MARGARITA MATHEMATICA EN MEMORIA DE
JOSÉ JAVIER (CHICHO) GUADALUPE HERNÁNDEZ
(Luis Español y Juan L. Varona, editores),
Servicio de Publicaciones, Universidad de La Rioja,
Logroño, Spain, 2001.

PUNTOS DEL RETÍCULO

FERNANDO CHAMIZO Y ANTONIO CÓRDOBA

En memoria de Chicho

Abstract. In this expository paper we discuss several "lattice point problems" describing some of the standard geometric and analytic methods. At the end we also present three applications to problems in Number Theory and Quantum Mechanics.

1. El círculo y el retículo

Contar cuántos elementos de $\mathbb{Z}^2$ hay dentro de un conjunto, o de una familia de ellos, resulta ser una operación delicada que, sin embargo, nos aparece en contextos sumamente interesantes.

Un ejemplo notable es la función aritmética

$$r_2(l) = \#\{(m,n) \in \mathbb{Z}^2 : m^2 + n^2 = l\},$$

que es el número de puntos de $\mathbb{Z}^2$ que están en la circunferencia de radio $\sqrt{l}$ centrada en el origen. Observemos que la sucesión de sus valores es bastante irregular: $r_2(1) = 4$; $r_2(2) = 4$; $r_2(3) = r_2(6) = r_2(7) = 0$; $r_2(5) = 8$; $r_2(25) = 12$; $r_2(4225) = 36$; $r_2(4227) = 0$. No obstante existen fórmulas que dependen de la descomposición de l en producto de primos. La razón estriba en que si $l = m^2 + n^2$ entonces tenemos que $l = (m + ni)(m - ni)$, $i = \sqrt{-1}$. De manera que la función r_2 está ligada a la divisibilidad en el anillo $\mathbb{Z}[i]$ de los enteros gaussianos. Si $l = 2^\gamma \prod_{p_i\equiv 1\ (4)} p_i^{\alpha_i} \prod_{q_j\equiv 3\ (4)} q_j^{\beta_j}$ resulta que $r_2(l) = 0$ a menos que todos los β_j sean pares. En cuyo caso $r_2(l) = 4\prod(1 + \alpha_i)$.

A partir de esta fórmula resulta muy sencillo demostrar que:

(a) $r_2(k) = O(k^\epsilon)$, para todo $\epsilon > 0$.
(b) $\operatorname{lím\,sup}_{k\to\infty} \frac{r_2(k)}{(\log k)^p} = +\infty$, para todo p.

Un procedimiento eficiente para regularizar una función consiste en calcular sus promedios. En nuestro caso da lugar a la definición:

$$\mathcal{N}(R) = \sum_{l\le R^2} r_2(l).$$

2000 *Mathematics Subject Classification.* 11H06, 11P21, 52C05, 52C07.
Key words and phrases. Lattice points, exponential sums, circle problem.

La función $\mathcal{N}(R)$ también admite una interpretación geométrica en términos del retículo fundamental, no es más que el número de puntos de coordenadas enteras dentro del círculo centrado de radio R.

Asociemos con cada punto $\nu = (\nu_1, \nu_2)$ de $\mathbb{Z}^2$ el cuadrado unidad Q_ν que lo tiene como centro y cuyos vértices son $(\nu_1 \pm 1/2, \nu_2 \pm 1/2)$. Entonces la región $A(R) = \bigcup_{\|\nu\| \le R} Q_\nu$ verifica la identidad $\text{Área}(A(R)) = \mathcal{N}(R)$, por lo que la doble inclusión $D_{R-\sqrt{2}}(\mathbf{0}) \subset A(R) \subset D_{R+\sqrt{2}}(\mathbf{0})$ nos permite escribir:

$$\mathcal{N}(R) = \pi R^2 + O(R), \qquad R \to +\infty.$$

Surge el problema: ¿Cuál es el verdadero orden de magnitud de $E(R) = \mathcal{N}(R) - \pi R^2$ cuando $R \to +\infty$?

En términos más precisos: *¿Cuál es el ínfimo de los valores de θ para los que $E(R) = O(R^\theta)$?*

He aquí algunas cotas superiores para este ínfimo:

$$\begin{array}{ll}
\dfrac{2}{3} = 0'6666\ldots\ , & \text{G. Voronoï y W. Sierpiński (1903)} \\
\dfrac{33}{50} = 0'66 \qquad , & \text{J. G. van der Corput (1922)} \\
\dfrac{15}{23} = 0'6521\ldots, & \text{E. C. Titchmarsh (1935)} \\
\dfrac{13}{20} = 0'65 \qquad , & \text{L.-K. Hua (1942)} \\
\dfrac{35}{54} = 0'6481\ldots, & \text{G. Kolesnik (1976)} \\
\dfrac{7}{11} = 0'6363\ldots, & \text{H. Iwaniec y C. J. Mozzochi (1988)} \\
\dfrac{46}{73} = 0'6301\ldots, & \text{M. N. Huxley (1993)}
\end{array}$$

En la dirección opuesta, Hardy y Landau, en 1915, probaron que

$$\limsup_{R \to +\infty} \frac{|E(R)|}{R^{1/2} (\log R)^{1/4}} = +\infty.$$

No obstante, si sustituimos la estimación L^∞ por otra en la métrica L^2, entonces, como veremos más adelante, se cumple la fórmula:

$$\frac{1}{R} \int_0^R |E(s)|^2 ds = cR + O(R^\epsilon), \qquad \text{para todo } \epsilon > 0,$$

donde $c > 0$ es una constante explícita. Esta fórmula nos permite, siguiendo a Hardy, ser «optimistas» y precisar el «problema del círculo» en la siguiente pregunta:

$$\boxed{\text{¿Es cierto que } E(R) = O(R^{1/2+\epsilon}),\ R \to +\infty, \text{ para todo } \epsilon > 0\text{?}}$$

En dimensión tres hay un problema análogo para la esfera, cuya formulación se encuentra ya en la obra de Gauss, y que aparece asociado, de manera natural, al proceso de contar el número de clases de ideales en las extensiones cuadráticas del cuerpo de los racionales (véase la última sección).

$$\mathcal{N}_3(R) = \#\{\nu \in \mathbb{Z}^3 : \|\nu\| \leq R\} = \frac{4\pi}{3}R^3 + E_3(R).$$

De nuevo se trata de conocer el verdadero orden de magnitud de $E_3(R)$. El mejor resultado hasta la fecha se debe a D. R. Heath-Brown [8] y es $E_3(R) = O(R^{21/16+\epsilon})$.

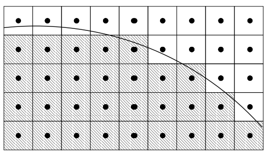
Resulta curioso constatar que para las dimensiones $n \geq 4$, el correspondiente *problema de la n-esfera* es más asequible a los métodos del Análisis Armónico y se conoce el valor óptimo del exponente. Por lo que los casos abiertos son los anteriormente expuestos, $n = 2$ y $n = 3$.

2. Otros dominios convexos

2.1. El problema general. El problema del círculo admite una generalización natural simplemente cambiando la circunferencia por otra curva y el radio por la razón de la homotecia que aplicamos sobre ella. Concretamente se trata de lo siguiente:

> *Dada una curva regular cerrada simple cuya curvatura es estrictamente positiva en todo punto, sea D la región convexa acotada que limita y sea A su área. Hallar el ínfimo de los exponentes θ para los que se cumple*
>
> $$E(R) := \#\{(n,m) \in \mathbb{Z}^2 : (n/R, m/R) \in D\} - AR^2 = O(R^\theta).$$

Si a cada punto de $\mathbb{Z}^2$ se le asigna, como antes, el cuadrado unidad que lo tiene por centro, entonces la geometría del problema muestra que $E(R)$ depende esencialmente de las proporciones normalizadas entre $-1/2$ y $1/2$ en las que la curva dilatada corta a cada uno de estos cuadrados.



Razonando heurísticamente, si se supone equidistribución y cierta independencia entre dichas proporciones, el teorema central del límite llevaría a una distribución normal $N(0, \sqrt{n})$ donde n es el número de cuadrados cortados por la curva dilatada, el cual es obviamente $O(R)$. Este argumento probabilístico sugiere que es muy difícil conseguir $|E(R_0)| > cR_0^\theta$ con $\theta > 1/2$ para un R_0 fijo, y en el límite resulta imposible. De nuevo la conjetura de Hardy se presenta como una frontera natural de este proceso.

En este sentido hay un antiguo resultado de D. G. Kendall [13] que se puede glosar diciendo que, una vez fijada la razón de la homotecia R_0, si lanzamos al azar la región dilatada sobre el plano, la media de los puntos de $\mathbb{Z}^2$ atrapados es AR_0^2 y la desviación típica es $\sigma < cR_0^{1/2}$, donde c sólo depende de la curva. Por otra parte, se conoce que, al igual que en el problema del círculo, el exponente $\theta = 1/2$ no puede alcanzarse, esto es,

$$\limsup_{R\to\infty} |E(R)|R^{-1/2} = \infty$$

(de nuevo, incluso todavía podría dividirse por cierto factor logarítmico [15] y el resultado seguiría siendo ∞).

El mejor resultado conseguido hasta la fecha es el mismo que el obtenido para el problema del círculo y se debe a M. N. Huxley [9], quien probó $E(R) = O(R^\theta)$ para todo $\theta > 46/73$ (bajo la hipótesis de que la curvatura sea C^1); concretamente:

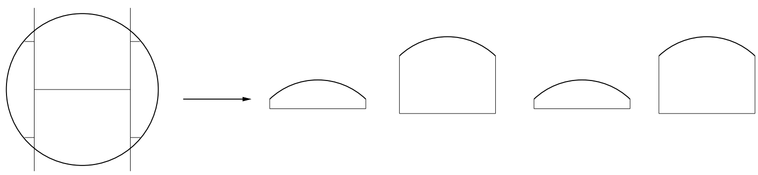
$$E(R) = O(R^{46/73}(\log R)^{315/146}).$$

A pesar de que el método empleado es muy complejo (en la cuarta sección se da una breve descripción de la idea fundamental) y está bastante optimizado, cuantitativamente sólo constituye una mejora de menos de un 6 % sobre el exponente llamado *trivial* 2/3. Lo cual da una idea de la dificultad del problema.

2.2. Puntos bajo gráficas. A base de cortar la región D con algunas rectas de la forma $x = n$, $y = m$ $(n, m \in \mathbb{Z})$ y orientar adecuadamente los trozos resultantes, se puede reducir la estimación de $E(R)$ a la de la cantidad análoga para regiones de la forma

$$D(a, b; f) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : a \le x \le b,\ 0 \le y \le f(x)\}, \quad a, b \in \mathbb{Z},$$

con la salvedad de que los puntos en las fronteras rectas cuentan sólo la mitad (porque al recomponer D cada uno pertenece a dos trozos).



Con este convenio, en cada vertical intermedia $x = c$, $a < c < b$, el número de puntos de coordenadas enteras es $[f(c)] + 1/2$ donde $[\,\cdot\,]$ indica la parte entera. Por consiguiente la contribución a $E(R)$ de la región $D(a, b, f)$ es

$$-\frac{[f(a)] + [f(b)] + 1}{2} + \sum_{n=a}^{b}\Big([f(n)] + \frac{1}{2}\Big) - \int_a^b f(t)\,dt.$$

Por construcción (recuérdese la convexidad de la curva) siempre se puede suponer que $f(x) = R\,g(x/R)$ con $0 < c_1 < -g'' < c_2$ y $|g'| < c_3$. Resultados bien conocidos sobre la aproximación de sumas por integrales (Euler-McLaurin o la regla del trapecio) implican que, salvo una magnitud acotada, la cantidad anterior coincide con

$$E(a, b; f) = -\sum_{n=a}^{b} \psi(f(n)) \qquad \text{donde } \psi(x) = x - [x] - \frac{1}{2}.$$

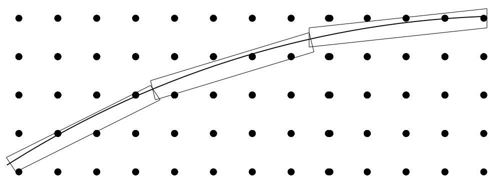
Si la gráfica de f contiene M puntos de $\mathbb{Z}^2$ entonces $E(a,b;f+\epsilon)-E(a,b;f-\epsilon)=M$ para ϵ suficientemente pequeño. De aquí surge naturalmente la condición de convexidad de la curva inicial, porque si fuera demasiado plana se podría conseguir que pasara por muchos puntos del retículo y $R^{1/2}$ no sería el límite natural. De todas formas, en este tipo de argumentos no hay que perder de vista que R puede variar. Por ejemplo, un resultado clásico de V. Jarník [12] (véase también [10, §2.2]) implica que dado un R_0 siempre es posible construir una curva con curvatura acotada y continua $c_1 \le k \le c_2$ de manera que $|E(R_0)| \ge c_3 R_0^{2/3}$ donde c_1, c_2 y c_3 son constantes absolutas. Nótese que esto no invalida que para cualquiera de estas curvas se cumpla $E(R)=O(R^\theta)$ cuando $R\to+\infty$ para algún $\theta<2/3$. Por otra parte se sabe que las gráficas suficientemente regulares no pueden contener muchos puntos del retículo (véase [2] y [17]) impidiendo generalizar la construcción de Jarník.

2.3. El exponente $2/3$ por métodos elementales. Como veremos en la tercera sección, la acotación $E(R)=O(R^{2/3})$ es inmediata (al menos para el problema del círculo) si se aplican los rudimentos del Análisis Armónico. Sin embargo también es posible obtener el exponente $2/3$, salvo un factor logarítmico extra, con argumentos geométricos elementales combinados con resultados básicos de aproximación diofántica. Hay algunos detalles en la demostración que la hacen un poco extensa para incluirla aquí en su totalidad [10, p. 33–41] pero descartando estos detalles es realmente breve.

La idea clave radica en que es fácil contar puntos bajo rectas de pendiente racional cuando el denominador de ésta es igual a la longitud del intervalo. Concretamente, para calcular $E(A,B;px/q+\beta)$ con p/q irreducible y $[A,B]$ un intervalo entero conteniendo q elementos, se puede usar la fórmula elemental

$$\sum_{n=A}^{B}\psi\Big(\frac{p}{q}n+\beta\Big)=\psi(q\beta).$$

Para estimar $E(a,b;f)$, supongamos que la gráfica de f se aproxima por tangentes de pendientes racionales cuyo denominador coincida con la longitud de la proyección (en x) de la tangente y sea comparable a $R^{1/3}$. Si es posible hacer esto en todo el intervalo $[a,b]$, por geometría elemental podemos completar estas rectas a rectángulos de altura comparable a $R^{-1/3}$ (recuérdese que $c_1/R<-f''<c_2/R$) que cubran toda la gráfica de f.



El área de cada uno de los rectángulos es $O(1)$ y por la fórmula anterior (o por un argumento geométrico sencillo) también lo es el número de puntos de $\mathbb{Z}^2$ incluidos en cada uno de ellos. Como $b-a=O(R)$, hay $O(R^{2/3})$ rectángulos y se deduce

$$E(a,b;f)=O(R^{2/3}).$$

Como f' es decreciente (en particular inyectiva) y $|f'|<c_3$, el número de valores de x tales que $f'(x)=p/q$ con $1\le q\le R^{1/3}$ es comparable a $R^{2/3}$ [7, Th. 331], si $b-a$ es como R, el espaciamiento promedio entre estos valores de x es $R^{1/3}$. Así pues, teniendo en cuenta que la mayoría de las fracciones tienen denominador grande, la construcción anterior parece en principio posible (quizá permitiendo multiplicar por una constante las longitudes de las tangentes). Sin embargo esto no es cierto del todo, ya que las fracciones con denominador pequeño están mucho más separadas del resto que el espaciamiento promedio. Por ejemplo, para $p/q\ne 0/1$, $1\le q\le R^{1/3}$, se tiene $R\,|0/1-p/q|\ge R^{2/3}$ que está muy lejos del $R^{1/3}$ esperado. Los racionales con denominador pequeño son pocos, con lo cual no parece que su contribución sea decisiva, aunque en cualquier caso aparece amplificada por el problema del espaciamiento. Teniendo en cuenta cuidadosamente estos hechos contrapuestos, lo que se obtiene es un factor logarítmico extra con respecto a lo que correspondería a la última fórmula. Por ejemplo, en [10] se obtiene con argumentos de este tipo $E(R)=O(R^{2/3}\log^{4/3}R)$.

3. Análisis Armónico del término de error

3.1. Fórmula de sumación de Poisson. Serie de Hardy. Cada punto del retículo $\nu\in\mathbb{Z}^n$ origina una función periódica: $e(\nu\cdot x)$ donde aquí y en lo sucesivo $e(t)$ es una abreviatura para $e^{2\pi i t}$. El conjunto de todas ellas constituye una base ortonormal del espacio $L^2(\mathbb{T})=L^2(\mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)=L^2(Q)$ siendo Q el cubo unidad. Toda función integrable tiene una serie de Fourier

$$f\sim\sum_{\nu}\widehat{f}(\nu)e(\nu\cdot x)$$

donde los coeficientes están calculados por medio de las fórmulas

$$\widehat{f}(\nu)=\int_Q f(x)e(-\nu\cdot x)\,dx.$$

El Análisis Armónico estudia las diversas maneras en las que la serie representa a la función.

Como ya hemos visto en la sección anterior, los problemas de puntos del retículo llevan a estimar sumas de $\psi(f(n))$ donde $\psi(t)=t-[t]-1/2$. Si $n\ne 0$ tenemos que $\int_0^1\psi(t)e(-nt)\,dt=i/(2\pi n)$, luego

$$\psi(t)\sim-\frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\operatorname{sen}(2\pi nt)}{n}=-\frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{M}\frac{\operatorname{sen}(2\pi nt)}{n}+O(M^{-1}|||\nu|||^{-1})$$

donde $|||t|||=\operatorname{dist}(t,\mathbb{Z})$.

Sustituyendo la serie de Fourier en la expresión del término de error, obtenemos una reducción del «problema del retículo» al de la estimación de sumas trigonométricas del tipo

$$\sum_n e(f(n)),$$

que abordaremos en la próxima sección.

En el caso no periódico tenemos también la transformada de Fourier

$$\mathcal{F}(f)(\xi) = \int_{\mathbb{R}^n} e(-\xi \cdot x) f(x)\,dx, \quad \xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n.$$

Dada una función integrable en $\mathbb{R}^n$ existen, por lo menos, dos procedimientos para construir una función periódica a partir de ella, a saber:

$$f_1(x) = \sum_{\nu \in \mathbb{Z}^n} f(x+\nu), \tag{1}$$

$$f_2(x) = \sum_{\nu \in \mathbb{Z}^n} \mathcal{F}(f)(\nu)\, e(\nu \cdot x). \tag{2}$$

La fórmula de sumación de Poisson consiste en la afirmación de que ambas funciones coinciden, $f_1 = f_2$. En particular, haciendo $x = 0$ (para funciones adecuadas) obtenemos la identidad

$$\sum_\nu f(\nu) = \sum_\nu \widehat{f}(\nu),$$

donde hemos hecho uso de la notación estándar $\widehat{f}(\xi) = \mathcal{F}(f)(\xi)$ para la transformada de Fourier.

En el caso particular en que $f(x)$ es la función característica del disco centrado de radio R, la suma de la izquierda es exactamente nuestra función $\mathcal{N}(R)$. En cuanto al miembro de la derecha, tenemos que

$$\begin{aligned} \widehat{f}(\xi) &= \int_{D_R(\mathbf{0})} e(-\xi \cdot x)\,dx = R^2 \int_{D_1(\mathbf{0})} e(-R\,\xi \cdot x)\,dx \\ &= R^2 \int_0^1 \int_0^{2\pi} \rho\, e(|\xi|\rho\cos\theta)\,d\theta\,d\rho = R^2 \int_0^1 \rho\, J_0(2\pi R|\xi|\rho)\,d\rho = R\frac{J_1(2\pi R|\xi|)}{2\pi|\xi|}, \end{aligned}$$

donde J_k designa la función de Bessel de orden k. Las funciones de Bessel verifican la ecuación $\frac{d}{dt}\big(t^k J_k(t)\big) = t^k J_{k-1}(t)$ y tienen el desarrollo asintótico

$$J_k(t) = \Big(\frac{2}{\pi t}\Big)^{1/2} \cos\Big(t - \frac{k\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\Big) + O(t^{-3/2}), \quad t \to +\infty.$$

Habida cuenta de que $\widehat{f}(\mathbf{0}) = \pi R^2$ obtenemos, formalmente,

$$E(R) = \frac{R^{1/2}}{\pi} \sum_{n=1}^\infty \frac{r_2(n)}{n^{3/4}} \cos\Big(2\pi R\sqrt{n} - \frac{3\pi}{4}\Big) + O(r_2(R^2)+1),$$

que es la fórmula de Hardy.

Observemos que se trata de una identidad notable, donde la serie de la derecha debe ser tratada con un cierto esmero, al no ser absolutamente convergente. No obstante, eso no representa ningún obstáculo, ya que con poco esfuerzo podemos obtener fórmulas aproximadas. Para ello tómese una función auxiliar ϕ, radial, no negativa y de clase C_0^∞ en el disco unidad, entonces su transformada de Fourier es una función radial $\varphi(r)$ que decae rápidamente, y un sencillo argumento (involucrando la convolución con ϕ) nos permite escribir:

$$E(R) = \frac{R^{1/2}}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{r_2(n)}{n^{3/4}} \cos\Big(2\pi R\sqrt{n} - \frac{3\pi}{4}\Big)\, \varphi(\delta\sqrt{n}) + O\big((\delta R + 1)R^{\epsilon}\big)$$

para todo $\epsilon > 0$, uniformemente en $\delta > 0$.

Si elegimos ahora el valor $\delta = R^{-1/3}$ obtenemos la estimación de Voronoï y Sierpiński. Haciendo uso de esta fórmula aproximada y tomando luego el límite cuando $\delta \to 0^+$, se obtiene el promedio

$$\frac{1}{R}\int_0^R |E(s)|^2 ds = cR + O(R^{\epsilon}), \qquad \text{para todo } \epsilon > 0,$$

donde

$$c = \frac{1}{8\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{r_2^2(n)}{n^{3/2}}.$$

Podemos hacer variar también el centro de las circunferencias. Dado un punto y en el cuadrado unidad, Q, consideremos el disco

$$D_R(y) = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x - y\| \leq R\}.$$

Sea $E(R; y) = \sum_{\nu} \chi_{D_R(y)}(\nu) - \pi R^2$. La fórmula de sumación de Poisson permite escribir

$$E(R; y) = \sum_{\nu \neq 0} \widehat{\chi}_{D_R(y)}(\nu) e(\nu \cdot y).$$

Por lo que

$$\int_Q |E(R; y)|^2\, dy = \sum_{\nu\neq 0} |\widehat{\chi}_{D_R(y)}(\nu)|^2 = \frac{R}{\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{r_2(n)}{n^{3/2}} \cos^2\Big(2\pi R\sqrt{n} - \frac{3\pi}{4}\Big) + O(1).$$

Es decir: Si lanzamos «al azar» un disco de radio R en el plano y contamos cuántos puntos del retículo captura dentro, resulta que el valor esperado es πR^2, con una desviación típica $O(R^{1/2})$.

3.2. Regularización. (Principio de Incertidumbre). El análisis anterior aparenta la necesidad de un proceso delicado de truncación de la serie obtenida cuando aplicamos la fórmula de sumación de Poisson. También parece descansar sobre las propiedades analíticas de las funciones de Bessel. Ello es debido al empecinamiento en usar la función indicadora del círculo, que es discontinua y cuya transformada de Fourier no decae con rapidez suficiente. Sin embargo, como hemos visto, con la ayuda de los procesos de regularización (y el principio de incertidumbre para la transformación de Fourier), podremos hacer el mismo cálculo de forma mucho más sencilla y maleable. Válida incluso para el caso de dominios convexos más generales.

Diremos que la función diferenciable ϕ está adaptada al intervalo $I \subset \mathbb{R}$ si se verifica que

$$\operatorname{sop}(\phi) \subset I, \qquad \|D^j\phi\|_\infty \leq C_j|I|^{-j}, \quad j = 0, 1, 2, 3, \ldots,$$

siendo $|I|$ la longitud del intervalo y las C_j constantes positivas fijadas de antemano.

En este caso la transformada de Fourier verifica la estimación

$$|\widehat{\phi}(\xi)| \ll \sum_{k=0}^{\infty} 2^{-kj} |I_k^*|^{-1} \chi_{I_k^*}(\xi),$$

donde $I_k^* = [-2^k/|I|, 2^k/|I|]$ y $\ll$ es otra forma de indicar la notación O de Landau, esto es, significa *menor salvo constantes* (que en este caso dependen de j y de C_j).

En el plano tenemos funciones adaptadas a rectángulos T que pueden poseer dimensiones y direcciones arbitrarias. Si θ_1 y $\theta_2 = \theta_1^{\perp}$ son las direcciones de los lados de T cuyas longitudes respectivas son d_1 y d_2, entonces ϕ está adaptada a T cuando

$$\mathrm{sop}(\phi) \subset T, \quad \text{ y } \quad \|D_{\theta_1}^{\alpha} D_{\theta_2}^{\beta} \phi\|_\infty \leq C_{\alpha\beta} d_1^{-\alpha} d_2^{-\beta},$$

donde las constantes positivas, $C_{\alpha\beta}$, han sido fijadas previamente.

Cuando T sea paralelo a los ejes de coordenadas, con longitudes respectivas d_1 y d_2, el rectángulo T_k^* es igual a $[-2^k/d_1, 2^k/d_1] \times [-2^k/d_2, 2^k/d_2]$. Dado que la transformada de Fourier conmuta con las rotaciones del espacio subyacente, el caso anterior nos permite obtener la noción de T_k^*, cualquiera que sean las direcciones de T, que hace válida la siguiente estimación:

$$|\widehat{\phi}(\xi)| \ll \sum_{k=0}^{\infty} 2^{-kj} |T_k^*|^{-1} \chi_{T_k^*}(\xi)$$

donde $|T_k^*|$ designa ahora el área.

Existen diversos procedimientos para obtener una familia de funciones $\{\phi_k\}$, de clase C^∞, de manera que:

(i) ϕ_k está adaptada a $(1-2^{-k}, 1-2^{-k-1})$, $k = 1, 2, \ldots$

(ii) $\sum \phi_k(\rho) \equiv 1$ en $[3/4, 1)$.

Sea $\phi_0(\rho) = 1 - \sum_{k=1}^{\infty} \phi_k(\rho)$, $0 \leq \rho \leq 1$. Consideraremos las funciones radiales en $\mathbb{R}^2$ definidas por $\varphi_k(x) = \phi_k(|x|)$. Tenemos que

$$\chi_{D_R(\mathbf{0})}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_k(x/R),$$

que da lugar a la familia de aproximaciones

$$\sum_{\nu} \chi_{D_R(\mathbf{0})}(\nu) = \sum_{\nu} \sum_{k=0}^{M} \varphi_k(\nu/R) + O\big((2^{-M}R^2 + 1)R^{\epsilon}\big)$$

para todo entero positivo M y todo $\epsilon > 0$.

El análisis del término de error nos lleva, de nuevo a través de la fórmula de sumación de Poisson, a considerar el siguiente tipo de sumas:

$$E(R) = \sum_{k=0}^{M} R^2 \sum_{\nu \neq 0} \widehat{\varphi}_k(R\nu) + O\big((2^{-M}R^2 + 1)R^{\epsilon}\big).$$

Los primeros términos de la suma se estiman fácilmente debido al decaimiento de la transformación de Fourier y contribuyen con $O(1)$. Cuando k crece, sin embargo, se presenta el siguiente problema tipo: dado $\delta > 0$ (pequeño) y una función φ adaptada a $(1-\delta, 1)$, definiendo $\varphi(x) = \phi(|x|)$, se trata de estimar $\sum_{\nu\neq 0} \widehat{\varphi}(R\nu)$.

La geometría sugiere que tomemos una partición diferenciable de la circunferencia unidad (partición en ángulos) de manera que $\phi_j(\theta)$ esté adaptada al intervalo $\big(2\pi(j-1)\delta^{1/2}, 2\pi(j+1)\delta^{1/2}\big)$ y $\sum \phi_j(\theta) \equiv 1$ en $[0, 2\pi]$. Sea $\varphi_j(\rho e^{i\theta}) = \phi_j(\theta)\phi(\rho)$. Entonces φ_j está adaptada a un rectángulo T^j, cuyo lado menor, de longitud $\sim \delta$, tiene la dirección del ángulo $2\pi j\delta^{1/2}$ y cuyo lado mayor, de longitud $\sim \delta^{1/2}$, tiene la dirección de la tangente a la circunferencia en $e^{2\pi i j\delta^{1/2}}$.

Tenemos que

$$\begin{aligned}\Big|\sum_{\nu\neq 0}\widehat{\varphi}(R\nu)\Big| &\ll \sum_{\nu\neq 0}\sum_j |\widehat{\varphi}_j(R\nu)| \ll \sum_{k=0}^{\infty} 2^{-kl} \sum_{1\leq\|\nu\|}\sum_j |T_k^{j*}|^{-1}\chi_{T_k^{j*}}(R\nu)\\ &= \sum_{k=0}^{\infty} 2^{-kl}\delta^{3/2}2^{-2k} \sum_{1\leq\|\nu\|}\sum_j \chi_{T_k^{j*}}(R\nu) \ll \delta^{-1/2}R^{-2}.\end{aligned}$$

Unas sencillas consideraciones geométricas demuestran la estimación

$$\sum_j \chi_{T_k^{j*}}(R\nu) \ll \frac{2^k\delta^{-1}}{R\|\nu\|} \qquad \text{y} \qquad \sum_{1\leq\|\nu\|\leq 2^k\delta^{-1}/R} \frac{2^k\delta^{-1}}{R\|\nu\|} \ll \frac{2^{2k}\delta^{-2}}{R^2}.$$

Volviendo a $E(R)$ hemos obtenido que

$$\begin{aligned}E(R) &\ll \sum_{k=0}^{M} 2^{k/2} + O\big((2^{-M}R^2+1)R^{\epsilon}\big)\\ &\ll 2^{M/2} + O\big((2^{-M}R^2+1)R^{\epsilon}\big).\end{aligned}$$

Tomando $2^M = R^{4/3}$ obtenemos de nuevo la estimación de Sierpiński y Voronoï. (Con un poco de cuidado podríamos haber eliminado el término R^{ϵ}.)

4. Sumas trigonométricas

4.1. Los pares de exponentes de van der Corput. Según hemos visto, la estimación del error en el problema del círculo o sus generalizaciones lleva a expresiones que involucran sumas trigonométricas. Esta situación es recurrente en Teoría de Números. Por recordar sólo dos ejemplos, se puede señalar que una estimación no trivial para $\sum_{n\leq N} e(\alpha n^2)$ implica que la parte fraccionaria de αn^2 está equidistribuida si α es irracional [18], o un estudio cuidadoso de $\sum_{p\leq N} e(px)$, donde p recorre los primos, es crucial para demostrar que todo número impar suficientemente grande es suma de tres primos.

Establecer un método general para tratar las sumas trigonométricas es un objetivo demasiado ambicioso, pero la teoría de pares de exponentes de van der Corput (escrita en su forma actual por E. Phillips [16]) permite obtener estimaciones cuando las fases satisfacen ciertas propiedades analíticas.

Comencemos notando que quizá dividiendo en intervalos diádicos se puede suponer que los extremos del intervalo de sumación son de tamaño comparable, esto es, consideraremos sumas trigonométricas del tipo

$$S = \sum_{n \asymp N} e(f(n)),$$

donde $n \asymp N$ abrevia $N \ll n \ll N$; o sea, $n \asymp N$ equivale a $c_1 N \le n \le c_2 N$ con $c_1, c_2 > 0$. Si tenemos en mente el caso $f(n) = Ng(n/N)$ que corresponde a dilatar una gráfica y suponemos que las derivadas de g no se anulan, se llega a las hipótesis de la teoría de pares de exponentes:

$$|f^{(k)}| \asymp DN^{1-k}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, \qquad D \gg 1.$$

Nótese que D es el tamaño de la derivada. La condición $D \gg 1$ es meramente técnica, ya que si D fuera muy pequeño podríamos aproximar muy bien las fases por funciones lineales y se tendría una estimación precisa, típicamente una fórmula asintótica.

Los «enemigos» para estimar S son la longitud del intervalo y la oscilación, por ello esperamos acotaciones del tipo

$$|S| \ll D^\alpha N^\beta.$$

Si esta acotación tiene validez general con las hipótesis antes señaladas, se dice que (α, β) es un *par de exponentes*. Con este lenguaje la acotación trivial corresponde a $(0, 1)$.

El método de pares de exponentes de van der Corput establece fórmulas inductivas que permiten generar nuevos pares de exponentes, y están contenidas en los siguientes resultados:

Proceso A. Si (α, β) es un par de exponentes entonces

$$A(\alpha, \beta) = \Big(\frac{\alpha}{2\alpha + 2}, \frac{\alpha + \beta + 1}{2\alpha + 2} \Big)$$

también lo es.

Proceso B. Si (α, β) es un par de exponentes entonces

$$B(\alpha, \beta) = \Big(\beta - \frac{1}{2}, \alpha + \frac{1}{2} \Big)$$

también lo es.

Nótese que geométricamente A atrae (α, β) hacia $(0, 1)$ de forma no lineal y B es la simetría que intercambia $(0, 1)$ y $(1/2, 1/2)$.

A veces se añade a estos dos procesos un tercero, llamado Proceso C, que no es otra cosa que la observación trivial de que el conjunto de pares de exponentes es convexo; es decir, que si (α_1, β_1) y (α_2, β_2) pertenecen a él, entonces $(t\alpha_1 + (1 - t)\alpha_2, t\beta_1 + (1 - t)\beta_2)$ con $0 \le t \le 1$ también.

Los pares de exponentes de van der Corput se obtienen aplicando de todas las formas posibles los procesos anteriores al par trivial $(0, 1)$. Por ejemplo,

$$B(0, 1) = \Big(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \Big), \quad AB(0, 1) = \Big(\frac{1}{6}, \frac{2}{3} \Big), \quad BA^2B(0, 1) = \Big(\frac{2}{7}, \frac{4}{7} \Big),$$

son pares de exponentes de van der Corput. En la actualidad se conoce algún par de exponentes que no se obtiene por estos procesos a partir del trivial $(0, 1)$ (en realidad el método clásico de Vinogradov ya consigue este objetivo en el caso límite $\alpha \to 0$).

Veamos a grandes rasgos la idea de la demostración de estos dos procesos.

El Proceso A fue introducido por H. Weyl [18] en su estudio de la equidistribución de las partes fraccionarias de polinomios, y en este contexto era una idea simple pero ingeniosa para reducir el grado, En primer lugar, nótese que para cualquier H, digamos pequeño en comparación con N, en la suma doble

$$\sum_{n\asymp N}\sum_{h\le H} e(f(n+h))$$

cada término de S aparece esencialmente H veces (en rigor hay un pequeño problema técnico con los términos cercanos a la frontera, que obviaremos aquí, estableciendo cierta relación entre los límites de sumación de n y h). Por tanto, la desigualdad de Cauchy-Schwarz implica

$$\begin{aligned} H^2|S|^2 &\ll N\sum_{n\asymp N}\Big|\sum_{h\le H} e(f(n+h))\Big|^2 \\ &\ll N\sum_{h_1,h_2\le H}\Big|\sum_{n\asymp N} e(f(n+h_1)-f(n+h_2))\Big|. \end{aligned}$$

La nueva suma trigonométrica que debemos tratar tiene ahora una oscilación, previsiblemente menor, que podemos controlar con H. Es decir, dominamos al «enemigo» de la oscilación a costa de permitir que aparezcan varias sumas trigonométricas, lo que en principio parece favorecer al «enemigo» de la longitud del intervalo de sumación.

El término diagonal $h_1 = h_2$ contribuye con N^2H mientras que si $h_1 \neq h_2$ podemos usar el par de exponentes (α,β) con la nueva cota para la derivada $\widetilde{D} \asymp |h_1-h_2|DN^{-1}$. En total se obtiene

$$H^2|S|^2 \ll N^2H + NH^2(HDN^{-1})^\alpha N^\beta.$$

Con la elección óptima $H^{\alpha+1} = D^{-\alpha}N^{1+\alpha-\beta}$ se sigue

$$|S| \ll D^{\alpha/(2\alpha+2)}N^{(\alpha+\beta+1)/(2\alpha+2)},$$

que es la estimación deseada.

Olvidándose de los detalles técnicos (que no son triviales), el Proceso B se reduce a la fórmula de sumación de Poisson. Al aplicarla formalmente (sin considerar los problemas de convergencia) pasaríamos a una suma de integrales del tipo

$$I_n = \int e(f(x)-nx)\,dx.$$

Estas integrales tendrán una contribución relevante sólo si $e(nx)$ y $e(f(x))$ oscilan dentro del mismo rango de frecuencias (y así hay interferencia), es decir, $n \asymp f'$. En este caso, el principio de fase estacionaria sugiere que

$$I_n \sim e^{\pm i\pi/4}\frac{e(g(n))}{\sqrt{|f''(x_n)|}}$$

donde x_n cumple $f'(x_n) = n$ y $g(n) = f'(x_n) - nx_n$. Por consiguiente, sumando por partes (nótese que $|f''(x)| \asymp DN^{-1}$) y suprimiendo términos de orden inferior cabe esperar

$$|S| \ll D^{-1/2}N^{1/2}\Big|\sum_{n\asymp D} e(g(n))\Big|$$

donde, como es fácil comprobar derivando implícitamente, $|g'| \asymp N$. Así que aplicando el par de exponentes (α, β) a la última suma, se tiene

$$|S| \ll D^{\beta-1/2}N^{\alpha+1/2},$$

como queríamos demostrar.

En el caso del problema del círculo, para estar en las hipótesis de la teoría de pares de exponentes, lo mejor es utilizar la fórmula $r_2(m) = 4(d_1(m) - d_3(m))$, donde $d_j(m)$ es el número de divisores de m que son congruentes con j módulo 4. Contar puntos en circunferencias se traduce entonces en contar ciertos puntos en hipérbolas del tipo $xy = m$. De esta forma, el Análisis Armónico traduce la acotación del término de error en la estimación de sumas de la forma

$$\sum_{h\asymp H}\sum_{n\asymp N} e\Big(h\frac{R^2}{n}\Big).$$

Completando este programa [6, §4.4], se llega a que si (α, β) es un par de exponentes entonces el error en el problema del círculo es

$$\#\{(n,m) \in \mathbb{Z}^2 : n^2 + m^2 \le R^2\} - \pi R^2 = O\big(R^{(\alpha+\beta)/(\alpha+1)}\big).$$

A pesar del refinamiento del método, se puede probar [6] que por mucho que apliquemos los procesos A y B (y C), a partir de $(0,1)$, tan solo puede alcanzarse el exponente $0'65804271\dots$ que está desalentadoramente muy próximo a $2/3$.

4.2. Métodos bidimensionales. Como hemos visto al estudiar los problemas de puntos del retículo, aparecen de forma natural sumas trigonométricas en dos variables. Además la demostración del Proceso A nos indica que se puede transformar una suma unidimensional en otra bidimensional. En cualquier caso, siempre podemos estudiar sumas trigonométricas dobles despreciando la cancelación en una de las variables y tratando la suma en la otra variable. La pregunta lógica es si no se podría generalizar el método antes introducido para que opere genuinamente en las dos variables simultáneamente. La respuesta es que en teoría sí y se conjetura que la cancelación se duplica [6, p. 72–73], pero incluso en los casos más sencillos no se verifican las hipótesis que se necesitan en las pruebas. La razón es que la condición natural

$$\Big|\frac{\partial^{j+k} f}{\partial x^j \partial y^k}\Big| \asymp \mathcal{D}N^{-j}M^{-k}, \quad j,k = 1,2,3,\dots$$

no es suficiente en este caso, porque no asegura que los Hessianos que aparecen al aplicar el método de fase estacionaria no se anulen. De todos formas algunos autores (especialmente G. Kolesnik [14]) han conseguido superar con gran esfuerzo estas dificultades en algunos ejemplos particulares.

4.3. El método de Hardy-Littlewood discreto. La demostración de Huxley [9] del mejor resultado para los problemas de puntos del retículo está basada en los trabajos anteriores [1] y [11]. Como tiene reminiscencias con el método del círculo clásico (también llamado de Hardy-Littlewood) sustituyendo algunas integrales por sumas, se ha dado en llamarlo método de Hardy-Littlewood discreto. Aunque es un proceso bastante complejo, podemos resumir la idea subyacente en unas líneas:

Imaginemos, por ejemplo, la circunferencia aproximada por tangentes. Alrededor de los puntos en los que la pendiente sea un número racional de denominador pequeño podemos contar con bastante precisión los puntos del retículo. Esto se refleja en que la suma trigonométrica correspondiente se puede no sólo estimar, sino aproximar muy bien gracias a la fórmula de sumación de Poisson y el principio de fase estacionaria. Sin embargo con ello sólo se cubre una pequeña porción de la circunferencia (recuérdese lo visto en la segunda sección acerca del espaciamiento cuando el denominador es pequeño) y hay una multitud de sumas trigonométricas que no sabemos controlar individualmente. La idea clave es que, después de tratar estas sumas y agruparlas adecuadamente, si no hay «resonancias» entre las frecuencias no todas las sumas pueden ser grandes simultáneamente. El resultado básico en este sentido es la llamada *desigualdad de gran criba*:

$$\sum_{x_j} \Big| \sum_{n\le N} a_n e(nx_j) \Big|^2 \le (N+\delta^{-1}) \sum_{n\le N} |a_n|^2,$$

donde $\delta = \min |x_j - x_k|$ con $j \ne k$ y $x_j \in [0, 1-\delta]$. Cualesquiera que sean los coeficientes $a_n \in \mathbb{C}$, mientras las frecuencias sean bien diferentes (no haya «resonancias»), δ^{-1} tendrá un tamaño aceptable. En el caso de los problemas de puntos del retículo la desigualdad que se necesita [1, Lemma 2.4] es más compleja y versátil pero guarda la misma idea. Una de las mayores dificultades que se plantean tras su aplicación es que el estudio del espaciamiento no es en absoluto sencillo y lleva a problemas diofánticos bastante finos.

5. Algunas aplicaciones

5.1. El promedio del número de clases. El número de clases de $\mathbb{Z}[\sqrt{d}]$, $h(d)$, mide, en un sentido que no precisaremos aquí, lo lejos que está este anillo de tener factorización única, y tiene una importancia capital en muchos problemas aritméticos. Por ejemplo, $h(-1) = 1$ implica que dados dos primos impares distintos p y q, $x^2 + y^2 = pq$ tiene solución en enteros si y sólo si $x^2 + y^2 = p$ y $x^2 + y^2 = q$ la tienen. Por otra parte, $h(-5) = 2$ implica que, al cambiar $x^2 + y^2$ por $x^2 + 5y^2$, el resultado anterior sólo se cumple para la mitad de los primos. Hay primos como 7 y 23 que son «defectuosos» porque $x^2 + 5y^2 \ne 7, 23$ y sin embargo $9^2 + 5 \cdot 4^2 = 7 \cdot 23$. De alguna forma, $1/h(d)$ es la proporción de primos «no defectuosos» cuando se considera $x^2 - dy^2$ en lugar de $x^2 + y^2$.

El número de clases tiene un comportamiento muy caótico y desconocido, por ejemplo, un resultado tan débil como que $\lim_{n\to+\infty} h(-n) = \infty$ fue un problema abierto durante más de 130 años. El origen de este problema, y otros similares, está en la obra de Gauss quien introdujo el número de clases en 1801 y dio una aproximación para su promedio. La relación con los problemas de puntos del retículo viene a través de la fórmula

$$\#\{(a,b,c)\in\mathbb{Z}^3 : 4ac-b^2=n,\ -a<b\le a<c \text{ ó } 0\le b\le a=c\} = \sum_{k^2|n} h(-n/k^2).$$

Así que el número de clases está relacionado con el número de puntos del retículo en cierta porción de un hiperboloide. Curiosamente se puede hacer lo mismo con una superficie esférica para muchos valores de n. A través de esta relación con los puntos del retículo, mediante métodos avanzados se puede dar una forma precisa de la aproximación de Gauss. Concretamente de [4] y [8] se deduce que, para todo $\epsilon>0$,

$$\frac{1}{N}\sum_{n\le N} h(-n) = \frac{\pi}{18\zeta(3)}N^{1/2} - \frac{3}{2\pi^2} + O(N^{-11/32+\epsilon}).$$

En particular, en media, $h(-n)$ crece como $\sqrt{n}$.

5.2. Problemas aleatorios. Uno de los hitos de la Física actual es la formulación de R. P. Feynmann de la Mecánica Cuántica por medio de integrales sobre todos los caminos. Según esta interpretación, si un haz de luz parte de P se refleja en un espejo y llega a Q, lo que ocurre no es que los fotones sigan trayectorias rectilíneas y verifiquen mágicamente que el ángulo de incidencia y el de reflexión sean iguales, sino que los fotones siguen *todas* las trayectorias y la probabilidad de ir de P a Q depende del valor de

$$\int_P^Q e^{iS/\hbar}\,\mathcal{D}\mu,$$

donde S es la acción y $\mathcal{D}\mu$ es una medida sobre el espacio de todos los caminos que unen P y Q. Si creemos que el principio de fase estacionaria es aplicable en este contexto ($\hbar$ es pequeño), deduciremos que la trayectoria más probable es la de acción estacionaria, esto es, la clásica.

La filosofía subyacente también encuentra su reflejo en varios aspectos de la Ciencia: quizá no debamos buscar modelos plenamente deterministas que den resultados precisos a partir de datos precisos, sino que más bien muchos fenómenos responden a comportamientos cualitativos y leyes de escala obtenidos al promediar sobre todos los *escenarios* posibles.

Con esta idea en mente tiene sentido formular problemas de puntos del retículo para curvas aleatorias y de hecho Ya. G. Sinai ha estudiado algunos de ellos en relación con la Física. En nuestro contexto y guardando la analogía con las integrales de Feynman podemos considerar todos los arcos convexos uniendo $(0,0)$ y $(N,0)$ cuya curvatura sea comparable a $1/N$. Como la curvatura coincide con la derivada segunda tras un giro de ejes, podemos pensar que estos arcos son gráficas con $c_2/N\le -f''\le c_1/N$. Si las identificamos con sus valores en los enteros, $y_i=f(i)$, una medida natural en este espacio es

$$d\mu_N(f) = K_N\prod_{i=1}^{N-1}\phi\Big(-\frac{x_{i+1}-2x_i+x_{i-1}}{2}N\Big),$$

con ϕ soportada en $[c_1, c_2]$, y K_N se escoge de forma que $\int d\mu_N(f) = 1$. Utilizando esta medida, en [3] se prueba que la conjetura de Hardy de que el error está acotado por $O(N^\theta)$ para todo $\theta > 1/2$ es cierta para casi todo arco.

5.3. Átomos. En la formulación de Born-Oppenheimer se considera que un átomo consta de un núcleo de carga Z, que supondremos en el origen, y de Z electrones cuantizados. Para simplificar la presentación, aunque sin alterar el alcance de nuestro punto de vista, consideraremos que la masa y la carga del electrón son iguales a uno, así como también la constante de Planck; si además prescindimos del *spin*, entonces el hamiltoniano es el siguiente:

$$H_Z = -\sum_{i=1}^{Z} \left(\Delta_{x_i} + \frac{Z}{\|x_i\|} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{\|x_i - x_j\|},$$

que es un operador que actúa sobre el espacio $\mathcal{H}$ de funciones de onda antisimétricas.

El estado fundamental está descrito por una función Ψ_0 que minimiza la energía:

$$E(Z) = \inf_{\|\Psi\|_2 = 1,\ \Psi \in \mathcal{H}} \langle H_Z \Psi, \Psi \rangle.$$

La función de onda da lugar a la densidad electrónica

$$\rho(x) = \int_{\mathbb{R}^{3(Z-1)}} |\Psi(x, x_2, \dots, x_Z)|^2 \, dx_2 \dots dx_Z$$

cuya interpretación (de Copenhague) es que la probabilidad de encontrar un electrón del sistema en una región A del espacio $\mathbb{R}^3$ es igual a $\int_A \rho(x)\, dx$.

Tenemos el siguiente:

Teorema. *Para $Z \to +\infty$ se cumple la fórmula asintótica*

$$E(Z) = C_{TF} Z^{7/3} + C_{Sc} Z^2 + C_{SD} Z^{5/3} + \dots$$

El primer término fue conjeturado por Fermi (1927) y demostrado por Lieb y Simon (1977). El segundo, respectivamente por Scott (1952) y por Hughes (1990); y el tercero fue previsto por Schwinger y Dirac y finalmente demostrado por Fefferman y Seco (1991).

La prueba es bastante laboriosa; sin embargo resulta interesante resaltar que en [5] se observa que el término siguiente en el desarrollo asintótico de $E(Z)$ no es de la forma $C\, Z^{4/3}$, sino que es una suma trigonométrica similar a la que aparece en el problema del círculo:

$$\psi(Z) = \sum_{k=1}^{\lambda} f(k)\, \mu\big(\lambda \phi(k/\lambda)\big)$$

donde $\lambda = Z^{1/3}$ y $\mu(x) = \operatorname{dist}(x, \mathbb{Z}))^2 - 1/12$. La amplitud f y la fase ϕ involucran al potencial de Thomas-Fermi, pero son apropiadas en el sentido de que f es «monótona» y ϕ es convexa. El método de van der Corput permite entonces demostrar lo siguiente:

Teorema.

$$(a) \qquad |\psi(Z)| \leq CZ^{3/2}.$$

$$(b) \qquad \limsup_{Z\to\infty} |Z^{-3/2}\psi(Z)| \neq 0.$$

(c) ψ *oscila «cuasiperiódicamente».*

Básicamente existen dos estrategias para estimar $E(Z)$: la de Hartree-Fock y la de Thomas-Fermi. La primera es idónea para el caso de pocos electrones, mientras que la de Thomas-Fermi es una aproximación estadística que debe mejorar para números atómicos grandes. En las demostraciones de los teoremas anteriormente citados se combinan ambos puntos de vista.

Consideremos el hamiltoniano

$$H_0 = \sum_i (-\Delta_{x_i} + V(x_i)),$$

donde V es el potencial que actúa sobre un solo electrón y que en principio desconocemos. Si supiéramos la densidad electrónica ρ, un buen candidato para V sería

$$V(x) = -\frac{Z}{\|x\|} + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(y)}{\|x-y\|}\, dy.$$

Supongamos por un momento que tenemos ρ, El método de separación de variables permite obtener el estado fundamental de H_0:

$$\Psi_{hf}(x_1,\dots,x_Z) = C\sum_\sigma (-1)^{\mathrm{sgn}(\sigma)} \varphi_1(x_{\sigma(1)})\cdots\varphi_Z(x_{\sigma(Z)}),$$

donde $\{\varphi_1,\dots,\varphi_Z\}$ son las primeras autofunciones del operador de una sola variable tridimensional $-\Delta_x + V(x)$, C es una constante de normalización, y el sumatorio está extendido sobre todas las permutaciones de Z elementos.

La energía (de Hartree-Fock) es entonces $E_{hf}(Z) = \langle H\Psi_{hf}, \Psi_{hf}\rangle$. La densidad electrónica debe verificar una ecuación de autoconsistencia:

$$\rho_{hf}(x) = \int |\Psi_{hf}(x,x_2,\dots,x_Z)|^2\, dx_2\dots dx_Z = \sum_{k=1}^{Z} |\varphi_k(x)|^2 = \rho(x).$$

La ecuación $\rho_{hf} = \rho$ se resuelve por iteración, pero hay que tener cuidado en hacer una buena elección de la densidad de partida.

En este empeño resulta útil la teoría de Thomas-Fermi. En ella, la energía asociada a ρ viene dada por la expresión

$$\mathcal{E}_{TF}(\rho) = C_{TF}\int_{\mathbb{R}^3} \rho^{5/3}(x)\, dx + \frac{1}{2}\iint \frac{\rho(x)\rho(y)}{\|x-y\|}\, dx\, dy - Z\int \frac{\rho(x)}{\|x\|}\, dx,$$

donde los dos últimos sumandos representan la energía potencial electrostática, mientras que el primero describe la energía cinética (lo que puede ser justificado mediante un argumento que involucra contar puntos del retículo dentro de una esfera).

Surge, por tanto, el problema de calcular

$$\min\Big\{\mathcal{E}_{TF}(\rho) : \int \rho(x)\, dx = Z\Big\},$$

que puede tratarse por los métodos del Cálculo de Variaciones, obteniéndose la densidad electrónica que corresponde al potencial de Thomas-Fermi $V_{TF}^Z(x)$. Estamos entonces en condiciones de escribir la fórmula del término $\psi(Z)$:

$$\sum_{l=1}^{l_{TF}} \frac{2l+1}{\frac{1}{\pi}\int \left[V_{TF}^Z(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]_+^{-1/2} dr}\,\mu\bigg(\int \left[V_{TF}^Z(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]_+^{-1/2} dr\bigg).$$

Como hemos indicado anteriormente, con un poco de trabajo es posible preparar la suma $\psi(Z)$ de manera que el método de van der Corput (fórmula de sumación de Poisson más fase estacionaria) nos dé la estimación del teorema. La mayor regularidad de $\mu(x)$ respecto a la función parte fraccionaria hace que esta suma sea más fácil de estimar que la correspondiente al problema del círculo. No obstante, resultan dignos de ser reseñados tanto el parecido analítico del estos problemas como el carácter oscilatorio del término ψ, comparado con la periodicidad de las propiedades químicas de los átomos. Son un testimonio fehaciente de la relación entre la Teoría de los Números y la Mecánica Cuántica.

Referencias

[1] E. Bombieri y H. Iwaniec, On the order of $\zeta(\frac{1}{2}+it)$, *Ann. Sc. Nor. Sup. Pisa (4)* **13** (1986), 449–472.

[2] E. Bombieri y J. Pila, The number of integrals points on arcs and ovals, *Duke Math. J.* **59** (1989), 337–357.

[3] F. Chamizo y A. Córdoba, A path integral approach to lattice point problems, prepublicación (2000).

[4] F. Chamizo y H. Iwaniec, On the Gauss mean-value formula for class number, *Nagoya Math. J.* **151** (1998), 199–208.

[5] A. Córdoba, C. Fefferman y L. A. Seco, Weyl sums and atomic energy oscillations, *Rev. Mat. Iberoamericana* **11** (1995), 165–226.

[6] S. W. Graham y G. Kolesnik, *Van der Corput's method of exponential sums*, London Math. Society Lecture Note Series **126**, Cambridge University Press, 1991.

[7] G. H. Hardy y E. M. Wright, *An introduction to the theory of numbers*, 5.ª edición, Oxford University Press, 1983.

[8] D. R. Heath-Brown, Lattice points in the sphere, en *Number theory in progress, Vol. 2* (Zakopane-Kościelisko, 1997), de Gruyter, Berlín (1999), 883–892.

[9] M. N. Huxley, Exponential sums and lattice points II, *Proc. London Math. Soc. (3)* **66** (1993), 279–301.

[10] M. N. Huxley, *Area, lattice points, and exponential sums*, Clarendon Press, Oxford, 1996.

[11] H. Iwaniec y C. J. Mozzochi, On the divisor and circle problems, *J. Number Theory* **29** (1988), 60–93.

[12] V. Jarník, Über die Gitterpunkte auf konvexen Kurven, *Math. Zeitschrift* **24** (1925), 500–518.

[13] D. G. Kendall, On the number of lattice points inside a random oval, *Quart. J. Math. Oxford* **19** (1948), 1–26.

[14] G. Kolesnik, On the method of exponent pairs, *Acta Arith.* **45** (1985), 115–143.

[15] W. G. Nowak, On the lattice rest of a convex body in $\mathbb{R}^s$, *Arch. Math.* **45** (1985), 284–288.

[16] E. Phillips, The zeta-function of Riemann; further developments of van der Corput's method, *Quart. J. Math.* **4** (1933), 209–225.

[17] H. P. F. Swinnerton-Dyer, The number of lattice points on a convex curve, *J. Number Theory* **6** (1974), 128–135.

[18] H. Weyl, Über die Gleichverteilung von Zahlen mod. Eins, *Math. Ann.* **77** (1916), 313–352.

Departamento de Matemáticas, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid
Correo electrónico: `fernando.chamizo@uam.es, antonio.cordoba@uam.es`