

EXTENSIÓN DEL ESQUEMA DE INTEGRADORES SIMPLÉCTICOS EN EL MÉTODO PSEUDO-ESPECTRAL

Diego Sanjinés C.¹

Carrera de Física, U.M.S.A.

RESUMEN

Se presenta una generalización del esquema de operadores simplécticos en el método pseudo-espectral. Ya en trabajos anteriores [1], se utilizó la aproximación de segundo orden de este esquema y con ello se verificó analíticamente el fenómeno físico de la oscilación de Bloch. Surge entonces la cuestión de saber si este fenómeno es “sensible” al orden del integrador simpléctico elegido para simular numéricamente la dinámica de un electrón cristalino de enlace fuerte en un campo eléctrico estático y homogéneo. El resultado de este trabajo muestra que el periodo de la oscilación de Bloch, y probablemente todos los aspectos físicos relevantes de dicha dinámica, no dependen del orden del integrador.

1. INTRODUCCIÓN

El problema de representar la dinámica de un electrón en presencia de un campo eléctrico externo estático corresponde —como es sabido [2]— al cálculo de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ como solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, junto con las variables dinámicas que dependen de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ como ser los valores medios de posición, velocidad y ancho del paquete de ondas electrónico. La expresión formal de dicha solución es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iH(t-t_0)} \Psi(\mathbf{r}, t_0) \quad (1)$$

donde $H = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r})$ es el hamiltoniano independiente del tiempo. Ya que los operadores de energía cinética $T(\mathbf{p})$ y energía potencial $V(\mathbf{r})$ en general no conmutan, el desarrollo del operador de evolución temporal $\exp(-iH(t-t_0))$ en (1) tendrá un resultado no-trivial al actuar sobre un estado inicial $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$, que —para el caso de un típico electrón cristalino— se puede tomar como un paquete gaussiano definido en una red. Las unidades físicas que se usará en este trabajo son aquellas denominadas “atómicas” (ver, por ejemplo, Yoshida [3]) donde $\hbar = 1$, M (masa del electrón) = 1, e (carga del electrón) = 1 y a (constante de red) = 1.

Así, en la mayoría de los esquemas numéricos para simular la dinámica de un electrón cristalino [4], se busca separar el operador de evolución en (1) de forma aproximada, de manera tal que para $t = t_1$ y $t_1 - t_0 = \Delta t$, la aplicación iterativa de (1) permita obtener el estado $\Psi(\mathbf{r}, t)$ para un instante arbitrario $t = N\Delta t$ hasta un orden de aproximación $O(\Delta t^{n+1})$, donde n es un entero positivo. El esquema formal que permite dicha separación es el esquema de integradores simplécticos para sistemas hamiltonianos [3], y se puede describir como:

Para los operadores no-conmutativos T y V , el número real pequeño Δt y el entero positivo n (denominado *orden del integrador*, existen dos conjuntos de números reales $\{c_1, c_2, \dots, c_k\}$ y $\{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ tales que se cumple

$$e^{-i(V+T)\Delta t} = \prod_{m=1}^k e^{-ic_m V \Delta t} e^{-id_m T \Delta t} + O(\Delta t^{n+1}), \quad (2)$$

donde

$$\sum_{m=1}^k c_m = \sum_{m=1}^k d_m = 1. \quad (3)$$

Una condición física que debe cumplir el esquema descrito por (2) es la reversibilidad temporal, esto es,

$$e^{-iH\Delta t} e^{-iH(-\Delta t)} = e^{-iH(-\Delta t)} e^{-iH\Delta t} = 1, \quad (4)$$

lo que restringe el esquema en cuestión a integradores simplécticos de orden par [3]; sin embargo, el caso de $n = 3$ se considerará más adelante solamente para efectos ilustrativos.

El caso trivial de (2) corresponde a $n = k = 1$, con $c_1 = d_1 = 1$. Para $n = k = 2$ se encuentra $c_1 = c_2 = 1/2$, $d_1 = 1$ y $d_2 = 0$. En general, para valores de $n > 2$ (integradores simplécticos de orden superior) se encuentra los conjuntos $\{c_1, c_2, \dots, c_k\}$ y $\{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ a través de aplicar a (2) la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff [5]. Así, para $n = k = 4$, Yoshida y otros antes que él [3] obtuvieron los siguientes coeficientes (que aquí se escriben de forma aproximada):

$$c_1 = c_4 \cong 0.676, \quad c_2 = c_3 \cong -0.176, \\ d_1 = d_3 \cong 1.351, \quad d_2 \cong -1.702 \quad \text{y} \quad d_4 = 0. \quad (5)$$

¹Email: sanjines@fiumsa.edu.bo

La separación de acuerdo a (2) para $n = k = 2$ es particularmente útil en el contexto del método pseudo-espectral aplicado al estudio (en una dimensión) de la dinámica electrónica de enlace fuerte (*tight-binding*) en presencia de un campo eléctrico homogéneo y estático [1], pues de ello resulta la fórmula iterativa de evolución infinitesimal

$$C_m^{p+1} = \sum_n C_n^p e^{-i\alpha(n+m)\lambda} i^{n-m} J_{n-m}(z) + O(\Delta t^3), \quad (6)$$

donde los coeficientes $C_n^p \equiv C_n(p\Delta t)$ describen al estado cristalino $\Psi(x = na, t)$ en la representación de las funciones Wannier $\Phi(x - ma)$:

$$\Psi(x = na, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m(t) \Phi(x - ma). \quad (7)$$

En (6) se tiene $z = 2A\Delta t = 4A\lambda$, con A el elemento de salto (*hopping*) entre sitios vecinos de una red cristalina separados por una constante de red unitaria $a = 1$; la energía potencial correspondiente al campo eléctrico homogéneo de intensidad α es $V_n = \alpha n$ y J_m es la función de Bessel de primer tipo y orden entero m . La solución analítica de (6) representada por C_n^N para un instante arbitrario $t = N\Delta t$ ya se conoce (cf. ec. (23) abajo) y se discutió ampliamente en otros trabajos [1]; en el límite de $N \rightarrow \infty$ esta solución permite describir el fenómeno físico de la oscilación de Bloch con un periodo $\tau_B = 2\pi/\alpha$.

2. EXTENSIÓN DEL ESQUEMA DE INTEGRADORES SIMPLÉCTICOS

La cuestión natural que surge a continuación es saber cómo, a través de (2), una mayor “segmentación” del operador de evolución puede incorporarse en el método pseudo-espectral, es decir, para integradores simplécticos de orden mayor ($n = 4, 6, 8, \dots$), ¿cuál es la correspondiente fórmula iterativa de evolución infinitesimal? ¿Cuál es la solución general de dicha fórmula? ¿Cómo depende el fenómeno físico de la oscilación de Bloch del orden del integrador n en (2)? Seguramente que la respuesta a esta última pregunta es “no”, pues la oscilación de Bloch, como fenómeno físico, debe depender solamente de la estructura del hamiltoniano H en (2), sin importar cuál sea su segmentación aproximada. La veracidad de esta afirmación debe reflejarse en el análisis que se presentará a continuación.

La respuesta a la primera pregunta está dada por la fórmula (8) a continuación, y resulta (ver [1] y referencias allí citadas) de una extensión natural de los pasos que llevaron del esquema de integradores simplécticos dado por (2) a la fórmula pseudo-espectral (6); así, para el integrador simpléctico de orden n se tiene:

$$C_{n_k}^{p+1} = \sum_{n_1, \dots, n_{k-1}} C_{n_1}^p \prod_{m=1}^k \exp(-ic_m V_{n_m} \Delta t) \times F(n_m - n_{m+1}, d_m) + O(\Delta t^{n+1}), \quad (8)$$

donde $d_k = 0$, $n_{k+1} = n_k$ y, para el caso de la banda de enlace fuerte $T(k) = -2A \cos k$, de tal forma que

$$F(n_m - n_{m+1}, d_m) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[k(n_m - n_{m+1})] \times \exp(2id_m A \Delta t \cos k) dk; \quad (9)$$

esta última integral en (7) se puede expresar en términos de la función de Bessel del primer tipo y orden entero, así que (8) se escribe finalmente como

$$C_{n_k}^{p+1} = \sum_{n_1, \dots, n_{k-1}} C_{n_1}^p \prod_{m=1}^k e^{-ic_m n_m \alpha \Delta t} i^{n_m - n_{m+1}} \times J_{n_m - n_{m+1}}(2d_m A \Delta t) + O(\Delta t^{n+1}). \quad (10)$$

Siguiendo el esquema de integradores simplécticos sugerido por Yoshida [3] la relación entre el orden del integrador n y el índice k en la multiplicatoria de (10) es $n = k$ hasta $n = 4$; sin embargo, para integradores de orden superior ($n > 4$) dicha relación ya no se cumple necesariamente. Se puede ver que la fórmula (6) corresponde al caso de (10) con $n = k = 2$, $d_2 = 0$, $n_3 = n_2$ y los coeficientes $c_1 = c_2 = 1/2$, $d_1 = 1$ y $d_2 = 0$ (recordemos que $J_0(0) = 1$). El siguiente paso lógico es tomar $n = k = 3$, $d_3 = 0$ y $n_4 = n_3$ en (10), cuyo desarrollo es:

$$C_{n_3}^{p+1} = \sum_{n_1, n_2} C_{n_1}^p \times e^{-ic_1 n_1 \alpha \Delta t} i^{n_1 - n_2} J_{n_1 - n_2}(2d_1 A \Delta t) \times e^{-ic_2 n_2 \alpha \Delta t} i^{n_2 - n_3} J_{n_2 - n_3}(2d_2 A \Delta t) \times e^{-ic_3 n_3 \alpha \Delta t} i^{n_3 - n_4} J_{n_3 - n_4}(2d_3 A \Delta t) + O(\Delta t^4), \quad (11)$$

que se puede reacomodar como

$$C_{n_3}^{p+1} = \sum_{n_1} C_{n_1}^p e^{-i(c_1 n_1 + c_3 n_3) \alpha \Delta t} i^{n_1 - n_3} \times \sum_{n_2} e^{-i(c_2 n_2) \alpha \Delta t} J_{n_1 - n_2}(2d_1 A \Delta t) \times J_{n_2 - n_3}(2d_2 A \Delta t) + O(\Delta t^4), \quad (12)$$

de tal forma que la suma sobre n_2 (que se designará como Γ) se pueda calcular de acuerdo a la fórmula de adición de Graf [6]. El resultado es:

$$\Gamma = J_{n_1 - n_3}(\tau_{p+1}) e^{-i(n_3 - n_1) \chi_p + n_1 c_2 \alpha \Delta t}, \quad (13)$$

donde

$$\chi_p = \arctan \left[\frac{\sin(c_2 \alpha \Delta t)}{d_2/d_1 + \cos(c_2 \alpha \Delta t)} \right], \quad (14)$$

$$\tau_{p+1} = \tau_1 \frac{\sin(c_2 \alpha \Delta t)}{\sin(\chi_p)}, \quad (15)$$

y $\tau_1 = 2d_1 A \Delta t$. Una aproximación útil —aunque poco precisa— para (14) y (15) es $\chi_p \cong c_2 \alpha \Delta t / (d_2/d_1 + 1)$ y $\tau_{p+1} \cong \tau_1 (d_2/d_1 + 1)$ respectivamente, con lo que Γ en (13) se puede escribir como

$$\Gamma \cong J_{n_1 - n_3}(\tau_1 (d_2/d_1 + 1)) \times \exp \left[-ic_2 \alpha \Delta t \left(\frac{n_3 d_1 + n_1 d_2}{d_1 + d_2} \right) \right], \quad (16)$$

de tal manera que (12) queda como

$$C_m^{p+1} \cong \sum_n C_n^p e^{-i(A_n+B_m)\alpha\Delta t} i^{n-m} \times J_{n-m}(2A\Delta t), \quad (17)$$

donde se invocó la fórmula (3) y se definió $\mathcal{A} = c_1 + c_2d_2$ y $\mathcal{B} = c_3 + c_2d_1$. Notemos que la fórmula (17) —aunque expresada con menor precisión que (12)— tiene la misma estructura matemática que (6) y, además, en vista de (3), se cumple que $\mathcal{A} + \mathcal{B} = 1$.

El caso que acabamos de ver corresponde al integrador simpléctico de tercer orden, es decir, $n = k = 3$ en (2), pero ya se dijo a continuación de (4) que este caso no obedece el requisito físico de reversibilidad temporal. Así pues, antes de sacar mayores conclusiones de (17) sobre la extensión del esquema de operadores simplécticos en el método pseudo-espectral, debemos proceder a examinar el caso $n = k = 4$ para el que existe reversibilidad temporal en (2). Esto implica básicamente sustituir $k = 4$, $d_4 = 0$ y $n_5 = n_4$ en (10), y repetir el conjunto de pasos de (11) a (17) con las modificaciones apropiadas:

$$C_{n_3}^{p+1} = \sum_{n_1, n_2, n_3} C_{n_1}^p \times e^{-ic_1n_1\alpha\Delta t} i^{n_1-n_2} J_{n_1-n_2}(2d_1A\Delta t) \times e^{-ic_2n_2\alpha\Delta t} i^{n_2-n_3} J_{n_2-n_3}(2d_2A\Delta t) \times e^{-ic_3n_3\alpha\Delta t} i^{n_3-n_4} J_{n_3-n_4}(2d_3A\Delta t) \times e^{-ic_4n_4\alpha\Delta t} i^{n_4-n_5} J_{n_4-n_5}(2d_4A\Delta t) + O(\Delta t^5), \quad (18)$$

que se reescribe

$$C_{n_4}^{p+1} = \sum_{n_1, n_2} C_{n_1}^p e^{-i(c_1n_1+c_2n_2+c_4n_4)\alpha\Delta t} \times i^{n_1-n_4} J_{n_1-n_2}(2d_1A\Delta t) \times \sum_{n_3} e^{-ic_3n_3\alpha\Delta t} J_{n_2-n_3}(2d_2A\Delta t) \times J_{n_3-n_4}(2d_3A\Delta t) + O(\Delta t^5), \quad (19)$$

la suma sobre n_3 se realiza por medio de la fórmula de adición de Graf y se aproxima de la misma forma que llevó a (16); el resultado se ordena como

$$C_{n_4}^{p+1} \cong \sum_{n_1} C_{n_1}^p i^{n_1-n_4} \times \exp\left[-i\left(c_1n_1 + c_4n_4 + \frac{c_3d_2n_4}{d_2 + d_3}\right)\alpha\Delta t\right] \times \sum_{n_2} \exp\left[-i\left(c_2 + \frac{c_3d_3n_2}{d_2 + d_3}\right)\alpha\Delta t\right] \times J_{n_1-n_2}(2d_1A\Delta t) J_{n_2-n_4}(2(d_2 + d_3)A\Delta t) \quad (20)$$

y de nuevo, se suma sobre el índice n_2 . El resultado que queda después de simplificaciones es

$$C_{n_4}^{p+1} \cong \sum_{n_1} C_{n_1}^p e^{-i(A_{n_1}+B_{n_4})\alpha\Delta t} i^{n_1-n_4} \times J_{n_1-n_4}(2A\Delta t), \quad (21)$$

donde $\mathcal{A} = c_1 + c_2d_2 + c_2d_3 + c_3d_3$, $\mathcal{B} = c_2 + c_3 + c_4 - c_2d_2 - c_2d_3 - c_3d_3$, verificándose también en este caso que $\mathcal{A} + \mathcal{B} = 1$. Debe notarse que este último resultado es *independiente* de los valores específicos de los conjuntos de coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_i\}$ en (5) hallados por Yoshida y otros autores [3], permitiendo que un aspecto físico importante como es la oscilación de Bloch, pueda dilucidarse (en el contexto del método pseudo-espectral) sin necesidad de recurrir a los intrincados recursos algebraicos derivados del uso de la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff [5]. Después de comparar (21) con (17) (para distintos valores de \mathcal{A} y \mathcal{B} en cada caso) ya se puede proponer que

$$C_m^{p+1} \cong \sum_n C_n^p e^{-i(A_n+B_m)\alpha\Delta t} \times i^{n-m} J_{n-m}(2A\Delta t) \quad (22)$$

sea una simplificación adecuada de la fórmula iterativa de evolución infinitesimal (10). Los valores de $\mathcal{A} = \mathcal{A}\{c_i, d_j\}$ y $\mathcal{B} = \mathcal{B}\{c_i, d_j\}$ dependen a su vez de los conjuntos de coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ dados por (2). Así, se sugiere que la condición $\mathcal{A} + \mathcal{B} = 1$ se debería cumplir para cualquier orden de integrador simpléctico, conjetura que se verificará más adelante a partir de un requerimiento físico.

Ciertamente, la fórmula (22) ya no tiene la precisión de (10) y por ello es una aproximación muy pobre, sin embargo, su estructura matemática es más sencilla que la de (10): por ejemplo, los coeficientes $\{d_i\}$ ya no se encuentran en el argumento de las funciones de Bessel, sino en la función exponencial. Esto permitirá una gran ventaja en el tratamiento analítico que se muestra a continuación.

La solución general para la ecuación iterativa (6) (que corresponde a $\mathcal{A} = \mathcal{B} = 1/2$) ya se encontró [1] y se demostró por inducción. Esta solución general para el instante arbitrario $t = N\Delta t$ es

$$C_n^N = \sum_r C_r^0 e^{in(\xi_N - \eta_N)} e^{-ir\xi_N} i^{r-n} J_{r-n}(\tau_N), \quad (23)$$

con

$$\tau_N e^{i\xi_N} = \tau_1 e^{i\phi_N} + \tau_{N-1} e^{i\xi_{N-1}}, \quad (24)$$

y

$$\phi_N = (\eta_N + \eta_{N-1})/2, \quad \eta_N = \eta_{N-1} + \alpha\Delta t. \quad (25)$$

A continuación se demostrará por inducción que (23) también es la solución general para (22), con las definiciones equivalentes a (24) y (25) donde se habrá hecho las sustituciones adecuadas. Tomando $N = p$ en (23) y reemplazando en (22):

$$C_m^{p+1} = \sum_r C_r^0 i^{r-m} e^{-ir\xi_p} e^{-i\alpha m \mathcal{B} \Delta t} \times \sum_n e^{-in(\eta_p - \xi_p + \alpha A \Delta t)} J_{n-m}(2A\Delta t) J_{r-n}(\tau_p); \quad (26)$$

luego, se utiliza la fórmula de Graf para sumar sobre el índice n y se define en lugar de (25)

$$\eta_{p+1} = \eta_p + \alpha \Delta t (\mathcal{A} + \mathcal{B}), \quad (27)$$

con lo que se obtiene finalmente

$$C_m^{p+1} = \sum_r C_r^0 e^{im(\xi_{p+1} - \eta_{p+1})} e^{-ir\xi_{p+1}} i^{r-m} J_{r-m}(\tau_{p+1}). \quad (28)$$

Vemos pues que (28) corresponde a (23) con $N = p + 1$. Q.E.D.

Al comparar (27) y la segunda ecuación en (25), se ve que la sustitución adecuada debe ser $\alpha \rightarrow (\mathcal{A} + \mathcal{B})\alpha$ a fin de garantizar que (23), junto con las cantidades ahí comprendidas, es la solución general de la ecuación iterativa infinitesimal (22) para cualquier “segmentación” u orden n del integrador simpléctico en (2). Por otra parte, el periodo $\tau_B = 2\pi/\alpha$ de la oscilación de Bloch para un electrón cristalino en presencia de un campo eléctrico estático y homogéneo de intensidad α , debe ser *independiente* de la forma particular que se haya elegido para “segmentar” el operador de evolución $\exp[-iH(t-t_0)]$ en (1), así que necesariamente se debe cumplir la condición $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$ para todo orden de integrador simpléctico. Queda pues confirmada la conjetura citada arriba.

3. CONCLUSIONES

Se obtuvo la generalización (22) de la fórmula de evolución iterativa infinitesimal (6). Se mostró que (23) es la solución general (para $t = N\Delta t$) de (22), y corresponde a una “segmentación” arbitraria del operador de evolución según el esquema de integradores simplécticos (2). Esta generalización —que consiste de una aproximación burda de (10)— es muy conveniente, pues así se verifica que (23) es válida tanto para el caso $n = k = 2$, que ya se había tratado en trabajos anteriores, como para cualquier otra “segmentación” mayor, siempre que se verifique la condición $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$. Notemos que, a pesar de la pérdida de precisión de la fórmula aproximada (22) respecto a (10), (22) conserva la información de los coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_i\}$ de tal forma que se cumpla la referida condición. La validez de dicha condición se puede inferir a partir del requerimiento de que el fenómeno físico de la oscilación de Bloch deba permanecer invariante respecto al orden del integrador simpléctico elegido en (2). Una demostración directa (por construcción) de $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$ exigiría desarrollar un algoritmo eficiente para calcular los conjuntos de coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ a través de la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff, por ejemplo, con la ayuda del paquete computacional de álgebra no-conmutativa “NCAAlgebra” [7], pero el esfuerzo computacional se incrementa notablemente a medida que aumenta el orden del integrador. De manera equivalente, aunque no menos complicada, se podría verificar $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$

por construcción directa, sustituyendo (23) en (10) en lugar de (22), a fin de demostrar (23) por inducción. En el análisis matemático que se presentó en este trabajo, los valores específicos de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ resultan innecesarios, pues se demostró que el periodo de la oscilación de Bloch, como uno de los aspectos relevantes de la dinámica electrónica de enlace fuerte en presencia de un campo eléctrico estático y homogéneo, no depende de dichos coeficientes.

Resulta interesante mencionar que el cálculo específico de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ es un problema actual de relevancia en otras áreas, como por ejemplo en algunos sistemas dinámicos: el péndulo simple y el problema astronómico de tres cuerpos [8]. En estos casos, se muestra que los valores negativos de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ pueden ocasionar problemas de “estabilidad” en el algoritmo numérico de integración de estos sistemas hamiltonianos. Ciertamente, para un cálculo numérico eficiente, siempre habrá un pequeño error acumulado en las fórmulas (22) y (23) para el integrador simpléctico de orden n en (2); sin embargo, es útil saber que existirán propiedades dinámicas que se mantengan invariantes ante la estructura específica de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$, pues ello se podría utilizar, además de la condición (3), para encontrar dicha estructura.

Finalmente, mencionemos que para el hamiltoniano dependiente del tiempo $H(t) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}, t)$, la ec. (1) ya no es la solución formal de la ecuación de Schrödinger, por lo que la ec. (6) de evolución infinitesimal debe modificarse para incluir la variación temporal de $V(\mathbf{r}, t)$. En este caso, la extensión del esquema de integradores simplécticos (2) ya no es un asunto trivial, pero se conoce propiedades dinámicas invariantes [1] que servirían para calcular $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$. Este asunto permanece como un problema abierto interesante.

El autor expresa su agradecimiento al Prof. Dr. Jean-Pierre Gallinar (Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela), por su valiosa y oportuna colaboración en la revisión de este artículo.

REFERENCIAS

- [1] Sanjinés D., Gallinar J.-P.; *Phys. Rev. B* **64**, 54301 (2001); *Rev. Boliviana de Física* **7**, 16 (2001).
- [2] Liboff R.L.; *Introductory Quantum Mechanics* (Holden-Day, 1980).
- [3] Yoshida H.; *Phys. Lett.* **A150**, 5, 262 (1990).
- [4] *Computer Physics Communications* **63** (1991). Todo este volumen está dedicado a métodos numéricos en dinámica cuántica.
- [5] Swanson M.; *Path Integrals and Quantum Processes* (Academic Press, 1992).
- [6] Abramowitz M., Stegun I.; *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, 1965).
- [7] Helton J.W., Stankus M., Miller R.; *The NCAAlgebra SUITE* (<http://math.ucsd.edu/~ncalg>).
- [8] Laskar J., Robutel P.; *High order symplectic integrators for perturbed Hamiltonian systems* (<http://arxiv.org/list/astro-ph/0005074v1>, 4 May 2000).