con el Programa IX para TI-59P y se comparan con los "exactos" en la Tabla 18.10. Las conclusiones que se extraen son similares a las que se vieron en el Ejemplo 1; nuevamente, nuestros resultados son los más precisos que se presentan hoy en día utilizando la TPRS hasta el cuarto orden. Cabe agregar que nuestro tratamiento constituye la primera aplicación exitosa de las propiedades asintóticas de la energía de unión para este estado.

Por completitud presentamos los coeficientes $\bar{F}^{(n)}$ obtenidos con k_4^* :

$$\begin{aligned} \bar{F}^{(0)} &= 24,72194503 ; & \bar{F}^{(1)} &= - 29,48835808 ; & \bar{F}^{(2)} &= 22,1446101 \\ \bar{F}^{(3)} &= - 6,333475378 ; & \bar{F}^{(4)} &= - 10,54476258 \end{aligned} \quad (58.35)$$

Ejemplo 3:

El tercer estado fuertemente ligado es el $3d_{-2}$. Los resultados de la Tabla 9.1 para los coeficientes RS y las ecs.(58.23) (tomando $m=M=2$) nos conducen a los siguientes resultados:

$$\begin{aligned} F^{(0)} &= \frac{1}{9}\Omega_2 ; & F^{(1)} &= \frac{7}{2}\Omega_2 ; & F^{(2)} &= - \frac{81}{4}\Omega_2 ; & F^{(3)} &= - \frac{3699}{24}\Omega_2 ; \\ F^{(4)} &= \frac{1135455}{64}\Omega_2 \end{aligned} \quad (58.36a)$$

donde:

$$\Omega_2 = e^{CE+11/6} = 11,14007535 \quad (58.36b)$$

Con los coeficientes (58.36a) obtenemos fácilmente los valores de k óptimo (ecs.(58.26) y (58.27)):

$$k_2^* = 2,420923881 \quad (58.37a)$$

$$k_4^* = 6,348622330 \quad (58.37b)$$

Los autovalores aproximados se calcularon con el Programa IX utilizando SF_2 y SF_4 como representaciones aproximadas para $F(1,\lambda)$. Los resultados obtenidos se comparan en la Tabla 18.11 con los resultados "exactos" obtenidos por Wunner y col. /13/. Nuevamente las conclusiones que se extraen son similares a las correspondientes a los ejemplos previos, y los resultados son muy aceptables. Los resultados perturbacionales para este estado se presentan por primera vez en esta obra.

Por completitud presentamos los coeficientes $\bar{F}^{(n)}$ obtenidos con k_4^* :

$$\begin{aligned} \bar{F}^{(0)} &= 49,88897756 ; & \bar{F}^{(1)} &= - 60,78769141 ; & \bar{F}^{(2)} &= 44,2919922 \\ \bar{F}^{(3)} &= - 12,77935486 ; & \bar{F}^{(4)} &= - 20,11392349 \end{aligned} \quad (58.38)$$

Ejemplo 4:

El cuarto estado fuertemente ligado es el $4f_{-3}$. Los resultados de la

Tabla 9.1 para los coeficientes RS y las ecs.(58.23) (tomando $m=M=3$) nos conducen a los siguientes resultados para la función $F(1, \lambda)$:

$$\begin{aligned} F^{(0)} &= \frac{1}{16}\Omega_3 ; & F^{(1)} &= \frac{9}{2}\Omega_3 ; & F^{(2)} &= -64\Omega_3 ; & F^{(3)} &= -\frac{3680}{3}\Omega_3 ; \\ F^{(4)} &= \frac{957559}{4}\Omega_3 \quad , & & & & & & \end{aligned} \quad (58.39a)$$

donde:

$$\Omega_3 = e^{C_E+25/12} = 14,30413989 \quad (58.39b)$$

Con los coeficientes $\{F^{(n)}\}$ dados más arriba, y las ecs.(58.26) y (58.27), obtenemos los valores de k óptimo:

$$k_2^* = 3,78596908 \quad , \quad (58.40a)$$

$$k_4^* = 9,722789555 \quad (58.40b)$$

Nuevamente los autovalores se calculan merced al programa IX, utilizando SF_2 y SF_4 como representaciones funcionales para $F(1, \lambda)$. Los resultados obtenidos aparecen comparados en la Tabla 18.12 con los exactos de la ref./13/. Las conclusiones obtenidas son idénticas a las encontradas para los ejemplos previos. Al igual que los resultados reportados en el ejemplo 3, nuestro tratamiento para el estado $4f_{-3}$ constituye la primera aplicación que se hace de la TPRS.

Completamos la discusión presentando los coeficientes $\bar{F}^{(n)}$ obtenidos con k_4^* :

$$\begin{aligned} \bar{F}^{(0)} &= 84,51300375 ; & \bar{F}^{(1)} &= -104,6573780 ; & \bar{F}^{(2)} &= 74,82888846 ; \\ \bar{F}^{(3)} &= -21,33170284 ; & \bar{F}^{(4)} &= -32,85264205 & & \end{aligned} \quad (58.41)$$

Si bien hemos introducido en este parágrafo un número pequeño de coeficientes RS, las ventajas del uso de este nuevo procedimiento para aplicar el MF son claramente manifiestas: i) El método introduce en una transformación muy sencilla (ec.(58.9)), mucha más información de tipo analítico sobre el autovalor que cualesquiera de los métodos utilizados previamente /1,5,14/. ii) Es más fácil de aplicar, a punto tal que los autovalores pueden ser aproximados con precisión razonable mediante la utilización de una calculadora programable.

Para cerrar esta sección creemos oportuno mostrar una forma alternativa de cálculo para la energía de unión, que podría resultar más conveniente para introducir la TPRS para órdenes elevados.

La ec.(58.1) nos permite escribir a ϵ_m como una serie de potencias en λ :

$$\epsilon_m = -E_m^{(0)} + \frac{M+1}{2}\lambda - \sum_{n=1}^{\infty} E_m^{(n)} \lambda^{2n} \quad , \quad (58.42)$$

que, mediante la ec.(58.9), se puede transformar en una serie de potencias en u :

$$\epsilon_m = \sum_{n=0}^{\infty} A_m^{(n)} u_m^n \quad (58.43)$$

Los nuevos coeficientes $\{A_m^{(n)}\}$ pueden determinarse inmediatamente en términos de los coeficientes $\{E^{(n)}\}$ provistos por la TPRS.

Ahora bien, la ec.(58.43) nos sugiere que el MF puede ser aplicado considerando a la energía de unión ϵ_m como una función de u_m , en lugar de una función de λ . Procediendo en consecuencia, necesitamos introducir un desarrollo asintótico de ϵ_m , cuando $u_m \gg 1$. Obviamente este comportamiento es provisto por la ec.(58.3), que nos asegura que:

$$\epsilon_m \rightarrow \frac{1}{2} u_m^2, \quad \text{si } 1/\lambda \rightarrow 0. \quad (58.44)$$

Podemos, entonces, escribir el siguiente desarrollo asintótico formal para ϵ_m :

$$\epsilon_m = u_m^\beta \sum_{n=0}^{\infty} a_m^{(n)} u_m^{n\alpha}, \quad (58.45)$$

donde $\beta=2$, $a_m^{(0)}=1/2$ y donde $\alpha < 0$ es un exponente auxiliar, que ahora puede ser ajustado para obtener la máxima velocidad de convergencia. En resumen, el procedimiento a seguir sería: i) se fija un valor de α , se aplica el MF para sumar la serie (58.43), donde el valor de u_m se determina para cada λ según la ec.(58.9); ii) se varía α , y se repiten los cálculos observando la convergencia de la secuencia S_{ϵ_N} , hasta obtener la óptima. Dado que el coeficiente $a_m^{(0)}$ es conocido, resulta más conveniente recurrir a la formulación del MF aplicada en el §.50, ya que permite utilizar en forma conjunta, a los coeficientes $\{A_m^{(n)}\}$ y al coeficiente asintótico para $1/u_m \rightarrow 0$ ($a_m^{(0)}$).

REFERENCIAS DEL CAPITULO XVIII.

- /1/ A. Galindo and P. Pascual, Nuovo Cimento B 34 (1976) 155.
- /2/ J. Cizek and E. Vrscay, Int. J. Quantum Chem. 21 (1982) 27.
- /3/ G.A. Arteca, F.M. Fernández, A.M. Mesón and E.A. Castro; "A Method for Summing Strongly Divergent Perturbation Series: The Zeeman Effect in Hydrogen", Physica A ~~(Leningrad)~~. 128 (1984) 253
- /4/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, Chem. Phys. Lett. 102 (1983) 344.
- /5/ J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Ann. Phys. (NY) 147 (1983) 57.
- /6/ J.N. Silverman, Phys. Rev. A 28 (1983) 498.
- /7/ J.E. Avron, I.W. Herbst and B. Simon, Phys. Lett. A 62 (1977) 214.
- /8/ J.E. Avron, I.W. Herbst and B. Simon, Phys. Rev. A 20 (1979) 2287.
- /9/ M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1970.
- /10/ R.H. Garstang, Rep. Prog. Phys. 40 (1977) 105.
- /11/ J. Simola and J. Virtamo, J. Phys. B 11 (1978) 3309.
- /12/ G. Wunner and H. Ruder, J. Physique 43 (1982) C2-137.
- /13/ W. Rösner, G. Wunner, H. Herold and H. Ruder, J. Phys. B 17 (1984) 29.
- /14/ S.H. Patil, J. Phys. B 15 (1982) 1161.
- /15/ J.E. Avron, I.W. Herbst and B. Simon, Commun. Math. Phys. 79 (1981) 529.

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XVIII)

Tabla 18.1

Secuencias convergentes $S_N(k_N^I, 1)$ para el estado 1s del EZAII, obtenidas siguiendo las rectas indicadas en la fig.18.1.

N a)	$S_N(k_N^I, 1)$ b)	N a)	$S_N(k_N^I, 1)$ c)
3 (B _I)	0,4750	4 (A _I)	0,5156
6 (C _I)	0,4806	8 (B _I)	0,5332
		12 (C _I)	0,5467
		16 (D _I)	0,4687

a) Entre paréntesis se indica el tipo de secuencia con dependencia lineal k-N a la que pertenece el punto crítico.

b) Puntos de inflexión en la recta "a" (fig.18.1).

c) Puntos de inflexión en la recta "b" (fig.18.1).

Tabla 18.2

Coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ de la secuencia renormalizada para el estado
1s del EZAH.

n	$\bar{E}^{(n)}$ a)	n	$\bar{E}^{(n)}$
0	-0,2524491420 (1)	9	-0,1370177476 (0)
1	0,5098497763 (1)	10	-0,1200678616 (0)
2	-0,2427606254 (1)	11	-0,1735519413 (-1)
3	0,1360458082 (0)	12	0,1255858375 (0)
4	0,1565960417 (0)	13	0,2137936444 (0)
5	0,1461970244 (0)	14	0,1554263910 (0)
6	0,9678088241 (-1)	15	-0,5918477234 (-1)
7	0,1344913598 (-1)	16	-0,3093538524 (0)
8	-0,7864419124 (-1)		

a)
Se utilizó $k_{16}^I = 2,24699417869$ (recta "b") para los cálculos.
Entre paréntesis se indica la potencia de 10 por la que se
debe multiplicar al coeficiente tabulado.

Tabla 18.3

Menor autovalor del hamiltoniano (56.1) (estado 1s) en función de la intensidad de campo λ .

λ	SE_{16}^- a)	SE'_{20} b)	$E(1, \lambda^2)$ c)
0,01	-0,499975005	-0,499975001	-0,499975005
0,1	-0,497526480	-0,497526480	-0,497526480
0,2	-0,490381565	-0,490381565	-0,490381565
0,6	-0,4274595	-0,4274556	-0,42746229
1,0	-0,331114	-0,331041	-0,3311689
2,0	-0,021305	-0,019968	-0,0222139
3,0	0,338399	0,343336	0,335467
6,0	1,54362	1,57283	1,531755
10,0	3,27316	3,35652	3,252204
20,0	7,79409	8,06697	7,78462
60,0	26,427	27,690	26,795
100,0	45,211	47,572	46,211
200,0	92,249	97,483	95,273
300,0	139,293	147,473	144,645
2000,0	937,97	997,94	990,696

a)
Calculado con la serie renormalizada hasta el orden 16, utilizando $k_{16}^I = 2,2469941786$.

b)
Calculado con la serie renormalizada hasta el orden 20, con el agregado del comportamiento dominante para campo infinito. Se utilizó $k_{20}^* = 2,756838835$ (ec.(57.1)).

c)
Resultados de las refs./12,13/, obtenidos variacionalmente.

Tabla 18.4

Secuencias convergentes $S_N(k_N^I, 1)$ para el estado $2p_{\pm 1}$ del EZA, obtenidas siguiendo las rectas indicadas en la fig.18.2.

N a)	$S_N(k_N^I, 1)^b)$	N a)	$S_N(k_N^I, 1)^c)$	N a)	$S_N(k_N^I, 1)^d)$
3 (B _I)	1,1588	5 (B _I)	1,1098	3 (A _I)	0,9497
6 (C _I)	0,9297	8 (C _I)	1,0039	6 (B _I)	1,0689
		11 (D _I)	1,0507	9 (C _I)	1,0483
		14 (E _I)	0,9733	12 (D _I)	0,9731
				15 (E _I)	1,1883

a) Entre paréntesis se indica el tipo de secuencia con dependencia lineal k-N a la que pertenece el punto de inflexión.

b) Puntos de inflexión en la recta "a".

c) Puntos de inflexión en la recta "b".

d) Puntos de inflexión en la recta "c".

Tabla 18.5

Coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ de la secuencia renormalizada para el estado $2p_{\pm 1}$ del EZAH.

n	$\bar{E}^{(n)}$ a)		$\bar{E}^{(n)}$
0	-0,24099135958 (1)	8	-0,2039991113 (0)
1	0,49754344302 (1)	9	0,1690336956 (0)
2	-0,21148867613 (1)	10	0,4859040227 (0)
3	0,37577501385 (0)	11	0,285806640 (0)
4	0,33942784157 (0)	12	-0,4629740576 (0)
5	0,1553443561 (0)	13	-0,9993819445 (0)
6	-0,11582599788 (0)	14	-0,3380552073 (0)
7	-0,29950362586 (0)	15	0,1346150366 (1)

a)
 Se utilizó $k_{15}^I = 4,39082096726$ (recta "c"). Entre paréntesis se indica la potencia de 10 por la que debe multiplicarse el coeficiente tabulado.

Tabla 18.6

Energía del estado $2p_{\pm 1}$ del hamiltoniano (56.1), en función de la intensidad de campo λ .

λ	SE_{15}^{-} ^{a)}	SE'_{15} ^{b)}	$E(1, \lambda^2)$ ^{c)}
0,01	-0,124701	-0,124701	-0,124701
0,1	-0,100846	-0,100846	-0,100846
0,2	-0,050559	-0,050566	-0,050539
0,6	0,223978	0,222923	0,225376
1,0	0,539055	0,533680	0,543403
2,0	1,39128	1,35944	1,400387
3,0	2,29220	2,21587	2,29645
6,0	5,14423	4,86594	5,07671
10,0	9,13330	7,89582	8,87458
20,0	19,5350	17,7721	18,53453
60,0	63,1870	55,8798	57,8031
100,0	107,991	94,547	97,3653
200,0	221,766	192,076	196,653
2000,0	2323,08	1973,66	1993,048

a)

Calculado con la serie renormalizada hasta el orden 15, utilizando $k_{15}^I = 4,39082096726$.

b)

Calculado con la serie renormalizada hasta el orden 15 con el agregado del comportamiento dominante en el límite de campo infinito. Se utilizó $k_{15}^* = 4,41293433$ (ec.(57,1)).

c)

Resultados "exactos" (refs./12,13/).

Tabla 18.7

Energía del estado 2s del hamiltoniano (56.1), en función de la intensidad de campo λ .

λ	SE'_{13} a)	$E(1, \lambda^2)$ b)
0,001	-0,12499650	-0,12499650
0,01	-0,12465157	-0,12465157
0,1	-0,097734	-0,0980892
0,2	-0,04375	-0,04899
0,6	0,2233	0,14723
1,0	0,5010	0,33956

a)

Calculado con la serie renormalizada hasta el orden 13, con el agregado del comportamiento dominante en el límite de campo infinito. Se utilizó $k_{13}^* = 8,0498714$.

b)

Resultados "exactos" (refs./12,13/).

Tabla 18.8

Comparación de resultados para el comportamiento asintótico de la energía de unión del estado $1s$ del EZAH.

λ	u_m a)	$(2\epsilon_m)^{1/2}$ b)	λ	u_m a)	$(2\epsilon_m)^{1/2}$ b)
10^2	1,97434	2,99219	10^7	10,2025	10,5807
10^3	3,26864	4,25834	10^8	12,1549	12,4658
10^4	4,80194	5,58120	10^9	14,1530	14,4139
10^5	6,49920	7,09989	10^{10}	16,1871	16,4097
10^6	8,31019	8,78113	10^{20}	37,5310	37,6100

a)
Calculado con la ec.(58.9).

b)
Calculado con la ec.(58.2a).

Tabla 18.9

Energía del estado 1s del hamiltoniano (56.1), en función de la intensidad de campo λ , estudiada mediante el procedimiento del §.58.

λ	E a)	E b)	E c)
2000,0	991,7598	992,0069	990,696
1000,0	493,1416	493,4034	492,370
200,0	95,55188	95,80990	95,273
100,0	46,32549	46,56458	46,21091
10,0	3,154161	3,277650	3,252203
3,0	0,271992	0,328427	0,335467
2,0	-0,068129	-0,029651	-0,022214
1,0	-0,352008	-0,335441	-0,331169
0,2	-0,491286	-0,490494	-0,490382
0,1	-0,497674	-0,497535	-0,497526
0,01	-0,4999752	-0,49997500	-0,49997500

a)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF₂.

b)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF₄.

c)
Resultados "exactos" (ref./13/).

Tabla 18.10

Energía del estado $2p_{-1}$ del hamiltoniano (56.1), en función de la intensidad de campo λ , estudiada mediante el procedimiento del §.58.

λ	E a)	E b)	E c)
2000,0	1994,2222	1994,330	1993,018
1000,0	995,30007	995,41296	994,3616
200,0	197,10504	197,21566	196,653
100,0	97,65472	97,75842	97,3653
10,0	8,86663	8,93293	8,87458
3,0	2,25345	2,29746	2,29645
2,0	1,357060	1,393808	1,400387
1,0	0,507371	0,532495	0,543403
0,2	-0,060178	-0,054310	-0,050539
0,1	-0,104226	-0,102068	-0,100846
0,01	-0,124714	-0,124702	-0,124701

a)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF_2 .

b)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF_4 .

c)
Resultados "exactos" (ref./13/).

Tabla 18.11

Energía del estado $3d_{-2}$ del hamiltoniano (56.1), en función de la intensidad de campo λ , estudiada mediante el procedimiento del 5.58.

λ	E a)	E b)	E c)
2000,0	2995,188	2995,262	2994,031
1000,0	1496,1255	1496,2023	1495,1949
200,0	297,66756	297,74096	297,19800
100,0	148,12751	148,19600	147,81183
10,0	14,11604	14,16028	14,09179
3,0	3,919972	3,951259	3,942848
2,0	2,500318	2,527506	2,528828
1,0	1,116675	1,137278	1,146952
0,2	0,103140	0,111173	0,118679
0,1	0,003771	0,008073	0,012161
0,01	-0,054376	-0,054279	-0,054247

a)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF_2 .

b)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF_4 .

c)
Resultados "exactos" (ref./13/).

Tabla 18.12

Energía del estado $4f_{-3}$ del hamiltoniano (56.1), en función de la intensidad de campo λ , estudiada mediante el procedimiento del §.58.

λ	E a)	E b)	E c)
2000,0	3995,745	3995,805	3994,622
1000,0	1996,5937	1996,6548	1995,6916
200,0	397,9759	398,0334	397,5163
100,0	198,3838	198,4369	198,0700
10,0	19,24845	19,28247	19,21223
3,0	5,508988	5,533403	5,521409
2,0	3,577199	3,598664	3,596760
1,0	1,675479	1,692282	1,700031
0,2	0,232983	0,240900	0,249912
0,1	0,077062	0,082064	0,088140
0,01	-0,028221	-0,027921	-0,027708

a)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF_2 .

b)
Calculado con la ec.(58.18), usando SF_4 .

c)
Resultados "exactos" (ref./13/).

LEYENDAS PARA LAS FIGURAS (Capítulo XVIII)

Fig.18.1: Plano $(k_N^I)^4 - N$ para los puntos de inflexión de la secuencias renormalizadas $S_N(k,1)$ para el estado $1s$ del EZAH.

(Con línea llena se indican las secuencias en las cuales k_N^I crece linealmente con N).

Fig.18.2: Idem Fig.18.1 para el estado $2p_{\pm 1}$ del EZAH.

Fig.18.3: Distintas aproximaciones para energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno en un campo magnético, en el rango de intensidades intermedias.

———— Aproximantes de Padé
- - - - MF con SE'_5 y SE'_6
o Resultados "exactos" /13/

Fig. 18.1

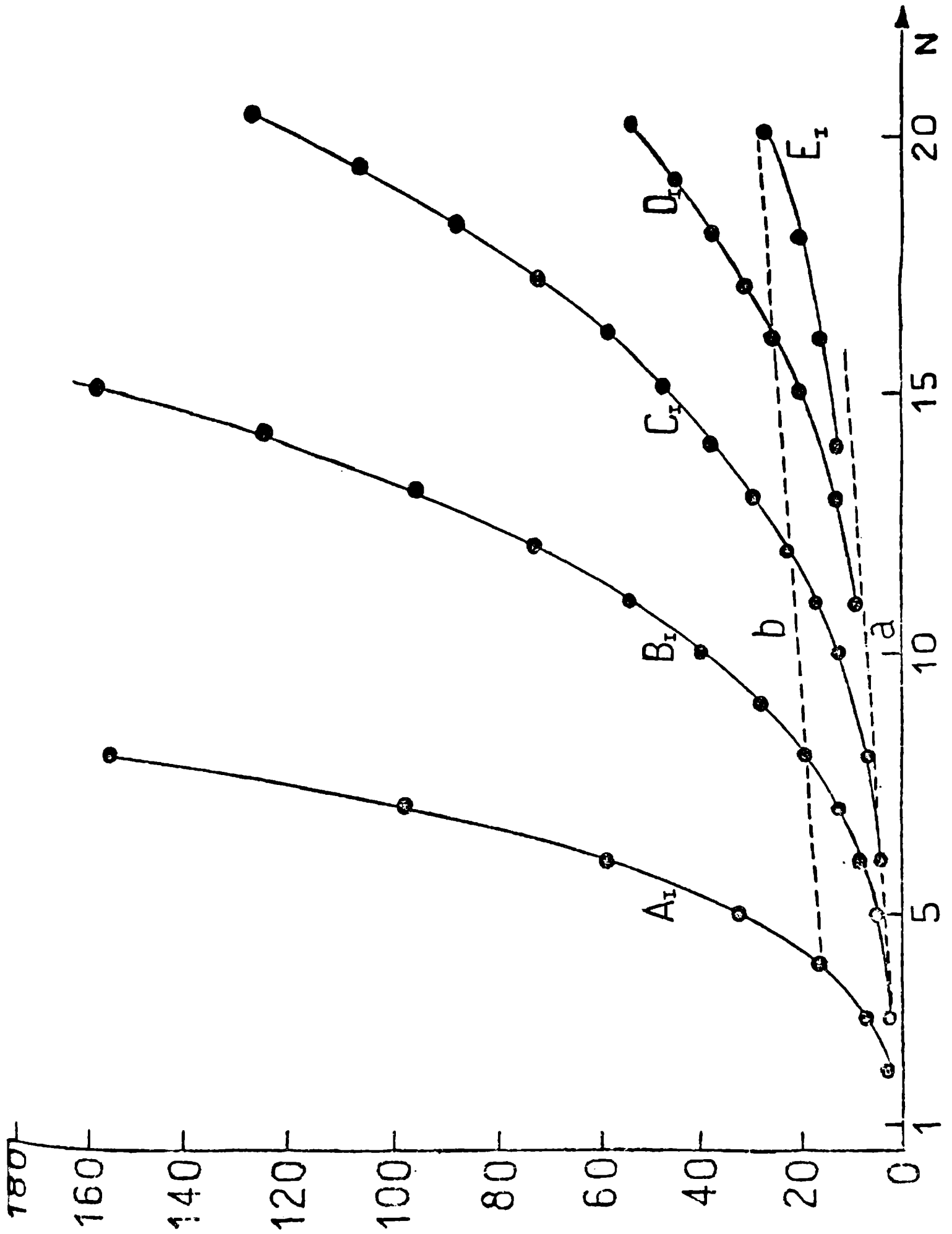


Fig. 18.2

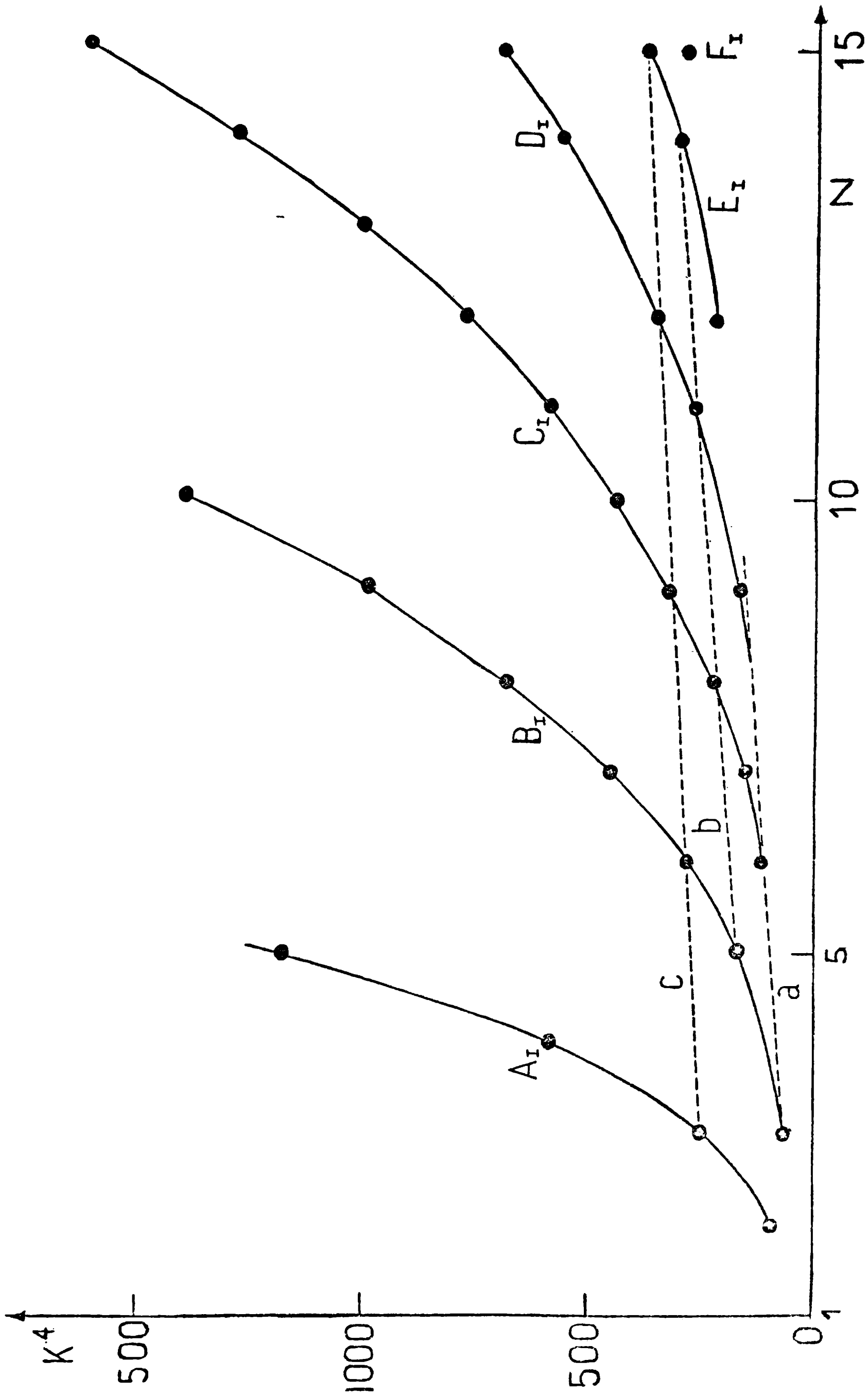
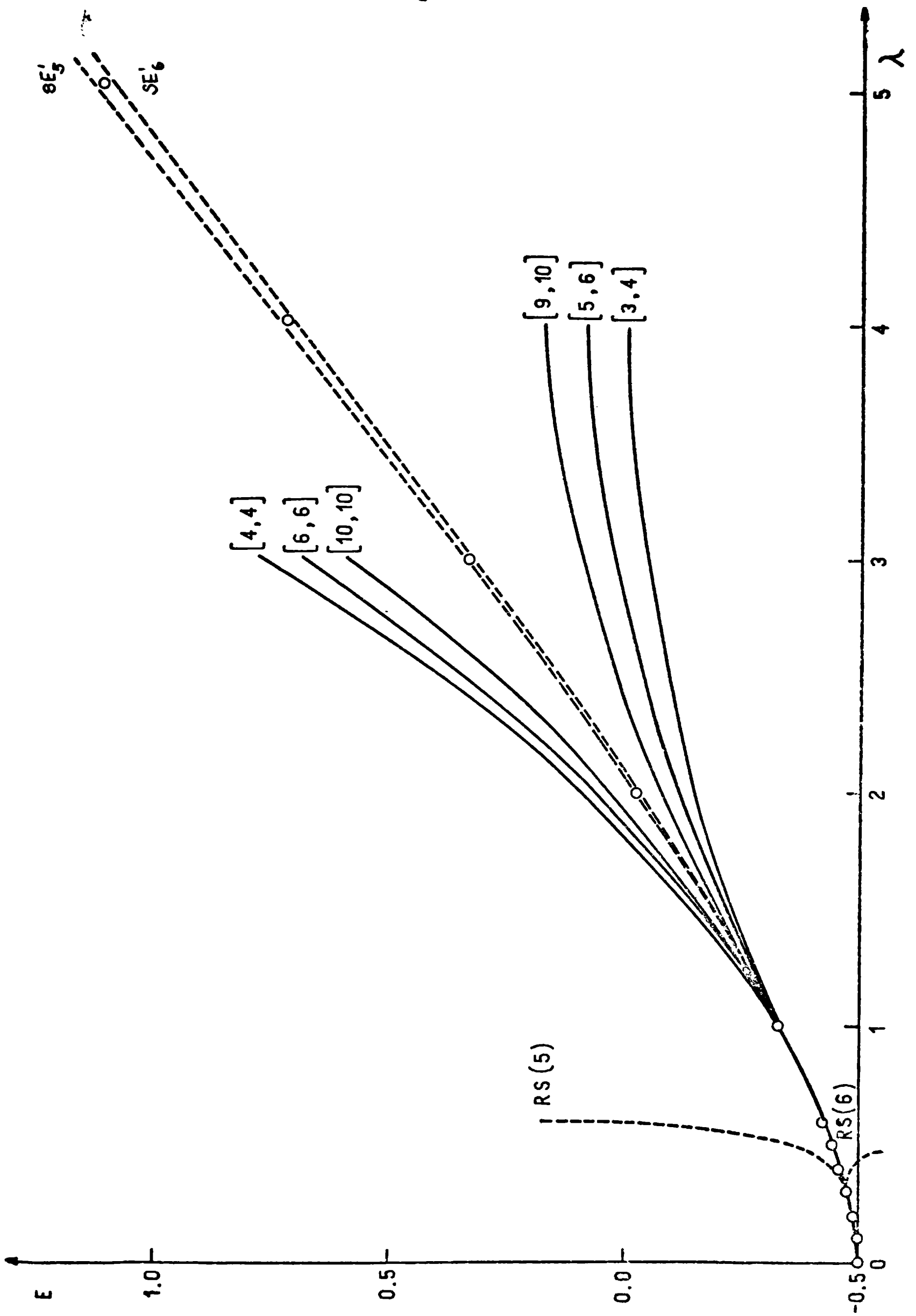


Fig. 18.3



CAPITULO XIX

APLICACION DEL MF AL EFECTO STARK EN EL ATOMO DE HIDROGENO.

§.59. APROXIMACION DE LAS RESONANCIAS STARK MEDIANTE EL MF.

El efecto Stark para el átomo de hidrógeno ha atraído una gran atención desde los primeros días de la mecánica cuántica /1-9/.

El sistema en cuestión, constituido por un átomo hidrogenoide de carga nuclear Z situado en un campo eléctrico homogéneo de intensidad F , está descrito por el siguiente operador hamiltoniano:

$$H_s = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} + eFz \quad , \quad (59.1a)$$

donde hemos considerado que la masa nuclear es infinita (ya que m es la masa del electrón) y que el campo eléctrico aplicado está alineado con el eje z . Convenientemente, podemos vincular el operador (59.1a) con otro adimensional mediante el procedimiento usual de introducir una dilatación en las coordenadas (ver Apéndice A). Inmediatamente arribamos a:

$$H_s = \frac{me^4}{\hbar^2} H(Z, \lambda) \quad , \quad H(Z, \lambda) = - \frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r} + \lambda z \quad , \quad (59.1b)$$

$$\lambda = F/F_0 \quad , \quad F_0 = m^2 e^5 / \hbar^4 \quad , \quad (59.1c)$$

donde me^4/\hbar^2 es la unidad atómica de energía (hartree) y F_0 la unidad atómica de campo, equivalente a $5,14 \times 10^{11}$ V/m. El parámetro λ representa el campo adimensional.

Si bien este modelo es frecuentemente presentado en libros de texto básicos como un problema sencillo, en rigor está muy lejos de serlo. La complicación esencial es debida a que la presencia del campo eléctrico F transforma el espectro del problema coulombico (discreto para energías negativas y continuo para energías positivas) en otro absolutamente continuo para energías $-\infty < E < \infty$, no importa cuán pequeño sea el campo. Sin embargo existen estados cuasiligados o resonancias, ubicados en el continuo, cuyo tiempo de vida τ disminuye a medida que la intensidad del campo aplicado aumenta. Tales estados resonantes pueden describirse como autovalores complejos del hamiltoniano (59.1) dilatado analíticamente /10/:

$$\epsilon = E - i\Gamma/2 \quad , \quad (59.2)$$

donde los números reales $E=E(Z, \lambda)$ y Γ son respectivamente la posición y el ancho de la resonancia. Por las propiedades expuestas, el efecto Stark configura un problema totalmente diferente a los discutidos en los capí-

tulos anteriores. Cabe recordar que los osciladores anarmónicos (Cap. XVI) y los potenciales de confinamiento (Cap. XVII) poseen características similares a las mencionadas más arriba sólo en el caso de valores negativos del parámetro perturbacional.

Hasta hace unos 10 años el progreso realizado, tanto teórica como experimentalmente, en este campo había sido bastante escaso, principalmente debido al hecho que todos los fenómenos estudiados involucraban campos eléctricos pequeños. En estos casos, la interacción del electrón con el núcleo es mucho más fuerte que la interacción con el campo eléctrico y los estados cuasiligados poseen un tiempo de vida medio grande (esto es, un ancho de resonancia pequeño).

Al igual que se comentó en el §.30 en relación al efecto Zeeman, el efecto Stark ha recibido un renovado interés en los últimos años debido al estudio experimental de las propiedades de los átomos en campos eléctricos muy intensos /11-15/. Una revisión de los últimos adelantos en el tema puede consultarse en la ref./16/. Cabe comentar que las propiedades de los átomos en campos eléctricos estáticos intensos pueden relacionarse a los fenómenos que ocurren en campos de radiación láser, como fotodisociación e ionización multifotónica /16/. Dado que el estudio de los campos estáticos es más simple, es fácil entender porqué el principal interés se ha centrado en los mismos.

Para el estado fundamental del átomo de hidrógeno, las interacciones electrón-campo y electrón-núcleo son similares en la condición $\lambda=1$, lo que equivale a aplicar un campo del orden de 10^{11} V/m (ec.(59.1c)). Este campo es mucho mayor que los obtenibles usualmente en el laboratorio. Designaremos de aquí en más con F' a la intensidad de campo para la cual ambas interacciones son similares, para un estado cuántico dado (esto es, $F'=F_0$ para el estado fundamental). Dicho valor F' disminuye rápidamente con el número cuántico y por ello las investigaciones de campos muy intensos se concentran sobre los estados de Rydberg de los átomos alcalinos.

Mediante un argumento muy simple podemos verificar la variación de los corrimientos Stark con el número cuántico principal para estados de Rydberg. A tal efecto sabemos que el nivel n del electrón de valencia de un átomo alcalino posee una energía $E_n^*(\ell)$ dada por /16/:

$$E_n(\ell) = -\frac{1}{2} (n-\sigma_\ell)^{-2}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad (59.3)$$

donde σ_ℓ es el defecto cuántico, que da cuenta del rompimiento de la degeneración en ℓ , característica del potencial coulombico. Si n es suficientemente grande, la diferencia de energía entre estados con número cuántico principal n y diferente ℓ se puede escribir a partir de (59.2) de la siguiente manera:

$$\Delta E_{\ell\ell'} = E_n(\ell) - E_n(\ell') \approx \frac{\sigma}{n^3}, \quad \sigma = \sigma_{\ell'} - \sigma_\ell \quad (59.4)$$

Si ahora se aplica un campo eléctrico de intensidad F , el estado n s ten-

drá asociado para campos bajos ($F \gg F^2$) un efecto Stark de segundo orden /17,18/. Si $\delta E_n(F)$ indica el corrimiento de la energía del estado ns , tenemos (ver §.7):

$$\delta E_n(F) = e^2 F^2 \sum_{m \neq n} \frac{|z_{mn}|^2}{E_m - E_n}, \quad (59.5)$$

donde z_{mn} es el elemento de matriz de la coordenada z (dirección del campo eléctrico (ec.(59.1))). Si sólo estamos interesados en estimar groseramente la dependencia con n , la ec.(59.5) se puede escribir reteniendo el término más importante de la suma:

$$\delta E_n(F) = e^2 F^2 \frac{|\langle r \rangle_n|^2}{\Delta E_{01}}, \quad (59.6)$$

siendo $|\langle r \rangle_n|$ el módulo del elemento de matriz de r en el estado considerado. Podemos ahora estimar la intensidad del campo F para la situación que hemos definido como de campo intenso. Este régimen puede situarse en aquella condición en la que los corrimientos Stark sean del orden de la diferencia de energía entre estados a campo cero. Dicha condición significa $\Delta E_{01} \approx \delta E_n(F')$ para el estado ns , y de acuerdo a (59.5) implica que:

$$F'^2 \approx e^{-2} (\Delta E_{01})^2 |\langle r \rangle_n|^{-2} \quad (59.7)$$

Tomando en cuenta que el "radio" del átomo es descrito aproximadamente por $|\langle r \rangle_n|$, y que éste es proporcional a n^2 , las ecs.(59.4) y (59.7) nos dan:

$$F' \sim \text{cte. } n^{-5} \quad (59.8)$$

La ec.(59.8) nos muestra con qué rapidez desciende la intensidad de campo F' , a medida que el electrón pasa a estados más excitados. Por ejemplo, para $\sigma=0,1$ y $n=30$, es necesario un campo de sólo $F \approx 20$ V/cm para igualar las interacciones entre el electrón y el núcleo, y el electrón y el campo /16/.

Varios métodos han sido aplicados para aproximar la parte real $E(Z, \lambda)$ de las resonancias y sus anchos $\Gamma(\lambda)$. Entre los no perturbacionales podemos citar a los siguientes: i) Procedimientos variacionales basados en diversas funciones de prueba /19-21/, con la inclusión de técnicas de estabilización /22-24/. Estos métodos proveen algunos de los resultados más precisos que se presentan hoy en día para las resonancias, en el rango de campos pequeños ($\lambda \lesssim 0,02$) y grandes ($0,02 \lesssim \lambda \lesssim 0,12$). El inconveniente que presentan dichos procedimientos es que no existe una función de onda apropiada para describir todo el rango de valores de campo /19-24/. Se ha puntualizado también que para el estudio de las resonancias es conveniente utilizar el método de dilatación compleja o de rotación de coordenada compleja /25-27/. ii) Métodos semiclásicos /7-9, 28-30/ basados en diversas aproximaciones de las integrales del método JWKB. Estos

procedimientos permiten obtener resultados aceptables para todas las resonancias, pero involucran la enorme complicación de calcular numéricamente integrales elípticas.

La bibliografía citada más arriba en relación a métodos no perturbacionales no pretende en modo alguno ser completa, y literatura adicional puede obtenerse a partir de la misma.

La aplicación de la TPRS al modelo definido por el hamiltoniano (59.1) está basada en considerar como perturbación al campo eléctrico, siendo λ el parámetro perturbacional. Mediante este procedimiento se puede asociar a la parte real de la resonancia $E(Z, \lambda)$ un desarrollo formal en serie de potencias de λ . Para la parte real de la menor resonancia, E_0 , correspondiente a la distorsión del autovalor $1s$ del hamiltoniano hidrogenico, los coeficientes RS asociados a potencias impares de λ son nulos, con lo cual tenemos:

$$E_0(Z, \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E_0^{(n)} \gamma^n, \quad \gamma = \lambda^2 \quad (59.9)$$

Desde hace tiempo se conoce que el desarrollo (59.9) es asintótico divergente /31/, pero sumable a través del método de Borel /10/. En general, para los hamiltonianos sin espectro de estados ligados, la TPRS converge a la parte real de las resonancias (polos del resolvente).

Un gran esfuerzo ha sido realizado en los últimos años para determinar los coeficientes RS en función de los números cuánticos que describen el sistema. La corrección de cuarto orden en γ se obtuvo en forma analítica recién en 1974 /32/; la de quinto orden ha sido determinada utilizando el formalismo del §.8, introduciendo relaciones hiperviriales en coordenadas parabólicas /33,34/. Resultados numéricos para los coeficientes RS de diversos estados, han sido obtenidos en forma recursiva hasta órdenes muy elevados /35-41/, utilizando relaciones hiperviriales (§.8) y el método de la derivada logarítmica (§.9). El cálculo más completo para E_0 es el de Privman /40/ que ha determinado 30 coeficientes.

Dado el carácter divergente del desarrollo (59.9), se ha prestado mucha atención al estudio de la estructura asintótica de los coeficientes $E_0^{(n)}$. Dichos coeficientes pueden determinarse para órdenes muy elevados, haciendo uso de una relación de dispersión similar a la encontrada en el §.11 (ecs.(11.13) y (11.76)) /25,42/:

$$E_0^{(n)} = - \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \lambda^{-(2n+1)} \Gamma_0(\lambda) d\lambda \quad (59.10)$$

La ec.(59.10) ha sido generalizada de forma tal de tratar un estado cualquiera /43/. La determinación de $E^{(n)}$ según la ec.(59.10) requiere conocer el ancho de resonancia para $\lambda \rightarrow 0$, lo que implica la prolongación analítica del autovalor al campo complejo. La forma de $\Gamma_0(\lambda \rightarrow 0)$ ha sido estudiada desde hace tiempo /6,18/, si bien sólo recientemente ha sido obtenida en forma rigurosa /44/; el resultado es el siguiente:

$$\Gamma_0(\lambda) \rightarrow -\frac{4}{\lambda} e^{-2/3\lambda} \quad (59.11)$$

La estructura de $\Gamma(\lambda)$ es conocida para todos los estados en función de los números cuánticos /43,45-47/. Reemplazando (59.11) en (59.10) obtenemos el siguiente comportamiento asintótico:

$$E_0^{(n)} \rightarrow -\frac{4}{\pi} \left(\frac{3}{2}\right)^{2n+1} (2n)! \quad , \quad (59.12)$$

que corresponde a una divergencia muy fuerte. Notemos además que para $E_0(Z, \lambda)$, a diferencia de todos los modelos que hemos discutido previamente, los coeficientes RS son todos negativos.

Silverstone /35/ ha realizado un estudio exhaustivo del rango de utilidad de la TPRS en un amplio intervalo de valores de λ , truncando (59.9) de forma tal que el último término retenido $|\lambda^n E^{(n)}|$ fuera el menor de todos ellos. Esto último puede hacerse dado el carácter asintótico del desarrollo en serie de potencias (59.9). Fuera del intervalo investigado por Silverstone /35/, deben introducirse indefectiblemente métodos de suma para obtener resultados precisos para $E(Z, \lambda)$ utilizando la TPRS.

La aplicación de métodos de suma al problema de las resonancias Stark es menos exitosa que en otros modelos, principalmente debido a la no alternancia en signo de los coeficientes $E^{(n)}$. Cabe añadir a este respecto que la demostración de la convergencia del desarrollo (59.9) a través del método de Borel se basa en la convergencia de dicho desarrollo para campo imaginario puro ($\lambda^2 < 0$), para el cual la serie resulta oscilante en signo. Los aproximantes de Padé han sido utilizados para prolongar el rango de utilidad de la TPRS /50/, si bien su aplicación debe ser modificada apropiadamente para obtener resultados razonables para E y Γ en la zona de campos intermedios /49/.

Recientemente ha sido aplicado el método de las series renormalizada /50/ al efecto Stark, combinado con los aproximantes de Padé y con un método de estabilización. Austin /50/ siguiendo este método ha logrado obtener buenas aproximaciones a la parte real de las resonancias, utilizando 16 órdenes en la TP. Además, se ha mostrado que la fluctuación en los aproximantes de la serie renormalizada producida por el agregado del último coeficiente perturbacional es del orden de Γ /50/, lo que está de acuerdo con lo comentado previamente por Reinhardt /49/.

El objeto de este párrafo es discutir la aplicación del MF al efecto Stark utilizando los primeros órdenes de la TPRS. Por sencillez nos restringiremos en lo que hace a resultados numéricos, a la primer resonancia. Al igual que lo hicimos en capítulos anteriores, aplicaremos aquí el formalismo desarrollado en el §.44, si bien creemos oportuno agregar que hemos realizado una aplicación previa del formalismo del §.42 al efecto Stark, tal como se muestra en la ref./51/.

Para aplicar el MF necesitamos una relación de dilatación para $E(Z, \gamma)$. Dicha relación puede ser extraída sin inconvenientes a partir de las propiedades del hamiltoniano. Introduciendo una dilatación de las coordena-

das cartesianas en el operador (59.1), el teorema de Symanzik nos permite escribir la siguiente equivalencia unitaria (ver Apéndice A):

$$H(Z, \lambda) = \lambda^{2/3} H(Z\lambda^{-1/3}, 1) \quad , \quad (59.13)$$

de la cual se deduce la relación de dilatación buscada:

$$E(Z, \gamma) = \gamma^{1/3} E(Z\gamma^{-1/6}, 1) \quad , \quad (59.14)$$

y los exponentes correspondientes, $\beta=1/3$, $\alpha=-1/6$. Cabe comentar aquí que $E_0(Z, \gamma)$ presenta un comportamiento asintótico para $\gamma \gg 1$ muy diferente de una serie de potencias en $\gamma^{-1/6}$ /44/:

$$|E| \sim \gamma^{1/3} \left(\frac{1}{2} \ln \gamma \right)^{2/3} + O(\gamma^{1/3} \{ \ln \ln(\sqrt{\gamma}) \}^{-1/3}) \quad (59.15)$$

En este sentido tenemos para el efecto Stark una situación aún más anóma la que para el efecto Zeeman, ya que $\gamma^{-1/3} |E_0|$ no se mantiene finito cuando $1/\gamma \rightarrow 0$. Por ello no estudiaremos la convergencia para $\gamma \rightarrow \infty$ y sí aplicaremos aquí el MF con el fin de obtener resultados numéricos para $E(Z, \gamma)$, en el rango de valores $\gamma \lesssim 0, 1$.

Con los exponentes obtenidos arriba y la ec.(44.18), el MF nos dice que la función $E(l, \gamma)$ debe aproximarse por la secuencia renormalizada SE_N :

$$E(l, \gamma) \approx SE_N = \left(\frac{\gamma}{w} \right)^{1/3} S_N(k, w) \quad , \quad (59.16a)$$

$$S_N(k, w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad , \quad (59.16b)$$

donde los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ están dados por la ec.(44.14):

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{2-6j}{n-j} E^{(j)} k^{2-6j} \quad (59.17)$$

La ec.(44.7) nos proporciona el cambio de variables:

$$\gamma = w k^{-6} (1-w)^{-6} \quad , \quad (59.18)$$

que debe resolverse numéricamente para cada valor de γ .

Los cálculos para el efecto Stark mediante aplicación del MF, pueden llevarse a cabo con el Programa VII, salvo ligeras modificaciones que permitan aplicar las reglas de estabilidad a SE_N en lugar de $S_N(k, w)$. Sin embargo las propiedades del método para este problema son enteramente diferentes de las estudiadas hasta el momento, y que podemos suponer son características de los sistemas sin estados ligados. En primer lugar, podemos notar que al ser todos los coeficientes $E^{(n)}$ negativos, la se-

cuencia truncada de la TPRS:

$$s_N(\gamma) = \sum_{n=0}^N E^{(n)} \gamma^n, \quad (59.19)$$

es monótona decreciente, $s_N(\gamma) > s_{N+1}(\gamma)$, y no acotada inferiormente. Debido a este hecho hemos encontrado que SE_N , para cada γ y N , es una función monótona creciente de k , para $k > 0$. En este intervalo la función SE_N no posee PE ni PI.

Nuestros cálculos muestran que la secuencia SE_N sólo posee PI y PE (en cuyo caso es un mínimo aislado) si N es menor que un cierto valor que denominaremos N' y además $\rho = k^6 < 0$ (ec.(44.9b)). De acuerdo al lema 44.3 la raíz de (59.18) que satisface la condición antedicha es la que cumple $-1/5 \leq \omega \leq 0$ para $\{-(5/6)^5 / (6\gamma) = \rho_c\} \leq \rho \leq 0$. En este intervalo de valores de ω pueden aplicarse las reglas 1 y 2 de estabilidad; los PE y PI obtenidos satisfacen además los teoremas 44.1 y 44.2.

Cuando $N > N'$, debe utilizarse un criterio de estabilidad diferente al no existir PI ni PE. Para este sistema hemos encontrado conveniente determinar $\rho = \rho_N^*$ de acuerdo al siguiente criterio, para cada valor de γ :

$$\left(\frac{\partial SE_N}{\partial \rho}\right)_{(\rho=\rho_N^*)} = \left(\frac{\partial SE_{N-1}}{\partial \rho}\right)_{(\rho=\rho_N^*)} \quad (59.20)$$

La condición (59.20) merece un breve comentario. Si fijamos un par de valores de γ y ρ , y trazamos una línea continua que pase por los puntos (N, SE_N) (fig.19.1) obtenemos puntos de inflexión $\partial^2 SE_N / \partial N^2 = 0$ ubicados entre dos valores contiguos de N . En particular, la fig.19.1 muestra los resultados obtenidos para $\gamma=0,1$ y diferentes valores de ρ . Podemos extraer dos conclusiones a partir de tales puntos de inflexión: i) Los mismos constituyen una razonable aproximación a la parte real de la resonancia. ii) El hecho que los puntos de inflexión surjan, para un valor de ρ dado, con el agregado de términos perturbacionales tiene similitud con lo que ocurre al aplicar el método de Rayleigh-Ritz a problemas sin estados ligados /22-24/. Para llevar a cabo tales cálculos se suelen utilizar diferentes bases de funciones parametrizadas, y las resonancias pueden ser aproximadas a través de puntos de inflexión que aparecen al efectuar los cálculos con un número creciente de funciones de base variacionales /22-24/. Es realmente revelador verificar que el MF conduce a un resultado similar para la TPRS, donde el número de correcciones perturbacionales jugaría el papel del tamaño de la base de funciones en los métodos variacionales.

Obviamente los puntos de inflexión en función de N no pueden determinarse ya que N es una variable discreta. Sin embargo, la ec.(59.20) determina aproximadamente la ubicación de los mismos, y es más fácil de resolver. Debido a ello utilizaremos la ec.(59.20) para obtener k_N^* , si $N > N'$.

Para poder aplicar el criterio (59.20) a la secuencia SE_N se debe determinar N' para cada valor de γ . Este problema lo hemos resuelto calculando N' como el menor entero positivo que satisface:

$$0 < \lim_{\rho \rightarrow \rho_c} \left(\frac{\partial SE_{N'}}{\partial \rho} \right) \leq \lim_{\rho \rightarrow \rho_c} \left(\frac{\partial SE_N}{\partial \rho} \right) , \quad N \geq N' , \quad (59.21)$$

lo cual nos asegura que $(\partial SE_N / \partial \rho) > 0$ para todo $\rho > \rho_c$ y $N \geq N'$. La determinación de N' nos da el punto de partida para construir la secuencia óptima:

$$SE_N = \left(\frac{\gamma}{w} \right)^{1/3} S_N(\rho_{N'}^*, w) , \quad (59.22)$$

para cada valor de γ . Para el mayor valor de γ que hemos considerado, esto es $\gamma = 0,1$, se encuentra $N' = 1$ según la ec.(59.21), por lo que la secuencia $S_N(\rho_{N'}^*, w)$ para dicho valor de γ está totalmente determinada por el criterio (59.20). La fig.19.2 muestra la convergencia de la secuencia SE_N en función de N , para $N \leq 10$. Los coeficientes perturbacionales utilizados se extrajeron de la ref./40/.

Según se aprecia SE_N parece convergir a un resultado ligeramente superior al 'exacto' /19,49/, si bien el error cometido disminuye al disminuir γ , haciéndose en ese caso la convergencia más rápida.

La Tabla 19.1 compara los resultados obtenidos mediante SE_{10} con los 'exactos' /19,49/ y con los derivados por Austin /50/ mediante las series renormalizadas. Hemos agregado también el aproximante diagonal de Padé (Apéndice D) |5/5| que involucra el mismo número de correcciones perturbacionales que SE_{10} . También se han incluido, por completitud, los valores de $\rho_{N'}^*$ para cada valor de γ , correspondientes en este caso a soluciones de la ec.(59.20). A partir de la Tabla 19.1 se pueden extraer las siguientes conclusiones: i) El MF permite obtener mejores resultados que los aproximantes de Padé del mismo orden, si bien en este caso las diferencias no son tan marcadas, como sucedía en los problemas previamente tratados. ii) Los resultados obtenidos son perfectamente comparables a los de Austin /50/. Cabe tomar en cuenta que éstos últimos corresponden a una estabilización de aproximantes |N/N|, construídos con una serie renormalizada y con $6 \leq N \leq 16$. Evidentemente el MF permite obtener resultados similares con mucho menor esfuerzo y utilizando un menor número de coeficientes RS. iii) En todo el rango de valores de γ estudiado se verifica:

$$|SE_{10} - E(1, \gamma)| < \Gamma , \quad (59.23)$$

lo que es una medida adicional de la precisión alcanzada /50/.

Cabe añadir finalmente que recientemente hemos investigado la estructura de la transformación conforme entre los planos complejos λ y w representada por la ec.(59.15) /52/. Hemos podido encontrar que la misma es multivaluada para ciertos valores de $Re \lambda$ finito, a diferencia de todas las estudiadas en capítulos anteriores. Este hecho sugiere una posible explicación para las diferentes propiedades de convergencia arriba mencionadas para el efecto Stark. Este problema se continúa estudiando actualmente en nuestro laboratorio.

§.60. COTAS SUPERIORES E INFERIORES A LA PARTE REAL DE LAS RESONANCIAS DEL EFECTO STARK.

La aplicación del MF al efecto Stark para el átomo de hidrógeno presenta una muy interesante consecuencia, como es la obtención de cotas superiores e inferiores a la parte real de las resonancias. El argumento que presentaremos dista de ser una demostración rigurosa, pero verificaremos que las consecuencias que de él se derivan son correctas.

La parte real de la resonancia, $E(l, \gamma)$, se hace más negativa a medida que aumenta la intensidad, $\lambda = \gamma^{1/2}$, del campo eléctrico aplicado. Utilizando la notación del §.59 esto significa que

$$s_0 > E(l, \gamma) \quad , \quad \text{para todo } \gamma > 0 \quad (60.1)$$

Por otro lado sabemos que s_N posee las siguientes propiedades (§.59):

$$s_N > s_{N+1} \quad , \quad \lim_{N \rightarrow \infty} s_N(\gamma) = -\infty \quad , \quad \gamma > 0 \quad (60.2)$$

Uniendo (60.1) y (60.2) llegamos a la conclusión que debe existir un número entero positivo M tal que:

$$s_N(\gamma) > E \quad , \quad N \leq M \quad ; \quad s_N(\gamma) < E \quad , \quad N > M \quad (60.3)$$

Es evidente que la determinación de M nos proveerá cotas superiores e inferiores a $E(l, \gamma)$.[⊗] Cabe comentar que el estudio que encararemos de las propiedades de la secuencia $s_N(\gamma)$ es totalmente diferente del llevado a cabo por Silverstone /35/, quién no determinó cotas para $E(l, \gamma)$.

Para determinar M utilizaremos el MF. La secuencia que construimos para aproximar $E(l, \gamma)$ satisface una desigualdad similar a (60.2):

$$SE_N(\rho_N^*) > SE_{N+1}(\rho_{N+1}^*) \quad , \quad \rho_N^* = (k_N^*)^6 \quad , \quad (60.4)$$

donde ρ_N^* , determinado de acuerdo al criterio establecido por la ec.(59.20), satisface:

$$\left(\frac{\partial \rho_N^*}{\partial N} \right)_\gamma > 0 \quad (60.5)$$

Por otro lado a partir de la ec.(59.21) conocemos la variación de SE_N con ρ :

⊗ A similar procedure has been invoked recently by Burrows et al /52a) to provide bounds to the exact energy of different systems

$$\left(\frac{\partial SE_N}{\partial \rho}\right)_\gamma > 0, \quad \rho_c < \rho < 0, \quad N \geq N', \quad \rho_c = -\frac{1}{6\gamma} \left(\frac{5}{6}\right)^5, \quad (60.6a)$$

$$\left(\frac{\partial SE_N}{\partial \rho}\right)_\gamma > 0, \quad \text{para todo } N \text{ si: } \rho > 0 \quad (60.6b)$$

Dado que ρ puede ser negativo utilizaremos de aquí en más esta variable en lugar de k .

Bajo ciertas condiciones, las secuencias SE_N y s_N se pueden vincular. A tal efecto tomemos en cuenta que si $k \ll 1$, luego $\gamma \rightarrow \gamma k^{-6}$ (ec.(59.18)); por otro lado a partir de la ec.(59.17) se deduce que $\bar{E}^{(n)} \rightarrow E^{(n)} k^{-6n+2}$, de donde se concluye que $S_N(k, \gamma) \rightarrow s_N(\gamma) k^2$. Finalmente la ec.(59.16) nos permite encontrar:

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} SE_N = s_N(\gamma) \quad (60.7)$$

A partir de las ecs.(60.6b) y (60.7) se deduce:

$$SE_N > s_N(\gamma), \quad \text{si } \rho_N^* > 0 \quad (60.8)$$

La cuestión que ahora queda abierta es, naturalmente, determinar el valor de N para que se cumpla la condición $\rho_N^* > 0$.

Introducimos en este punto una hipótesis de trabajo, bastante razonable, consistente en aceptar que el MF conduce siempre a mejores resultados que la serie original divergente, esto es:

$$|SE_N - E| < |s_N - E|, \quad \text{para todo } N \text{ y } \rho_c < \rho. \quad (60.9)$$

Utilizando la propiedad (60.9) y la desigualdad (60.8) se encuentra:

$$E(1, \gamma) > s_N(\gamma), \quad \text{si } \rho_N^* > 0 \quad (60.10)$$

Definamos ahora un entero positivo N^* tal que:

$$0 < \lim_{\rho \rightarrow 0} \left(\frac{\partial SE_{N^*}}{\partial \rho}\right)_\gamma \leq \lim_{\rho \rightarrow 0} \left(\frac{\partial SE_N}{\partial \rho}\right)_\gamma, \quad N \geq N^* \quad (60.11)$$

La ec.(60.6a) nos asegura que:

$$N' < N^*, \quad (60.12)$$

ya que $\rho_c < 0$. Si ahora tomamos en cuenta que ρ_N^* crece con N (ec.(60.5)) cuando se usa el criterio (59.20), y que por otro lado SE_N cumple (60.4), es evidente que N^* determina, a partir de la definición (60.11), una secuencia con la siguiente propiedad:

$$\rho_N^* > 0, \quad \text{para todo } N > N^* \quad (60.13)$$

Las desigualdades (60.13), (60.8) y (60.10) nos permiten obtener:

$$E(1,\gamma) > s_N(\gamma) , \quad N > N^* \quad (60.14)$$

Por otro lado, la definición (60.3) se puede vincular con (60.14), de lo que deducimos:

$$M < N^* + 1 \quad (60.15)$$

Ahora bien, considerando que la secuencia de valores positivos de ρ_N^* comienza con la condición (60.13), la desigualdad (60.12) nos permite escribir:

$$\rho_c < \rho_{N'}^* < 0 , \quad (60.16)$$

siempre de acuerdo al criterio (59.20). Utilizando ahora la desigualdad (60.6a) y la ec.(60.7) encontramos:

$$SE_{N'} < s_{N'}(\gamma) \quad (60.17)$$

Introduciendo la hipótesis (60.9) obtenemos el resultado siguiente:

$$E(1,\gamma) < s_{N'}(\gamma) , \quad (60.18)$$

que completa nuestro análisis al proporcionarnos:

$$N' < M \quad (60.19)$$

En resumen, el MF nos permite acotar los resultados exactos $E(1,\gamma)$ por medio de secuencias perturbacionales:

$$s_{N'}(\gamma) < E(1,\gamma) < s_{N^*+1}(\gamma) , \quad (60.20)$$

donde N' y N^* se determinan para cada γ según las ecs.(59.21) y (60.11), respectivamente. La Tabla 19.2 nos muestra los valores de N' , N^* , $s_{N'}$, y s_{N^*+1} para $\lambda \leq 0,1$, comparados con valores muy precisos de la parte real de la resonancia /19,49/. Obviamente se verifica (60.20) para todos los valores de intensidad de campo estudiadas.

REFERENCIAS DEL CAPITULO XIX.

- /1/ E. Schrödinger, Ann. Physik 80 (1926) 437.
/2/ P.S. Epstein, Phys. Rev. 28 (1926) 695.
/3/ G. Wentzel, Z. Physik 38 (1926) 518.
/4/ I. Waller, Z. Physik 38 (1926) 635.
/5/ Y. Ishida and S. Hiyama, Sci. Papers Inst. Phys. Chem. Res. (Tokyo) 9 (1928) 1.
/6/ J.R. Oppenheimer, Phys. Rev. 31 (1928) 66.
/7/ C. Lanczos, Z. Physik 62 (1930) 518; 65 (1930) 431; 68 (1931) 204.
/8/ H.A. Bethe and E.E. Salpeter, Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, Springer, Berlin, 1957.
/9/ H.G. Kuhn, Atomic Spectra, Longmans, London, 1962.
/10/ S. Graffi and V. Grecchi, Commun. Math. Phys. 62 (1978) 83.
/11/ R.F. Stebbings, Science 193 (1976) 537.
/12/ M.G. Littman, M.L. Zimmerman and D. Kleppner, Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 486.
/13/ P.M. Koch, Phys. Rev. Lett. 41 (1978) 99.
/14/ H.J. Beyer and H. Kleinpoppen, Int. J. Quantum Chem. S 11 (1978) 271.
/15/ S. Feneuille, S. Liberman, J. Pinard and A. Taleb, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 1404.
/16/ D. Kleppner, Atoms in Very Strong Fields, en: R. Balian and J.C. Adams (Ed.), Les Houches 1980, Session XXXVI, Course 7, North Holland, 1982.
/17/ L.I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill-Kogakusha, International Student Edition, Tokyo, 1968.
/18/ L.D. Landau and E.M. Lifshits, Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, Pergamon, London, 1958.
/19/ M.H. Alexander, Phys. Rev. 178 (1969) 34.
/20/ R.J. Damburg and V.V. Kolosov, J. Phys. B 9 (1976) 3149.
/21/ E. Luc-Koenig and A. Bachelier, J. Phys. B 13 (1980) 1743. V.V. Kolosov
/22/ A.U. Hazi and H.S. Taylor, Phys. Rev. A 1 (1970) 1109. J. Phys. B 20 (1987) 2359
/23/ C.H. Maier, L.S. Cederbaum and W. Domcke, J. Phys. B 13 (1980) L 119.
/24/ J. Killingbeck, Phys. Lett. A 78 (1980) 235; M. Garcia-Sucre and ©
/25/ I.W. Herbst and B. Simon, Phys. Rev. Lett. 41 (1978) 67.
/26/ B. Simon, Int. J. Quantum Chem. 14 (1978) 529.
/27/ Ver el volumen: Int. J. Quantum Chem. 14(1) (1978).
/28/ M.H. Rice and R.H. Good, J. Opt. Soc. Am. 52 (1962) 239.
/29/ D. Bekenstein and J.B. Krieger, Phys. Rev. 188 (1969) 130.
/30/ J.A.C. Gallas, H. Walther and E. Werner, Phys. Rev. A 26 (1982) 1775.

³ R. Jofre, Chem. Phys. Lett. 130 (1986) 240; V.C. Aguilera-Navarro

J Phys. B 19 (1986) 2979

- /31/ E.C. Titchmarsh, Eigenfunction Expansions, Oxford University Press, Oxford, 1946.
- /32/ S.P. Alliluev and I.A. Malkin, Sov. Phys.-JETP 39 (1974) 627.
- /33/ E.J. Austin, Mol. Phys. 40 (1980) 893.
- /34/ C.S. Lai, Phys. Lett. A 83 (1981) 322.
- /35/ H.J. Silverstone, Phys. Rev. A 18 (1978) 1853.
- /36/ M. Grant and C.S. Lai, Phys. Rev. A 20 (1979) 718.
- /37/ S.P. Alliluev, V.L. Eletsky and V.S. Popov, Phys. Lett. A 73 (1979) 103.
- /38/ S.P. Alliluev, V.L. Eletsky, V.S. Popov and V.M. Weinberg, Phys. Lett. A 78 (1980) 43.
- /39/ S.P. Alliluev, V.M. Vainberg, V.L. Eletskii and V.S. Popov, Sov. Phys. Dokl. 25 (1980) 851.
- /40/ V. Privman, Phys. Rev. A 22 (1980) 1833.
- /41/ C.S. Lai, Phys. Rev. A 23 (1981) 455.
- /42/ I.W. Herbst and B. Simon, Commun. Math. Phys. 80 (1981) 181.
- /43/ H.J. Silverstone, B.G. Adams, J. Cizek and P. Otto, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1498.
- /44/ L. Benassi, V. Grecchi, E. Harrell and B. Simon, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 704.
- /45/ T. Yamabe, A. Tachibana and H.J. Silverstone, Phys. Rev. A 16 (1977) 877.
- /46/ R.J. Damburg and V.V. Kolosov, J. Phys. B 11 (1978) 1921.
- /47/ H.J. Silverstone, E. Harrell and C. Grot, Phys. Rev. A 24 (1981) 1925.
- /48/ H.J. Silverstone and P.M. Koch, J. Phys. B 12 (1979) L 537.
- /49/ W.P. Reinhardt, Int. J. Quantum Chem. 21 (1982) 133.
- /50/ E.J. Austin, J. Phys. A 17 (1984) 367.
- /51/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, "A Method for Summation of Perturbation Series", Physica A (~~en prensa~~). 128 (1984) 589
- /52/ G.A. Arteca, F.M. Fernández y E.A. Castro, resultados no publicados.

② B.L. Burrows, M. Cohen and T. Feldman, J. Phys. A 20 (1987) 889

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XIX)

Tabla 19.1

Primera resonancia para el efecto Stark del átomo de hidrógeno en función del campo aplicado λ .

λ	$(k_{10}^*)^6$	$-SE_{10}$ ^{a)}	$- 5/5 $ ^{b)}	$-E$ ^{c)}	$-E$ ^{d)}
0,03	11,30	0,502742749	0,50274261		0,502742726
0,04	50,42	0,503771750	0,50378279	0,503772	0,5037715
0,05	124,43	0,50610205	0,5061030	0,506076	0,5061054
0,06	236,94	0,5091572	0,509903	0,509205	0,5092036
0,08	693,25	0,517053	0,517262	0,517121	0,517559
0,10	1634,45	0,52588	0,539636	0,526333	0,527425 ^{e)}

a) Calculado mediante las ecs.(59.20) y (59.22).

b) Aproximante de Padé $|5/5|$.

c) Promedio de aproximantes de Padé $|N/N|$, $6 \leq N \leq 16$, construídos a partir de series renormalizadas (ref./50/).

d) Resultados "exactos" obtenidos variacionalmente (ref./19/).

e) Resultado "exacto" (ref./49/).

Tabla 19.2

Cotas superiores e inferiores a la primera resonancia del efecto Stark en el átomo de hidrógeno (ver §.60).

λ	$N^a)$	$N^{*b)}$	$-s_{N^a}$	$-s_{N^{*+1}}$	$-E^c)$
0,03	9	10	0,502074269	0,502074276	0,5020742726
0,04	6	7	0,503770659	0,503772207	0,5037715
0,05	3	5	0,50604885	0,50611505	0,5061054
0,06	3	4	0,50904886	0,50929989	0,50920360
0,08	2	3	0,5166752	0,51929425	0,5175595
0,10	1	2	0,5225	0,53296246	0,5274248 ^{d)}

a)
Calculado con la ec.(59.21).

b)
Calculado con la ec.(60.11).

c)
Resultados "exactos" (ref./19/).

d)
Resultado "exacto" (ref./49/).

LEYENDAS PARA LAS FIGURAS (Capítulo XIX)

Fig.19.1: Dependencia de la secuencia SE_N con N para diferentes valores de ρ para la parte real de la menor resonancia del efecto Stark en el átomo de hidrógeno.
(Los resultados corresponden al campo $\lambda=0,1$)

Fig.19.2: Convergencia de la secuencia $SE_N(\rho=\rho_N^*)$ para $\lambda=0,1$, para la menor resonancia del efecto Stark en el átomo de hidrógeno.

Fig. 19.1

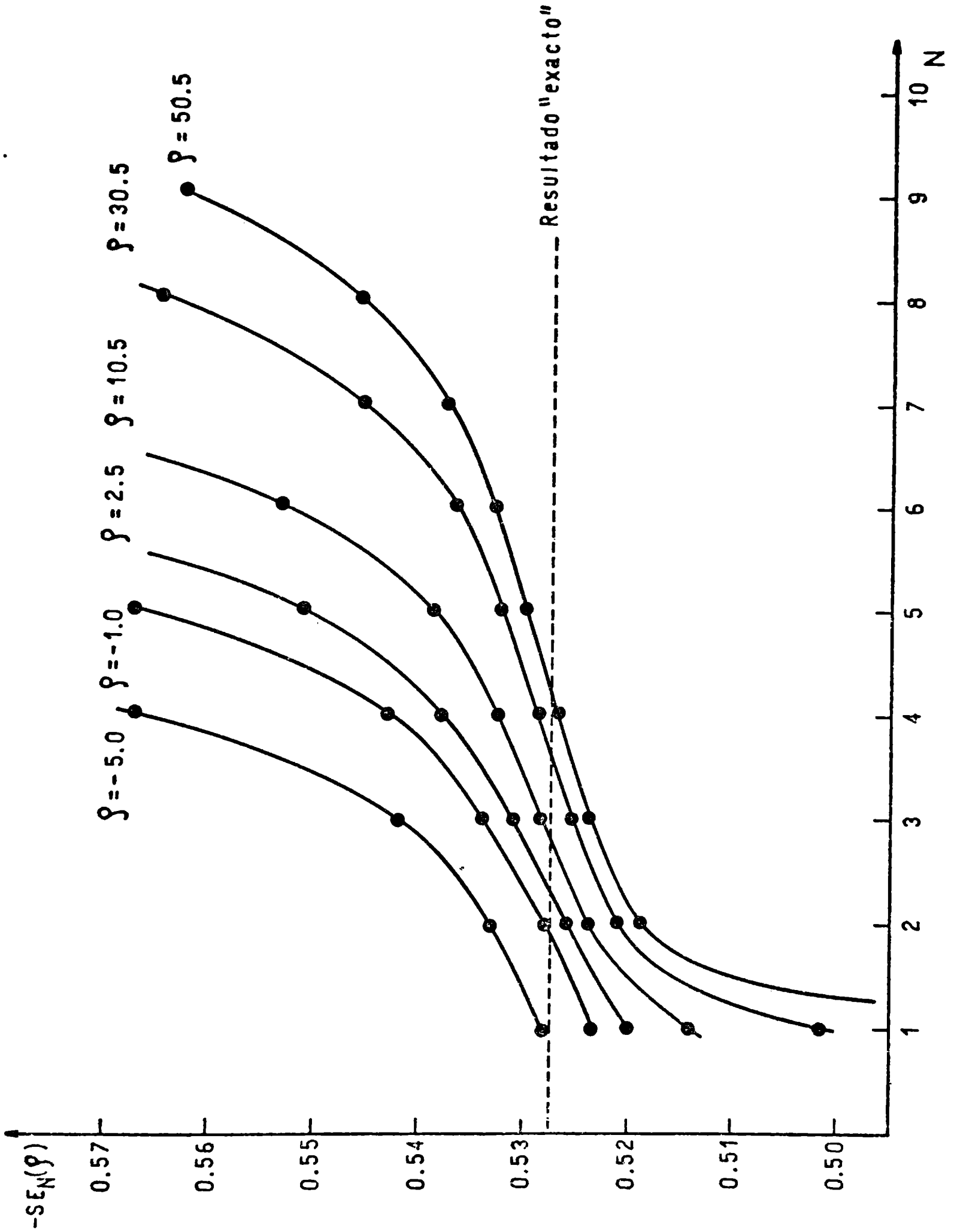
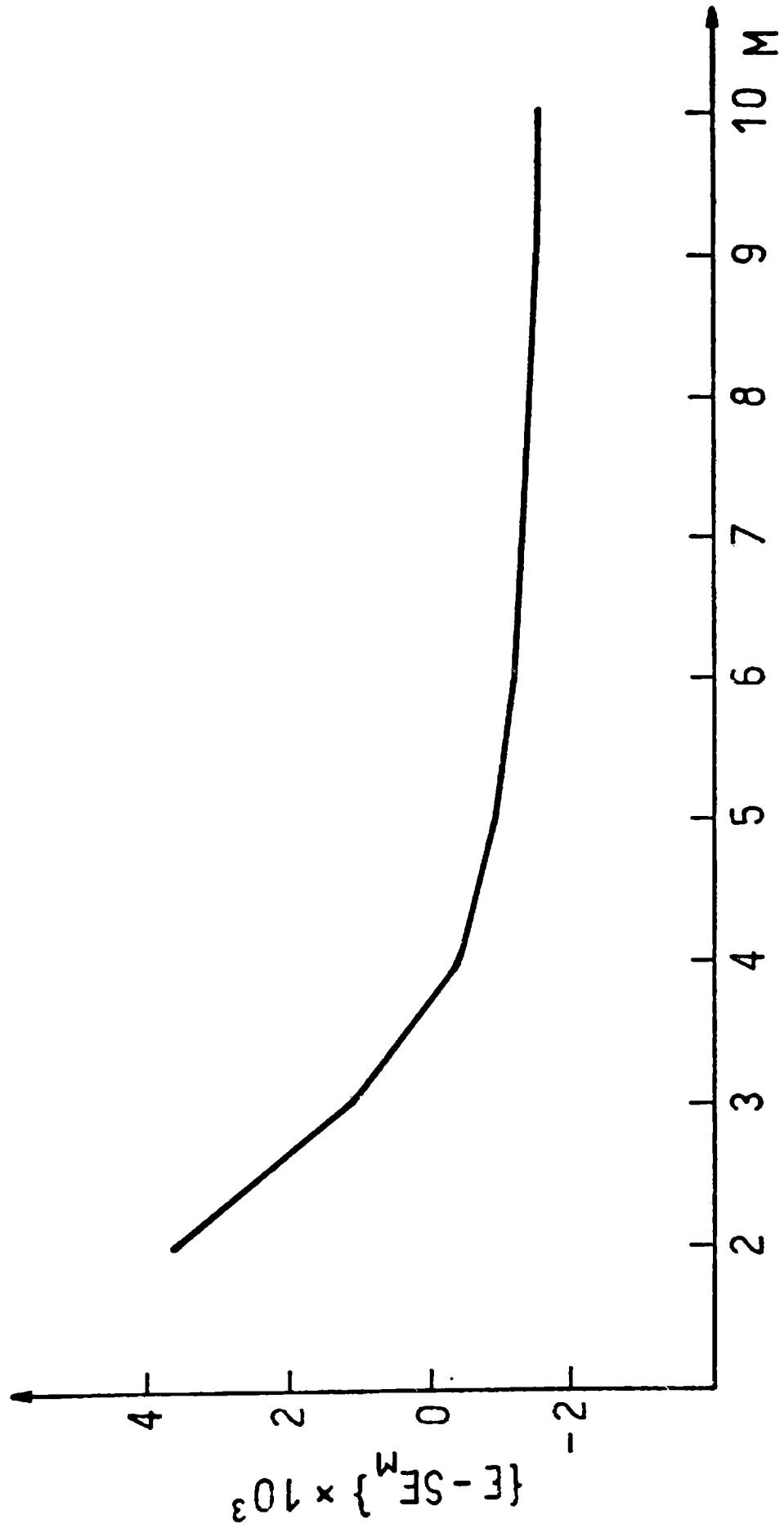


Fig. 19.2



CAPITULO XX

MF PARA ESTUDIAR LOS POTENCIALES VIBRACIONALES DE MOLECULAS
DIATOMICAS.

§.61. POTENCIALES VIBRACIONALES DE MOLECULAS DIATOMICAS.

Cuando se desea aproximar la energía electrónica de las moléculas diatómicas mediante la utilización de la información analítica disponible, existen tres posibles procedimientos que pueden seguirse, a saber: estudiar la energía electrónica desde el límite de los átomos unidos, hacerlo desde el límite de los átomos infinitamente separados o bien desde la posición molecular de equilibrio. Este último caso corresponde solamente a estados moleculares ligantes.

La primera aproximación ha sido estudiada desde diferentes puntos de vista /1-4/. En el límite de los átomos unidos, la energía electrónica $E(R)$ se puede escribir en términos de la separación internuclear R de la siguiente manera:

$$E(R) = E_0 + E_2R^2 + E_3R^3 + E_4R^4 + E_5R^5 (1 - C \ln R) + \dots, \quad (61.1)$$

siendo E_0 la energía de los átomos unidos. $E(R)$ es el autovalor del hamiltoniano electrónico, en el contexto de la aproximación de Born-Oppenheimer. Los términos logarítmicos en el desarrollo (61.1) son característicos de los sistemas compuestos por un solo electrón /3,4/, y aparecen también en órdenes superiores del desarrollo. La expresión (61.1) es válida sólo para valores muy pequeños de R , y además los coeficientes E_n con $n > 2$ son conocidos para muy pocos sistemas. Debido a este hecho, y a la presencia de términos logarítmicos, no es simple ni práctico realizar la prolongación analítica del desarrollo (61.1), con el fin de calcular la energía electrónica para todo valor de R . Información adicional puede extraerse de la ref./5/.

La segunda aproximación, esto es, el desarrollo asintótico de la energía electrónica para distancias internucleares grandes es un punto de vista que ha despertado un notorio interés recientemente. Actualmente, todo el conocimiento que se posee para este problema está prácticamente limitado al estado fundamental de la molécula ión hidrógeno (H_2^+). El hamiltoniano electrónico para esta molécula es:

$$H(R) = \frac{1}{2} p^2 - \frac{1}{r} - \frac{1}{|\vec{R}-\vec{r}|} \quad (61.2)$$

Para el estado fundamental $\sigma_g 1s$, el límite de átomos infinitamente separados corresponde a disociación en $H(1s)+H^+$. En este caso, la energía electrónica posee una complicada dependencia asintótica con R dada por /6-8/:

$$E(R) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} R^{-n} = 4R e^{-(R+1)} (1 + O(R^{-1})), \quad R \gg 1, \quad (61.3)$$

donde todos los coeficientes $E^{(n)}$ son negativos /8/:

$$E^{(0)} = -1/2; \quad E^{(1)} = -1; \quad E^{(2)} = -9/4, \text{ etc} \quad (61.4)$$

Obviamente, para calcular en forma analítica la energía electrónica para un valor arbitrario de R es menester sumar el desarrollo (61.4). Sin embargo es conocido que el mismo es fuertemente divergente /8-10/ ya que:

$$|E^{(n)}| \sim e^{-2(n+1)!} 2^{-n}, \quad (61.5)$$

lo que nos conduce a un desarrollo con radio de convergencia nulo. Se ha conjeturado además que el mismo no es sumable a través del método de Borel.

Recientemente ha comenzado a discutirse la aplicación de los diferentes métodos de suma de series de potencias, para sacar provecho de la enorme cantidad de información contenida en la ec.(61.3) /11/, pero no se cuenta hasta el momento con resultados exitosos. Cabe acotar en este sentido que el desarrollo (61.3) posee varias características que, según vimos en capítulos precedentes, hacen problemática su aproximación mediante el MF: el comportamiento asintótico de $E(R)$ no es un desarrollo puro en serie de potencias inversas de R y la serie divergente no es oscilante en signo. Cabe comentar que el término exponencial que aparece en la ec.(61.3) está ligado al desdoblamiento, para valores finitos de R , entre las energías electrónicas de los estados moleculares $\sigma_g 1s$ y $\sigma_u 2p$, que son degenerados en el límite de átomos infinitamente separados /8-11/. Este comportamiento no puede ser descrito mediante la TPRS, que sólo aproxima, a través del desarrollo en serie de potencias de R^{-1} , la semi-suma de las energías del mencionado par de estados. Nuestra experiencia nos permite conjeturar que la serie renormalizada desarrollada en el §.44 no convergirá, probablemente, al límite correcto para $R \rightarrow 0$.

A diferencia de las dos aproximaciones antes mencionadas, el estudio de las propiedades de la energía electrónica alrededor de la posición de equilibrio (mínimo del potencial para el movimiento nuclear) ha permitido obtener mucha información para un gran número de moléculas. Debido al interés que posee este problema, dedicaremos el resto de este parágrafo al mismo, siempre teniendo en vista la posible aplicación del MF.

Cuando se estudian las propiedades electrónicas de las moléculas diatómicas en la vecindad de la posición de equilibrio, es posible construir en forma directa el llamado potencial vibracional $U(R)$, esto es la suma de la energía electrónica y el potencial de repulsión internuclear. Este potencial, como veremos, puede aproximarse en términos de un desarrollo en serie de potencias que, a diferencia de todos los estudiados previamente, es empírico. Esto significa que se deben utilizar resultados experimentales para construirlo.

Para los estados ligantes en los que estamos interesados, la fuente natural para extraer dicha información es la espectroscopía rotovibracional, y existen trabajos muy completos sobre el aprovechamiento de tales datos experimentales /5,12-14/. En el caso que la interacción fuera predominantemente repulsiva, las experiencias de dispersión (scattering) serán obviamente las que deberán utilizarse para estudiar las propiedades del potencial.

La información más relevante para generar una expresión completa para el potencial de un estado ligante, está constituida por la energía de los niveles vibracionales (asociados a las frecuencias vibracionales medidas) y las constantes rotacionales correspondientes. En lo que resta de este párrafo mostraremos brevemente cómo se utilizan dichas constantes.

Consideremos el movimiento nuclear en una molécula diatómica. El problema puede ser descrito en la aproximación de Born-Oppenheimer, mediante la ecuación de Schrödinger para un solo cuerpo con masa reducida μ y teniendo como coordenada a la separación internuclear R :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + \frac{K}{R^2} + U(R) \right\} \chi_{nJ}(R) = E_{nJ} \chi_{nJ}(R) , \quad (61.6)$$

donde $J(J+1)\hbar^2 = 2\mu K$ es el autovalor del momento angular L^2 , y $\chi_{nJ}(R)$ y E_{nJ} son, respectivamente, las autofunciones y autovalores del hamiltoniano nuclear. La ecuación anterior puede reescribirse en una forma más conveniente si definimos a la función de onda del siguiente modo:

$$\chi_{nJ}(R) = R^{-1} P_{nJ}(\lambda) , \quad (61.7)$$

donde:

$$\lambda = (R - R_e) / R_e , \quad (61.8)$$

y R_e es la separación nuclear de equilibrio:

$$U(R_e) = \min_{(R)} U(R) \quad (61.9)$$

Introduciendo (61.7) en (61.6) y teniendo presente el siguiente resultado auxiliar:

$$\frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} \chi_{nJ}(R) = \frac{R}{R_e^2} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} P_{nJ}(\lambda) , \quad (61.10)$$

se deduce:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu R_e^2} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + \frac{K}{R^2} + U(R) \right\} P_{nJ}(\lambda) = E_{nJ} P_{nJ}(\lambda) \quad (61.11)$$

Para construir el potencial $U(R)$, el procedimiento usual es desarrollar-

lo en serie de Taylor alrededor del mínimo, esto es:

$$U(R) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} U^{(m)}(R_e) (R-R_e)^m = U(R_e) + \sum_{m=2}^{\infty} \left\{ \frac{1}{m!} R_e^m U^{(m)}(R_e) \right\} \lambda^m \quad (61.12)$$

La ec.(61.12) nos permite definir el denominado potencial de Dunham /15/, que utilizando la notación que es usual se escribe:

$$V(\lambda) = U(R) - U(R_e) = a_0 \lambda^2 (1 + a_1 \lambda + a_2 \lambda^2 + \dots) \quad (61.13)$$

Los coeficientes a_n , $n \geq 0$, son denominados coeficientes de Dunham y deben determinarse mediante medidas experimentales. A tal efecto desarrollamos el término en R^{-2} (centrípeto) en la ec.(61.11) en serie de potencias de λ . Para ello escribimos:

$$\frac{1}{R^2} = \frac{1}{R_e^2} (1+\lambda)^{-2} = \frac{1}{R_e^2} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) (-\lambda)^n, \quad (61.14)$$

lo que finalmente nos permite expresar el potencial efectivo para el movimiento nuclear de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{K}{R^2} + V(\lambda) &= B_e J(J+1) - 2J(J+1)B_e \lambda + \lambda^2 (a_0 + 3B_e J(J+1)) \\ &+ \sum_{n=3}^{\infty} \lambda^n \{ a_0 a_{n-2} + (-1)^n (n+1) B_e J(J+1) \}, \end{aligned} \quad (61.15a)$$

siendo B_e la constante rotacional asociada a la posición de equilibrio:

$$B_e = \hbar^2 / (2\mu R_e^2) \quad (61.15b)$$

Es evidente que al ser el potencial efectivo un desarrollo en serie de potencias de λ , los autovalores E_{nJ} serán los de un oscilador anarmónico rotante. Si retenemos sólo los términos hasta el segundo orden:

$$\begin{aligned} \frac{K}{R^2} + V(\lambda) &\approx B_e J(J+1) - 2J(J+1)B_e \lambda + \{ a_0 + 3J(J+1)B_e \} \lambda^2 \\ &= B_e J(J+1) + (a_0 + 3J(J+1)B_e) \left\{ \lambda - \frac{B_e J(J+1)}{a_0 + 3J(J+1)B_e} \right\}^2 \\ &- \frac{B_e^2 J^2 (J+1)^2}{a_0 + 3J(J+1)B_e}, \end{aligned} \quad (61.16)$$

el hamiltoniano nuclear se puede escribir aproximadamente como el de un

oscilador armónico:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu R_e^2} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + U(R_e) + J(J+1)B_e - \frac{B_e^2 J^2 (J+1)^2}{a_0 + 3J(J+1)B_e} + (a_0 + 3J(J+1)B_e) \left\{ \lambda - \frac{B_e J(J+1)}{a_0 + 3J(J+1)B_e} \right\}^2 + O(\lambda^3), \quad (61.17)$$

cuyos autovalores constituyen una aproximación a la energía de los estados rotovibracionales. Estos son:

$$E_{nJ} \approx U(R_e) + J(J+1)B_e + (n + \frac{1}{2})\hbar w_e(J) - \frac{B_e^2 J^2 (J+1)^2}{a_0 + 3J(J+1)B_e} + \quad (61.18)$$

donde la frecuencia $w_e(J)$ está dada por:

$$w_e(J) = \left\{ \frac{2}{\mu R_e^2} (a_0 + 3J(J+1)B_e) \right\}^{1/2} \quad (61.19)$$

La ec.(61.18) nos sugiere que los autovalores E_{nJ} pueden expresarse en términos de n y J de la siguiente manera:

$$E_{nJ} = \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} Y_{rs} (n+1/2)^r J^s (J+1)^s, \quad (61.20)$$

donde algunos de los primeros coeficientes Y_{rs} son:

$$Y_{00} = U(R_e), \quad Y_{01} = B_e, \quad Y_{10} = \hbar w_e(0) = \hbar \left(\frac{2a_0}{\mu R_e^2} \right)^{1/2} \\ Y_{02} = -B_e^2/a_0, \quad \text{etc} \quad (61.21)$$

El procedimiento que debe seguirse entonces para determinar los coeficientes de Dunham, comienza con el ajuste del espectro rotovibracional mediante una expresión como la (61.20), y luego las constantes $\{a_n\}$ se expresan en términos de los coeficientes $\{Y_{rs}\}$.

Debe notarse que para obtener los coeficientes de las potencias de $(n+1/2)^r$ con $r \geq 2$, es necesario incluir los términos anarmónicos del potencial efectivo. Esta última extensión introduce una gran complicación ya que se deben calcular los autovalores de un oscilador anarmónico, por lo que es necesario recurrir a métodos aproximados. El procedimiento originalmente seguido por Dunham /15/, y que es uno de los más apropiados, consiste en aplicar el método JWKB hasta el primer orden, utilizando la transformación de Langer /16/ para reemplazar $J(J+1)$ por $(J+1/2)^2$. Posteriormente el procedimiento ha sido extendido a órdenes superiores de la aproximación semiclassical /17,18/. Con estos métodos es posible conocer en forma analítica unos 5 o 6 coeficientes $\{a_n\}$ en términos de las constantes $\{Y_{rs}\}$ (ver por ejemplo la ref./14/).

Es notorio, a partir de las ecuaciones anteriores, que existen más

coeficientes $\{Y_{rs}\}$ que coeficientes de Dunham, cuando se trunca la serie hasta un orden dado de λ . En consiguiente, la determinación de estos últimos debe ser complementada con un análisis de consistencia interna. Cabe comentar que una inconsistencia en los resultados puede ser reveladora de ciertos fenómenos, como por ejemplo la no validez de la aproximación adiabática de Born-Oppenheimer /15,17,19,20/.

El manejo de la serie de Dunham (ec.(61.23)) posee varios inconvenientes, una vez que un cierto número de coeficientes $\{a_n\}$ logra ser determinado para una dada molécula diatómica. Por ejemplo, existen importantes errores en los coeficientes a_n debidos a la truncación de potencial $V(\lambda)$, los que aumentan con el orden n . Naturalmente estos errores traerán aparejado algún tipo de inconvenientes para valores de R algo alejados de R_e .

Sin embargo existe un inconveniente de naturaleza más profunda, y que es el que más nos interesa desde el punto de vista de esta obra. El problema es el siguiente: cuando $R \rightarrow 0$, el comportamiento dominante del potencial será la repulsión internuclear, en cuyo caso tendremos en la ec.(61.11) que $U(R) \rightarrow R^{-1}$. Por consecuencia, el potencial de Dunham $V(\lambda)$ posee una singularidad en $\lambda = -1$, y por lo tanto el desarrollo (61.13) diverge si (condición necesaria):

$$|\lambda| > 1, \quad \text{luego: } R > 2R_e \quad (61.22)$$

La existencia de un radio de convergencia finito impide utilizar el desarrollo (61.13) para valores grandes de R , pese a que se utilice el método JWKB para construirlo. Debido a esta limitación no es posible extraer ninguna información útil sobre el comportamiento del potencial cuando $1/R \rightarrow 0$, mediante el manejo directo de la serie Dunham asociada al mínimo del potencial. Es evidente la importancia de la aplicación de alguna técnica de suma para prolongar analíticamente el desarrollo (61.13), ya que en caso contrario se desaprovecha toda la información contenida en los coeficientes de Dunham.

Para superar los inconvenientes antes mencionados se puede recurrir a varias vías. Un método particularmente preciso para determinar el potencial vibracional, es el llamado método RKR (debido a que fue desarrollado por Rydberg, Klein y Rees) /5,13,21-23/. El método RKR utiliza la misma información que el método desarrollado por Dunham /15/ y es también de naturaleza semiclásica, pero permite obtener en forma directa los puntos de retorno clásicos, en lugar de los coeficientes de un desarrollo en serie de potencias. Si bien el mismo proporciona excelentes curvas de potencial para varias moléculas diatómicas (por ejemplo ver las refs./24-28/), su aplicación presenta ciertas complicaciones que nos proponemos resaltar, de manera tal que nos sirva como marco de comparación para las discusiones que realizaremos en los próximos parágrafos. La idea básica del método RKR es muy simple: si designamos por R_+ y R_- los dos puntos de retorno clásicos, la aproximación JWKB de primer orden (Cap.II) nos permite determinar los autovalores semiclásicos mediante la

siguiente integral:

$$\int_{R_-}^{R_+} (E_{nJ} - W_J(R))^{1/2} dR = h(n + \frac{1}{2}) / (8\mu)^{1/2} , \quad (61.23a)$$

siendo $W(R)$ (ver ec.(61.9)):

$$W_J(R) = \frac{K}{R^2} + U(R) \quad (61.23b)$$

Los resultados que nos provee la espectroscopía rotovibracional son las energías E_{nJ} y las constantes rotacionales $B_e(n)$. Los primeros junto a la ec.(61.23a) no son suficientes para determinar totalmente las constantes R_+ y R_- para cada n y por ello es necesario utilizar una segunda condición que involucre a las constantes rotacionales $B_e(n)$ como por ejemplo /5/:

$$B_e(n) = (E_{n+1,J} - E_{nJ}) (8\mu)^{-1/2} \int_{R_-}^{R_+} (E_{nJ} - W_J(R))^{-1/2} R^{-2} dR \quad (61.24)$$

El par de ecs.(61.23) y (61.24) determinan totalmente los puntos de retorno R_+ , R_- una vez propuesto un potencial aproximado para $W(R)$. Dado que tales ecuaciones son poco prácticas, para llevar a cabo los cálculos es conveniente utilizar otras relaciones equivalentes que pueden deducirse mediante el procedimiento que se ve en el Apéndice J (ver también las refs./22,29,30/) para obtener:

$$R_+ - R_- = \hbar \left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2} \int_{n_0}^n (E_{nJ} - E_{n',J})^{-1/2} dn' , \quad (61.25a)$$

$$\frac{1}{R_-} - \frac{1}{R_+} = (8\mu)^{1/2} \hbar^{-1} \int_{n_0}^n B_e(n') (E_{nJ} - E_{n',J})^{-1/2} dn' , \quad (61.25b)$$

donde el número real n_0 está determinado por la siguiente ecuación /30/:

$$E_{n_0J} = \min_{(R)} W_J(R) \quad (61.26)$$

Las integrales presentes en las ecs.(61.25) se han calculado en forma numérica, mediante desarrollos en series /25,29/, y también incluyendo los efectos de las aproximaciones JWKB de orden superior /31/.

En cualesquiera de las condiciones antes mencionadas es bastante complicado derivar buenos resultados para R_+ y R_- para valores grandes de n . Es así que, si bien el método RKR no posee limitaciones en lo que hace a convergencia, en la práctica no permite obtener una representación de la curva de potencial vibracional para distancias dos o tres veces mayores que R_e .

Si uno desea obtener una representación analítica explícita de $V(\lambda)$ en términos de λ (esto es, de R), la forma más simple de proceder es sumar el desarrollo Dunham mediante algún método apropiado. Diversos méto-

dos han sido propuestos en la literatura para resolver dicho problema /32-38/, desde los aproximantes de Padé /32/ hasta nuevos desarrollos en serie de potencias /33-38/ con mejores propiedades de convergencia. Estos últimos son particularmente interesantes y se encuentran condensados en la siguiente expresión:

$$V(\lambda) = v_0 f(\lambda)^2 \{1 + v_1 f(\lambda) + v_2 f(\lambda)^2 + \dots\} \quad , \quad (61.27)$$

donde la función $f(\lambda)$ debe ser elegida de modo de obtener el mayor radio /39,40/ y velocidad de convergencia. La serie original de Dunham corresponde a hacer $f(\lambda)=\lambda$ y $v_n=a_n$, $n \geq 0$. El desarrollo de Simons y col. /33/ corresponde a la transformación $f(\lambda)=\lambda/(1+\lambda)$; el de Ogilvie /38/ introduce la función $f(\lambda)=\lambda/(2+\lambda)$ y el de Thakkar /34/ utiliza $f(\lambda)=\text{sgn}(p)\{1-(1+\lambda)^{-p}\}$ siendo p un parámetro real ajustable. Es fácil notar que la transformación de Simons y col./33/ corresponde a la transformación de Euler /41/, la que además posee una firme fundamentación mecánica sobre la base de una partición apropiada del hamiltoniano /33/. Cabe comentar finalmente que varios de los procedimientos anteriores han sido discutidos en forma comparativa /35-37/.

A pesar de que cualesquiera de los métodos arriba mencionados /32-38/ proporcionan potenciales vibracionales bastante realísticos, poseen también varias desventajas. Por ejemplo, sólo pueden ser construídos los aproximantes de Padé y los desarrollos en serie de pequeños órdenes debido a que sólo se conocen los primeros coeficientes de Dunham, y los resultados que se obtienen de este modo son fuertemente dependientes de la precisión de dichos coeficientes. Cabe comentar que los radios de convergencia de dichas series no se pueden calcular fácilmente, y la singularidad en $\lambda=-1$ sólo nos provee una cota superior a los mismos /32-40/. Debido a la inexistencia de información precisa sobre tales radios de convergencia, parece más apropiado hablar de rango de utilidad de las series /36/. Una desventaja adicional que poseen los métodos utilizados para extender el rango de utilidad de la serie de Dunham es que normalmente no pueden describir con la misma precisión a las moléculas diatómicas iónicas y covalentes; por ejemplo, los aproximantes de Padé /32,41/ son apropiados para describir moléculas iónicas y no covalentes, ~~ent~~ tanto que que la situación es exactamente la opuesta usando el método de Thakkar /34/. Esta diferencia es debida al distinto comportamiento asintótico de los potenciales vibracionales en el límite de disociación.

Cabe señalar que algunas de las series antes nombradas suelen conducir a máximos no-físicos en el potencial de Dunham, y aún a energías de disociación negativas /33/. Por otro lado, los aproximantes de Padé diagonales /32/ $|N/N|$, con $N > 2$, presentan polos debidos a ceros del polinomio del denominador.

Teniendo presente la discusión anterior, estamos ya en condiciones de aplicar el MF para sumar la serie de Dunham utilizando los coeficientes experimentales y el comportamiento asintótico del potencial vibracional.

La magnitud experimental de mayor interés que deseamos aproximar es la energía de disociación espectroscópica D_e :

$$\lim_{R \rightarrow \infty} V(\lambda) = \{ \lim_{R \rightarrow \infty} U(R) \} - U(R_e) = D_e \quad (61.28)$$

Puede notarse que la magnitud D_e es la más crítica para aproximar utilizando un desarrollo en serie alrededor de $\lambda=0$, ya que corresponde a $1/\lambda=0$. En este sentido la utilización del MF para renormalizar la serie de Dunham de modo tal que se cumpla (61.28), constituye un problema muy similar a los vistos en capítulos precedentes. Una versión abreviada de los resultados que presentaremos en las secciones siguientes puede verse en la ref./42/.

§.62. POTENCIAL ROTOVIBRACIONAL DE KRATZER-FUES.

La aplicación de los métodos de suma de series de potencias para prolongar el rango de utilidad de la serie de Dunham, no nos permite realizar un análisis exhaustivo de convergencia dado que típicamente se conocen como máximo 7 u 8 coeficientes del desarrollo de Dunham para moléculas diatómicas, y esto sólo en muy pocos casos.

Para estudiar en forma rigurosa la convergencia de dichos desarrollos mediante el MF debemos recurrir a un modelo simplificado de potencial vibracional para el que se conozcan en forma analítica los coeficientes de Dunham. El modelo que consideraremos aquí es el denominado potencial de Kratzer-Fues /43-46/. Entre diferentes aplicaciones que lo tienen como ejemplo, cabe mencionar que este modelo ha sido estudiado mediante el método JWKB de orden superior. Es conveniente reescribir el potencial de la siguiente manera:

$$V_{KF}(R) = D_e \left\{ \left(\frac{R_e}{R} \right)^2 + 1 - 2 \frac{R_e}{R} \right\} \quad (62.1)$$

Este posee las siguientes propiedades:

$$\min_{(R)} V_{KF}(R) = V_{KF}(R_e) = 0, \quad \lim_{R \rightarrow \infty} V_{KF}(R) = D_e \quad (62.2)$$

Introduciendo la variable (61.8) el potencial vibracional se puede expresar como:

$$V_{KF}(\lambda) = D_e \lambda^2 (1+\lambda)^{-2}, \quad (62.3)$$

cuyo desarrollo en serie de potencias de λ intentaremos sumar. Observemos que la función (62.1) posee una singularidad en $R=0$ ($\lambda=-1$), al igual que el potencial real, producto de los términos centrípeto y coulombico contenidos en (62.1).

Para aplicar el MF al potencial (62.1) es conveniente estudiar a la siguiente función:

$$E(\lambda) = D_e^{-1} \lambda^{-2} V_{KF}(\lambda) = (1+\lambda)^{-2}, \quad (62.4)$$

que posee los siguientes desarrollos en serie de Taylor:

$$E(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n, \quad E^{(n)} = (-1)^n (n+1) \quad \lambda \ll 1, \quad (62.5a)$$

$$E(\lambda) = \lambda^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{(n)} \lambda^{-n}, \quad e^{(n)} = E^{(n)}, \quad \lambda \gg 1 \quad (62.5b)$$

El desarrollo en serie (62.5a) determina la serie de Dunham correspondiente al potencial de Kratzer-Fues ($a_0 = D_e$, $a_n = E^{(n)}$, $n \geq 1$), y junto con la ec.(62.5b) constituye nuestro punto de partida, ya que nos proporciona los exponentes $\alpha = -1$ y $\beta = -2$ (ver §§.42 y 44) para aplicar el MF.

Cabe notar que la función $E(\lambda)$ es muy similar a la función generatriz de la serie geométrica que estudiamos en el §.47. En consecuencia se puede esperar encontrar resultados similares en este caso.

Utilizando la ec.(44.18), escribimos la secuencia SE_N que aproxima a la función $E(\lambda)$:

$$SE_N = \left(\frac{\lambda}{w}\right)^{-2} S_N(k, w), \quad (62.6)$$

donde:

$$S_N(k, w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n, \quad (62.7a)$$

$$\bar{E}^{(n)} = k^{-2} y^n (n+1), \quad y = 1 - k^{-1} \quad (62.7b)$$

La variable w está dada por una transformación de Euler generalizada:

$$w = \lambda k / (1 + \lambda k) \quad (62.7c)$$

En virtud de la ec.(62.7b), la secuencia $S_N(k, w)$ puede evaluarse exactamente. Ahora bien, para determinar el valor de k debemos aplicar las reglas de estabilidad (§.44) a la suma parcial $S_N(k, 1)$, cuyo valor es:

$$S_N(k, 1) = (N+1)y^{N+2} - (N+2)y^{N+1} + 1 \quad (62.8)$$

Esta función posee un único extremo:

$$k_N^S = 1, \quad \text{para todo } N \geq 1, \quad (62.9)$$

y nos permite sumar en forma correcta el desarrollo (62.5a) cuando $1/\lambda \rightarrow 0$:

$$S_N(k_N^S, 1) = 1 \quad (62.10)$$

Un cálculo análogo nos revela que la función (62.8) posee dos únicos PI. El primero de ellos es:

$$k_N^I = 1, \quad \text{para todo } N \geq 2, \quad (62.11)$$

y nos conduce nuevamente al resultado (62.10). Este PI es el que satis-

face las reglas de estabilidad, ya que posee la menor derivada primera. El segundo PI es linealmente dependiente de N:

$$(k_N^I)' = \frac{N}{3} + 1 \quad , \quad (62.12)$$

que como ya se vió en párrafos anteriores, conduce a una secuencia con un límite erróneo:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S_N((k_N^I)', 1) = 1 - 4/e^3 < 1 \quad (62.13)$$

El análisis que hemos realizado para el potencial de Kratzer-Fues, revela que el MF permite sumar el desarrollo en serie de Dunham en el caso más desfavorable $1/\lambda=0$. Esto significa que la energía de disociación espectroscópica molecular podría ser aproximada a partir de un desarrollo en serie de potencias alrededor de la posición de equilibrio. En las secciones siguientes verificaremos esta aseveración.

Dado que la secuencia SE_N converge correctamente (utilizando las ecs. (62.9) y (62.11)) para $w=1$, entonces lo hace para $0 \leq w \leq 1$; esto es para todo $\lambda > 0$. En consecuencia el MF provee una representación analítica para el potencial vibracional si $R \geq R_e$.

La parte del potencial correspondiente a $R < R_e$ debe estudiarse cuidadosamente, pues $\lambda < 0$ y $w > 1$. Para analizar esto, consideremos a k independiente de N y calculemos el radio de convergencia de la serie (62.7a) con $N \rightarrow \infty$. Encontramos fácilmente que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\bar{E}^{(n+1)} / \bar{E}^{(n)}| = \frac{k-1}{k} \quad , \quad (62.14)$$

lo que nos dice que el radio de convergencia de dicha serie es infinito sólo si $k=1$. Dado que $w \rightarrow \infty$ si $\lambda \rightarrow -1/k$, entonces, al aplicar las reglas de estabilidad, el MF nos permite sumar el desarrollo Dunham del potencial de Kratzer-Fues para todo valor de R . Obviamente la condición de obtener un PI o PE en $k=1$ no puede asegurarse para un problema genérico, por lo que las secuencias SE_N poseerán una singularidad espúrea en $0 < R < R_e$. Este defecto no es de gran importancia ya que normalmente el interés mayor radica en conocer las propiedades del potencial vibracional para distancias mayores a la de equilibrio. Además cabe acotar que existen varias representaciones adecuadas para $V(\lambda)$ en la zona $R < R_e$ y no así para $R > R_e$.

§.63. SERIES DE DUNHAM PARA MOLECULAS IONICAS.

El MF puede aplicarse al potencial vibracional de cualquier molécula diatómica, a partir de dos desarrollos en serie de potencias, tal como lo hicimos en el parágrafo anterior. Como sabemos, el potencial $U(R)$ (ec. (61.13)) puede expresarse mediante el desarrollo en serie de potencias de Dunham; por otro lado, para moléculas de tipo iónico conocemos el siguiente desarrollo asintótico /5/:

$$V(R) = D_e - \frac{C}{R} + O(R^{-2}) = D_e - \frac{C}{\lambda R_e} + O(R^{-2}) , \quad C > 0 , \quad (63.1)$$

siendo D_e y $-C/R$ la energía de disociación y la interacción coulombica nuclear, respectivamente. Las moléculas que se estudian en este parágrafo poseen un estado fundamental ligante $^1\Sigma^+$. Este estado es predominantemente iónico para distancias internucleares del orden de la de equilibrio, pero para distancias mayores presenta un entrecruzamiento de niveles (en realidad un entrecruzamiento "evitado") con un estado covalente /5/. Por sencillez, aquí supondremos al estado fundamental como totalmente iónico, esto es no tomaremos en cuenta el entrecruzamiento y consideraremos sólo la disociación molecular en iones. Este tipo de disociación es el responsable del segundo término del desarrollo (63.1).

Si ahora introducimos la función:

$$E(\lambda) = \lambda^{-2} a_0^{-1} V(R) , \quad (63.2)$$

en virtud del desarrollo de Dunham y del desarrollo (63.1), el MF puede aplicarse a $E(\lambda)$ utilizando los exponentes $\alpha=-1$ y $\beta=-2$. Los coeficientes $E^{(n)}$ del desarrollo de $E(\lambda)$ en serie de potencias de λ se hallan vinculados a los coeficientes de Dunham:

$$E^{(0)} = 1 ; \quad E^{(n)} = a_n , \quad n \geq 1 , \quad (63.3)$$

y nos proporcionan el punto de partida para investigar la aproximación a la energía de disociación D_e . Nos proponemos aquí estudiar 20 haluros alcalinos, como ejemplos de moléculas iónicas, para obtener algunas conclusiones sobre la utilidad del MF. Utilizaremos los coeficientes de Dunham tabulados en la ref./32/, ya que constituyen una lista muy completa. Cabe añadir que para este tipo de moléculas se conocen, con fiabilidad aceptable, hasta tres coeficientes de Dunham; en consecuencia res-

tringiremos nuestro cálculo a tres términos de la serie renormalizada.

Utilizando el formalismo desarrollado en el §.44, la secuencia SE_N que aproxima a (63.2) es:

$$SE_N = (w/\lambda)^2 S_N(k,w) \quad , \quad (63.4)$$

donde:

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad , \quad (63.5)$$

y:

$$w = \lambda k / (1 + \lambda k) \quad (63.6)$$

Los primeros términos de la secuencia (63.5), necesarios para efectuar todos nuestros cálculos, son los siguientes:

$$\bar{E}^{(0)} = k^{-2} ; \quad \bar{E}^{(1)} = a_1 k^{-3} + 2k^{-2} ; \quad \bar{E}^{(2)} = a_2 k^{-4} + 3a_1 k^{-3} + 3k^{-2} ;$$

$$\bar{E}^{(3)} = a_3 k^{-5} + 4a_2 k^{-4} + 6a_1 k^{-3} + 4k^{-2} \quad (63.7)$$

El parámetro k queda determinado, como es usual, mediante los puntos críticos de la secuencia $S_N(k,1)$. Esta secuencia nos permite escribir, a su vez, nuestra aproximación D_N a la energía de disociación (ecs.(63.2) y (63.4)) de la siguiente manera:

$$D_N = a_0 S_N(k,1) \quad (63.8)$$

Si hubiera convergencia, se esperaría que $D_N \rightarrow D_e$ para $N \rightarrow \infty$.

El MF constituye una aproximación totalmente diferente de aquéllas que ya se han aplicado al estudio de las moléculas iónicas /32,33/. Es interesante notar que cuando $k=1$, la ec.(63.6) coincide con la transformación de Euler ya utilizada por Simons y col. /33/. Esta conexión entre ambos procedimientos revela la importancia del parámetro k , ya que el método SPF /33/ conduce a máximos espúreos y sin sentido físico en el potencial vibracional, o bien a energías de disociación negativas. Como veremos enseguida, si k se determina de acuerdo a las reglas de estabilidad no se presentan tales anomalías.

El análisis de los puntos críticos se ha llevado a cabo utilizando el Programa VII que se muestra al final de la obra. Tanto para $N=2$ como para $N=3$ hemos utilizado el PI con mayor valor de k (k_2^I y k_3^I , respectivamente) para realizar los cálculos, siguiendo las reglas de estabilidad. En la Tabla 20.1 se presentan los resultados para el valor absoluto de la desviación relativa porcentual (d_N) de nuestra predicción D_N respecto de los valores experimentales para D_e /32/. Tal como se ve en la tabla, el error $d_N(\text{NaF})$ es mucho mayor que el correspondiente a cual-

quier otra molécula, probablemente a causa de errores en los coeficientes de Dunham. Debido a esto no lo tomaremos en cuenta en nuestra discusión.

La desviación promedio \bar{d}_2 , sobre las 19 moléculas restantes nos da 2,1%, que es apreciablemente menor que \bar{d}_3 (6,0%). Esto es debido, seguramente, a que el error en el coeficiente a_3 es mayor que el correspondiente a a_2 . Nuestra mejor aproximación a las energías de disociación, esto es D_2 , es muy superior a la que se obtiene con los aproximantes de Padé $|2/2|/32/$, que para el mismo grupo de moléculas arrojan un error promedio del 5,9%, utilizando el mismo número de coeficientes de Dunham. Nuestros resultados superan ligeramente aún los obtenidos mediante el potencial empírico de Rittner /5/, usualmente utilizado para ajustar las curvas RKR; en este caso el error promedio es de 2,9%. En conclusión, D_2 constituye una excelente aproximación a D_e , más aún cuando se toma en cuenta que los resultados experimentales con los que hemos hecho la comparación poseen un error de 1%.

Respecto a otros métodos, cabe añadir que si bien el método de Thakkar /34/ da muy buenos resultados para las moléculas covalentes, da un error promedio del 25% cuando se lo aplica a las moléculas iónicas. Es posible obtener una estimación algo más precisa mediante los aproximantes $|2/3|$ construidos a partir de la serie de Simons y col. /33/ (5,8%). Este último procedimiento (que introduce el comportamiento dominante correcto para $1/R \rightarrow 0$) parece haber sido subestimado por algunos autores /34/.

Por otro lado, la fig.20.1 muestra al potencial vibracional (en unidades de a_0) para el KI, calculado utilizando hasta el coeficiente de Dunham a_2 y diversos métodos aproximativos. Nuestra aproximación (es decir $\lambda^2 SE_N$), y los aproximantes de Padé $|2/2|/32/$ dan curvas aceptables para $R > R_e$ que además coinciden con la de Simons y col. /33/ ($k=1$ en el MF) en el rango $R_e \leq R \leq 1,5R_e$. Se sabe que en dicho intervalo la función de Simons y col. es una aproximación razonable al potencial RKR /33/. Tal como se ve en la figura, la curva SPF /33/ no tiene sentido físico para $R > 2R_e$, ya que posee un máximo local en $R \approx 2,5R_e$. Por el contrario, la curva que nos provee el MF, con $k=k_2^I \approx 3,1$, no posee ninguna característica anormal.

Una de las ventajas que presenta el MF respecto de los otros métodos utilizados, es que permite emplear en forma sistemática toda la información experimental disponible. Por ejemplo, si la energía de disociación D_e es conocida, ésta puede incorporarse a la serie renormalizada para obtener una mejor aproximación al potencial vibracional. A tal efecto, definamos la siguiente función:

$$E'(\lambda) = a_0^{-1} \{V(\lambda) - D_e\} \quad , \quad (63.9)$$

que posee los siguientes comportamientos asintóticos:

$$E'(\lambda) = - a_0^{-1} D_e + \lambda^2 + a_1 \lambda^3 + a_2 \lambda^4 + \quad , \quad \lambda \ll 1 \quad , \quad (63.10a)$$

$$E'(\lambda) = \lambda^{-1} \{-Ca_0^{-1}R_e^{-1} + O(\lambda^{-1})\}, \quad \lambda \gg 1. \quad (63.10b)$$

Estamos ahora en condiciones de aplicar el MF con los exponentes $\alpha=\beta=-1$. Los coeficientes del desarrollo de $E'(\lambda)$ en serie de λ son: $E'^{(0)} = -D_e/a_0$, $E'^{(1)} = 0$, $E'^{(2)} = 1$, y $E'^{(n)} = a_{n-2}$, si $n > 2$. Con la inclusión del coeficiente de Dunham a_2 es posible construir la siguiente función:

$$SE'_4 = \left(\frac{w}{\lambda}\right) \sum_{n=0}^4 \bar{E}'^{(n)} w^n; \quad w = \lambda k / (1 + \lambda k) \quad (63.11)$$

Nuevamente el valor de k puede determinarse con los puntos críticos de $\lambda SE'_4$ cuando $w=1$. Finalmente $(SE'_4 + D_e/a_0)$ representa nuestra aproximación al potencial $V(\lambda)/a_0$. Para el KI hemos obtenido $k_4^I = 4,890$ y los resultados se muestran también en la fig.20.1. Tal como se ve allí, esta nueva aproximación es muy similar al aproximante $|2/2|$ cuando $R_e \lesssim R \lesssim 3R_e$ y no difiere mayormente de SE_2 .

En conclusión, podemos asegurar que el MF resulta sumamente útil para manejar series empíricas como la de Dunham, y obtener así muy buenas aproximaciones a la energía de disociación y potenciales vibracionales. Cabe recordar que las curvas RKR prácticamente no son conocidas para moléculas iónicas debido a la falta de suficiente información experimental, hecho que destaca la gran utilidad del MF.

§.64. SERIE DE DUNHAM PARA MOLECULAS COVALENTES.

Las propiedades asintóticas de los potenciales vibracionales para moléculas diatómicas iónicas y covalentes en el rango de valores grandes de R son muy diferentes. Esta diferencia es la responsable de que los métodos utilizados para sumar la serie de Dunham de moléculas iónicas no sean eficaces para moléculas covalentes y viceversa. Engelke /36/ ha sugerido que es necesario introducir en los métodos de prolongación analítica el comportamiento correcto del potencial alrededor de $1/R=0$, si se desea obtener resultados razonables para la energía de disociación. Precisamente una de las ventajas del MF es que permite aproximar el potencial vibracional mediante una secuencia SE_N que incorpora la información de tipo analítico apropiada.

Las moléculas covalentes que consideraremos son aquéllas que poseen un estado fundamental covalente para distancias cercanas a la de equilibrio. Este estado puede presentar un entrecruzamiento de niveles con un estado molecular iónico para distancias internucleares grandes. Sin embargo, al igual que hicimos en el §.63, no tomaremos en cuenta tales entrecruzamientos y consideraremos sólo la disociación covalente en átomos neutros. En estas condiciones, el potencial vibracional de una molécula covalente posee el siguiente desarrollo típico:

$$V(R) = D_e + C'R^{-6} + \dots ; R \gg 1 \quad , \quad (64.1)$$

donde el término $C'R^{-6}$ corresponde a la interacción de Van der Waals. Para aplicar el MF, procedemos como en la sección previa definiendo la función $E(\lambda)$:

$$E(\lambda) = \lambda^{-2} V(R) a_0^{-1} \quad , \quad (64.2)$$

que posee los siguientes desarrollos en serie:

$$E(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n ; \quad E^{(0)} = 1 \quad , \quad E^{(n)} = a_n \quad , \quad n \geq 1 \quad , \quad \lambda \ll 1 \quad , \quad (64.3a)$$

$$E(\lambda) = \lambda^{-2} \{ a_0^{-1} D_e + C'R_e^{-6} \lambda^{-6} + \dots \} \quad , \quad \lambda \gg 1 \quad (64.3b)$$

A pesar de que los términos de orden superior en la ec.(64.3b) no configuran un desarrollo en serie de potencias de λ^{-6} , aplicaremos el MF con

los exponentes $\alpha=-6$ y $\beta=-2$. Estos coeficientes y la ec.(44.7) nos conducen al siguiente cambio de variables:

$$\lambda^{-6} = k w^{-6} (1-w) \quad (64.4)$$

El MF nos permite ahora aproximar la función $E(\lambda)$ por medio de la siguiente secuencia (ecs.(44.18)):

$$SE_N = \left(\frac{w}{\lambda}\right)^2 S_N(k,w) \quad , \quad (64.5a)$$

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n \quad , \quad (64.5b)$$

donde los coeficientes $\bar{E}^{(n)}$ pueden calcularse mediante la ec.(44.14):

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{i=0}^n (-1)^{n-i} \binom{-(i+2)/6}{n-i} E^{(i)} k^{-(i+2)/6} \quad (64.5c)$$

Para estudiar la convergencia de la secuencia a la energía de disociación hemos considerado $w=1$ para hacer los cálculos. Dado el valor muy negativo de α ($\alpha=-6$) hemos encontrado que no existen PI ni PE para algunos valores de N . Por sencillez hemos elegido $k=\text{Re}(k_N^S)$ como valor óptimo de k , si bien pudo haberse utilizado $k=\text{Re}(k_N^I)$, obteniéndose conclusiones similares.

Para las moléculas covalentes CO, HF y HCl hemos utilizado los coeficientes de Dunham tabulados en las refs./5,14,32/, y los resultados obtenidos se ven en la Tabla 20.2 comparados con los provenientes de otros métodos. Los resultados se expresan en desviación porcentual relativa respecto de los experimentales. El análisis de la Tabla 20.2 nos revela que el MF y el de Thakkar /34/ parecen ser los únicos que permiten obtener resultados razonables. Sin embargo, la serie de Thakkar /34/ parece no ser fácilmente sumable ya que todos sus coeficientes son de magnitud comparable, y por lo tanto el error en la aproximación de la energía de disociación aumenta una vez que se añade un número suficientemente grande de coeficientes de Dunham /36/. Este hecho se aprecia claramente comparando al HCl con el CO y HF en la Tabla 20.2. Por otro lado, el MF parece convergir suavemente por arriba, y por lo tanto constituye el método más estable, confiable y controlable. Deberíamos, no obstante, incluir un mayor número de coeficientes de Dunham para verificar numéricamente si el MF permite obtener una secuencia convergente.

Para comprobar la importancia de la inclusión del comportamiento asintótico correcto del potencial vibracional en la serie renormalizada (tal como fue puntualizado por Engelke /36/), hemos comparado los resultados de la energía de disociación del HCl obtenidos con los exponentes del comportamiento covalente ($\alpha=-6$, $\beta=-2$) e iónico ($\alpha=-1$, $\beta=-2$). Los resultados obtenidos se ven en la Tabla 20.3. Es inmediato notar que la secuencia correspondiente a los parámetros covalentes aproxima mucho más

rápidamente el resultado experimental que la secuencia construída con los parámetros iónicos. Esta diferencia es aún más notable si tomamos en cuenta que para el caso covalente la singularidad del potencial en $R=0$ ($\lambda=-1$) se corresponde con un valor de w menor que la unidad, a diferencia del caso iónico en que $w>1$. Esta propiedad haría suponer en principio que el error mayor ocurriría para la serie renormalizada en el caso covalente, ya que dicha singularidad debería afectar la convergencia para $w>1$. Sin embargo, el hecho que la descripción covalente sea la más apropiada (Tabla 20.3) nos hace concluir en que es sumamente importante tomar en cuenta el comportamiento analítico del potencial vibracional para predecir la energía de disociación con razonable exactitud.

Resumiendo, el MF provee una vía particularmente útil para obtener información a partir de los espectros vibracionales, mediante la utilización de series de potencias empíricas. El MF permite asimismo incorporar sistemáticamente toda la información experimental disponible para derivar muy buenas curvas de potencial. Este método puede ser aplicado para aproximar algunas otras funciones con características similares como puede ser el caso de los momentos dipolares para moléculas diatómicas /47-49/. Este último problema está siendo investigado actualmente en nuestro laboratorio.

REFERENCIAS DEL CAPITULO XX.

- /1/ W.A. Bingel, J. Chem. Phys. 30 (1959) 1250.
/2/ D.M. Duparc and R.A. Buckingham, Proc. Phys. Soc. 83 (1964) 731.
/3/ W. Byers-Brown and E. Steiner, J. Chem. Phys. 44 (1966) 3934.
/4/ D.I. Abramov and S. Yu. Slavyanov, J. Phys. B 11 (1978) 2229.
/5/ J. Goodisman, Diatomic Interaction Potential Theory, vol.I: Fundamentals; vol.II: Applications, Academic Press, New York & London, 1973.
/6/ H. Wind, J. Chem. Phys. 42 (1965) 2371.
/7/ R.J. Damburg and R.Kh. Propin, J. Phys. B 1 (1968) 681.
/8/ J.D. Morgan III and B. Simon, Int. J. Quantum Chem. 16 (1980) 1143.
/9/ E. Brézin and J. Zinn-Justin, J. Physique 40 (1979) L 511.
/10/ J. Cizek, M.R. Clay and J. Paldus, Phys. Rev. A 22 (1980) 793.
/11/ J. Cizek and E. Vrscay, Int. J. Quantum Chem. 21 (1982) 27.
/12/ G. Herzberg, Spectra of Diatomic Molecules, Van Nostrand-Reinhold, Princeton, 1950.
/13/ E.A. Mason and L. Monchick, Adv. Chem. Phys. 12 (1967) 329.
/14/ J.F. Ogilvie and R.H. Tipping, Int. Rev. Phys. Chem. 3 (1983) 3.
/15/ J.L. Dunham, Phys. Rev. 41 (1932) 721.
/16/ M.V. Berry and K.E. Mount, Rep. Prog. Phys. 35 (1972) 315.
/17/ I. Sandeman, Proc. R. Soc. Edinburgh 60 (1940) 210.
/18/ J.E. Kilpatrick, J. Chem. Phys. 30 (1959) 801.
/19/ C.L. Pekeris, Phys. Rev. 45 (1934) 98.
/20/ P.R. Bunker, J. Mol. Spectrosc. 35 (1970) 306.
/21/ R. Rydberg, Z. Physik 73 (1931) 376.
/22/ O. Klein, Z. Physik 76 (1932) 226.
/23/ A.L.G. Rees, Proc. R. Soc. London Ser. A 59 (1947) 998.
/24/ J.T. Vanderslice, E.A. Mason, W.G. Maisch and E.R. Lippincott, J. Mol. Spectrosc. 3 (1959) 17.
/25/ W.R. Jarman, Can. J. Phys. 38 (1960) 217.
/26/ W.G. Richards and R.F. Barrow, Trans. Faraday Soc. 60 (1964) 797.
/27/ R. Zare, J. Chem. Phys. 40 (1964) 1934.
/28/ F.R. Gilmore, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 5 (1965) 369; [⊗]
/29/ R.H. Davies and J.T. Vanderslice, Can. J. Phys. 44 (1966) 219.
/30/ E.W. Kaiser, J. Chem. Phys. 53 (1970) 1686.
/31/ J.N. Huffaker, J. Mol. Spectrosc. 65 (1977) 1.
/32/ K.D. Jordan, J.L. Kinsey and R. Silbey, J. Chem. Phys. 61 (1974) 911.
/33/ G. Simons, R.G. Parr and J.M. Finlan, J. Chem. Phys. 59 (1973) 3229.
/34/ A. Thakkar, J. Chem. Phys. 62 (1975) 1693.
/35/ R. Engelke, J. Chem. Phys. 68 (1978) 3514.
/36/ R. Engelke, J. Chem. Phys. 70 (1979) 3745.
/37/ L. Mattera, C. Salvo, S. Terreni and F. Tommasini, J. Chem. Phys. 72 (1980) 6815.

⊗ C. R. Vidal, Comments At. Mol. Phys 17(1986) 173; I. P. Hamilton, J.C. Light and K.B. Whaley, J. Chem. Phys 85(1986) 5151.

- /38/ J.F. Ogilvie, Proc. R. Soc. London Ser. A 378 (1981) 287.
/39/ C.L. Beckel and R. Engelke, J. Chem. Phys. 49 (1968) 5199.
/40/ C.L. Beckel, J. Chem. Phys. 65 (1976) 4319.
/41/ G.H. Hardy, Divergent Series, Oxford University Press, Oxford, 1949.
/42/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Chem. Phys. 81 (1984) 4540.
/43/ K. Kratzer, Z. Physik 3 (1920) 289.
/44/ K. Kratzer, Ann. Physik 67 (1922) 127.
/45/ E. Fues, Ann. Physik 80 (1926) 367.
/46/ S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer International Student Edition, Berlin, 1979, A. Requena, J. Zúñiga, L.M. Fuentes and H. Hidalgo. ©
/47/ J.M. Herbelin and G. Emanuel, J. Chem. Phys. 60 (1974) 689.
/48/ J.F. Ogilvie, W.R. Rodwell and R.H. Tipping, J. Chem. Phys. 73 (1980) 5221.
/49/ W.T. Zemke and W.C. Stwalley, J. Chem. Phys. 73 (1980) 558.

⊙ /41a/ A. Pardo

Chem Phys Lett. 131(1986)490

⊙ J. Chem Phys. 85(1986) 3939 (and other references quoted therein).

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XX)

Tabla 20.1

Valor absoluto de la desviación porcentual relativa de las energías de disociación predichas por el MF para 20 haluros alcalinos.

Molécula	k_3^I	$d_3^{a)}$	k_2^I	$d_2^{a)}$
LiF	3,0300	6,3	2,4388	1,9
LiCl	3,1778	0,9	2,5271	5,2
LiBr	3,3998	7,6	2,6740	0,5
LiI	3,3773	4,9	2,6613	2,2
NaF	3,7161	17,3	2,9776	12,8
NaCl	3,5566	5,1	2,8320	0,6
NaBr	3,4643	0,7	2,7523	5,4
NaI	3,6375	2,9	2,8822	3,7
KF	3,7591	12,0	2,9650	4,0
KCl	3,8509	7,0	3,0329	0,2
KBr	3,8791	7,0	3,0720	0,0
KI	3,9268	6,1	3,0912	1,3
RbF	3,6345	2,0	2,9006	3,7
RbCl	4,0069	8,7	3,1449	1,5
RbBr	3,9853	7,0	3,1339	0,0
RbI	4,0916	8,5	3,2199	1,6
CsF	3,8713	4,1	2,9924	5,5
CsCl	4,1548	8,4	3,2378	0,4
CsBr	4,0606	7,0	3,1718	0,7
CsI	4,2036	7,1	3,2857	0,6

a)

$$d_N = 100 |1 - D_N / D_e|$$

Tabla 20.2

Desviación porcentual relativa para las energías de disociación de las moléculas de CO, HF y HCl obtenidas mediante el MF. ($\delta_N = 100(1 - D_N/D_e)$).

Molécula	N	k	$\delta_N^{a)}$	$\delta_N^{b)}$	$\delta_N^{c)}$	$\delta_N^{d)}$
CO	1	781,9	67,4		-133,0	-103,0
	2	689,0*	46,4	-143,0	-82,0	290,0
	3	116,8	40,9		-36,0	342,0
	4	85,8*	23,0	182,0	-3,6	229,0
HF	1	265,6	71,4		-164,0	-210,0
	2	433,9*	56,9	-161,0	-126,0	-96,0
	3	51,5	47,3		-104,0	-68,0
	4	29,9*	26,4	-182,0	-46,0	117,0
	5	33,6	25,9		7,1	264,0
HCl	1	353,3	64,3		-205,2	-261,1
	2	435,9*	43,8	-194,7	-141,9	-17,5
	3	71,1	36,9		-75,9	145,4
	4	56,0*	16,3	-1931,0	-5,5	327,6
	5	21,5	16,9		63,2	484,0
	6	7,2	8,9		143,4	796,1

* $\{ \text{Re}(k_N^S)^{-1/6} \}^{-6}$

a) Obtenidos mediante el MF.

b) Aproximantes de Padé $|(1+N/2)/(1+N/2)|$ (refs./32,34/).

c) Método de Thakkar (ref./34/).

d) Ec.(22) en la ref./33/.

Tabla 20.3

Energía de disociación del HCl obtenida por aplicación del MF, considerando diferentes comportamientos asintóticos para el potencial vibracional.

N	D_N/a_0 ^{a)}	D_N/a_0 ^{b)}
1	0,062871	0,604240
2	0,099036	0,498981
3	0,111204	0,454131
4	0,147554	0,428698
5	0,146513	0,412272
6	0,162115	0,400771

D_e/a_0 (experimental): 0,17629

a) Comportamiento asintótico covalente: $\beta=-2$, $\alpha=-6$.

b) Comportamiento asintótico iónico: $\beta=-2$, $\alpha=-1$.

LEYENDA PARA LA FIGURA (Capítulo XX)

Fig.20.1: Curva de energía potencial vibracional para el KI
construida mediante la utilización de los tres primeros
coeficientes de la serie de Dunham.

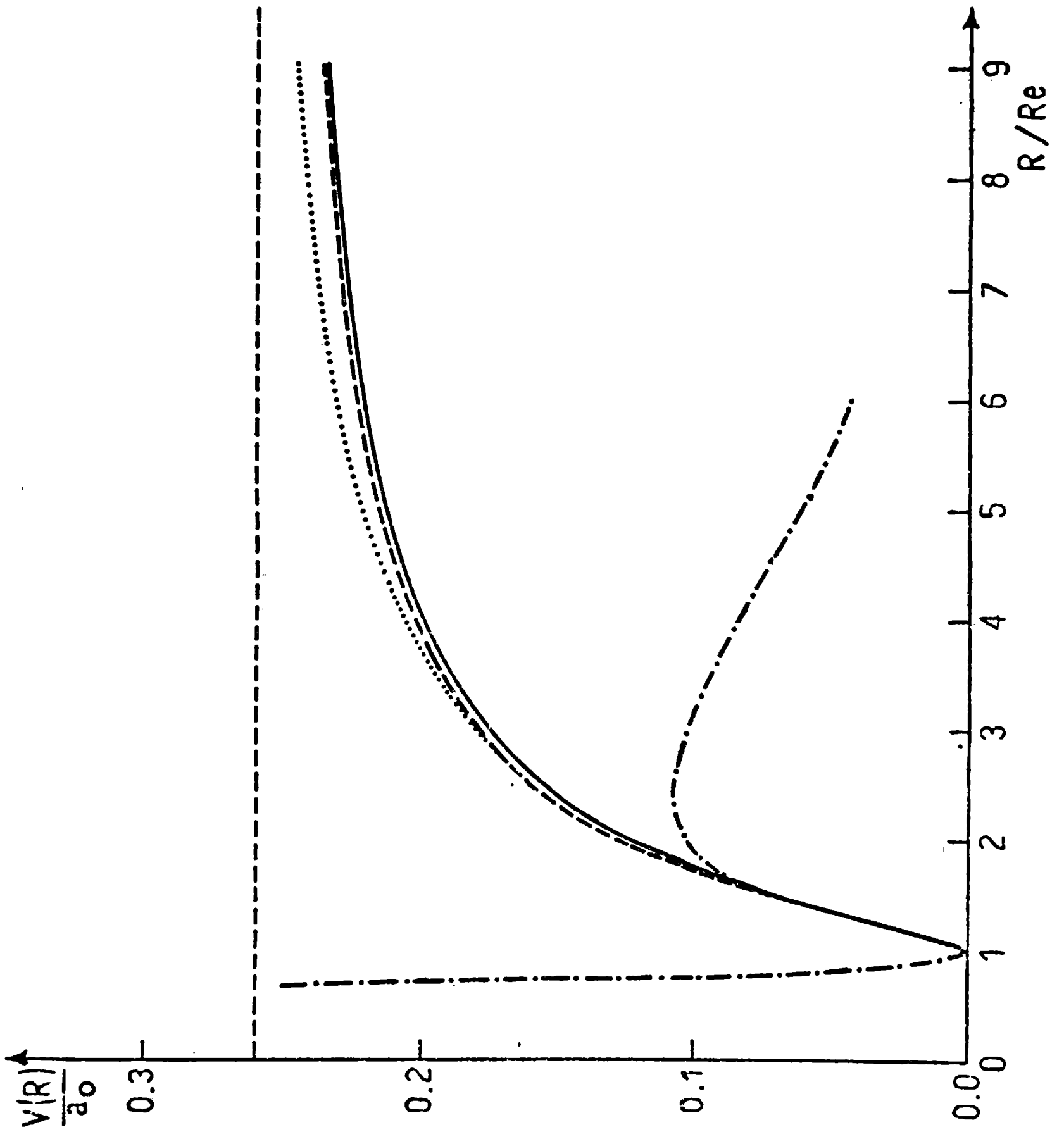
———— MF: $\lambda^2 SE_2$, $k=k_2^I$

----- MF: $SE_4 + D_e/a_0$, $k=k_4^I$

Aproximante de Padé |2/2|.

-.-.-.-. Serie de Simons y col.: $\lambda^2 SE_2$, $k=1$./33/

Fig. 20.1



CAPITULO XXI

OTRAS APLICACIONES DEL MF.

§.65. OBTENCION DE CURVAS UNIVERSALES DE TORQUE MAGNETICO PARA SOLIDOS CRISTALINOS.

Las experiencias de torque magnético son una fuente frecuentemente utilizada para obtener información sobre constantes físicas de sólidos, tales como la magnetización intrínseca de saturación y las constantes de anisotropía magnética /1/.

Para la interpretación de los resultados experimentales y la determinación de las constantes antes mencionadas, resulta muy importante contar con expresiones analíticas para el torque (o magnitudes directamente ligadas al mismo) en función de las variables experimentales. En el problema que aquí estudiaremos, dichas variables son dos: la intensidad del campo magnético aplicado (H), y el ángulo que el mismo forma con un eje del cristal (θ), elegido apropiadamente.

Varias alternativas se han presentado para proveer tales expresiones analíticas /2,3/, todas ellas basadas en desarrollos del torque en serie de Fourier de $\sin\theta$, con coeficientes dependientes de H . Los coeficientes del desarrollo de Fourier permiten determinar varias de las constantes físicas de interés /2,3/, pero no ha sido estudiado con suficiente detalle si las mismas son de validez como para describir al torque como una función de θ y H , en un rango suficientemente amplio de valores de este último. De hecho, los desarrollos previamente utilizados involucran una suposición de campo intenso /3/. Por otro lado, es fácil verificar que cada coeficiente de la serie de Fourier genera un desarrollo completo en todas las potencias del campo. En consecuencia, las truncaciones de la serie de Fourier deben realizarse con sumo cuidado, si se desea obtener resultados razonables para campos del orden 10^3 oersted (ver ref./1/).

En esta sección presentaremos una aproximación alternativa para obtener expresiones analíticas para el torque magnético, utilizando el MF desarrollado y estudiado en los capítulos anteriores. Nuestro punto de vista es bien diferente de los utilizados previamente, ya que recurriremos al desarrollo del torque en serie de potencias del campo magnético, en lugar de emplear la serie de Fourier.

Nuestra discusión presenta no sólo interés debido a la importancia práctica de contar con expresiones analíticas para curvas universales del torque magnético, sino que además resulta de interés conceptual en lo que hace a las propiedades del MF. Como veremos enseguida, el problema que aquí nos ocupa presenta algunas características que no estaban presentes en los ejemplos estudiados en capítulos anteriores.

Para mostrar cuál es el problema que concretamente debemos estudiar, consideremos por el momento un cristal cúbico con una magnetización intrínseca \bar{M} . La energía de anisotropía magnética para este sistema queda dada por /1/:

$$\epsilon = k_1 (a_1^2 a_2^2 + a_3^2 a_2^2 + a_3^2 a_1^2) + k_2 a_1^2 a_2^2 a_3^2, \quad (65.1)$$

donde los coeficientes $\{a_i\}$ son los cosenos directores de \bar{M} y k_1 y k_2 son las constantes de anisotropía magnética. Si ahora el cristal cúbico se rota alrededor del eje $|001|$, tenemos $a_3=0$ y $a_2^2=1-a_1^2$, con lo cual la ec.(65.1) se puede reescribir del siguiente modo:

$$\epsilon = k_1 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha, \quad (65.2)$$

donde α es el ángulo que forma la magnetización con el eje $|100|$, esto es, $a_1 = \cos \alpha$.

El torque magnético τ está definido, a partir de la ec.(65.2), de la siguiente manera /1/:

$$\tau = \frac{\partial \epsilon}{\partial \alpha} = \frac{1}{2} k_1 \sin(4\alpha) \quad (65.3)$$

Si ahora aplicamos al cristal, pendiente de su eje $|001|$, un campo magnético externo de intensidad $H = ||\bar{H}||$, formando un ángulo θ con el eje del cristal (ver fig.21.1), el torque total τ_{tot} que se obtiene es:

$$\tau_{tot} = \tau - \frac{\partial}{\partial \alpha} \{ \bar{H} \cdot \bar{M} \} = \tau - \frac{\partial}{\partial \alpha} \{ HM \cos(\theta - \alpha) \}$$

$$M = ||\bar{M}||, \quad H = ||\bar{H}||, \quad (65.4)$$

donde naturalmente $(\theta - \alpha)$ es el ángulo entre el campo aplicado y la magnetización del cristal (fig.21.1). Experimentalmente, la medida consiste en aplicar el campo magnético H , reestableciendo al mismo tiempo el equilibrio de forma tal que el cristal no rote mediante un torque mecánico sobre el eje del que pende el cristal. En esta condición se cumple que $\tau_{tot}=0$, lo que nos da una expresión para el torque, que convenientemente escribiremos del siguiente modo:

$$\tau' = \sin(4\alpha) = b \sin(\theta - \alpha), \quad \tau' = 2\tau/k_1, \quad (65.5)$$

donde b es un parámetro adimensional dado por:

$$b = \frac{2HM}{k_1} \quad (65.6)$$

Debe tenerse presente desde ahora que las magnitudes fijadas experimentalmente son $\sin \theta$ y H , en tanto que la magnitud medida es τ . Las constantes k_1 , M y α son desconocidas y deben determinarse a partir de los datos

anteriores. Ahora bien, la ec.(65.5) vincula α , θ y la nueva variable b ; dicha relación nos permitirá más adelante desarrollar un procedimiento adecuado para determinar las constantes desconocidas.

Dado que deseamos obtener expresiones analíticas explícitas de alguna función de α en términos de θ y de b a partir de la ec.(65.5), podría parecer a primera vista que se pierde generalidad al considerar sólo la rotación alrededor de la cara $|001|$, y en consecuencia al involucrar sólo a k_1 en las ecuaciones. Sin embargo esto no es así, pues k_1 y k_2 pueden determinarse en forma independiente mediante un sencillo dispositivo experimental, de forma tal de reducir la ecuación para el torque a la ec.(65.5) /4/. Cabe acotar que si el cristal es tetragonal, la tercera constante de anisotropía que aparece en este caso, k_3 , puede determinarse nuevamente mediante una ecuación similar a (65.5). En consecuencia, dado que la ec.(65.5) describe un conjunto bastante general de problemas, nos restringiremos a ella en lo que sigue de este párrafo. Debe tenerse presente, no obstante, que el procedimiento que seguiremos es totalmente general.

Tal como lo comentamos más arriba, las soluciones de la ec.(65.5) y similares se suelen aproximar mediante expresiones como la siguiente:

$$\text{sen} \alpha = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n}(H) \text{sen } 2n\theta \quad (65.7)$$

Nuestra propuesta es estudiar a $\text{sen} \alpha$ como una función de b (y no de H), y evitar la serie de Fourier (65.7). Con tal propósito la ec.(65.5) puede ser reescrita convenientemente como una ecuación algebraica, si utilizamos la siguiente relación auxiliar:

$$\text{sen } 4\alpha = 4 \text{cos} \alpha \text{sen} \alpha (1 - 2\text{sen}^2 \alpha) \quad (65.8)$$

Con el resultado anterior, y luego de unas simples manipulaciones algebraicas se llega a que la ec.(65.5) es equivalente a:

$$\begin{aligned} & - 64x^8 + 128x^6 - 16b\text{sen}\theta x^5 - 80x^4 + 24b\text{sen}\theta x^3 + (16-b^2)x^2 \\ & - 8b\text{sen}\theta x + b^2\text{sen}^2\theta = 0 \quad , \quad x=\text{sen} \alpha \end{aligned} \quad (65.9)$$

Las raíces de la ec.(65.9) se pueden desarrollar en serie de potencias del parámetro b , haciendo:

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} x^{(n)} b^n \quad , \quad b \ll 1 \quad , \quad (65.10a)$$

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} x'^{(n)} b^{-n} \quad , \quad b \gg 1 \quad (65.10b)$$

Naturalmente los desarrollos (65.10) corresponden, respectivamente, a los desarrollos de Taylor y Laurent de las raíces, y nos proporcionan un

punto de partida para aplicar el MF. Ambos desarrollos poseen radio de convergencia finito, por lo que cabe esperar que se obtengan buenos resultados al aplicar el método de suma de series.

El coeficiente $x^{(0)}$ en la ec.(65.10a) corresponde a las raíces de la ec.(65.9) cuando $b=0$, esto es:

$$x^{(0)2} \{-4x^{(0)6} + 8x^{(0)4} - 5x^{(0)2} + 1\} = f(x^{(0)}) = 0 \quad (65.11)$$

Las raíces de la ecuación anterior son $x^{(0)} = 0(2), 1/2(2), -1/2(2), 1(1), -1(1)$, indicando entre paréntesis la multiplicidad de las mismas. Cabe notar que las raíces de multiplicidad 2 son extremos locales de $f(x^{(0)})$ y por lo tanto la función no cambia de signo en un entorno de las mismas. Observemos que por otro lado las raíces $x^{(0)} = \pm 1$ nos dan $\alpha = \pm \pi/2$, que corresponde a ejes del cristal en el caso cúbico.

Utilizando la ec.(65.10b), es inmediato llegar a la conclusión que el coeficiente $x'^{(0)}$ corresponde a las raíces de la ec.(65.9) cuando $b \rightarrow \infty$. Un simple cálculo nos muestra que estas raíces son sólo dos:

$$x'^{(0)} = \pm \text{sen} \theta \quad (65.12)$$

Dado que las soluciones de la ec.(65.5) tienen período $\pi/2$, basta con considerar el intervalo:

$$\frac{\pi}{4} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \quad , \quad (65.13)$$

para describir el problema completo. A partir de dicha condición, se deduce que la raíz de interés en todo el rango de valores de b es la que satisface:

$$\lim_{b \rightarrow 0} x = 1 \quad , \quad \lim_{b \rightarrow \infty} x = \text{sen} \theta \quad (65.14)$$

El significado físico de las condiciones expresada en (65.14) es claro: a campo nulo la magnetización \bar{M} se encuentra alineada con un eje del cristal (ortogonal al que hemos tomado como referencia), y cuando el campo tiende a infinito la magnetización tiende a alinearse con aquél ($\alpha \rightarrow \theta$).

Considerando ahora que la magnetización M es una constante sólo si el campo H es muy intenso, parece apropiado dar preeminencia a los coeficientes $\{x'^{(n)}\}$ para construir una expresión analítica para x en términos de b . De esta manera b será directamente proporcional a H .

Estamos interesados en obtener expresiones analíticas sencillas para x , por lo tanto recurriremos a los primeros coeficientes de los desarrollos (65.10a) y (65.10b). A tal efecto, al introducir (65.10a) en (65.9) e igualar a cero los coeficientes que acompañan a cada potencia de b , calculamos los primeros coeficientes $x^{(n)}$:

$$x^{(1)} = \text{sen } \theta (3x^{(0)2} - 2x^{(0)4} - 1) / (64x^{(0)6} - 96x^{(0)4} + 40x^{(0)2} - 4), \quad (65.15a)$$

$$\begin{aligned} x^{(2)} = & \{1792x^{(0)6} x^{(1)2} - 1920x^{(0)4} x^{(1)2} + 80x^{(0)4} x^{(1)} \text{sen } \theta \\ & + 480x^{(0)2} x^{(1)2} - 72x^{(0)2} x^{(1)} \text{sen } \theta - 16x^{(1)2} + x^{(0)2} \\ & + 8x^{(1)} \text{sen } \theta - \text{sen}^2 \theta\} / \{-512x^{(0)7} + 768x^{(0)5} - 320x^{(0)3} \\ & + 32x^{(0)}\} \end{aligned} \quad (61.15b)$$

Introduciendo en las ecs.(65.15) las raíces elegidas de acuerdo a la condición (65.14), obtenemos la siguiente expresión para x:

$$x \approx 1 - \frac{\cos^2 \theta}{32} b^2 + O(b^3) \quad , \quad (65.16)$$

válida para valores pequeños de b. Notemos que el término de primer orden es nulo.

En forma análoga, introduciendo (65.10b) en (65.9) y utilizando la condición (65.14) para elegir a $x^{(0)}$, deducimos:

$$x^{(1)} = -4\{\text{sen } \theta + 3\text{sen}^3 \theta + 2\text{sen}^5 \theta\} \quad , \quad (65.17a)$$

$$x^{(2)} = 16\{18\text{sen}^9 \theta - 44\text{sen}^7 \theta + \frac{73}{2}\text{sen}^5 \theta - \frac{23}{2}\text{sen}^3 \theta + \text{sen } \theta\}. \quad (65.17b)$$

A modo de comparación, es fácil verificar que en el desarrollo de Fourier (65.7) hay una gran cantidad de coeficientes A_{2n} que contribuyen con términos del orden de b^{-1} y b^{-2} . Luego, una truncación arbitraria de (65.7), necesaria para efectuar algún cálculo, no permite garantizar en modo alguno el comportamiento correcto de x para valores grandes de b. Esta es una diferencia fundamental entre nuestro tratamiento y los realizados previamente /1-3/: los coeficientes $x^{(1)}$ y $x^{(2)}$ nos dan todas las contribuciones exactas hasta el segundo orden en b^{-1} , las que, por lo tanto, constituyen los términos dominantes para $(b^2 x)(1/b \rightarrow 0)$. Por otro lado no es muy difícil obtener los coeficientes de Fourier a partir de los desarrollos en serie (65.10), haciendo:

$$\text{sen}^m \theta = \sum_{n=1}^{\infty} B_{mn} \text{sen } 2n\theta \quad (65.18)$$

Para aplicar el MF es conveniente definir la función a aproximar de la siguiente manera (introducimos la notación usada en los capítulos anteriores):

$$E(1, \lambda) = x - 1 \quad , \quad \lambda = 1/b \quad , \quad (65.19)$$

función esta última que, a partir de los desarrollos (65.10), posee las siguientes propiedades:

$$E(1,\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} E^{(n)} \lambda^n ; E^{(0)} = x^{(0)} - 1 ; E^{(n)} = x^{(n)}, n \geq 1, \lambda \ll 1 \quad (65.20a)$$

$$E(1,\lambda) = \lambda^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{(n)} \lambda^{-n} ; e^{(n)} = x^{(n+2)}, n \geq 0, \lambda \gg 1 \quad (65.20b)$$

De acuerdo a lo discutido en el §.44 /5-7/ sabemos que el MF puede aplicarse a la función $E(1,\lambda)$, usando los exponentes $\alpha=-1$ y $\beta=-2$, deducidos a partir de los desarrollos asintóticos (65.20). En consecuencia, utilizando las ecs.(44.7), (44.8), (44.14) y (44.18) sabemos que la función $E(1,\lambda)$ puede ser aproximada por una secuencia SE_N ; dada por:

$$SE_N = \left(\frac{w}{\lambda}\right)^2 S_N(k,w) , \quad (65.21)$$

siendo:

$$S_N(k,w) = \sum_{n=0}^N \bar{E}^{(n)} w^n , \quad (65.22a)$$

$$\bar{E}^{(n)} = \sum_{i=0}^n (-1)^{n-i} \binom{-2-i}{n-i} E^{(i)} k^{-2-i} , \quad (65.22b)$$

donde w es la nueva variable del desarrollo, que en este caso, al ser $\alpha=-1$, nos conduce a una transformación de Euler generalizada /8/:

$$w = \lambda k / (1 + \lambda k) , \quad k > 0 \quad (65.23)$$

La secuencia SE_N dada por la ec.(65.21) se construye con los coeficientes $E^{(n)}$, esto es, se construye a partir del desarrollo de x en serie de $1/b$, válido para grandes intensidades del campo magnético.

Para ilustrar las ventajas del MF, nos restringiremos aquí a una aproximación sumamente sencilla, tomando $N=2$ en las ecs.(65.21) y (65.22). La truncación de la secuencia a este orden nos permite utilizar los coeficientes calculados previamente (ecs.(65.14), (65.17a) y (65.17b)). Con estos resultados y con las ecuaciones provistas por el MF, deducimos la siguiente expresión analítica para SE_2 en términos de b , θ y la constante k :

$$\begin{aligned} SE_2 = & 1 + b^2 \left(\frac{k/b}{1+k/b}\right)^2 \{(\text{sen}\theta-1)k^{-2} + \frac{k/b}{1+k/b} (2(\text{sen}\theta-1)k^{-2} \\ & - 4k^{-3}(\text{sen}\theta-3\text{sen}^3\theta+2\text{sen}^5\theta)) + \left(\frac{k/b}{1+k/b}\right)^2 (3(\text{sen}\theta-1)k^{-2} \\ & - 12k^{-3}(\text{sen}\theta-3\text{sen}^3\theta+2\text{sen}^5\theta) + 16\text{sen}\theta (18\text{sen}^8\theta-44\text{sen}^6\theta \\ & + \frac{73}{2}\text{sen}^4\theta - \frac{23}{2}\text{sen}^2\theta + 1)k^{-4})\} \quad (65.24) \end{aligned}$$

La constante k puede determinarse de acuerdo a las reglas de estabilidad vistas en el §.44, esto es, a través de los puntos críticos de $S_N(k,1)$. En el caso que aquí nos ocupa la secuencia que debemos estudiar es:

$$S_2(k,1) = 6k^{-2}E^{(0)} + 4k^{-3}E^{(1)} + k^{-4}E^{(2)} \quad (65.25)$$

Para realizar los cálculos utilizaremos el PI con k positivo de mayor valor absoluto, ya que éste corresponde a la menor derivada primera y en consecuencia define una mejor meseta para la secuencia $S_2(k,1)$ como una función de k . Los dos PI que posee (65.25) están determinados por:

$$(k^*)^{-1} = \frac{1}{20E^{(2)}} \{ -24E^{(1)} \pm (576E^{(1)2} - 720E^{(0)}E^{(2)})^{1/2} \}, \quad (65.26a)$$

$$k_2^I = \max k^*, \quad k^* > 0, \quad (65.26b)$$

siendo finalmente k_2^I quien nos permite obtener nuestra aproximación a la función $E(1,\lambda)$, haciendo:

$$E(1,\lambda) \approx \left(\frac{w}{\lambda}\right)^2 S_2(k_2^I, w) \quad (65.27)$$

Mediante las ecs.(65.24) y (65.26) el MF nos proporciona una expresión analítica explícita para $\text{sen } \theta$ (y de allí para el torque τ') como una función de θ y b .

Para obtener mejores resultados en el rango de valores pequeños de b es conveniente determinar k^* en una forma alternativa. La forma más simple para obtener el comportamiento correcto en el límite $b \rightarrow 0$, es recurrir a la ec.(57.1), que en nuestro caso nos da la siguiente expresión para k^* :

$$S_2(k^*,1) = e^{(0)}, \quad (65.28)$$

que, de acuerdo a la ec.(65.25), es una ecuación de cuarto grado en k .

Antes de discutir los resultados obtenidos, es conveniente realizar algunos comentarios sobre las características que distinguen a este problema de todos aquéllos estudiados en los capítulos precedentes. En primer lugar, observemos que la constante k de la transformación (65.23) depende de θ ; de hecho para cada valor de θ obtenemos un conjunto de coeficientes $\{E^{(n)}\}$ diferente, y por lo tanto cambia la serie a ser sumada. Por otro lado, los coeficientes $\{E^{(n)}\}$ dependen de θ como un polinomio en $\text{sen } \theta$ y por lo tanto pueden cambiar de signo para valores de θ entre $-\pi/4$ y $\pi/2$. Esta propiedad hace que la serie de potencias (65.20a) que estamos aproximando puede ser oscilante en signo sólo para algún intervalo de valores de θ . Cabe recordar que, tal como lo hemos discutido en párrafos anteriores, el MF permite obtener mejores resultados para aquellos desarrollos en serie cuyos coeficientes son oscilantes en signo /9/.

Estudieemos la condición que debe cumplirse para mantener la oscilación en signo en los tres primeros coeficientes $E^{(0)}$, $E^{(1)}$ y $E^{(2)}$, que han sido los utilizados para obtener la ec.(65.24). A partir de las ecs. (65.14) y (65.17a) se deduce inmediatamente que:

$$E^{(0)} < 0, \quad \frac{\pi}{4} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad (65.29a)$$

$$E^{(1)} > 0, \quad \frac{\pi}{4} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad (65.29b)$$

y por lo tanto nuestro problema se reduce a determinar la condición para que $E^{(2)} < 0$. Utilizando la ec.(65.17b), encontramos el único cero que posee $E^{(2)}$ como una función de θ en:

$$\theta_0 = 1,116 \quad (\approx 63,92^\circ), \quad (65.30)$$

siendo $E^{(2)}(\theta > \theta_0) < 0$. En consecuencia, cabe esperar que el MF permitirá obtener resultados aceptables para $E(1, \lambda)$ utilizando la información analítica disponible, si el ángulo entre el campo aplicado y el eje del cristal satisface: $64^\circ \lesssim \theta \leq 90^\circ$. Por otro lado si $\theta \lesssim 64^\circ$, los resultados para valores pequeños de b no serán tan precisos al utilizar la ec.(65.24).

Para verificar la utilidad de nuestro procedimiento en una posible experiencia de torque magnético medido en función del campo aplicado, hemos calculado τ' como una función de b , para un ángulo $\theta = 72^\circ$, que satisface la condición arriba mencionada. La Tabla 21.1 muestra los resultados obtenidos mediante la ec.(65.24), utilizando el valor de k obtenido con la ec.(65.26) (segunda columna), y utilizando la ec.(65.28) (tercera columna). Los cálculos se han realizado con el Programa X para TI-59P que se muestra al final de la obra, y los resultados se comparan con los exactos, obtenidos mediante la solución numérica de la ec.(65.5).

Los resultados que se ven en la Tabla 21.1 nos revelan que, como se esperaba, el agregado del coeficiente $e^{(0)}$ (ec.(65.28)) mejora en gran medida la precisión de la aproximación a τ' . Considerando la sencillez de nuestra expresión analítica, nuestros resultados proveen una excelente aproximación a curvas generales de τ' vs. b , en todo el rango de valores de este último.

Otro tipo de curva universal que resulta interesante aproximar es la correspondiente a τ' vs. θ , para valores fijos del parámetro b (esto es, de la intensidad del campo magnético). Para verificar la precisión de nuestros resultados para este nuevo tipo de curva, hemos decidido restringirnos a un rango de valores de b que resulte bien representativo de los valores experimentales de las magnitudes M , k_1 y H . A partir de la información contenida en las refs./1-3/ hemos hecho la siguiente estimación:

$$k_1 \approx 10^5 \text{ erg cm}^{-3}, \quad 10^3 < H < 10^5 \text{ (oersted)}, \quad 0,1 < M < 10 \text{ (T)}$$

con lo cual obtenemos el siguiente rango de mayor interés para b:

$$10 < b < 10^5 \quad (65.31)$$

Para construir la curva τ' vs. θ es necesario hacer variar θ entre $\pi/4$ y $\pi/2$. No obstante la discusión previamente realizada respecto de la oscilación en signo de los coeficientes $E^{(n)}$, hemos decidido utilizar por sencillez la ec.(65.26) para calcular k.

Los cálculos han sido realizados con el Programa X para TI-59P y los resultados se presentan en la fig.21.2, para $b=10$ y $b=100$, de acuerdo a (65.31). Nuevamente los resultados se comparan con los exactos obtenidos por resolución numérica de la ec.(65.5). La descripción para $b=10$ es muy aceptable, teniendo en cuenta que el valor de b no es lo suficientemente grande como para minimizar el error que sabemos se comete en mayor grado para $\theta \lesssim 64^\circ$. Por el contrario, si $b=100$ la precisión es enorme en todo el rango de valores de θ , a punto tal que no es posible distinguir en la escala del gráfico entre los resultados exactos y los obtenidos a través del MF, ya que el acuerdo es a cuatro decimales.

Frente a esta notable aproximación, creemos oportuno recordar que el MF fue aplicado para sumar una serie de potencias de b, y no una función de θ como la que se ve en la fig.21.2, con características bien diferentes. Es también digno de destacarse que nuestro método permite una aproximación especialmente buena al máximo de las curvas τ' vs. θ .

En conclusión, el MF permite obtener con muy poco esfuerzo, excelentes curvas universales para dos posibles procedimientos de medida: τ vs. θ , con H constante y τ vs. H, con θ constante. Por otro lado el método posee la ventaja de generar expresiones analíticas en términos de b, el cual es proporcional a la intensidad del campo magnético H sólo si M y k_1 son independientes del mismo. En este sentido nuestro procedimiento permite un nivel mayor de generalidad.

El manejo de las curvas universales requiere un comentario adicional, ya que nuestro "torque" τ' es adimensional, lo mismo que el parámetro b. Nuestra propuesta final es el siguiente esquema de trabajo experimental para determinar las constantes físicas k_1 y M: i) En primer lugar se determinan los ejes del cristal magnético a estudiar; ii) Se aplica un campo intenso ($H \sim 10^4$ oersted) y se rota el cristal alrededor de un eje perpendicular al campo, hasta determinar el valor del torque máximo ($\tau'=1$). Esto nos proporciona k_1 y nos da la unidad para las curvas universales (ec.(65.5)). iii) Finalmente se realizan mediciones de τ para diferentes campos de intensidad H, con $\theta \gtrsim 64^\circ$, para luego interpolar en la curva τ' vs. b, determinando b y de allí la magnetización M.

Finalmente, creemos oportuno añadir que el procedimiento seguido en este capítulo es totalmente general, y puede aplicarse para aproximar las raíces de cualquier otra ecuación algebraica de interés.

REFERENCIAS DEL CAPITULO XXI.

- /1/ H. Zijlstra, Measurement of Magnetic Quantities, en: E.P. Wohlforth (Ed.), Experimental Methods in Magnetism, vol.IX, North Holland, 1967.
- /2/ G.S. Korzunin and M.P. Uvarova, Phys. Met. Metallog. 37 (1974) 72.
- /3/ Z. Dali, Z. Hui and C. Liya, J. Magn. Magn. Mat. 19 (1980) 412.
- /4/ Ref./1/, pág.187.
- /5/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Math. Phys. 25 (1984) 2377.
- /6/ F.M. Fernández, G.A. Arteca, S.A. Maluendes and E.A. Castro, Phys. Lett. A 103 (1984) 19.
- /7/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, J. Math. Phys. (~~en prensa~~). 25 (1974) 3492
- /8/ G.H. Hardy, Divergent Series, Oxford University Press, Oxford, 1949.
- /9/ G.A. Arteca, F.M. Fernández and E.A. Castro, Physica A (~~en prensa~~). 128 (1984) 589

RESULTADOS NUMERICOS (CAP.XXI)

Tabla 21.1

Variación del torque τ' con b , para $\theta=72^\circ$.

b	$-\tau'$ a)	$-\tau'$ b)	$-\tau'$ c)
0,01	0,003114	0,003086	0,003086
0,1	0,030559	0,030252	0,030183
0,5	0,14034	0,13909	0,13796
1,0	0,25331	0,25138	0,24869
2,0	0,41912	0,41678	0,41265
5,0	0,66661	0,66498	0,66293
10,0	0,80507	0,80439	0,80433
100,0	0,93878	0,93878	0,93878
1000,0	0,94988	0,94988	0,94988

a)
Calculado con las ecs.(65.24) y (65.26). Se utilizó $k_2^I=6,65259310$.

b)
Calculado con las ecs.(65.24) y (65.28). Se utilizó $k^*=6,797809685$.

c)
Resultado exacto, obtenido por resolución numérica de la ec.(65.5).

LEYENDAS PARA LAS FIGURAS (Capítulo XXI)

Fig.21.1: Esquema de los ángulos elegidos entre el campo magnético aplicado, \vec{H} , la magnetización, \vec{M} , y un eje del cristal.

Fig.21.2: Curva de torque τ' en función del ángulo θ para distintos valores de la variable b .

- Calculado con el MF, $b=10$.
- Calculado con el MF, $b=100$.
- o Resultado exacto numérico.

Fig. 21.1

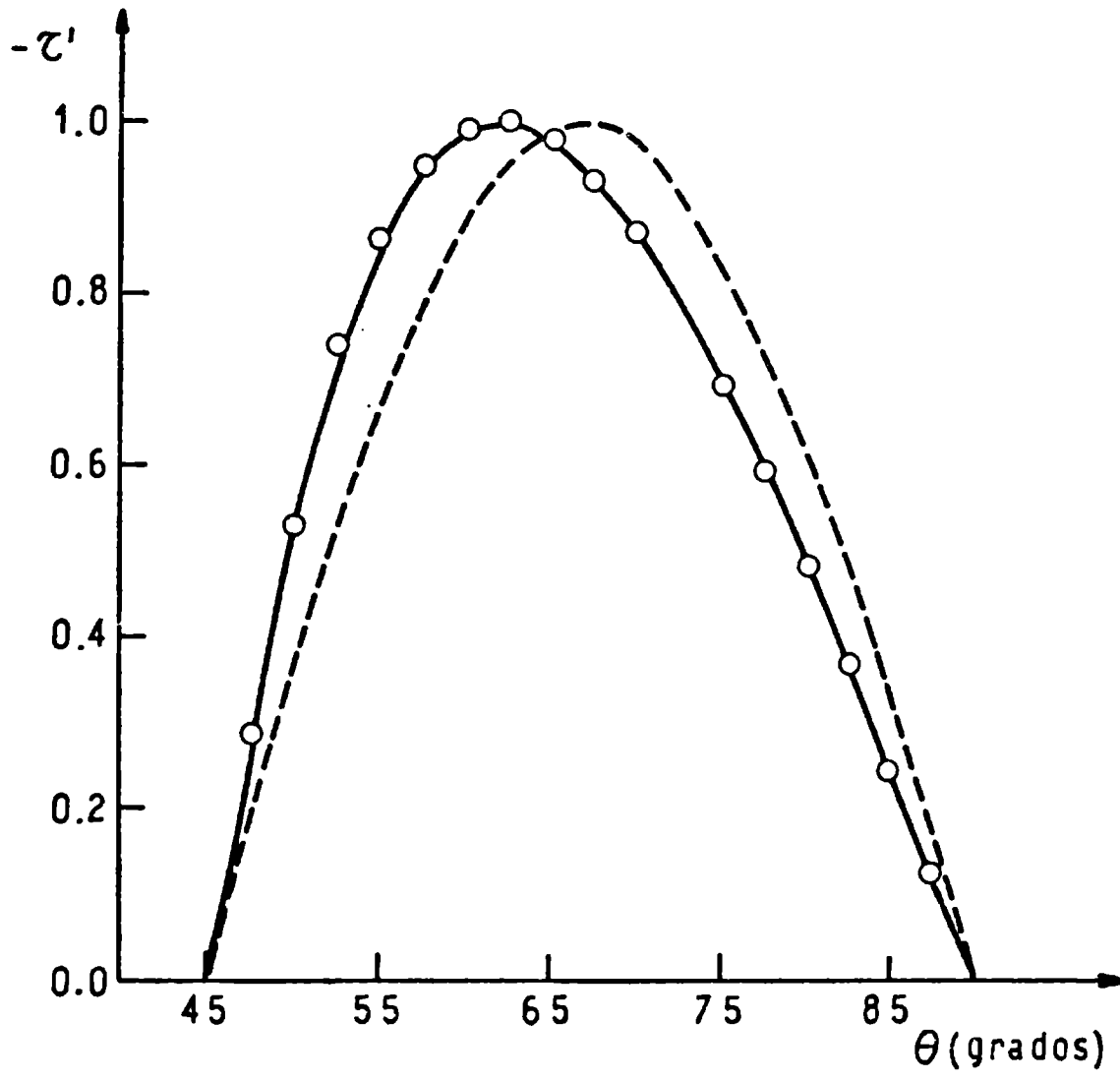
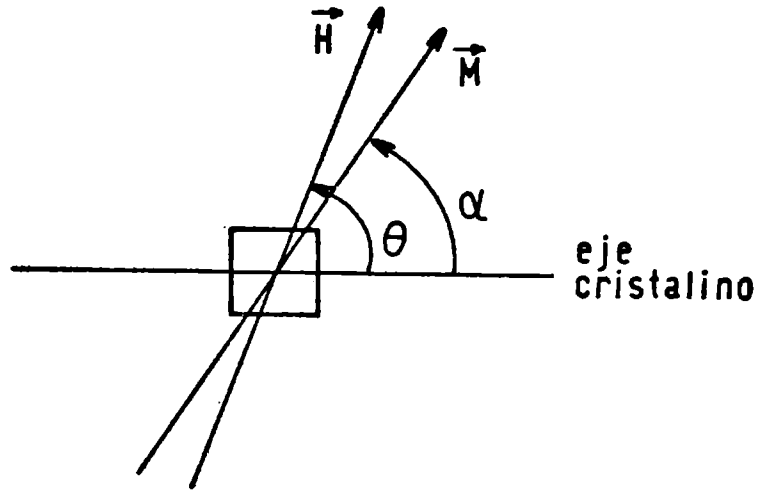


Fig. 21.2

APENDICES

APENDICE A

APLICACIONES DEL MODELO DEL OSCILADOR ANARMONICO Y RELACIONES DE DILATACION.

A.I. Aplicaciones del modelo del oscilador anarmónico.

El modelo del oscilador anarmónico, definido por el siguiente operador de Hamilton:

$$H(Z, \lambda) = p^2 + Zx^2 + \lambda x^{2N}, \quad 0 \leq Z, \lambda < \infty, \quad N=2,3,\dots, \\ p = -i d/dx, \quad (A.1)$$

ha jugado, y juega hasta el día de hoy, un papel fundamental en diversos campos de la física y la fisicoquímica. El interés en las propiedades del espectro de autovalores de $H(Z, \lambda)$, se justifica tanto por las diferentes aplicaciones del modelo en relación a diversos fenómenos, como por su interés teórico, ya que es uno de los sistemas más simples en el que se presentan propiedades características de otros modelos más complejos.

No es de ninguna manera la intención de este Apéndice hacer una revisión sobre la bibliografía referente al modelo (A.1), dada la vastedad de la misma. Antes bien, deseamos aquí dar un panorama de los principales fenómenos o teorías que exigen introducir en forma natural al operador (A.1). Considerando que en esta obra se utilizarán repetidamente los osciladores anarmónicos para diversas investigaciones, la discusión del presente Apéndice servirá como marco de referencia, para justificar la utilización del modelo.

Las oscilaciones anarmónicas resultan principalmente de importancia en tres campos bien diferentes: vibraciones moleculares, procesos de difusión y teorías de láser, y teorías de campos sencillas. En este Apéndice A discutiremos los dos primeros de ellos y el tercero será objeto del Apéndice B.

Indudablemente, el mayor interés de la fisicoquímica en el oscilador anarmónico radica en su aparición en ciertas vibraciones moleculares, y en este caso, la contribución anarmónica predominante es cuártica ($N=2$ en la ec.(A.1)).

Bell /1/ fue el primero en hacer notar que las vibraciones de "bending" fuera del plano, en anillos de cuatro miembros, deberían ser

fundamentalmente cuárticas (esto es, $Z=0$ y $N=2$ en (A.1)). A partir de allí, una abundante evidencia experimental confirma la importancia de las oscilaciones con anarmonicidad cuártica; entre los primeros resultados, podemos citar a los siguientes ejemplos: i) Interpretación del espectro de microondas del óxido de trimetileno $((\text{CH}_2)_3\text{O})$ /2,3/; ii) Interpretación del espectro infrarrojo lejano del óxido de trimetileno /4/ mediante oscilaciones fuera del plano del anillo; iii) Oscilaciones fuera del plano molecular del grupo CH_2 en el diazometano /5/; en este último caso, la anarmonicidad cuártica que se debe introducir es menor que en el caso ii).

Experiencias posteriores mostraron que el efecto de anarmonicidad cuártica aparece en una gran cantidad de compuestos anillados /6/, como el ciclobutano /7/ y la ciclobutanona /8/. Algunas vibraciones, como las que aparecen en el ciclopentano, requieren considerar oscilaciones anarmónicas cuárticas bidimensionales /9/.

Si bien en general puede esperarse una pequeña contribución cuártica en el potencial de vibración, para las oscilaciones de bajas frecuencias (grandes amplitudes), la anarmonicidad cuártica en los compuestos anillados tiene razones más fundamentales para su aparición. Dado que no hay una discusión suficientemente detallada en la literatura, mostraremos brevemente en este Apéndice porqué aparecen vibraciones de tipo cuártico.

Consideremos un enlace ABA perteneciente a un compuesto anillado, ubicado inicialmente en el plano 1 (A_1BA_1), indicado en la fig.A.1; el ángulo de enlace correspondiente a esta primera situación es $2\phi_1$. Si ahora suponemos que las fuerzas entre átomos no unidos por enlaces son despreciables, entonces las longitudes de enlace (R) no varían mientras se produce la oscilación, esto es, los átomos se mueven en círculos. Esta situación se indica en la fig.A.1, donde hemos graficado la vibración de deformación del anillo, en la cual los átomos pasan de la posición A_1 a A_2 . En la nueva posición el ángulo de enlace se ha deformado en la cantidad $2\Delta\phi=2(\phi_1-\phi_2)$.

Ahora bien, el potencial de vibración molecular para la deformación del anillo es debido, en las condiciones antes mencionadas, a la interacción entre los enlaces; en otras palabras, el potencial está asociado a la deformación $\Delta\phi$ del ángulo de enlace. Dado que es necesario describir el potencial molecular en términos de las coordenadas atómicas, debemos en primer lugar, vincular dichas coordenadas con $\Delta\phi$.

La fig.A.1 nos muestra que durante la vibración, los átomos A se han desplazado una distancia ℓ , dada por:

$$\ell^2 = \delta_1^2 + \delta_2^2 \quad (\text{A.2})$$

La figura nos permite apreciar inmediatamente las siguientes relaciones trigonométricas:

$$\delta_1^2 = R^2 (\text{sen}^2\phi_2 - \text{sen}^2\phi_1) \quad , \quad (\text{A.3a})$$

$$\delta_2^2 = R^2 (\text{sen}\phi_2 - \text{sen}\phi_1)^2, \quad (\text{A.3b})$$

con lo cual obtenemos:

$$l^2/R^2 = 2 (\text{sen}^2\phi_2 - \text{sen}\phi_1 \text{sen}\phi_2) \quad (\text{A.4})$$

La ec.(A.4) se puede reescribir fácilmente en términos de la variación del ángulo de enlace:

$$l^2/R^2 = 2 (\cos^2\Delta\phi - \cos\Delta\phi) \text{sen}^2\phi_1 + (\text{sen}2\phi_1 - \text{sen}\phi_1)\text{sen}(2\Delta\phi) + 2 \text{sen}^2\Delta\phi \cos^2\phi_1 \quad (\text{A.5})$$

En la aproximación de pequeñas oscilaciones ($\Delta\phi \gg \Delta\phi^2$), la ec.(A.5) se puede simplificar de la siguiente manera:

$$y^2 = l^2/R^2 \approx A\Delta\phi + B\Delta\phi^2, \quad (\text{A.6a})$$

$$A = \frac{1}{2} (\text{sen}2\phi_1 - \text{sen}\phi_1), \quad B = (3\cos^2\phi_1 - 1), \quad (\text{A.6b})$$

que se puede invertir, de forma tal de expresar $\Delta\phi$ en términos de y :

$$\Delta\phi \approx \frac{1}{A} y^2 - \frac{B}{A^3} y^4 \quad (\text{A.7})$$

Si la interacción entre enlaces y entre átomos es débil, no sólo los átomos se moverán en círculos, sino que además la rotación alrededor de los enlaces se puede considerar como libre. En este caso, la fuerza restauradora para las oscilaciones proviene de la distorsión de los ángulos de enlace, y puede considerarse como armónica, con lo cual el potencial queda:

$$V = k\Delta\phi^2 \approx \frac{k}{A^2} y^4 \quad (\text{A.8})$$

La situación antes mencionada se da principalmente en los pequeños ciclos no tensionados, esto es, no planos. La ec.(A.8) nos asegura que para tales ciclos, los átomos oscilan (en pequeñas oscilaciones) en forma cuártica, y no armónica, alrededor de sus posiciones de equilibrio.

Si los ciclos son tensionados, los átomos no se mueven en círculos. En este caso, la rotación está impedida y la contribución al potencial molecular puede depender del signo de $\Delta\phi$. Podemos escribir entonces:

$$V = k_1\Delta\phi + k_2\Delta\phi^2 \approx \frac{k_1}{A} y^2 + \left(\frac{k_2}{A^2} - \frac{Bk_1}{A^3}\right) y^4, \quad (\text{A.9})$$

lo que nos da un potencial de vibración anarmónico cuártico. La ec.(A.9) muestra que las constantes de fuerza y el ángulo de enlace son los que

determinan el signo de Z (ec.(A.1)). En el caso que $Z < 0$, el potencial de vibración posee un doble mínimo, que es característico de problemas de inversión molecular o puente de hidrógeno.

La oscilación anarmónica cuártica es característica de ciclos cuasiplanos, como el ciclobutano y ciclopentano. Sin embargo otros ciclos planos con enlaces más débiles (como el dímero del cloruro de aluminio) son esencialmente cuárticos en su vibración.

La discusión realizada más arriba revela claramente la importancia de conocer los autovalores de (A.1) en forma continua para todo $\lambda > 0$, esto es, para los osciladores anarmónico cuártico y puramente cuártico. En esta obra se realizarán varios aportes al cálculo de dichos autovalores.

La necesidad de conocer el espectro de autovalores de osciladores anarmónicos aparecen también en forma natural en un contexto totalmente diferente, como es la teoría de procesos de difusión /10-12/. Haremos aquí una breve presentación del problema, para mostrar de qué modo se involucra la teoría de oscilaciones anarmónicas en este campo de la física.

Cuando se estudia un proceso de difusión unidimensional, como puede ser el caso de iones en una membrana /10/, la densidad de probabilidad, $P(x,t)$, queda determinada por la ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left(\frac{dU(x)}{dx} \right) P(x,t) \right\} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) \quad , \quad (A.10)$$

donde D es el coeficiente de difusión y $U(x)$ es el potencial externo al que está sometido al sistema. El caso $D=0$ corresponde a la ecuación de continuidad de Liouville /10/.

Un modelo de proceso de difusión que ha tenido gran interés en la literatura, por ser uno de los más simples y no triviales, es el correspondiente al potencial:

$$U(x) = \frac{Z}{2} x^2 + \frac{1}{4} x^4 \quad , \quad (A.11)$$

para distintos valores del parámetro Z . La sustitución de (A.10) en (A.11), nos proporciona la ecuación siguiente:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \{ (Zx + x^3) P \} + D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad , \quad (A.12)$$

que ha sido estudiada también en relación a la teoría de láseres /13-15/. Por otro lado, la ec.(A.12) representa la descripción de orden cero de un proceso de Markov más general, en el límite termodinámico /12/.

Mostraremos a continuación que la solución de la ec.(A.12) puede ser relacionada a la ecuación de Schrödinger de un oscilador anarmónico. Sin pérdida de generalidad tomaremos $D=1$. Definamos pues $P_0 = P(x,0)$ como la solución estacionaria de la ec.(A.10), esto es:

$$U' P_0 + U' P_0' + P_0'' = 0 \quad , \quad (A.13)$$

donde las primas indican derivación respecto de las coordenadas. Integrando (A.13) y utilizando las condiciones de contorno para la densidad de probabilidad:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} x^N P_0 = 0, \quad N > 0, \quad (A.14)$$

encontramos la relación siguiente:

$$U' = - P_0' / P_0 \quad (A.15)$$

Si ahora escribimos la densidad de probabilidad $P(x,t)$ como:

$$P(x,t) = \{P_0(x)\}^{1/2} S(x) e^{-\mu t}, \quad (A.16)$$

y reemplazamos en (A.10), encontramos luego de simples manipulaciones la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} -\mu P_0 S = (U'' P_0 + P_0' U' + P_0'') S - \frac{S}{2} (P_0' U' + P_0'' + \frac{1}{2P_0} P_0'^2) \\ + (U' P_0 + P_0') S' + P_0 S'' \end{aligned} \quad (A.17)$$

Introduciendo las ecs.(A.13) y (A.15) en (A.17), esta última adopta una forma muy simple:

$$-S'' + \left\{ \frac{U'^2}{4} - \frac{U''}{2} \right\} S = \mu S \quad (A.18)$$

La ec.(A.18) es la ecuación de Schrödinger correspondiente al hamiltoniano siguiente:

$$H = p^2 + V, \quad V(x) = \frac{1}{4} (U'^2 - 2U'') \quad (A.19)$$

siendo S la autofunción y μ el autovalor. Si utilizamos el potencial (A.11), la ec.(A.19) nos conduce al siguiente potencial:

$$V(x) = \left(\frac{1}{4} Z^2 - \frac{3}{2} \right) x^2 + \frac{Z}{2} x^4 + \frac{1}{4} x^6 - \frac{Z}{2} \quad (A.20)$$

Tal como vemos, para determinar la fase temporal μ en la densidad de probabilidad, es necesario conocer el espectro de autovalores del oscilador anarmónico (A.20). La discusión de otros potenciales de difusión conduce a otros potenciales de vibración anarmónica en (A.19).

A.II. Relaciones de dilatación.

Para el conocimiento de los autovalores del oscilador (A.1) y de otros modelos, se han aplicado una variedad de métodos basados en el teorema variacional, la teoría de perturbaciones en sus diferentes va-

riantes, métodos semiclásicos, etc, que aparecen discutidos en el transcurso de la presente obra. Para la discusión de las diferentes aplicaciones que tienen a los osciladores anarmónicos como ejemplo, hemos utilizado distintas expresiones para el hamiltoniano correspondiente. El propósito final de esta sección es mostrar cómo todos los problemas se reducen a determinar los autovalores (y autofunciones) de (A.1).

A tal efecto consideremos una expresión alternativa del hamiltoniano de un oscilador anarmónico, que también se utiliza en esta obra:

$$H'(Z, \lambda') = \frac{1}{2} p^2 + Zx^2 + \lambda' x^{2N} \quad (A.21)$$

El procedimiento que seguiremos para vincular $H(Z, \lambda)$ con $H'(Z, \lambda')$ es de carácter general y es válido para un gran número de operadores, y en consecuencia es conveniente que lo exponamos con algún detalle. Consideremos una función de onda $\Psi(\bar{x})$ normalizada en un espacio n-dimensional:

$$||\Psi(\bar{x})|| = 1, \quad \bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (A.22)$$

e introduzcamos en ella un factor $a > 0$ de dilatación en las coordenadas mediante una homotécea. Esto puede realizarse a través del operador U_a definido por:

$$U_a \Psi(\bar{x}) = a^{1/2} \Psi(a\bar{x}) \quad (A.23)$$

Es inmediato verificar que U_a es unitario:

$$||U_a \Psi(\bar{x})|| = 1, \quad U_a^+ = U_a^{-1}, \quad (A.24)$$

y que además satisface:

$$U_a^{-1} = U_{1/a} \quad (A.25)$$

El operador U_a forma el grupo infinito uniparamétrico de dilataciones ("scaling group"). Mediante dicho operador es inmediato deducir de la ec.(A.23) las siguientes transformaciones de similitud para las coordenadas y sus correspondientes momentos conjugados:

$$U_a x_j^m U_a^+ = a^m x_j^m, \quad (A.26a)$$

$$U_a p_j^m U_a^+ = a^{-m} p_j^m, \quad p_j = -i d/dx_j \quad (A.26b)$$

Las transformaciones (A.26) son la base del denominado "escalado" o dilatación de Symanzik /16/ y su implementación sobre operadores de Hamilton constituye el llamado teorema de Symanzik /16/.

Si ahora aplicamos la transformación de similitud determinada por el

operador U_a , al operador (A.21) obtenemos:

$$U_a H'(Z, \lambda') U_a^+ = \frac{1}{2} a^{-2} \{p^2 + 2a^4 Z x^2 + 2\lambda' a^{2N+2} x^{2N}\} \quad , \quad (A.27)$$

ecuación que se puede reescribir en una forma mucho más simple si elegimos el factor de dilatación tal que $2a^4=1$:

$$U_a H'(Z, \lambda') U_a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \{p^2 + Zx^2 + 2^{(1-N)/2} \lambda' x^{2N}\} \quad (A.28)$$

La ec.(A.1) nos permite escribir a la ec.(A.28) de la siguiente manera:

$$U_a H'(Z, \lambda') U_a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} H(Z, 2^{(1-N)/2} \lambda') \quad , \quad a=2^{-1/4} \quad , \quad (A.29)$$

o bien, haciendo $\lambda = \lambda' 2^{(1-N)/2}$:

$$H(Z, \lambda) = \sqrt{2} U_a H'(Z, 2^{(N-1)/2} \lambda) U_a^+ \quad , \quad a=2^{-1/4} \quad (A.30)$$

Las ecs.(A.29) y (A.30) nos muestran que H y H' son equivalentes a través de un operador unitario U_a . En consecuencia, la igualdad (A.30) se puede condensar en lo que es denominado una "equivalencia unitaria":

$$H(Z, \lambda) = \sqrt{2} H'(Z, 2^{(N-1)/2} \lambda) \quad (A.31)$$

Utilizaremos comúnmente en esta obra esta denominación, pero debe quedar en claro que el sentido de la igualdad formal de operadores (A.31) está dada por la ec.(A.30). Si ahora $E(Z, \lambda)$ y $E'(Z, \lambda)$ son los autovalores de $H(Z, \lambda)$ y $H'(Z, \lambda)$, respectivamente, la equivalencia (A.31) nos permite relacionarlos a través de la igualdad rigurosa:

$$E(Z, \lambda) = \sqrt{2} E'(Z, 2^{(N-1)/2} \lambda) \quad (A.32)$$

Establecida esta correspondencia entre ambos autovalores, en esta obra utilizaremos indistintamente los hamiltonianos (A.1) o (A.21) según nos resulte conveniente.

El procedimiento que hemos seguido para derivar las relaciones de equivalencia unitaria será utilizado repetidamente para deducir relaciones de dilatación similares a (A.32) para un número grande de sistemas. Para la mayoría de ellos no será necesario distinguir entre H y H', tal como se hizo aquí. El lector encontrará un ejemplo de equivalencia unitaria para un hamiltoniano muy general en el §.16, el que contiene como casos particulares a buena parte de los sistemas que se estudian en esta obra.

APENDICE B

EQUIVALENCIA ENTRE LOS ÓSCILADORES ANARMONICOS MECANOCUANTICOS Y LAS TEORIAS DE CAMPOS ϕ^N .

La importancia de los osciladores anarmónicos en el contexto de las vibraciones moleculares y los procesos de difusión gobernados por la ecuación de Fokker-Planck, fue discutida en el Apéndice A. Dichos osciladores resultan asimismo de sumo interés en relación a ciertas teorías de campos simples; el propósito de este Apéndice es establecer la conexión entre ambos problemas. El punto de vista que seguiremos es básicamente el delineado por Bender y Wu /17/, si bien aquí lo expondremos con mayor detalle.

La teoría de campos que consideraremos es aquella definida por el hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + \frac{1}{2} \phi^2 + \lambda \phi^4 \quad , \quad (B.1)$$

donde ϕ es un campo escalar espacio temporal unidimensional, y $\dot{\phi}$ su derivada temporal, los que satisfacen la relación de conmutación:

$$|\phi, \dot{\phi}| = i \quad (B.2)$$

Para derivar en forma rigurosa la representación en coordenadas y momentos del hamiltoniano (B.1), procedemos, en primer lugar, a escribir el campo ϕ en términos de los operadores de creación y aniquilación en el espacio de Fock /18-20/:

$$\phi = (1/2)^{1/2} (a e^{-it} + a^+ e^{it}) \quad , \quad (B.3a)$$

$$\dot{\phi} = (1/2)^{1/2} (-i a e^{-it} + i a^+ e^{it}) \quad , \quad (B.3b)$$

donde los operadores a y a^+ satisfacen la relación de conmutación:

$$|a, a^+| = 1 \quad (B.4)$$

Introduciendo (B.3) en (B.1) el hamiltoniano queda expresado de la siguiente manera (t=0):

$$H = (a^+ a + \frac{1}{2}) + \frac{\lambda}{4} (a + a^+)^4 \quad (B.5)$$

Consideremos ahora un autoestado de H , $|E\rangle$ con autovalor E :

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad ; \quad (B.6)$$

el estado $|E\rangle$ se puede escribir como combinación lineal del conjunto completo de autoestados del espacio de Fock:

$$|E\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A_n (n!)^{1/2} |n\rangle \quad , \quad (B.7)$$

donde $|n\rangle$, un estado del espacio de Fock, está dado por:

$$|n\rangle = (n!)^{-1/2} (a^+)^n |0\rangle \quad , \quad (B.8a)$$

donde:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad , \quad a^+ a |n\rangle = n |n\rangle \quad (B.8b)$$

Si reemplazamos (B.7) en (B.6) y utilizamos las ecs.(B.8), obtenemos, luego de unos simples reordenamientos algebraicos, una ecuación para los coeficientes A_n :

$$E A_n = (n+1/2) A_n + \frac{\lambda}{4} \{A_{n-4} + 4(n-2) A_{n-2} + 6n(n-1) A_n + 4n(n+1)(n+2) A_{n+2} + (n+1)(n+2)(n+3)(n+4) A_{n+4}\} \quad (B.9)$$

Por otro lado, los coeficientes A_n deben satisfacer la siguiente condición:

$$\sum_{n=0}^{\infty} |A_n|^2 n! < \infty \quad , \quad (B.10)$$

para que $|E\rangle$ sea normalizable. Para pasar en forma rigurosa a la representación de Schrödinger, en primer lugar determinaremos una ecuación diferencial que conduce a la recurrencia (B.9). Introduciendo la función generatriz:

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n z^n \quad , \quad (B.11)$$

es fácil concluir que (B.9) es equivalente a la ecuación siguiente:

$$E f(z) = \frac{1}{2} f(z) + z \frac{d}{dz} f(z) + \frac{\lambda}{4} \left(z + \frac{d}{dz}\right)^4 f(z) \quad (B.12)$$

Si ahora hacemos:

$$f(z) = h(z) e^{-z^2/2} \quad , \quad (B.13)$$

y tomamos en cuenta que, en consecuencia,

$$\left(z + \frac{d}{dz}\right) f(z) = h'(z) e^{-z^2/2} \quad , \quad (B.14)$$

la ec.(B.12) se transforma en:

$$E h(z) = \frac{1}{2} h(z) + (z h'(z) - z^2 h(z)) + \frac{\lambda}{4} h''''(z) \quad (B.15)$$

Para completar la demostración es conveniente introducir la transformada de Fourier, de modo de cambiar las derivadas en (B.15) por potencias de las coordenadas. Para definir la transformada de Fourier es necesario que $h(z) \rightarrow 0$ sobre el eje imaginario del plano complejo. Para estudiar este punto utilizamos (B.11) y la fórmula de Cauchy:

$$A_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{h(z)}{z^{n+1}} e^{-z^2/2} dz \quad (B.16)$$

Supongamos que $h(z)$ no tiende a cero; sin pérdida de generalidad situémonos en el caso que $h(z)$ fuera una constante. Luego, la mayor contribución a la integral (B.16) proviene del eje imaginario:

$$|A_n| \approx \frac{1}{2\pi} \oint_C \exp\left\{\frac{z^2}{2} - (n+1) \ln z\right\} dz \quad (B.17)$$

Utilizando el método del punto de ensilladura (Apéndice C), podemos realizar la estimación del comportamiento dominante de (B.17) cuando $n \gg 1$; éste es:

$$|A_n| \rightarrow \text{cte. } (n!)^{-1/2} n^{1/4} \quad , \quad (B.18)$$

el cual no satisface la condición (B.10). Entonces $h(z)$ debe ser nulo para z imaginario y $|z| \gg 1$, y podemos definir sin dificultad la transformada de Fourier sobre el eje imaginario:

$$h(z) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) e^{xz} dx \quad , \quad (B.19a)$$

de donde:

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} h(z) e^{-xz} dz \quad (B.19b)$$

Si ahora tomamos en cuenta que de (B.19) se deduce:

$$xg(x) = \int_{-\infty}^{\infty} h'(z) e^{-xz} dz \quad , \quad (B.20a)$$

podemos obtener el siguiente resultado auxiliar (derivando (B.20a) respecto de x):

$$-(g(x) + xg'(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} z h'(z) e^{-xz} dz \quad (B.20b)$$

Por otro lado de (B.19) deducimos que

$$x^4 g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} h''''(z) e^{-xz} dz \quad (B.20c)$$

Tomando la transformada (B.19b) en (B.15) y utilizando las relaciones (B.20) se llega a la ecuación:

$$g''(x) + xg'(x) + (E+1/2) g(x) - \frac{\lambda}{4} x^4 g(x) = 0 \quad (B.21)$$

Realizando ahora el cambio de función:

$$g(x) = e^{-x^2/4} \psi(x) \quad , \quad (B.22)$$

la ec.(B.21) se transforma en la ecuación buscada:

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad , \quad H = p^2 + \frac{1}{4} x^2 + \frac{\lambda}{4} x^4 \quad , \quad p = -i\frac{d}{dx} \quad (B.23)$$

La ec.(B.23) sugiere un comportamiento asintótico con la forma $\psi(x) \rightarrow \exp(\pm|x|^3)$, cuando $|x| \gg 1$. Las ecs.(B.19a) y (B.22) nos exigen elegir el comportamiento tal que se cumpla:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) = 0 \quad , \quad (B.24)$$

para que exista la transformada de Fourier y pueda determinarse $h(z)$, y de aquí los coeficientes $\{A_n\}$ correspondientes a la expansión de $|E\rangle$ en el espacio de Fock. La ec.(B.23) es la ecuación de Schrödinger de un oscilador anarmónico cuártico, cuyos autovalores E son los mismos que los del hamiltoniano de campos (B.1). Observemos que la discusión realizada arriba muestra que las autofunciones de ambos hamiltonianos, (B.1) y (B.23), están relacionadas, y en la condición de normalizabilidad de $|E\rangle$ conduce en forma natural a las condiciones de contorno (B.24) para $\psi(x)$.

El argumento seguido en este Apéndice tiene el atractivo de evitar en todo momento establecer una forma explícita para el campo ϕ , o los operadores a y a^+ , en términos de coordenadas o momentos. La conexión que hemos establecido, justifica plenamente la investigación de las propiedades analíticas y numéricas de la ecuación de Schrödinger para oscilaciones anarmónicas, ya que permite derivar conclusiones que deberían mantenerse para otras teorías de campos más complicadas y realísticas.

APENDICE C

METODO DEL PUNTO DE ENSILLADURA PARA CALCULAR INTEGRALES.

En varios parágrafos de esta obra deberemos calcular integrales en forma aproximada, determinando la mayor contribución a las mismas. El método apropiado para lograr tal propósito es el llamado método del punto de ensilladura ("saddle-point method") o del "descenso más rápido" ("steepest descent method") o método de Darwin y Fowler. Este método es el objeto de este Apéndice. De acuerdo a nuestros presentes intereses, nos restringiremos a funciones de una sola variable /21/.

Sea $J(z)$ una función de la variable compleja z , expresada a través de la siguiente integral de camino:

$$J(z) = \int_C e^{zf(t)} dt \quad , \quad (C.1)$$

donde $f(t)$ es una función de la variable compleja t . Si estamos interesados en calcular $J(z)$ cuando $|z| \gg 1$, la integral no puede calcularse con precisión (a menos que se elija C en forma muy apropiada) ya que el integrando se hace rápidamente oscilante. Para determinar aproximadamente dicha integral, debemos encontrar la zona donde $\text{Re}(zf(t))$ sea máxima y, por consiguiente, nos dé la mayor contribución al integrando.

La contribución mayor a la integral está relacionada con el punto crítico:

$$f'(t=t_0) = 0 \quad , \quad (C.2)$$

que es un punto de ensilladura en la variable compleja t /21/. Para elegir el camino de integración C debemos notar que: i) El mismo debe pasar por t_0 , y ii) dado que t_0 es un punto de ensilladura, para evitar la divergencia de la integral debemos tomar el camino de descenso más rápido desde t_0 , esto es, la dirección en la cual t_0 es un máximo.

Si ahora desarrollamos a $f(t)$ hasta el segundo orden alrededor de t_0 :

$$f(t) \approx f(t_0) + \frac{1}{2} f''(t_0) (t-t_0)^2 \quad , \quad (C.3)$$

la integral $J(z)$ toma la forma siguiente:

$$J(z) \approx e^{zf(t_0)} \int_C e^{zf''(t_0)(t-t_0)^2/2} dt \quad (C.4)$$

La aproximación (C.4) será tanto mejor cuanto mayor sea $|z|$. Para obtener el descenso más rápido desde t_0 , escribimos el integrando de (C.4) introduciendo un decaimiento exponencial; a tal efecto realizamos el siguiente cambio de variables:

$$z f''(t_0) (t-t_0)^2 = - |z| s^2, \quad z = |z| e^{i\phi}, \quad (C.5a)$$

de donde obtenemos:

$$s = \{e^{i(\pi+\phi)} f''(t_0)\}^{1/2} (t-t_0) \quad (C.5b)$$

Con este cambio de variables, la integral (C.4) se escribe:

$$J(z) = \{e^{i(\pi+\phi)} f''(t_0)\}^{-1/2} e^{zf(t_0)} \int_C e^{-|z|s^2/2} ds \quad (C.6)$$

Cuando $|z| \rightarrow \infty$, la mayor contribución a la integral proviene de $s \rightarrow 0 (t \rightarrow t_0)$. En consecuencia, sin afectar al resultado podemos tomar a s como variable real, deformar el camino C e integrar a $-\infty < s < \infty$. En este caso la ec. (C.6) se transforma en:

$$\begin{aligned} J(z) &= \{e^{i(\pi+\phi)} f''(t_0)\}^{-1/2} e^{zf(t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|z|s^2/2} ds \\ &= \{ze^{i\pi} f''(t_0)\}^{-1/2} e^{zf(t_0)} (2\pi)^{1/2} \end{aligned} \quad (C.7)$$

El término (C.7) es el dominante de una serie asintótica; para obtener los términos siguientes, debemos tomar en cuenta las fluctuaciones de $f(t)$ alrededor del punto de ensilladura t_0 . Para determinar tales fluctuaciones procedemos del siguiente modo: La función $f(t)$ se puede escribir como

$$f(t) = f(t_0) - w(t)^2, \quad (C.8)$$

de forma tal de transformar la integral en t en una integral en w . Para realizar dicha inversión hacemos:

$$dt = \left(\frac{\partial t}{\partial w}\right) dw, \quad \left(\frac{\partial t}{\partial w}\right) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i w^i, \quad (C.9)$$

y reemplazamos esta ecuación, junto a la ec.(C.8), en la ec.(C.7):

$$\begin{aligned} J(z) &= e^{zf(t_0)} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \int_{-\infty}^{\infty} w^i e^{-zw^2} dw \\ &= (a_0^2/z)^{1/2} e^{zf(t_0)} \sum_{i=0}^{\infty} (a_{2i}/a_0) \Gamma(i+1/2) z^{-i}, \end{aligned} \quad (C.10)$$

siendo $\Gamma(x)$ la función gamma.

Ahora sólo queda determinar el conjunto de coeficientes $\{a_i\}$, lo que debe hacerse para cada función $f(t)$. Veremos a continuación un sencillo ejemplo de aplicación /21/.

Ejemplo:

Consideremos la función gamma, definida a través de la integral:

$$\Gamma(z+1) = \int_0^\infty e^{-x} x^z dx = z^{z+1} \int_0^\infty e^{-tz} t^z dt \quad (C.11)$$

Para determinar el comportamiento asintótico de $\Gamma(z+1)$, cuando $|z| \rightarrow \infty$, seguimos el procedimiento explicado más arriba. Para ello escribimos a $\Gamma(z+1)$ como:

$$\Gamma(z+1) = z^{z+1} J(z) \quad , \quad (C.12a)$$

donde:

$$J(z) = \int_0^\infty e^{z(\ln t - t)} dt = \int_C e^{zf(t)} dt \quad (C.12b)$$

El extremo de $f(t)$:

$$f'(t) = \frac{1}{t} - 1 \quad , \quad t_0 = 1 \quad , \quad (C.13)$$

nos permite obtener la contribución más importante al integrando:

$$f(t_0) = -1 \quad (C.14)$$

Para determinar los coeficientes $\{a_i\}$, partimos de la ec.(C.8) que en nuestro caso es:

$$w = (t - 1 - \ln t)^{1/2} \quad (C.15)$$

Ahora podemos expresar a w en serie de Taylor alrededor de $t_0=1$; los resultados intermedios necesarios hasta el tercer orden se listan a continuación:

$$w(1) = 0 \quad , \quad (C.16a)$$

$$w'(t) = \frac{1}{2t} \left\{ \frac{(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\}^{-1/2} \quad , \quad \lim_{t \rightarrow 1} w'(t) = 1/\sqrt{2} \quad , \quad (C.16b)$$

$$w''(t) = -\frac{1}{2t^2} \left\{ \frac{(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\}^{-1/2} \\ - \frac{1}{4t} \left\{ \frac{(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\}^{-3/2} \left\{ \frac{(t-1)^2/t - 2(t-1-\ln t)}{(t-1)^3} \right\}$$

$$\lim_{t \rightarrow 1} w''(t) = -\sqrt{2}/3 \quad , \quad (C.16c)$$

$$\begin{aligned}
 w''''(t) &= \frac{1}{t^3} \left\{ \frac{(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\}^{-1/2} \\
 &+ \frac{1}{2t^2} \left\{ \frac{(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\}^{-3/2} \left\{ \frac{(t-1)^2/t - 2(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\} \\
 &+ \frac{3}{8t} \left\{ \frac{(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\}^{-5/2} \left\{ \frac{(t-1)^2/t - 2(t-1-\ln t)}{(t-1)^3} \right\}^2 \\
 &- \frac{1}{4t} \left\{ \frac{(t-1-\ln t)}{(t-1)^2} \right\}^{-3/2} \\
 &\quad \times \left\{ \frac{-(t-1)^3/t^2 - 3\{(t-1)^2/t - 2(t-1-\ln t)\}}{(t-1)^4} \right\}
 \end{aligned}$$

$$\lim_{t \rightarrow 1} w''''(t) = 7\sqrt{2}/12 \quad (C.16d)$$

El resultado final es:

$$w(t) \approx \frac{1}{\sqrt{2}} (t-1) - \frac{\sqrt{2}}{6} (t-1)^2 + \frac{7\sqrt{2}}{72} (t-1)^3 \quad (C.17)$$

Invirtiendo ahora la ec.(C.17), por iteraciones sucesivas, podemos expresar a $(t-1)$ en serie de potencias de w :

$$(t-1) \approx \sqrt{2} w + \frac{2}{3} w^2 + \frac{\sqrt{2}}{18} w^3 \quad (C.18)$$

Utilizando la ec.(C.9) determinamos los primeros dos coeficientes necesarios para obtener el término proporcional a $1/z$ en la suma indicada en la ec.(C.10). Esto es:

$$a_0 = \sqrt{2} \quad , \quad a_2 = \sqrt{2}/6 \quad (C.19)$$

Reemplazando las ecs.(C.19) y (C.14) en la ec.(C.10), y utilizando luego la ec.(C.12a), llegamos al siguiente resultado:

$$\Gamma(z+1) = z! \approx (2\pi z)^{1/2} \left(\frac{z}{e}\right)^z \left\{ 1 + \frac{1}{12z} + O(z^{-2}) \right\} \quad (C.20)$$

El término dominante cuando $|z| \rightarrow \infty$ en la ecuación anterior, constituye la llamada aproximación de Stirling.

APENDICE D

CONSTRUCCION DE APROXIMANTES DE PADE.

El objeto de este Apéndice es presentar un algoritmo muy simple para construir funciones racionales o aproximantes de Padé. Estos han sido utilizados extensamente para prolongar analíticamente los desarrollos en serie de Taylor, fuera de sus radios de convergencia. Por esta razón se los ha empleado para obtener resultados satisfactorios para diversas propiedades físicas, a partir del conocimiento de desarrollos perturbacionales divergentes o lentamente convergentes.

En este Apéndice realizaremos una presentación muy breve de aquellos resultados que son de interés para esta obra, por lo que se remite al lector interesado a la amplia bibliografía sobre el tema, de la cual una muestra mínima está representada por las refs./22-25/.

Consideremos un polinomio $F(x)$ de grado $N+M$, que puede corresponder, por ejemplo, a un desarrollo Taylor truncado:

$$F(x) = \sum_{n=0}^{N+M} F_n x^n \quad (D.1)$$

El aproximante de Padé $|M/N|$ está definido por la función racional $P^{(M)}/Q^{(N)}$ tal que:

$$F(x) - \frac{P^{(M)}(x)}{Q^{(N)}(x)} = O(x^{M+N+1}) \quad , \quad (D.2)$$

donde $P^{(M)}$ y $Q^{(N)}$ son dos polinomios de grado M y N , respectivamente:

$$P^{(M)}(x) = \sum_{n=0}^M P_n x^n \quad , \quad (D.3a)$$

$$Q^{(N)}(x) = \sum_{n=0}^N Q_n x^n \quad (D.3b)$$

El significado de la identidad formal (D.2) es que el aproximante $|M/N|$ origina un desarrollo en serie de potencias de x , cuyos coeficientes coinciden con los de F hasta el orden $N+M$.

Los coeficientes $\{P_n\}$ y $\{Q_n\}$ pueden ser determinados en función de los coeficientes $\{F_n\}$ en forma muy simple. Multiplicando (D.2) por

$Q^{(N)}(x)$ obtenemos el siguiente resultado:

$$C(x) = Q^{(N)}(x)F(x) = \sum_{s=0}^{\infty} C_s x^s = P^{(M)}(x) + O(x^{N+M+1}) \quad , \quad (D.4a)$$

donde:

$$C_s = \sum_{n=0}^s Q_n F_{s-n} \quad ; \quad Q_n = 0 \quad , \quad \text{si } n \geq M+1 \quad (D.4b)$$

Si ahora igualamos los coeficientes de los polinomios en la ec.(D.4a), obtenemos sin dificultad las siguientes relaciones:

$$\sum_{n=0}^s Q_n F_{s-n} = P_s \quad , \quad 0 \leq s \leq N \quad , \quad (D.5a)$$

$$\sum_{n=0}^s Q_n F_{s-n} = 0 \quad , \quad N+1 \leq s \leq N+M \quad , \quad (D.5b)$$

debiendo tener presente para Q_n , la relación (D.4b).

Las ecs.(D.5) nos muestran que es necesario conocer los $N+M$ coeficientes F_n para completar el cálculo de los polinomios $P^{(M)}$ y $Q^{(N)}$. Dicho cálculo se inicia resolviendo el sistema de ecuaciones algebraicas (D.5b), tomando por ejemplo $Q_0=1$. Una vez que se ha resuelto (D.5b), los coeficientes obtenidos se utilizan para resolver (D.5a).

El cálculo de los aproximantes $|M/N|$ también puede efectuarse en forma recursiva, mediante la identidad de Wynn /23/.

Cabe comentar que la construcción y estudio de funciones racionales puede encararse desde un punto de vista diferente, en el contexto de la teoría de las fracciones continuadas /26/.

Una breve revisión de las propiedades de convergencia de los aproximantes de Padé, y de sus aplicaciones, se puede ver en el §.13 de esta obra.

APENDICE E

ORDENAMIENTO NORMAL DE OPERADORES.

En este Apéndice se estudia el ordenamiento normal de operadores y su posterior aplicación en el reordenamiento de hamiltonianos conocido como "Wick-ordering". Los resultados que aquí mostraremos nos permitirán realizar una discusión de importancia en el contexto de esta obra, en virtud de la vinculación existente entre dicho reordenamiento de hamiltonianos y las técnicas de suma de series perturbacionales /27/.

Consideremos el modelo de teoría de campos definido a través del siguiente hamiltoniano H :

$$H(m^2, \lambda) = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \lambda \phi^{2N}, \quad m^2 > 0, \quad (E.1)$$

y la relación de conmutación:

$$|\dot{\phi}, \phi| = i, \quad (E.2)$$

siendo ϕ el campo espacio-temporal y $\dot{\phi}$ su derivada temporal. En el Apéndice B demostramos que (E.1) y (E.2) son equivalentes a un hamiltoniano mecanocuántico de un oscilador $2N$ -anarmónico, definido sobre un espacio de funciones de onda que satisfacen condiciones de contorno triviales.

Sea ahora M una masa, que denominaremos efectiva (o renormalizada), cuyo papel quedará evidenciado a continuación, y escribamos al campo en términos de los operadores de creación y aniquilación /18/ del siguiente modo (ecs.(B.3)):

$$\phi = (2M)^{-1/2} \{a e^{-iMt} + a^+ e^{iMt}\}, \quad (E.3a)$$

$$\dot{\phi} = -i (M/2)^{1/2} \{a e^{-iMt} - a^+ e^{iMt}\}, \quad (E.3b)$$

donde:

$$|a, a^+| = 1 \quad (E.4)$$

Indicaremos ahora con $:\phi^N:$ al campo ϕ^N ordenado en forma normal, esto es, con los operadores de creación (a^+) a la izquierda de los de aniquilación (a). Al igual que lo hicimos en el Apéndice B consideraremos de aquí en más $t=0$. El operador $:\phi^N:$ queda expresado por el llamado operador binomio de Newton /28/:

$$:\phi^N: = (2M)^{-N/2} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} a^{+n} a^{N-n} \quad (E.5)$$

En forma análoga, el campo $\dot{\phi}^N$ queda ordenado normalmente de la siguiente manera:

$$:\dot{\phi}^N: = (-i)^N (M/2)^{N/2} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} (-a^+)^n a^{N-n} \quad (E.6)$$

Podemos, entonces, definir al hamiltoniano ordenado en forma normal, $:H:$, como aquél que tiene todos sus componentes ordenados en forma normal, es to es:

$$:H(M^2, \lambda): = \frac{1}{2} :\dot{\phi}^2: + \frac{1}{2} M^2 :\phi^2: + \lambda :\phi^{2N}: \quad , \quad (E.7)$$

donde M juega el papel de la masa original m (ec.(E.1)). Para establecer la relación entre M y m, se debe encontrar la relación entre H y $:H:$. Para obtener dicha relación, aplicamos la ec.(E.5) y la ec.(E.4) para derivar:

$$\begin{aligned} \dot{\phi}^2 &= -\frac{M}{2} (a^2 - a^+a - aa^+ + a^{+2}) = -\frac{M}{2} (a^2 - 2a^+a + a^{+2}) + \frac{M}{2} \\ &= :\dot{\phi}^2: + \frac{M}{2} \end{aligned} \quad (E.8)$$

Procediendo en forma análoga tenemos:

$$\phi^2 = :\phi^2: + \frac{1}{2M} \quad (E.9)$$

Las ecs.(E.8) y (E.9) nos permiten vincular rápidamente los hamiltonianos H y $:H:$ cuando $\lambda=0$:

$$:H(M^2, 0): = \frac{1}{2} :\dot{\phi}^2: + \frac{1}{2} M^2 :\phi^2: = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + \frac{1}{2} M^2 \phi^2 - \frac{M}{2} \quad , \quad (E.10)$$

con lo cual deducimos:

$$H(m^2, 0) = :H(M^2, 0): + \frac{M}{2} \quad , \quad (E.11)$$

si y sólo si se cumple:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} M = m \quad (E.12)$$

En el caso de considerar el ordenamiento normal del hamiltoniano completo ($\lambda \neq 0$), la situación es más delicada. Consideremos el caso de la teoría de campos $\lambda \phi^4$, esto es, $N=2$. A partir de la ec.(E.3a) obtenemos el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} \phi^4 = & (4M^2)^{-1} \{a^4 + 2a^2 a^+ a + 2a^+ a^3 + 4a^+ a a^+ a + a^{+4} + a^2 a^{+2} \\ & + 2a^+ a a^{+2} + a^{+2} a^2 + 2a^{+3} a\} + (2M^2)^{-1} \{a^2 + 2a^+ a + a^{+2}\} \\ & + (4M^2)^{-1} \quad , \end{aligned} \quad (E.13)$$

el cual debe reordenarse para obtener el campo $:\phi^4:$. Utilizando la relación de conmutación (E.4), podemos encontrar sin dificultad los siguientes resultados intermedios auxiliares:

$$a^2 a^{+2} = a^{+2} a^2 + 4a^+ a + 2 \quad , \quad (E.14a)$$

$$a^2 a^+ a = a^+ a^3 + 2a^2 \quad , \quad (E.14b)$$

$$a^+ a a^+ a = a^{+2} a^2 + a^+ a \quad , \quad (E.14c)$$

$$a^+ a a^{+2} = a^{+3} a + 2a^{+2} \quad (E.14d)$$

Introduciendo las ecs.(E.14) en (E.13) y utilizando (E.5), obtenemos el resultado buscado:

$$:\phi^4: = \phi^4 - \frac{3}{M} \phi^2 + \frac{3}{4M^2} \quad (E.15)$$

La ec.(E.15) nos permite encontrar la forma del operador $:H:$, al reemplazarla, junto con (E.10), en la ec.(E.7):

$$:H(M^2, \lambda): = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + \frac{1}{2} M^2 \phi^2 + \lambda \phi^4 - \frac{3\lambda}{M} \phi^2 + \frac{3\lambda}{4M^2} - \frac{M}{2} \quad (E.16)$$

Notemos que $:\phi^4:$ (ec.(E.15)) tiene contribuciones de ϕ^4 y ϕ^2 , término este último que ya estaba presente en el hamiltoniano original H . Este hecho nos permite definir la masa efectiva M de forma tal que H y $:H:$ sólo difieran en una constante. Podemos así escribir, a partir de la ec. (E.16):

$$:H(M^2, \lambda): = H(m^2, \lambda) + \frac{3\lambda}{4M^2} - \frac{M}{2} \quad , \quad (E.17)$$

donde:

$$\frac{m^2}{2} = \frac{M^2}{2} - \frac{3\lambda}{M} \quad (E.18)$$

La ec.(E.18) determina el valor de M para cada par de valores de m y λ , y satisface la condición límite (E.12). La ec.(E.17) nos da una relación inmediata entre los autovalores E y \bar{E} de los hamiltonianos cuánticos H y $:H:$ provenientes de H y $:H:$, respectivamente (Apéndice B):

$$E(m^2, \lambda) = \bar{E}(M^2, \lambda) + \frac{M}{2} - \frac{3\lambda}{4M^2} \quad (\text{E.19})$$

La simple relación (E.19) ha motivado el interés de algunos autores /27/, para investigar las propiedades de la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger aplicada a $\bar{E}(M^2, \lambda)$, de modo de establecer un método de renormalización de series perturbativas.

Cabe notar que no puede definirse una masa efectiva M tal como se hizo en la ec.(E.18), si la teoría de campos tiene una interacción diferente de la considerada aquí (ϕ^4), a menos que se cumplan algunas condiciones muy restrictivas. Por ejemplo, si la interacción fuera $\lambda\phi^6$ ($N=3$ en la ec.(E.1)), necesitamos calcular $:\phi^6:$ para construir $:\mathcal{H}:$. Siguiendo el procedimiento arriba explicado se encuentra /29/:

$$:\phi^6: = \phi^6 - \frac{15}{2M} \phi^4 + \frac{45}{4M^2} \phi^2 - \frac{15}{8M^3} \quad (\text{E.20})$$

que introduce un término ϕ^4 , que no está presente en el hamiltoniano original. En consecuencia, \mathcal{H} y $:\mathcal{H}:$ no difieren sólo en una constante y por lo tanto no es posible renormalizar la TPRS a partir de la teoría del ordenamiento normal de operadores. En este caso es necesario recurrir a un procedimiento diferente (ver §.17).

APENDICE F

APLICACIONES DE LOS MODELOS CON POTENCIALES DE CONFINAMIENTO.

El propósito de este Apéndice es dar un breve panorama sobre la utilidad de los modelos con potenciales de confinamiento. Dichos potenciales son considerados en varias oportunidades en esta obra a modo de ejemplos.

Los potenciales de confinamiento tienen particular relevancia en la física de partículas elementales. En 1974 fueron descubiertas ciertas transiciones bosónicas muy intensas (J/ψ) producidas por el aniquilamiento materia-antimateria en grandes aceleradores; dichas transiciones fueron interpretadas mediante el denominado modelo de "charmonium" /30-33/, que básicamente constituye un sistema ligado entre el par quark-antiquark de encanto ($c\bar{c}$). Los estados ligados de dicho sistema, similar al positronio, se corresponden con las resonancias encontradas experimentalmente. El modelo del "charmonium" ha resultado muy útil para interpretar varios resultados experimentales merced a una representación simplificada de la interacción quark-antiquark, que constituye nuestro punto de interés.

La interacción entre quarks no es conocida aún en forma completa desde primeros principios (teorías de campos). Sin embargo los componentes básicos de la misma deben ser un potencial divergente atractivo para distancias pequeñas (término de intercambio gluónico) y otro de confinamiento para distancias grandes. Este último término es el que toma en cuenta el hecho experimental de que los quarks no se han visto como componentes libres. Si bien se han presentado modelos relativistas simples para obtener los estados ligados del charmonium /34/, los más utilizados por su sencillez han sido los potenciales de la forma siguiente /30-33,35-39/:

$$V = -\frac{Z}{r} + \lambda r^K, \quad K > 0, \quad Z, \lambda > 0 \quad (F.1)$$

El potencial (F.1) hace las veces del límite no relativista de la interacción quark-antiquark, y reduce el problema del espectro de altas energías al siguiente problema mecánico cuántico de autovalores:

$$H(Z, \lambda) \psi_{n\ell} = E_{n\ell}(Z, \lambda) \psi_{n\ell}, \quad \psi_{n\ell}(r \rightarrow \infty) = 0, \quad (F.2)$$

donde:

$$H(Z, \lambda) = -\frac{1}{2\mu} \Delta - \frac{Z}{r} + \lambda r^K, \quad \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}, \quad (F.2b)$$

siendo μ la masa reducida del charmonium. Debe tomarse en cuenta que el potencial anterior no pretende en absoluto ser una representación realística de la interacción, sino una descripción fenomenológica cualitativa de las características experimentales sobresalientes. Entre éstas podemos citar el ordenamiento de niveles, la separación relativa de los mismos, la dependencia de la energía (y el cuadrado de la función de onda en el origen) con la masa de la partícula, etc. Una serie de estudios muy exhaustivos /40-45/ han permitido determinar qué predicciones permite realizar el modelo del charmonium con el potencial (F.1), dando así solidez a la aproximación fenomenológica no relativista. Cabe señalar que la importancia y utilidad de dicha aproximación se magnifica a través del descubrimiento del quark b (bottom), mucho más pesado, cuyos estados ligados ($b\bar{b}$) deben ser aún mejor descritos por la aproximación no relativista. En virtud de ello el potencial (F.1), por extensión, suele denominarse potencial de "quarkonium".

Podemos añadir que pese a ser los potenciales de la forma (F.1) los más utilizados, no son los únicos que reproducen las características determinadas experimentalmente, tales como por ejemplo el siguiente ordenamiento /35,41,42/:

$$E_{n\ell}(Z, \lambda) < E_{n\ell'}(Z, \lambda), \quad \text{si } \ell > \ell' \quad (F.3)$$

Otro potencial utilizado es el llamado de confinamiento logarítmico /36,38/:

$$V = -\frac{Z}{r} + g \ln(1+\lambda r), \quad g > 0 \quad (F.4)$$

El modelo de confinamiento más extendido en la literatura es el llamado de confinamiento lineal, definido por $K=1$ en la ec.(F.1) /33,35/:

$$H(Z, \lambda) = \frac{1}{2\mu} p^2 - \frac{Z}{r} + \lambda r \quad (F.5)$$

Sus autovalores, $E_{n\ell}(Z, \lambda)$, han sido determinados por integración numérica de la ecuación de Schrödinger, para algunos valores de $\lambda > 1$. El acuerdo que el modelo (F.5) presenta para otras propiedades relacionadas a la energía y la función de onda /35/, lo han consagrado ampliamente como la primera y más sencilla aproximación al quarkonium. Debido a este hecho, el modelo ha motivado diversos estudios en el campo de los métodos aproximados, variacionales y perturbacionales. En esta obra el mismo será estudiado en varias oportunidades, como ejemplo ilustrativo, en el contexto de la teoría de perturbaciones y los métodos semiclásicos.

Se han propuesto otros modelos de confinamiento con $K=0,1$ /38/, $K=2$

/36,44/, $K=0,5$ /39,46/, etc. Finalmente remitimos al lector a la puesta a punto de la ref./47/, para otras propiedades importantes contenidas en las teorías de quarks y sus potenciales fenomenológicos.

Es oportuno agregar que el modelo (F.5) ha sido discutido en relación al efecto Stark radial /48-50/, tomando $\lambda < 0$. En este último caso los autovalores del modelo se transforman en resonancias en un continuo, al igual que sucede en el efecto Stark. El hecho que el potencial presente en (F.5) sea dependiente de una sola variable, lo que no sucede en el efecto Stark real, implica una gran simplificación en los cálculos. Este último hecho, unido a que el modelo explica las características cualitativas sobresalientes del efecto Stark, lo han transformado en un candidato adecuado para estudios de simulación.

APENDICE G

HAMILTONIANO DE UN ATOMÓ DE HIDROGENO EN UN CAMPO MAGNETICO.

En varios capítulos de esta obra se estudian diversas cuestiones que involucran a los autovalores de un átomo de hidrógeno en un campo magnético uniforme (efecto Zeeman). El objeto de este Apéndice es deducir el hamiltoniano que describe dicho efecto y discutir algunas propiedades elementales del mismo.

De acuerdo a la electrodinámica clásica, el hamiltoniano que describe una partícula con carga $q=-e$ y masa m en presencia de un campo magnético, tiene la forma siguiente /51/:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\bar{p} + \frac{e}{c} \bar{A})^2 + e\phi \quad , \quad (G.1)$$

donde \bar{A} y ϕ son el potencial vector y escalar respectivamente. El vector \bar{A} está relacionado con el vector inducción magnética \bar{B} de la siguiente manera:

$$\bar{B} = \text{rot } \bar{A} \quad , \quad (G.2a)$$

esto es:

$$\bar{A} = \frac{1}{2} (\bar{B} \times \bar{r}) \quad (G.2b)$$

Para obtener el hamiltoniano cuántico hacemos el cambio $\bar{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ en (G.1), con lo cual deducimos:

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{ie\hbar}{mc} \bar{A} \cdot \nabla - \frac{ie\hbar}{2mc} \nabla \cdot \bar{A} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 + e\phi \quad , \quad (G.3)$$

donde Δ es el laplaciano y $A=||\bar{A}||$. Por razones de sencillez elegiremos la calibración de campo tal que: $\text{div}\bar{A}=\phi=0$. Para escribir (G.3) en una forma más conveniente, utilizaremos la siguiente relación auxiliar, que se deduce mediante la utilización de la ec.(G.2b):

$$\begin{aligned} -\frac{ie\hbar}{mc} \bar{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 &= \frac{e}{2mc} (\bar{B} \times \bar{r}) \cdot \bar{p} + \frac{e^2}{8mc^2} (\bar{B} \times \bar{r}) \cdot (\bar{B} \times \bar{r}) \\ &= \frac{e}{2mc} \bar{B} \cdot \bar{L} + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 r^2 \text{sen}^2 \theta \quad , \quad (G.4) \end{aligned}$$

donde $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ es el operador momento angular, $B = ||\vec{B}||$ y θ el ángulo entre los vectores \vec{r} y \vec{B} . Si ahora reemplazamos (G.4) en (G.3) y recordamos la calibración de campo elegida, el hamiltoniano cuántico toma la forma:

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 r^2 \sin^2 \theta \quad (G.5)$$

Si la partícula cargada que hemos considerado posee, además, espín, existe un momento magnético $\vec{\mu}_s$ asociado a la misma en la dirección del vector de espín \vec{S} . El valor de dicho momento magnético es /52,53/:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2mc} g_s \vec{S} \quad , \quad (G.6)$$

donde $g_s \approx 2$ es el factor "g" de espín /52,53/. El momento magnético (G.6) introduce una contribución adicional a la energía dada por $-\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}$. Este término y la ec.(G.5) nos conducen al siguiente hamiltoniano:

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e}{2mc} (\vec{B} \cdot \vec{L} + g_s \vec{B} \cdot \vec{S}) + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 r^2 \sin^2 \theta \quad (G.7)$$

Si ahora fijamos a \vec{B} como un campo homogéneo en la dirección del eje z:

$$\vec{B} = (0, 0, B) \quad , \quad (G.8)$$

el hamiltoniano (G.7) se transforma en:

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{eB}{2mc} (L_z + g_s S_z) + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 (x^2 + y^2) \quad , \quad (G.9)$$

donde L_z y S_z son las proyecciones sobre el eje z de los momentos angulares \vec{L} y \vec{S} .

Dado que se cumple:

$$|H_c, L_z| = |H_c, S_z| = 0 \quad , \quad (G.10)$$

los operadores L_z y S_z están asociados a constantes de movimiento y sus autovalores suministran buenos números cuánticos para designar los estados del sistema. En consecuencia L_z y S_z introducen una contribución meramente aditiva a los autovalores del siguiente operador:

$$H'_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 (x^2 + y^2) \quad , \quad (G.11a)$$

siendo:

$$H_c = H'_c + \frac{eB}{2mc} (L_z + g_s S_z) \quad (G.11b)$$

Para simplificar la discusión podemos adimensionalizar el hamiltoniano-

no H'_c ; para ello realizamos una dilatación en las coordenadas cartesianas mediante un factor α (ver Apéndice A):

$$H'_c = \frac{\hbar^2 \alpha^{-2}}{m} \left\{ -\frac{\Delta}{2} + \frac{B^2 e^2 \alpha^4}{8c^2 \hbar^2} (x^2 + y^2) \right\} \quad , \quad (G.12a)$$

que elegido como: $\alpha = (e/c\hbar)^{-1/2}$ nos permite escribir la siguiente equivalencia unitaria:

$$H'_c = \frac{e\hbar}{mc} \left\{ -\frac{\Delta}{2} + \frac{B^2}{8} (x^2 + y^2) \right\} = \left(\frac{e\hbar}{mc} \right) h'_c \quad (G.12b)$$

El operador h'_c (adimensional) describe a una partícula que se mueve libremente a lo largo del eje z y que está sometida a un potencial armónico en el plano x - y . La ecuación de Schrödinger que describe esta situación es:

$$\left(h'_c + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{n_x, n_y}(x, y) = (n_x + n_y + 1) \left(\frac{B}{2} \right) \psi_{n_x, n_y}(x, y) \quad , \quad (G.13)$$

donde el número cuántico de Landau:

$$N = n_x + n_y \quad , \quad (G.14)$$

numera los autovalores del oscilador bidimensional.

Las ecs.(G.12)-(G.14) nos permiten ahora obtener los autovalores E del hamiltoniano original H_c :

$$E = (N + m + g_s m_s + 1) \left(\frac{e\hbar}{mc} \right) \frac{B}{2} + \frac{1}{2m} p_z^2 \quad , \quad (G.15)$$

donde $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ y $m_s = \pm 1/2$ (para un electrón) son los números cuánticos magnéticos y de espín, respectivamente, y $p_z = \hbar K$ ($-\infty < K < \infty$).

Nuestro interés es analizar el espectro de un átomo hidrogenoide en un campo magnético, por lo que sólo se debe introducir en H_c la interacción del electrón con el núcleo de carga Ze . Naturalmente el problema de dos cuerpos impone el cambio de la masa m por la masa reducida μ , si bien nosotros por simplicidad de notación tomaremos $\mu \approx m$. El hamiltoniano puede escribirse entonces del siguiente modo:

$$H_c = H_D + H_P \quad , \quad (G.16a)$$

$$H_D = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} + \frac{e^2 B^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) \quad , \quad (G.16b)$$

$$H_P = \frac{eB}{2mc} (L_z + g_s S_z) \quad , \quad (G.16c)$$

donde H_D y H_P designan, respectivamente, la parte diamagnética y paramagnética del hamiltoniano. Obviamente es H_D el operador que más nos in-

teresa, ya que los autovalores y autofunciones de H_p son conocidos y este operador conmuta con H_D .

Para simplificar los cálculos es conveniente adimensionalizar H_D , lo que se logra en forma análoga a como lo hicimos previamente, mediante una dilatación en las coordenadas cartesianas (Apéndice A). Es inmediato derivar la siguiente equivalencia unitaria:

$$H_D = \frac{\hbar^2 \alpha^{-2}}{m} \left\{ -\frac{\Delta}{2} - \frac{e^2 m \alpha}{\hbar^2} \frac{z}{r} + \frac{\alpha^4 e^2 B^2}{\hbar^2 c^2} \frac{1}{8} (x^2 + y^2) \right\} \quad , \quad (G.17)$$

que, mediante una apropiada elección de α , nos conduce a:

$$H_D = (me^4/\hbar^2) H(Z, \lambda) \quad , \quad (G.18a)$$

$$H(Z, \lambda) = -\frac{\Delta}{2} - \frac{z}{r} + \frac{\lambda^2}{8} (x^2 + y^2) \quad , \quad (G.18b)$$

$$\lambda = B/B_0 \quad , \quad B_0 = m^2 e^3 c / \hbar^3 \equiv 2,35 \times 10^9 \text{ gauss} = 2,35 \times 10^5 \text{ tesla}$$

$$1 \text{ T (tesla)} = 100 \text{ weber/m}^2 \quad (G.18c)$$

El hamiltoniano adimensional $H(Z, \lambda)$ es el que se estudiará en esta obra; las unidades atómicas de energía y de campo son (me^4/\hbar^2) (hartree) y B_0 , respectivamente.

El operador $H(Z, \lambda)$ satisface algunas relaciones de dilatación que nos serán particularmente útiles. Para encontrarlas recurrimos nuevamente al procedimiento conocido, introduciendo en (G.18b) un factor de dilatación a:

$$H(Z, \lambda) = a^{-2} \left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{Za}{r} + \frac{\lambda^2}{8} a^4 (x^2 + y^2) \right) \quad (G.19)$$

La elección $a=1/Z$ nos permite escribir la siguiente equivalencia unitaria:

$$H(Z, \lambda) = Z^2 H(1, \lambda Z^{-2}) \quad , \quad (G.20)$$

y por otro lado, haciendo $a=\lambda^{-1/2}$ encontramos:

$$H(Z, \lambda) = \lambda H(Z\lambda^{-1/2}, 1) \quad (G.21)$$

Las relaciones (G.20) y (G.21) son equivalentes y serán utilizadas en el transcurso de esta obra.

APENDICE H

COMPORTAMIENTO ASINTOTICO DE LA ENERGIA DE UNION PARA EL EFECTO ZEEMAN DEL ATOMO DE HIDROGENO.

En un apéndice anterior (Apéndice G) obtuvimos el hamiltoniano que describe el efecto Zeeman para el átomo de hidrógeno (EZH) en la aproximación no relativista, y encontramos los autovalores en el límite de Landau ($\lambda \rightarrow \infty$), siendo λ la intensidad (adimensional) del campo magnético. Ahora bien, si $\infty \gg \lambda \gg 1$, el electrón queda ligado en la dirección z del campo. Esta última contribución a la energía es la que deseamos discutir en este apéndice, ya que será utilizada en algunos párrafos de esta obra. El problema del comportamiento asintótico de los autovalores del EZH en campos intensos ha motivado una gran investigación /55-67/. De ella sólo presentaremos un resumen de aquellos puntos que son de nuestro interés, y adaptados a nuestras necesidades.

Sea $H(Z, \lambda)$ el hamiltoniano que describe el EZH, excluyendo la parte paramagnética y de espín (seguiremos aquí la notación del Apéndice G para el hamiltoniano y sus autovalores):

$$H(Z, \lambda) = -\frac{\Delta}{2} + \frac{\lambda^2}{8} \rho^2 - \frac{Z}{r}, \quad \rho^2 = r^2 - z^2, \quad (H.1a)$$

$$\Delta = \Delta_\rho + \Delta_z, \quad \Delta_z = \partial^2 / \partial z^2, \quad \Delta_\rho = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r^2}, \quad (H.1b)$$

siendo Z la carga nuclear y L^2 el operador momento angular en unidades de \hbar . Si $\Psi(\rho, z)$ es una autofunción de $H(Z, \lambda)$, la aproximación adiabática establece /55/ que la misma es aproximadamente separable de la siguiente manera:

$$\Psi(\rho, z) = \psi_N(\rho) f(z), \quad (H.2)$$

tal que la función $\psi_N(\rho)$ sea un orbital de Landau, esto es:

$$\langle \psi_N | -\frac{1}{2} \Delta + \frac{1}{2} \rho^2 | \psi_N \rangle = (N+1) \quad (H.3)$$

El número $N(=n_x + n_y)$ es el número cuántico de Landau, que se vió en el Apéndice G. Dicho número depende del número cuántico magnético m . La aproximación adiabática resulta asintóticamente correcta para $\lambda \gg 1$.

Para escribir la ecuación diferencial que determina a la función $f(z)$,

a partir de las ecs.(H.2) y (H.3), es conveniente reordenar el hamiltoniano. Utilizando la transformación de dilatación que introdujimos en el Apéndice G, es inmediato demostrar que $H(Z, \lambda)$ satisface la siguiente equivalencia unitaria:

$$H(1, \lambda) = \frac{\lambda}{4} h \quad , \quad (H.4a)$$

$$h = -\Delta + \rho^2 - \left(\frac{8}{\lambda}\right)^{1/2} \frac{1}{r} \quad , \quad (H.4b)$$

donde, sin pérdida de generalidad, hemos tomado $Z=1$. Mediante la relación (H.4) y las ecs.(H.2) y (H.3), estamos ahora en condiciones de encontrar la ecuación que determina a $f(z)$:

$$\langle \psi_N | H(1, \lambda) | \psi_N \rangle f = E_m(1, \lambda) f \quad , \quad (H.5a)$$

donde:

$$\langle \psi_N | H(1, \lambda) | \psi_N \rangle = \frac{\lambda}{4} \langle \psi_N | h | \psi_N \rangle = \frac{\lambda}{4} \{h_z^{(N)} + 2(N+1)\} \quad , \quad (H.5b)$$

donde el operador $h_z^{(N)}$ depende únicamente de z :

$$h_z^{(N)} = -\Delta_z - \left(\frac{8}{\lambda}\right)^{1/2} \langle \psi_N | r^{-1} | \psi_N \rangle \quad (H.5c)$$

Introduciendo (H.5c) y (H.5b) en (H.5a), obtenemos la ecuación diferencial:

$$\frac{\lambda}{4} h_z^{(N)} f = -\epsilon_m f \quad , \quad (H.6)$$

donde $\epsilon_m > 0$ es la llamada energía de unión del estado en consideración:

$$\epsilon_m = \frac{N+1}{2} \lambda - E_m(1, \lambda) \quad (H.7)$$

Los estados que son de mayor interés son los llamados estados fuertemente ligados ("tight bound"), para los cuales ϵ_m es una función monótona creciente de λ . Estos estados están dados por /67/:

$$-m = \ell = N \quad , \quad (H.8)$$

siendo ℓ el número cuántico azimutal. Este número es entonces el apropiado para describir todas las propiedades de los estados fuertemente ligados; para éstos la ec.(H.6) se transforma en:

$$\frac{\lambda}{4} h_z^{(\ell)} f(z) = -\epsilon_\ell f(z) \quad (H.9)$$

Para obtener la forma asintótica de ϵ_ℓ como una función de λ , debemos conocer la dependencia explícita del operador $h_z^{(\ell)}$ con z . Avron y col. /66,67/ han demostrado el siguiente resultado, que es el punto de par-

tida:

$$\langle \psi_\ell | \frac{1}{r} | \psi_\ell \rangle = V_\ell(z) = \frac{1}{\ell!} \int_0^\infty (t^2+z^2)^{-1/2} e^{-t} t^\ell dt \quad (\text{H.10})$$

La ec.(H.10) nos conduce al potencial del hamiltoniano de Schiff y Snyder /55/ como un caso límite:

$$V_\ell(z) \rightarrow \frac{1}{|z|} , \quad \text{si } z^2 \gg 1 \quad (\text{H.11})$$

Finalmente, mediante las ecs.(H.10), (H.5c) y (H.9) obtenemos la siguiente ecuación a autovalores para ϵ_ℓ :

$$\frac{\lambda}{4} \{- \Delta_z - (\frac{8}{\lambda})^{1/2} V_\ell(z)\} f(z) = - \epsilon_\ell f(z) \quad (\text{H.12})$$

Para tener una idea general de la estructura de ϵ_ℓ como una función de λ , podemos tomar en cuenta el siguiente teorema /67/, que enunciaremos, por completitud de este trabajo, pero que no demostraremos.

Teorema H.1: Los autovalores de la ec.(H.12) están acotados superiormente por $\tilde{\epsilon}_0$, que es el menor autovalor de:

$$\frac{\lambda}{4} \{- \Delta_z - (\frac{8}{\lambda})^{1/2} \frac{1}{(|z|+\sqrt{\ell+1})}\} f_n(z) = \tilde{\epsilon}_n f_n(z) \quad (\text{H.13})$$

$\tilde{\epsilon}_0 > - \epsilon_\ell \quad *$

Los autovalores $\tilde{\epsilon}_n$ fueron estudiados por Loudon /56/, van Haeringen /62/ y Gesztesy /63/. Para nuestro interés bastará con estudiar el comportamiento asintótico de los autovalores cuando $\lambda \rightarrow \infty$. De la ref./63/, extraemos que para:

$$\{- \Delta_z - \frac{c}{|z|+\alpha}\} f_n(z) = \tilde{\epsilon}'_n f_n(z) , \quad (\text{H.14a})$$

se cumple:

$$\tilde{\epsilon}'_0 \rightarrow - c^2 \ln^2(2c\alpha) , \quad \text{si } |\alpha c| \ll 1 \quad (\text{H.14b})$$

Realizando el cambio de variables $c=(8/\lambda)^{1/2}$, $\alpha=(\ell+1)^{1/2}$, la ec.(H.14b) nos da:

$$\tilde{\epsilon}'_0 \rightarrow - \frac{2}{\lambda} \ln^2(\frac{\lambda}{8}) , \quad (\text{H.15})$$

que, en virtud del teorema H.1, nos conduce al resultado buscado:

$$\epsilon_\ell > \frac{1}{2} \ln^2(\frac{\lambda}{8}) , \quad \ell \geq 0 , \quad \lambda \gg 1 \quad (\text{H.16})$$

La ec.(H.16) nos da una expresión rigurosa que muestra el carácter

fuertemente ligado de los estados considerados. Como lo puso plenamente de manifiesto nuestra discusión, el comportamiento asintótico de la energía de unión está íntimamente ligado a la separabilidad adiabática de la función de onda para campos muy intensos.

Avron y col. /64-67/ han encontrado una expresión asintótica para ϵ_ℓ a partir de la ec.(H.12), cuyo primer término coincide con (H.16). Dado que nos será de utilidad en esta obra, la presentaremos aquí. Con tal motivo debemos realizar unos pequeños cambios para compatibilizarla con nuestro hamiltoniano original (ec.(H.1)). El hamiltoniano utilizado por Avron y col. /67/ es:

$$H_A = p^2 + \frac{B^2}{4} \rho^2 - \frac{1}{r} \quad (H.17)$$

Mediante la transformación de dilatación del Apéndice G (ver también el Apéndice A), verificamos fácilmente que H_A es unitariamente equivalente a $H(1, \lambda)$, según se ve a continuación:

$$H_A = \frac{1}{2} H(1, \lambda) \quad , \quad \lambda=4B \quad (H.18)$$

Utilizando la ec.(H.18) y los resultados de la ref./67/ tenemos el siguiente desarrollo para la energía de unión:

$$\begin{aligned} \epsilon_\ell = & \frac{1}{2} \ln^2\left(\frac{\lambda}{8}\right) - 2 \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) \ln \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + 2 \{(C_\ell + \ln 2) \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right)\} \\ & + 2 \{\ln \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right)\}^2 - 4 \{C_\ell - 1 + \ln 2\} \ln \ln\left(\frac{\lambda}{8}\right) + O(1) \quad , \quad (H.19a) \end{aligned}$$

donde:

$$C_\ell = -\frac{1}{2} (q_\ell + C_E) \quad , \quad q_\ell = \frac{1}{\ell} + q_{\ell-1} \quad , \quad \ell \neq 0 \quad , \quad q_0 = 0 \quad , \quad (H.19b)$$

siendo $C_E = 0,577215664901\dots$ la constante de Euler-Mascheroni. La expresión (H.19a) es producto del desarrollo de la siguiente expresión implícita /67/:

$$\begin{aligned} u = & \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\lambda}{8u^2}\right) - \frac{1}{2} (C_E + q_\ell + \ln 2) + \frac{\pi^2}{12u} - \left(\frac{8}{\lambda}\right)^{1/2} \ln\left(\frac{\lambda}{8u}\right) \\ & + 2 \left(\frac{8}{\lambda}\right)^{1/2} u \frac{(\ell+1/2)!}{\ell!} + \left(\frac{8}{\lambda}\right)^{1/2} \frac{(\ell+1/2)!}{\ell!} D_\ell + \delta \quad , \quad (H.20a) \end{aligned}$$

donde:

$$u = (\epsilon_\ell / 2)^{1/2} \quad , \quad (H.20b)$$

$$D_\ell = q_{\ell+1/2} + 2 \ln 2 - 2 + C_E - 2C_1 \quad , \quad (H.20c)$$

$$C_1 = \int_0^\infty \{y(y^2+1)^{-1/2} - 1\} \ln y \, dy = 0,30685\dots \quad (H.20d)$$

El término δ expresa el error de la truncación y es aproximadamente:

$$\delta = \frac{5}{4} (\ln \lambda)^{-2} + O(\lambda^{-1/2}) \quad (\text{H.21})$$

Cabe añadir que en la expresión (H.19a) se presentan, en órdenes superiores, términos correspondientes a una serie de potencias de $\lambda^{-1/2}$, además de los términos logarítmicos. La presencia de estos términos puede explicarse teniendo presente la relación de dilatación (G.21) que satisface el hamiltoniano.

APENDICE I

APLICACIONES DEL VALOR MEDIO ESTADISTICO CLASICO DEL DESPLAZAMIENTO CUADRATICO EN EL OSCILADOR ANARMONICO.

El objeto de este Apéndice es dar un panorama somero sobre las aplicaciones de la función $\langle x^2 \rangle$, que representa un valor medio estadístico clásico en un oscilador anarmónico cuártico. La función que deseamos discutir está íntimamente relacionada a la polarizabilidad de medios materiales. Por ejemplo, al estudiar la polarizabilidad de ciertos líquidos no polares, en el rango de bajas frecuencias (1 a 10 MHz), se ha encontrado que la polarizabilidad dieléctrica isocórica es dependiente de la temperatura. Basados en este hecho Vij y Scaife /68/ estudiaron la polarizabilidad del benceno como una función de la temperatura, y la interpretación de los resultados experimentales ha requerido introducir en la ecuación de Clausius-Mosotti anarmonicidades para describir la interacción con el solvente /69/. Otro problema que involucra a la función $\langle x^2 \rangle$ es el estudio de la respuesta dinámica de los materiales ferroeléctricos de tipo orden-desorden y de tipo displacivo, a temperaturas superiores a la de Curie /70,71/. En este último caso, también es fundamental introducir anarmonicidades en las oscilaciones, para describir correctamente la dependencia con la temperatura de la susceptibilidad dieléctrica del material ferroeléctrico.

Para establecer la relación entre la función $\langle x^2 \rangle$ y la polarización de un medio sujeto a oscilaciones anarmónicas, consideremos el hamiltoniano clásico H que describe la oscilación unidimensional de una carga q en un dieléctrico:

$$H = \frac{1}{2} p^2 + V \quad , \quad (I.1a)$$

$$V = v_2 x^2 + v_4 x^4 \quad (I.1b)$$

El potencial (I.1b) resulta apropiado para describir la anarmonicidad de las oscilaciones, en primera aproximación /69,71/. Si ahora se aplica un campo eléctrico constante, con un valor local F sobre la carga q , el hamiltoniano se transforma en:

$$H = \frac{1}{2} p^2 + W(F) \quad , \quad W(F) = V + qFx \quad (I.2)$$

La aplicación del campo F produce una polarización en el medio en el que está ubicada la carga q . Si el sistema, en primera aproximación, puede ser descrito mediante una densidad n_0 constante de cargas idénticas q , entonces la polarizabilidad P puede escribirse de la siguiente manera:

$$P = n_0 \left\langle \frac{\partial H}{\partial F} \right\rangle = n_0 q \langle x \rangle(F) \quad (I.3)$$

donde $\langle A \rangle(F)$ indica el valor medio estadístico clásico de la variable mecánica A :

$$\langle A \rangle(F) = \int_{-\infty}^{\infty} A e^{-\beta' H} dp dx / \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta' H} dp dx$$

$$\beta' = (kT)^{-1} \quad , \quad (I.4)$$

que resulta ser una función de F a través del hamiltoniano (I.2).

Si el campo aplicado es pequeño (como es el caso de los fenómenos discutidos al principio), $\langle x \rangle(F)$ puede desarrollarse en serie de potencias de F y aproximarse por el término dominante. Tomando en cuenta entonces que:

$$e^{-\beta' W} \approx e^{-\beta' V} \{1 - \beta' q F x + O(F^2)\} \quad , \quad (I.5)$$

y que V es una función par de las coordenadas, obtenemos los siguientes resultados auxiliares:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta' W} dx \approx -\beta' q F \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\beta' V} dx + O(F^2) \quad , \quad (I.6a)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta' W} dx \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta' V} dx + O(F) \quad (I.6b)$$

Introduciendo ahora (I.6) en (I.3), tomando en cuenta la definición (I.4), encontramos el siguiente resultado:

$$P \approx -n_0 \beta' q^2 F \langle x^2 \rangle(0) + O(F^2) \quad , \quad (I.7)$$

que nos muestra que la función $\langle x^2 \rangle$ es directamente proporcional a la polarizabilidad del medio, para campos pequeños.

Para describir la dependencia de P con la temperatura es conveniente realizar el cambio de variables $(\beta' v_2)^{1/2} x \rightarrow x$ en la expresión de $\langle x^2 \rangle$; ésta resulta entonces:

$$\langle x^2 \rangle(0) = \frac{1}{\beta' v_2} E(1, \lambda) \quad , \quad \lambda = v_4 kT / v_2^2 \quad , \quad (I.8a)$$

donde:

$$E(g, \lambda) = \xi_1(g, \lambda) / \xi_0(g, \lambda) \quad , \quad (I.8b)$$

$$\xi_n(g, \lambda) = \int_0^\infty x^{2n} e^{-gx^2 - \lambda x^4} dx \quad (I.8c)$$

La expresión (I.8b) es muy conveniente para escribir a $E(1, \lambda)$ como fracción continuada /69/. Esto es de importancia, ya que la ec.(I.8a) no proporciona una expresión analítica para $\langle x^2 \rangle(0)$ como una función de la temperatura. Por otro lado las funciones $\xi_n(1, \lambda)$ son formalmente desarrollables en serie de potencias de λ , pero originan series divergentes. En consecuencia debe recurrirse a un método diferente para obtener una expresión analítica para $\langle x^2 \rangle(0)$ como una función de λ , y la fracción continuada es una razonable alternativa, ya que es convergente /69/. Para construirla, es suficiente integrar por partes (I.8c) para encontrar la siguiente recurrencia:

$$\xi_{n-1}(1, \lambda) = \frac{2}{2n-1} \xi_n(1, \lambda) + \frac{4\lambda}{2n-1} \xi_{n+1}(1, \lambda) \quad (I.9)$$

Si reescribimos la ecuación anterior de la siguiente manera:

$$\frac{\xi_n(1, \lambda)}{\xi_{n-1}(1, \lambda)} = \frac{1}{2} \frac{2n-1}{1 + 2\lambda \frac{\xi_{n+1}(1, \lambda)}{\xi_n(1, \lambda)}}, \quad (I.10)$$

la fracción continuada puede construirse recursivamente. El resultado final es:

$$\frac{\xi_n(1, \lambda)}{\xi_{n-1}(1, \lambda)} = \frac{1}{2\lambda} \frac{(2n-1)\lambda}{1 + \frac{(2n+1)\lambda}{1 + \frac{(2n+3)\lambda}{1 + \frac{(2n+5)\lambda}{1 + \dots}}}} = \frac{1}{2\lambda} \sum_{i=0}^{\infty} \downarrow (2n-1+2i)\lambda \quad (I.11)$$

Si ahora reemplazamos (I.11) en (I.8b), la polarizabilidad P se puede expresar de la siguiente manera, como una función de la temperatura absoluta T :

$$P \approx - n_0 q^2 \frac{F}{v_2} \sum_{i=0}^{\infty} \downarrow (2i+1) (v_4 kT / v_2^2) \quad (I.12)$$

La fracción continuada converge con extrema lentitud, por lo que la ec. (I.12) es poco práctica. En lugar de ella resulta más conveniente recurrir a métodos de suma de series divergentes, para obtener una expresión analítica para $\langle x^2 \rangle(0)$ válida para toda temperatura T .

APENDICE J

METODO RKR PARA DETERMINAR LOS POTENCIALES VIBRACIONALES DE MOLECULAS DIATOMICAS.

El objeto de este Apéndice es mostrar cómo se determinan los puntos de retorno clásicos del potencial vibracional de una molécula diatómica, utilizando el método RKR (Rydberg-Klein-Rees). Nuestro tratamiento sigue esencialmente el de las refs./72,73/ y completa la discusión que realizamos en el §.61.

Consideremos un estado molecular con energía rotovibracional E_{nJ} . El potencial efectivo $W(R)$ que afecta el movimiento nuclear es:

$$W(R) = U(R) + \frac{K}{R^2} \quad , \quad K = J(J+1)\hbar^2/2\mu \quad , \quad (J.1)$$

donde R es la separación internuclear y μ la masa reducida. El potencial vibracional está representado por $U(R)$. Nuestro objetivo es determinar los puntos de retorno R_+ y R_- :

$$W(R_+) = W(R_-) = E_{nJ} \quad (J.2)$$

Para ello introducimos la función auxiliar:

$$A(E_{nJ}, K) = \int_{R_-}^{R_+} (E_{nJ} - W(R)) \, dR \quad , \quad (J.3)$$

que satisface las siguientes propiedades:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial E_{nJ}}\right)_K = R_+ - R_- \quad , \quad (J.4a)$$

$$\left(\frac{\partial A}{\partial K}\right)_{E_{nJ}} = \frac{1}{R_+} - \frac{1}{R_-} \quad (J.4b)$$

Ahora bien, la función (J.3) puede reescribirse convenientemente en la forma de una integral doble. El argumento es el siguiente: partimos de la siguiente integral /74/:

$$\begin{aligned} \int \frac{(E-x)^{1/2}}{x-W} \, dx &= \{(x-W)(E-x)\}^{1/2} - \frac{W-E}{2} \int \{(x-W)(E-x)\}^{-1/2} \, dx + \text{cte.} \\ &= \{(x-W)(E-x)\}^{1/2} - (W-E) \arctg\left(\frac{W-x}{x-E}\right)^{1/2} + \text{cte.} \end{aligned} \quad (J.5)$$

la cual nos permite deducir:

$$\int_W^{E_{nJ}} \{(E_{nJ}-x)/(x-W)\}^{1/2} dx = \frac{\pi}{2} (E_{nJ}-W) \quad (J.6)$$

Mediante la ec.(J.6), la función $A(E_{nJ},K)$ se puede reescribir del siguiente modo:

$$A = \frac{2}{\pi} \int_{R_-}^{R_+} dR \int_W^{E_{nJ}} \{(E_{nJ}-x)/(x-W)\}^{1/2} dx \quad (J.7)$$

Si ahora consideramos que al variar R de R_- a R_+ , el potencial W pasa por un mínimo, obtenemos:

$$A = \frac{1}{\pi} \int_{\min W}^{E_{nJ}} (E_{nJ}-x)^{1/2} dx \oint (x-W)^{-1/2} dR \quad (J.8)$$

La ec.(J.8) es apropiada para introducir la condición de cuantización JWKB de primer orden (Cap.II):

$$\oint (x-W)^{1/2} dR = h(n+1/2)/(2\mu)^{1/2} \quad , \quad (J.9)$$

ya que derivando la expresión (J.9) respecto de n se obtiene:

$$\oint (x-W)^{-1/2} dR = h (2\mu)^{-1/2} \left(\frac{\partial x}{\partial n}\right)_K^{-1} \quad (J.10)$$

término que puede introducirse en la ec.(J.8) para dar:

$$A = \hbar (2/\mu)^{1/2} \int_{\min W}^{E_{nJ}} (E_{nJ}-x)^{1/2} \left(\frac{\partial n'}{\partial x}\right)_K dx \quad (J.11)$$

Finalmente, cambiando la variable de integración de la energía a los números cuánticos, la ec.(J.11) se transforma en:

$$A = \hbar (2/\mu)^{1/2} \int_{n_0}^n (E_{nJ}-E_{n',J})^{1/2} dn' \quad , \quad (J.12)$$

siendo el límite inferior de la integral, el número real que satisface:

$$\min W = E_{n_0 J} \quad (J.13)$$

Utilizando los ordenes superiores al primero en la aproximación JWKB, dicho límite puede calcularse como /75/:

$$n_0 = -\frac{1}{2} - Y_{00} w_e^{-1} = -\frac{1}{2} - \min U (\mu R_e^2/2a_0)^{1/2} \quad , \quad (J.14)$$

siendo a_0 el primer coeficiente de Dunham ($a_0 = R_e^2 (d^2U/dR^2)(R_e)/2$).

Utilizando las ecs.(J.4a) y (J.12), obtenemos una primera relación que involucra explícitamente a los puntos de retorno clásicos:

$$R_+ - R_- = \hbar (2/\mu)^{1/2} \int_{n_0}^n (E_{nJ}-E_{n',J})^{-1/2} dn' \quad (J.15)$$

Por otro lado combinando las ecs.(J.4b) y (J.12) deducimos:

$$\frac{1}{R_-} - \frac{1}{R_+} = \hbar (2/\mu)^{1/2} n_0 \int^n (E_{nJ} - E_{n',J})^{-1/2} \left(\frac{\partial E_{n',J}}{\partial K} \right) dn' \quad (J.16)$$

La dependencia de $E_{n',J}$ con K puede calcularse a partir de los primeros términos del desarrollo del autovalor, en serie de potencias de los números cuánticos n' y J /76/:

$$E_{n',J} = \text{cte.} + \frac{2\mu}{\hbar^2} B_{n',K} + \quad , \quad (J.17)$$

siendo B_n , la constante rotacional correspondiente al estado n' . Utilizando (J.17), obtenemos la segunda relación buscada:

$$\frac{1}{R_-} - \frac{1}{R_+} = (8\mu)^{1/2} \hbar^{-1} n_0 \int^n (E_{nJ} - E_{n',J})^{-1/2} B_{n'} dn' \quad (J.18)$$

Las ecs.(J.16) y (J.18) nos permiten calcular los puntos de retorno R_+ , y R_- en términos de las magnitudes experimentales E_{nJ} , B_n y n_0 . Las integrales involucradas pueden calcularse numéricamente, si bien ello trae problemas debido a las singularidades asociadas a los extremos del intervalo de integración. Dichos problemas pueden ser superados mediante una representación polinomial para E_{nJ} y B_n , que permita remover las singularidades /75/.

REFERENCIAS DE LOS APENDICES A-J.

- /1/ R.P. Bell, Proc. R. Soc. London Ser. A 183 (1945) 328.
- /2/ S.I. Chan, J. Zinn, J. Fernández and W.D. Gwinn, J. Chem. Phys. 33 (1960) 1643.
- /3/ S.I. Chan, J. Zinn and W.D. Gwinn, J. Chem. Phys. 34 (1961) 1319.
- /4/ A. Danti, W.J. Lafferty and R.C. Lord, J. Chem. Phys. 34 (1961) 294.
- /5/ C.B. Moore and G.C. Pimentel, J. Chem. Phys. 40 (1964) 1529.
- /6/ J. Laane, Appl. Spectrosc. 24 (1970) 73.
- /7/ T. Ueda and T. Shimanouchi, J. Chem. Phys. 49 (1968) 470.
- /8/ J.R. Durig and R.C. Lord, J. Chem. Phys. 45 (1966) 61.
- /9/ T.L. Smithson and H. Wieser, J. Chem. Phys. 79 (1983) 626.
- /10/ H. Dekker, Physica A 103 (1980) 55.
- /11/ H. Dekker and N.G. van Kampen, Phys. Lett. A 73 (1979) 374.
- /12/ R.J.L. Lerou and H. Dekker, Phys. Lett. A 83 (1981) 371.
- /13/ H. Risken and H.D. Vollmer, Z. Physik 201 (1967) 323.
- /14/ H. Risken and H.D. Vollmer, Z. Physik 204 (1967) 240.
- /15/ M. Suzuki, J. Stat. Phys. 16 (1977) 11.
- /16/ B. Simon, Ann. Phys. (NY) 58 (1970) 76.
- /17/ C.M. Bender and T.T. Wu, Phys. Rev. 184 (1969) 1231.
- /18/ J. Avery, Creation and Annihilation Operators, McGraw-Hill, New York, 1976.
- /19/ S. Raimes, Many Electron Theory, North Holland, Amsterdam & London, 1972.
- /20/ N.H. March, W.H. Young and S. Sampanthar, The Many Body Problem in Quantum Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge, 1967.
- /21/ P.M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, vol.I, McGraw-Hill, New York, 1953.
- /22/ P.R. Graves-Morris (Ed.), Padé Approximants, The Institute of Physics, London & Bristol, 1973.
- /23/ L. Wuytack (Ed.), Padé Approximation and Its Applications, Lecture Notes in Mathematics 765, Antwerp, Springer Verlag, 1979.
- /24/ G.A. Baker Jr., Phys. Rev. 161 (1967) 434.
- /25/ J. Zinn-Justin, Phys. Rep. 1 (1971) 55.
- /26/ H.S. Wall, Analytic Theory of Continued Fractions, Van Nostrand, New York, 1948.
- /27/ W.E. Caswell, Ann. Phys. (NY) 123 (1979) 153.
- /28/ W. Duch, J. Phys. A 16 (1983) 4233.
- /29/ T.I. Banks and C.M. Bender, J. Math. Phys. 13 (1972) 1320.
- /30/ T. Appelquist and H.D. Politzer, Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 43.
- /31/ A. De Rújula and S.L. Glashow, Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 46.
- /32/ T. Appelquist, A. De Rújula, H.D. Politzer and S.L. Glashow, Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 365.
- /33/ E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, J. Kogut, K.D. Lane and T.M. Yan, Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 369.

- /34/ J.S. Kang and H.J. Schmitzen, Phys. Rev. D 12 (1975) 841.
- /35/ E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, K.D. Lane and T.M. Yan, Phys. Rev. D 17 (1978) 3090.
- /36/ C. Quigg and J.L. Rosner, Phys. Rep. 56 (1979) 167.
- /37/ E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, K.D. Lane and T.M. Yan, Phys. Rev. D 21 (1980) 203.
- /38/ A. Martin, Phys. Lett. B 93 (1980) 338.
- /39/ G.C. Joshi and J.W.G. Wignall, Lett. Nuovo Cimento 35 (1982) 437.
- /40/ A. Martin, Phys. Lett. B 67 (1977) 330.
- /41/ H. Grosse, Phys. Lett. B 68 (1977) 343.
- /42/ A. Martin, Phys. Lett. B 70 (1977) 192.
- /43/ H. Grosse and A. Martin, Phys. Lett. B 79 (1978) 103.
- /44/ H. Grosse and A. Martin, Phys. Rep. 60 (1980) 341.
- /45/ A. Burnel and H. Caprasse, Phys. Rev. D 21 (1980) 2000.
- /46/ H.F. de Carvalho, R. Chanda and A.B. d'Oliveira, Lett. Nuovo Cimento 22 (1978) 679.
- /47/ S. Gasiorowicz and J.L. Rosner, Am. J. Phys. 49 (1981) 954.
- /48/ J. Killingbeck, Phys. Lett. A 65 (1978) 87.
- /49/ E.J. Austin, Mol. Phys. 42 (1981) 1391.
- /50/ J.R. Silva and S. Canuto, Phys. Lett. A 88 (1982) 282.
- /51/ N. Tralli, Classical Electromagnetic Theory, McGraw-Hill-Kogakusha, International Student Edition, Tokyo, 1963.
- /52/ L.I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill-Kogakusha, International Student Edition, Tokyo, 1965.
- /53/ L.D. Landau and E.M. Lifshits, Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, Pergamon, London, 1958.
- /54/ S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer International Student Edition, Berlin, 1977.
- /55/ L. Schiff and H. Snyder, Phys. Rev. 55 (1939) 59.
- /56/ R. Loudon, Am. J. Phys. 27 (1959) 649.
- /57/ L.K. Haines and D.H. Roberts, Am. J. Phys. 37 (1969) 1145.
- /58/ M. Ruderman, Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 1306.
- /59/ V. Canuto and D.C. Kelly, Astrophys. Space Sci. 17 (1972) 277.
- /60/ A.R.P. Rau and L. Spruch, Astrophys. J. 207 (1976) 671.
- /61/ C.H. Mehta and S.H. Patil, Phys. Rev. A 17 (1978) 43.
- /62/ H. van Haeringen, J. Math. Phys. 19 (1978) 2165.
- /63/ F. Gesztesy, J. Phys. A 13 (1980) 867.
- /64/ J. Avron, I. Herbst and B. Simon, Duke Math. J. 45 (1978) 847.
- /65/ J. Avron, I. Herbst and B. Simon, Ann. Phys. (NY) 114 (1978) 431.
- /66/ J. Avron, I. Herbst and B. Simon, Phys. Rev. A 20 (1979) 2287.
- /67/ J. Avron, I. Herbst and B. Simon, Commun. Math. Phys. 79 (1981) 529.
- /68/ J.K. Vij and W.G.S. Scaife, J. Chem. Phys. 64 (1976) 226.
- /69/ A. Morita and D.G. Frood, J. Phys. D 11 (1978) 2409.
- /70/ M.E. Lines, Phys. Rev. 177 (1969) 797.
- /71/ Y. Onodera, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 44 (1970) 1477.

/72/ O. Klein, Z. Physik 76 (1932) 226.

/73/ R.H. Davies and J.T. Vanderslice, Can. J. Phys. 44 (1966) 219.

/74/ I. Bronshtein y K. Semendiaev, Manual de Matemáticas para Ingenieros y Estudiantes, MIR, Moscú, 1982.

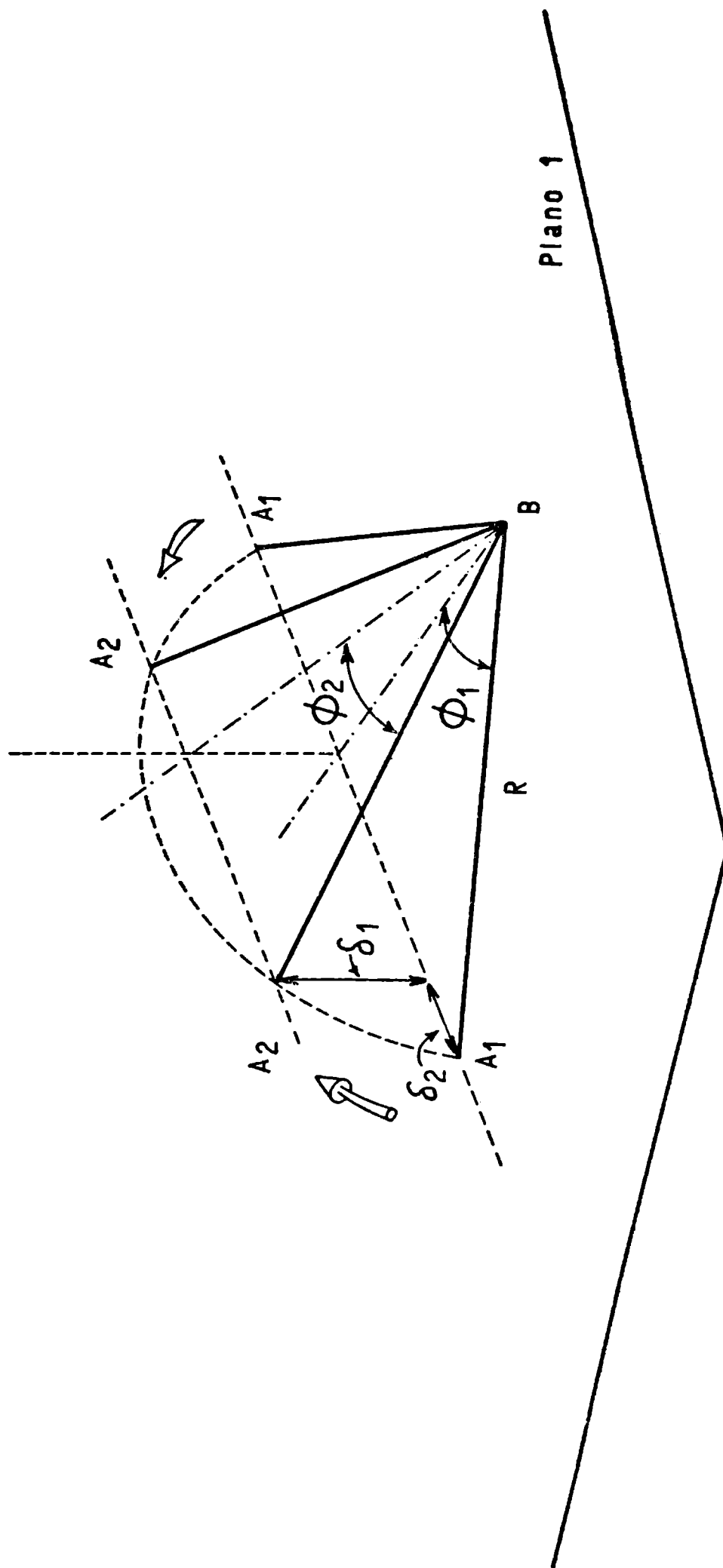
/75/ H. Telle and U. Telle, J. Mol. Spectrosc. 85 (1981) 248.

/76/ G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure: Spectra of Diatomic Molecules, Van Nostrand, Princeton, New Jersey, 1950.

LEYENDA PARA LA FIGURA (Apéndices)

Fig. A.1: Vibración de un enlace en un compuesto anillado.
(Se ha omitido el resto de la molécula)

Fig. A.1



PROGRAMAS

PROGRAMA I

El programa resuelve numéricamente las ecs.(26.20) y (26.21) para aproximar diversos autovalores del modelo con potencial de confinamiento lineal, utilizando el MFV.

El programa utiliza el ML-08 de la calculadora programable TI-59P; la nomenclatura indicada en las memorias usadas por el programa sigue la del Cap.VII.

Listado:

```

000 2nd Lbl          ×          3
      2nd A'         2nd π      ×
      STO           ÷          RCL
      10      (q)    3          22
      RCL          √x         x2
      20      (nr)  ×          -
      +           RCL         2
      RCL          10         ÷
      21      (l)    yx       RCL
      ÷           040 3        070 10
010 2            +          )
      +           RCL         STO
              10           30      (F(q*))
      7           -          074 INVSBR.
      5           2
      )           ×
      ÷           RCL
      (           22
      RCL          x2
      20           050 )
020 +            )
      RCL          2nd Pause
      21          INVSBR
      +           2nd Lbl
      1           2nd B'
      )           RCL
      STO          10
      22      (n)  x2
      ×           1/x
      RCL          060 ×
030 23

```


PROGRAMA II

Este programa resuelve numéricamente las ecs.(29.5) y (29.6) para aproximar los autovalores del oscilador armónico acotado simétricamente; con condiciones de contorno de Dirichlet, utilizando el MFV.

El programa utiliza el ML-08 de la calculadora TI-59P; la nomenclatura indicada en las memorias usadas por el programa sigue la del Cap.VIII.

Listado:

000	2nd Lbl		+		x
	2nd A'		RCL		2nd
	STO		13	(2K)	x ²
	10	(q)	x		÷
	x ²				4
	x ²		5)
	x		x		STO
	(RCL		15
	(10)
	2		040 x ²		070)
010	x		x		INVSBR
	RCL		(2nd Lbl
	11	(n)	RCL		2nd B'
	+		10		RCL
	1		÷		10
)		RCL		x ²
	x ²		14	(x ₀)	x
	÷)		2
	2nd π		y ^x		x
	x ²		050 RCL		080 RCL
020	÷		13		12
	(-		+
	RCL		((
	11		(RCL
	+		RCL		13
	1		11		÷
)		+		2
	x ²		1		+
))		1
	STO		060 x ²		090)
030	12	(B)			

```

×
(
RCL
10
÷
RCL
14
)
yx
100 RCL
13
)
)
STO
20 (Fn)(ec.(29.5))
INVSBR
2nd Lbl
2nd C'
RCL
110 10
x2
×
RCL
12
+
RCL
10
x2
1/x
120 ×
RCL
15
)
124 INVSBR. (Fn)(ec.(29.13))
```

PROGRAMA III

Este programa resuelve numéricamente las ecs.(33.13a) y (33.13b) para aproximar los autovalores del efecto Zeeman para un átomo hidrogenoide de carga Z, mediante el MFV.

Se calculan los autovalores y valores medios del potencial en función del campo magnético aplicado. El programa utiliza el ML-08 de la TI-59P para realizar los cálculos. La nomenclatura indicada en las memorias usadas en el programa sigue la notación del Cap.X.

Listado:

000	2nd Lbl	RCL		+
	2nd A'	20		3
	STO	x ²)
	10 (q*))		÷
	RCL	√x		(
	20 (n))		2
	x ²	STO		x
	x	40 (C)		RCL
	5	RCL		21
	+	040 22 (m)	070 -	
010	1	x ²		1
	-	x)
	3	3		+
	x	-		1
	RCL	RCL)
	21 (l)	21		STO
	x	x		41 (f)
	((RCL
	RCL	RCL		30
	21	050 21	080 x ²	
020	+	+		x
	1	1		2
))		x
))		RCL
	√x	÷		41
	STO	(x ²
	30	2		÷
	÷	x		9
	(RCL		÷
	2	060 21	090 (
030	x			

RCL		STO		43
23	(N)	44	$(\sqrt{A_1} + \sqrt{A_2})$	x
+		2		2
1		x		x
)		RCL		RCL
STO		10		10
50		y^x		y^x
x^2		3		3
)		÷		÷
100 STO		140 (180 RCL
42	(B)	RCL		24
RCL		24	(Z)	÷
30		x		RCL
÷		RCL		40
2		40)
-		+		\sqrt{x}
RCL		4		STO
50		$1/x$		52
÷		x		(q_3^{*2})
110 (150 RCL		190 RCL
2		25	(λ)	51
x		x^2		-
RCL		x		RCL
42		RCL		10
)		42		x^2
\sqrt{x}		x		-
)		RCL		RCL
STO		10		10
43	$(\sqrt{A_3})$	y^x		x^2
120 RCL		160 3		200)
50))
÷)		INVSBR
(\sqrt{x}		2nd Lbl
2		x		2nd B'
x		RCL		RCL
RCL		44		51
42)		x
)		STO		RCL
\sqrt{x}		51	$(q_1^{*2} + q_2^{*2})$	42
130)		170 RCL		210 x

RCL
25
 x^2
÷
4
-
RCL
24
×
220 RCL
40
÷
2
)
R/S (F(q*))
2nd Lb1
2nd C'
RCL
51
230 ×
RCL
42
)
234 R/S. ($\langle \rho^2 \rangle$)

Programa IV

Este programa FORTRAN para computadora HP-1000 calcula en forma aproximada los autovalores de los osciladores anarmónicos, mediante el procedimiento del Cap. XI. Se utilizó la ec.(38.8).

Son 56 líneas.

```
FTN4,L,Y
PROGRAM VFM2
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C Tratamiento variacional funcional de los osciladores 2K-anarmónicos
C por expansión de la función B(q).
C
  WRITE(1,900)
900  FORMAT(1H,"LEE C1 CON FORMATO F9.8",)
  READ(1,901)C1
901  FORMAT(D11.7)
  WRITE(1,902)C1
902  FORMAT(1H,"D11.7)
  READ(7,903)AN,AK,DELT,ALFA
903  FORMAT(D7.0,D4.0,2D11.7)
  WRITE(4,905)AK,AN
905  FORMAT(1H,"Oscilador anarmonico K=",D7.0,3X,"ESTADO N=",D7.0,/)
  WRITE(4,904)
904  FORMAT(1H,"Lambda",13X,"q",18X,"B",18X,"E",/)
  T=(AN+.5D0)
  EI1=(2.D0)**((AK+2.D0)/(AK+1.D0))*ALFA*T**((2.D0/(AK+1.D0))
  EI0=(2.D0)**(AK/(AK+1.D0))*C1*(T+DELT/T)**(2.D0*AK/(AK+1.D0))
  E0=2.D0*T
C
C LOS COEFICIENTES PERTURBACIONALES CORRESPONDEN AL OSC. SEXTICO
C
  E1=5.D0/16.D0*(5.D0*E0+E0**3)
  B0=(EI0/(AK+1.D0))**((AK+1.D0)*(AK/T**2))**AK
  A1=EI1-(AK+1.D0)/AK*T**2/EI0
  A2=(EI0*AK/(AK+1.D0)*T**2)**(AK)
  A3=AK**2*(AK-1.D0)**2*EI0**2/(T**4*(AK**2-1.D0)**2)
  B1=A1*A2*A3
  A4=2.D0**AK*E1/(E0**AK)
  B2=(16.D0/E0**4)*(A4-B0-.25D0*B1*E0**2)
  ALAM=1.D-05
  Q=DSQRT(T)
  B=B0+B1*Q**4+B2*Q**8
  DB=4.D0*B1*Q**3+8.D0*Q**7
  F=Q**4+ALAM*B*AK*Q**((2.D0*AK+2.D0))-T**2
  DF=4.D0*Q**3+2.D0*(AK+1.D0)*AK*B*ALAM*Q**((2.D0*AK+1.D0))+ALAM*DB*
  IQ**((2.D0*AK+2.D0)*AK
  DQ=-F/DF
  Q=Q+DQ
  IF(DABS(F).LE.1.D-10)GO TO 1
  GO TO 2
1
  E=2.D0*Q**2+(AK+1.D0)*ALAM*B*Q**((2.D0*AK)
  WRITE(1,906)ALAM,F
906  FORMAT(1H,"L=",D13.7,3X,"F=",D13.7,/)
  WRITE(4,907)ALAM,Q,B,E
907  FORMAT(1H,"4(D16.10,3X),/)
  ALAM=10.D0*ALAM
  IF(ALAM.GT.1.D-06)GO TO 20
  GO TO 3
20
  CONTINUE
  END
  END*
```

Programa V

Este programa FORTRAN para computadora HP-1000 calcula en forma aproximada los autovalores de los osciladores anarmónicos, mediante el procedimiento del Cap. XI. Se utiliza la ec.(38.14).

Son 52 líneas.

```
FTN4,L,Y
PROGRAM VFM3
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
C
C TRATAMIENTO VARIACIONAL FUNCIONAL DE LOS OSCILADORES 2K-ANARMONICOS
C UTILIZANDO LA FUNCION B(U).
C
C1=1.3468300D0
READ(7,903)AN,AK,DELT
903 FORMAT(D7.0,D4.0,D11.7)
WRITE(4,905)AK,AN
905 FORMAT(1H,"Oscilador anarmonico K=",D7.0,3X,"ESTADO N=",D7.0,/)
WRITE(4,904)
904 FORMAT(1H,"Lambda",13X,"u",18X,"B(u)",18X,"E",/)
T=(AN+.5D0)
EI0=(2.D0)**(AK/(AK+1.D0))*C1*(T+DELT/T)**(2.D0*AK/(AK+1.D0))
E0=2.D0*T
C
C LOS COEFICIENTES PERTURBACIONALES CORRESPONDEN AL OSC. SEXTICO.
C
E1=25.D0/8.D0*T+2.5D0*T**3
E2=-.25D0*(19277.D0/128.D0*T+4145.D0/16.D0*T**3+393.D0/8.D0*T**5)
B0=(2.D0/E0)**AK*E1
A=T**2
B1=.5D0*(2.D0/E0)**(2.D0*AK+1.D0)*(2.D0*E2+AK**2*E1**2/E0)
H=(AK+1.D0)*A/(EI0*AK)
B2=((EI0/(AK+1.D0))**((AK+1.D0)*(AK/A)**AK-B0-B1*H**((AK+1.D0))
1/H**((2.D0*(AK+1.D0))
ALAM=1.D-05
U=0.5D0
3
2
B=B0+B1*U**((2.D0*(AK+1.D0))+B2*U**((4.D0*(AK+1.D0))
DB=2.D0*(AK+1.D0)*U**((2.D0*AK+1.D0)*B1+4.D0*(AK+1.D0)*B2*
1U**((4.D0*AK+3.D0)
FF=(1.D0/ALAM)**(2.D0/(AK+1.D0))
F=FF*U**4+AK*B*U**((2.D0*(AK+1.D0))-A
DF=4.D0*FF*U**3+2.D0*(AK+1.D0)*AK*B*U**((2.D0*AK+1.D0)+DB*AK*U**((
12.D0*(AK+1.D0))
DU=-F/DF
U=U+DU
IF(DABS(F).LE.1.D-08)GO TO 1
GO TO 2
E=DSQRT(1.D0/FF)*((2.D0*FF*U**2+(AK+1.D0)*B*U**((2.D0*AK))
906 WRITE(1,906)ALAM,F
FORMAT(1H,"L=",D13.7,3X,"F=",D13.7,/)
907 WRITE(4,907)ALAM,U,B,E
FORMAT(1H,4(D16.10,3X),/)
ALAM=10.D0*ALAM
IF(ALAM.GT.1.D 06)GO TO 20
GO TO 3
20 CONTINUE
END
END$
```

Programa VI

Este programa FORTRAN para computadora HP-1000 calcula los coeficientes racionales $b_j^{(i)}$ (ver Cap. XIII). Son 60 líneas.

```
FTN4X,L,Y
PROGRAM BEGA
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DIMENSION B(20,20)

C Número de coeficientes a calcular: N.

10 READ(1,10)N
   FORMAT(I2)

C Exponentes de la relación de dilatación.

   AL=-.25D0
   BE=0.50D0
   BEL=-X(BE/AL)
   DO 1 I=1,N
     I11=I+1
     DO 2 L=1,I11
       L1=L-1
       IL=I-L
       L2=L+1
       IL1=IL+1
       IL2=I-L1
       IL3=IL2+1
       B(L,I)=0.D0
       DO 3 IP=1,L
         IA=IP-1
         B(L,I)=B(L,I)+(F(L1))*C(IL2/AL,IA)*C(BEL,L1-IA)
3      CONTINUE
2      CONTINUE
   WRITE(53,20)(B(L,I),L=1,I11)
20  FORMAT(1H,3(2X,D22.16))
   WRITE(53,21)
21  FORMAT(1H,??)
1   CONTINUE
   END
   FUNCTION C(A,N)
   DOUBLE PRECISION C,A,XI,XN
   IF(N.EQ.0)GO TO 7
   C=1.D0
   DO 1 I=1,N
     XI=I
     XN=N
     C=C*(A-XI+1.D0)/(XN-XI+1.D0)
1   CONTINUE
   GO TO 8
7   C=1.D0
8   RETURN
   END
   FUNCTION F(K)
   DOUBLE PRECISION F
   F=1.D0
   IF(MOD(K,2).EQ.1) F=-1.D0
   RETURN
   END
END$
```


Programa VII

Este programa FORTRAN para computadora HP-1000 realiza la renormalización de una serie de potencias arbitraria mediante el MF (Cap. XIII). Son 211 líneas.

```
FTN4X,L,Y
PROGRAM HCLGA
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
C
C Dimensionar los vectores y matrices de acuerdo al numero maximo de
C coeficientes perturbacionales E(n) que se va a utilizar.
C
  DIMENSION E(6),DE(6),EE(6),SE(6),DSE(6),
  IG(6,6),DDE(6),DDSE(6)
  N=5
C
C Este programa resuelve el problema de renormalizacion de una expan-
C sion perturbativa por el metodo funcional.
C Son datos de entrada: coeficientes alfa y beta provistos por una ley
C de escalado, los coeficientes de la serie original, el coeficiente
C MM que inicializa la busqueda de puntos criticos en la sucesion.
C Desde pantalla los datos ingresados son: tipo de punto critico,
C indice JND, y el intervalo a estudiar en K.
C
  NNN=N+1
C
C En este punto se introducen los coeficientes E(n) de la serie que
C se desea sumar.
C
  EE(1)=1.09333D0
  EE(2)=1.20597D0
  EE(3)=0.0399D0
  EE(4)=-1.6349D0
  EE(5)=-0.700D0
  EE(6)=5.011D0
  AA=EE(1)-1.D0
C
C Entrar los exponentes asociados a la relacion de dilatacion.
C
  ALFA=-1.D0
  BETA=-4.D0
  AP=BETA/ALFA
  BP=-1.D0/ALFA
  S=-2.D0*(ALFA+BETA)/BETA
  WRITE(1,346)
346  FORMAT(1H,"Coeficiente MM(Format I4), inicial.=2,barrido=1000")
  READ(1,345)MM
345  FORMAT(I4)
  WRITE(1,1017)
1017  FORMAT(1H,"Entrar el JND, indice del extremo: 1,PE; 2,PI.",/)
  READ(1,1018)JND
1018  FORMAT(I1)
  WRITE(1,1015)
1015  FORMAT(1H,"Intervalo de K: DDQ,QMAX,QINIC. Formato:D16.10")
  READ(1,901)DDQ,QMAX,Q0
901  FORMAT(3D16.10)
  QIN=Q0
  2  IND=1
  Q=Q0
  DO 600 I=1,NNN
  DO 600 J=1,NNN
600  G(I,J)=0.D0
  DO 601 I=1,NNN
601  G(I,I)=1.D0
  DO 700 M=2,N
  DO 701 I=1,M
  M1=M+1
  II=I-1
  IM=M-II-1
  SUX=1.D0
703  AUX=AP+BP*FLOAT(II)+FLOAT(IM)
  SUX=SUX*AUX
  IF(IM.EQ.0)GO TO 702
  IM=IM-1
  GO TO 703
702  IM2=M-II
701  G(M,I)=SUX/FACT(IM2)
700  CONTINUE
30  B=0**BP
  BE1=EE(2)+B*(S-2.D0*AA)/(S+2.D0)
  DBE1=(S-2.D0*AA)/(S+2.D0)
  DDEE1=0.D0
  E(1)=(AA+1.D0)*Q**(-AP)
  POT2=-*(AP+BP)
  E(2)=BE1+Q**POT2-Q**(-AP)
  DE(1)=(-AP)*(AA+1.D0)*Q**((-AP)-1.D0)
  DE(2)=POT2*BE1+Q**(POT2-1.D0)-(-AP)*Q**((-AP)-1.D0)+
  1BP*Q**POT2+Q**(BP-1.D0)*DBE1
  DDE(1)=(-AP)*(AA+1.D0)*((-AP)-1.D0)*Q**((-AP)-2.D0)
```

```

DDE(2)=POT2*BE1*(POT2-1.D0)*Q**((POT2-2.D0)+
1POT2*BP*DBE1*Q**((POT2+BP-2.D0)-(-AP)*((-AP)-1.D0)*Q**((-AP)-2.D0)+
2BP*(POT2+BP-1.D0)*Q**((POT2-2.D0+BP)*DBE1+
3BP**2.D0*Q**((POT2+2.D0*BP-2.D0)*DDBE1
DO 650 I=3,NNN
E(I)=0.D0
DE(I)=0.D0
650 DDE(I)=0.D0
DO 705 M=2,N
M1=M+1
DO 704 I=1,M1
I1=I-1
AI=I1
DIS1=EE(I)*Q**(-AP-BP*AI)
E(M1)=E(M1)+G(M1,I)*DIS1
DIS2=EE(I)*Q**(-AP-BP*AI-1.D0)
DE(M1)=DE(M1)+G(M1,I)*(-AP-BP*AI)*DIS2
DIS3=EE(I)*Q**(-AP-BP*AI-2.D0)
DDE(M1)=DDE(M1)+G(M1,I)*(-AP-BP*AI)*(-AP-BP*AI-1.D0)*DIS3
704 CONTINUE
705 CONTINUE
M=N+1
DO 156 I=1,M
SE(I)=0.D0
DDSE(I)=0.D0
156 DSE(I)=0.D0
IF(MM.NE.1000)GO TO 500
C
C Se utiliza el transfer *AFUGA para la escritura.
C
WRITE(53,911)Q
911 FORMAT(1H,"Parametro K=",D18.12)
500 CONTINUE
DO 157 I=1,M
DO 158 J=1,I
SE(I)=SE(I)+E(J)
DDSE(I)=DDSE(I)+DDE(J)
158 DSE(I)=DSE(I)+DE(J)
IF(MM.NE.1000)GO TO 501
WRITE(53,910)I,SE(I),I,DSE(I),I,DDSE(I),I,E(I)
910 FORMAT(1H,"SE(",I2,")=",D18.12,2X,"DSE(",I2,")=",D12.6,
12X,"DDSE(",I2,")=",D12.6,2X,"E VAR(",I2,")=",D18.10)
501 CONTINUE
157 CONTINUE
IF(MM.NE.1000)GO TO 31
Q=Q+DDQ
IF(Q.GT.QMAX)GO TO 71
GO TO 30
31 CONTINUE
IF(MM.EQ.1000)GO TO 71
IF(JND.EQ.2)GO TO 777
FUN=DSE(MM)
GO TO 778
777 FUN=DDSE(MM)
778 IF(IND.NE.1)GO TO 50
Q1=Q0
QD=QMAX
VQ=DDQ
C
C Error con que se calcula el valor de K en los puntos criticos.
C
ER=1.D-12
51 IF(Q1.GE.QD)GO TO 55
Q11=Q1
QI=Q11+VQ
Q12=Q1
ENE2=FUN
IND=2
Q=Q12
GO TO 30
50 IF(IND.NE.2)GO TO 59
ENE1=FUN
Q=Q11
IF(ENE2.EQ.0.D0)GO TO 70
ENE3=ENE2*ENE1
IF(ENE3.GE.0.D0)GO TO 51
52 Q=.50*(Q12+Q11)
VQ=Q12-Q11
IF(DABS(VQ).LT.ER)GO TO 70
IND=3
GO TO 30
59 IF(IND.NE.3)GO TO 71
ENE4=ENE1*FUN
IF(ENE4.EQ.0.D0)GO TO 70
IF(ENE4.GE.0.D0)GO TO 53
Q11=Q
GO TO 52
53 Q12=Q
GO TO 52
55 WRITE(53,11)

```

```
11  FORMAT(1H , "NO HAY RAIZ EN EL INTERVALO")
70  CONTINUE
    WRITE(53,998)Q,B
998  FORMAT(1H , "PARAMETRO K, EXTREMO= ",D18.12,2X,"B=",D18.12)
    WRITE(53,999)MM,SE(MM),MM,DSE(MM),MM,DDSE(MM)
999  FORMAT(1H , "SE( ",I2," )=",D18.12,2X,"DSE( ",I2," )=",D12.6,2X,/,
11H , "DDSE( ",I2," )=",D18.12,/)
C
C  En este punto se inicia la busqueda del siguiente punto critico. Es
C  conveniente que se haga  $Q0=Q+dQ$ , tal que  $dQ$  sea menor que  $DDQ$ .
C
    QQ=Q+0.2DQ
    IF(Q0.GE.QMAX)GO TO 3
    GO TO 2
3    IF(MM.GE.NNN)GO TO 71
    WRITE(1,7)MM
7    FORMAT(1H , "Termino el calculo para MM=",I2)
    WRITE(53,1119)
1119  FORMAT(1H , "-----",/)
    MM=MM+1
    QQ=QIN
    GO TO 2
71   CONTINUE
    END
    FUNCTION FACT(K)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    FACT=1.D0
C
C  Calculo del factorial hasta N=33, debido a overflow en la HP1000.
C
    IF(K.LT.1)GO TO 335
    DO 333 I=1,K
    AI=I
333  FACT=FACT*AI
335  RETURN
    END
    END$
```

PROGRAMA VIII

El programa calcula la secuencia SE' para el valor medio estadístico clásico del cuadrado de la coordenada del oscilador anarmónico cuártico, las ecs.(50.22) y (50.25). Se utilizan como datos de entrada los coeficientes correspondientes a los desarrollos en serie (50.19a) y (50.19b).

El programa es para calculadora programable TI-59P; la nomenclatura indicada en las memorias usadas en el programa sigue la del capítulo XV.

Listado:

000	2nd Lbl	RCL		x
	A	20		RCL
	STO	+		02
	00 (λ)	3		y^x
	R/S	x		3
	2nd Lbl	RCL		+
	B	11		5
	STO	x		x
	01 (k)	RCL		RCL
	1/x	040 02		070 12
010	STO	y^x		x
	03	3		RCL
	x	+		02
	RCL	RCL		y^x
	10 ($E^{(0)}$)	12 ($E^{(2)}$)		5
	=	x		+
	STO	RCL		RCL
	20 ($\bar{E}^{(0)}$)	02		13 ($E^{(3)}$)
	RCL	y^x		x
	20	050 5		080 RCL
020	+)		02
	RCL	STO		y^x
	11 ($E^{(1)}$)	22 ($\bar{E}^{(2)}$)		7
	x	RCL)
	RCL	20		STO
	02	+		23 ($\bar{E}^{(3)}$)
	y^x	6		RCL
	3	x		20
)	RCL		+
	STO	060 11		090 1
030	21 ($\bar{E}^{(1)}$)			

	0		24	($\bar{E}^{(4)}$)		14	
	x		RCL			x	
	RCL		20			RCL	
	11		+			02	
	x		1			y^x	
	RCL		5			9	
	02		x			+	
	y^x		RCL			RCL	
	3		11			15	($E^{(5)}$)
100	+	140	x		180	x	
	1		RCL			RCL	
	5		02			02	
	x		y^x			y^x	
	RCL		3			1	
	12		+			1	
	x		3)	
	RCL		5			STO	
	02		x			25	($\bar{E}^{(5)}$)
	y^x		RCL			+	
110	5	150	12		190	RCL	
	+		x			24	
	7		RCL			+	
	x		02			RCL	
	RCL		y^x			23	
	13		5			+	
	x		+			RCL	
	RCL		2			22	
	02		8			+	
	y^x		x			RCL	
120	7	160	RCL		200	21	
	+		13			+	
	RCL		x			RCL	
	14		RCL			20	
	x		02)	
	RCL		y^x			+/-	
	02		7			+	
	y^x		+			RCL	
	9		9			03	($e^{(0)}$)
)		x)	
130	STO	170	RCL		210	STO	

26	04	(w)	+
1	RCL		RCL
+	20		26
4	+		x
x	RCL		RCL
RCL	21		04
00	x		y ^x
x	RCL		6
RCL	04)
220 01	260 +		300)
x ²	RCL		STO
)	22		27
√x	x		x
+/-	RCL		RCL
+	04		01
1	x ²		x
+	+		(
2	RCL		1
x	23		-
230 RCL	270 x		310 RCL
00	RCL		04
x	04)
RCL	y ^x)
01	3		STO
x ²	+		.28 (SE' ₆)
)	RCL		R/S.
)	24		
÷	x		
(RCL		
240 2	280 04		
x	y ^x		
RCL	4		
00	+		
x	RCL		
RCL	25		
01	x		
x ²	RCL		
)	04		
)	y ^x		
250 STO	290 5		

PROGRAMA IX

El programa resuelve numéricamente la ec.(58.18) para aproximar los autovalores Zeeman de un átomo de hidrógeno, utilizando las propiedades asintóticas de la energía de unión.

El programa utiliza el ML-08 de la calculadora TI-59P; la nomenclatura indicada en las memorias usadas en el programa sigue la del Cap. XVIII.

Listado:

000	2nd Lbl	2	RCL	
	2nd A'	x	10	
	STO	RCL	x^2	
	13 (u)	11)	
	RCL	x	STO	
	11 (λ)	RCL	31	($\bar{F}^{(1)}$)
	x	10	RCL	
	4	x^2	22	($F^{(2)}$)
	x)	÷	
	RCL	040)	070 RCL	
010	10 (k))	10	
	x^2	STO	x^2	
	+	12 (w)	+	
	1	RCL	RCL	
)	20 ($F^{(0)}$)	20	
	\sqrt{x}	x	x	
	+/-	RCL	RCL	
	+	10	10	
	1	x^2	x^2	
	+	050)	080)	
020	2	STO	STO	
	x	30 ($\bar{F}^{(0)}$)	32	($\bar{F}^{(2)}$)
	RCL	RCL	RCL	
	11	21 ($F^{(1)}$)	23	($F^{(3)}$)
	x	-	÷	
	RCL	2	RCL	
	10	x	10	
	x^2	RCL	y^x	
)	20	4	
	÷	060 x	090 +	
030	(

2		STO		STO
x		34	($\bar{F}^{(4)}$)	41
RCL		x		-
22		RCL		RCL
÷		12		13
RCL		x^2		x^2
10		x^2		x
x^2		+		(
)		RCL		RCL
100 STO	($\bar{F}^{(3)}$)	140 33		180 13
33		x		+
RCL		RCL		RCL
22		12		45 (C_E)
÷		y^x		+
RCL		3		RCL
10		+		46 (q_m)
x^2		RCL)
x		32		INV
3		x		ln x
110 +		150 RCL		190)
4		12)
x		x^2		2nd Pause
RCL		+		193 INVSBR.
23		RCL		
÷		31		
RCL		x		
10		RCL		
x^2		12		
x^2		+		
120 +		160 RCL		
RCL		30		
24	($F^{(4)}$))		
x		x		
RCL		RCL		
10		11		
y^x		÷		
6		RCL		
+/-		12		
))		
130)		170)		

PROGRAMA X

Este programa permite calcular en forma analítica el torque magnético, en función de la orientación del campo magnético aplicado respecto del eje cristalino, para un valor dado de la intensidad del campo magnético.

Para llevar a cabo dicho cálculo se aplica el MF a través de las ecs.(65.24) y (65.26).

La notación utilizada, para indicar el contenido de las memorias usadas en el programa, es la que se introdujo en el Cap.XXI.

Listado (para calculadora programable TI-59P):

000	2nd Lbl	x	y ^x
	2nd A'	RCL	8
	STO	10	-
	10 (θ)	y ^x	4
	2nd Deg	3	4
	2nd sin)	x
))	RCL
	STO	x	10
	10	4	y ^x
	-	040)	070 6
010	1	STO	+
)	13 (E ⁽¹⁾)	7
	STO	x	3
	11 (E ⁽⁰⁾)	4	÷
	x	+/-	2
	6)	x
)	STO	RCL
	STO	14	10
	12	RCL	x ²
	(050 50	080 x ²
020	RCL	x	-
	10	1	2
	+	6	3
	2	x	÷
	x	(2
	RCL	1	x
	10	8	RCL
	y ^x	x	10
	5	RCL	x ²
	-	060 10	090 +
030	3		

1		CLR	18
)		$x \neq t$	INV
)		RCL	2nd $x \geq t$
STO		17	x^2
15	(E ⁽²⁾)	INV	GTO
3		2nd $x \geq t$	SUM
6		\sqrt{x}	2nd Lb1
x		GTO	x^2
RCL		y^x	1
100 14		140 2nd Lb1	180 0
x^2		\sqrt{x}	0
-		1	0
1		0	STO
2		0	18
0		0	2nd Lb1
x		STO	SUM
RCL		17	RCL
12		2nd Lb1	18
x		y^x	$x \neq t$
110 RCL		150 RCL	190 RCL
15		16	17
)		+/-	2nd $x \geq t$
\sqrt{x}		-	2nd B'
STO		6	RCL
16		x	17
-		RCL	1/x
6		14	STO
x)	20 (k)
RCL		÷	GTO
120 14		160 2	200 2nd C'
)		0	2nd Lb1
÷		÷	2nd B'
2		RCL	RCL
0		15	18
÷)	1/x
RCL		STO	STO
15		18	20 (k)
)		CLR	2nd Lb1
STO		$x \neq t$	2nd C'
130 17		170 RCL	210 RCL

40	(b)	RCL)
1/x		13)
STO		÷	STO
30	(λ)	RCL	31 (S ₂ (k,w))
×		20	×
RCL		y ^x	RCL
20		3	30
÷)	1/x
(+	x ²
220 1		260 RCL	300 ×
+		21	RCL
RCL		x ²	21
20		×	x ²
×		()
RCL		3)
30		×	+
)		RCL	1
)		11)
STO		÷)
230 21	(w)	270 RCL	310 STO
RCL		20	11 (senα)
11		x ²	2nd Rad
÷		+	INV
RCL		3	2nd sin
20		×)
x ²		RCL	×
+		13	4
RCL		÷)
21		RCL	2nd Rad
240 ×		280 20	320 2nd sin
(y ^x)
2		3	STO
÷		+	41 (τ' = sen4α)
RCL		RCL	324 INVSBR.
20		15	
x ²		÷	
×		RCL	
RCL		20	
11		x ²	
250 +		290 x ²	

gald