

REVISTA PROYECCIONES N° 12:101-102  
Diciembre 1986 - ISSN 0716-0917  
Jornada Matemáticas, Agosto 1986.

**AJUSTE DE UNA SERIE DE FOURIER PARA LA  
FUNCION DE CORRELACION POR PARES EN CON-  
FIGURACION DE MOLECULAS LINEALES**

**ALFREDO VASQUEZ SALAS \***

-----  
**RESUMEN.**

En mecánica estadística se expone que el potencial intermolecular de una configuración de  $N$  moléculas de posición  $(R_1, R_2, \dots, R_n)$  es la suma de las interacciones por pares, es decir,  $\sum (i < j) U(R_i, R_j)$ . Bajo este supuesto cualquier propiedad termodinámica se puede definir en términos de la función de correlación por pares (PCF).

El cálculo de los términos de la función de correlación por pares para moléculas no-esféricas ha sido objeto de variados estudios tanto de tipo experimental como teórico.

---

\* Académico del Departamento de Matemáticas.  
Universidad del Norte - Antofagasta.

Aquí se considera el aspecto teórico que permite obtener, a través de expansiones armónicas, esféricas y ciertas propiedades simétricas, las funciones  $g(R_i, R_j)$  y  $U(R_i, R_j)$ . Los valores de los coeficientes  $g_{11'm}(r)$  han sido calculados, para varios compuestos de moléculas lineales, por métodos de simulación. Ellos son importantes en el cálculo de propiedades termodinámicas específicas por lo que se ha buscado, a partir de estos datos, una forma simple que los genere. En estudios anteriores se obtuvo una aproximación del tipo  $\exp(-br) \sin(ar)$  que representa con bastante eficiencia puntual algunos valores  $g_{11'm}(r)$ . Por ello se buscó una forma analítica que se ajustara en forma general a los datos simulados para moléculas lineales.

El estudio de conjuntos de datos  $g_{11'm}(r)$  de diversos elementos lineales indicó que la serie de Fourier ajustada a un número finito de valores de  $g_{11'm}(r)$  es una buena técnica, además, se observó que los componentes de la serie  $a_n$  y  $b_n$  no tienen comportamiento funcional en términos de  $r$ , lo que hace imposible simplificar analíticamente la serie ajustada, por lo tanto, en beneficio de la exactitud se propone usar dicho modelo.