

Simulación de paquetes de onda

Amilcar Meneses Viveros Sergio V. Chapa Vergara Harold V. McIntosh†
amilcar@syngestp.dias.ie schapa@cs.cinvestav.mx mcintosh@servidor.unam.mx

Sección de Computación
Departamento de Ingeniería Eléctrica
CINVESTAV-IPN

†Departamento de Aplicación de Microcomputadoras
Instituto de Ciencias
Universidad Autónoma de Puebla

Resumen

Las soluciones a las ecuaciones diferenciales, que describen los sistemas de mecánica cuántica, tienen una interpretación probabilística al considerar que el cuadrado del valor absoluto de la solución es una densidad de probabilidad. Para la mayoría de los sistemas, obtener soluciones exactas que cumplan con este requerimiento de interpretación no es fácil, por lo que se optan por las técnicas numéricas y de aproximación. Un camino para obtener estas soluciones de manera computacional, es construyendo paquetes de onda. En este documento presentamos la manera de construir estos paquetes de onda para las ecuaciones de Schrödinger y Dirac en una dimensión con potenciales independientes del tiempo.

1 Introducción

Las ecuaciones de Schrödinger y de Dirac, permiten describir los sistemas cuánticos clásicos y relativistas, respectivamente. Estas ecuaciones se les denomina ecuaciones de onda y a sus soluciones, funciones de onda. Una característica en las funciones de onda es su interpretación probabilística, es decir, el cuadrado del valor absoluto de la función de onda se toma como la densidad de probabilidad. Para cumplir este requerimiento, se ha impuesto que las soluciones sean cuadráticamente integrables, y por esta razón, que pertenezcan a un espacio de Hilbert. Los sistemas no relativistas del oscilador armónico, el potencial del

pozo cuadrado, y el átomo de hidrógeno, son algunos de los pocos sistemas que se pueden resolver de forma exacta, y cuyas soluciones cumplen la condición de ser cuadráticamente integrables, para cada nivel de energía puro. Sin embargo, no es sencillo encontrar este tipo de soluciones en la mayoría de los sistemas cuánticos que se estudian.

Por esta razón, se han desarrollado distintas herramientas matemáticas para obtener, de manera analítica, el espectro y las soluciones a estos sistemas. También se han desarrollado algoritmos para aproximar estas soluciones. Y, desde el punto de vista físico, se ha contemplado la posibilidad de hacer extensiones a la teoría [1][2][3].

Otra dificultad aparece cuando los sistemas tienen asociados espectros continuos, ya que los espectros discretos son más fáciles de asociar a la explicación de la cuantificación. Por ejemplo, los niveles de energía resultan ser discretos para los problemas mencionados con la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, el principio de cuantificación consiste en que las soluciones de las ecuaciones dinámicas deben formar una base para el espacio de Hilbert, sobre el cual se establecen las interpretaciones [7]. Este principio, permite que las ecuaciones de Schrödinger y Dirac manejen sistemas con espectros continuos.

Una forma de encontrar soluciones cuadráticamente integrables de un sistema, es construyendo un paquete de onda. Un paquete de onda es una superposición de soluciones del sistema para niveles de energía válidos. Para construir un paquete de onda

se debe calcular el espectro —es decir, los niveles de energía que admite el sistema—, y después encontrar las soluciones propias de cada nivel de energía, con el fin de obtener la base de soluciones para producir el paquete de onda. Evidentemente, las soluciones base deberán cumplir con condiciones iniciales, o en la frontera, que imponga el sistema cuántico con el que se trabaje. Ambas tareas tienen sus propias complicaciones.

En este trabajo presentaremos una forma obtener soluciones de sistemas de mecánica cuántica no relativista y relativista en una dimensión, construyendo un paquete de ondas. Estas soluciones cumplen con la condición de ser cuadráticamente integrables. Particularmente, discutiremos la manera de construirlos a partir de una superposición de estados estacionarios. Así, inicialmente discutiremos las ecuaciones de Schrödinger y Dirac en una dimensión. Posteriormente veremos forma de construir un paquete de onda y la manera de obtenerlo computacionalmente, esto se enfatiza en la cuarta, quinta y sexta sección, donde se presentan las soluciones base, el manejo del espectro y el elemento temporal asociado al paquete de onda. Finalmente, se presentan los resultados y conclusiones obtenidas al desarrollar este trabajo.

2 Las ecuaciones de Schrödinger y Dirac

En mecánica cuántica se utilizan las ecuaciones de Schrödinger y Dirac para describir sistemas cuánticos no relativistas y relativistas, respectivamente. La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial de segundo orden que puede expresarse como un sistema de ecuaciones diferenciales acoplado de primer orden. Así, la ecuación de Schrödinger, para el caso estacionario, puede escribirse en notación de una matriz 2×2

$$\frac{dZ(x)}{dx} = \begin{pmatrix} 0 & V(x) - E \\ 1 & 0 \end{pmatrix} Z(x) \quad (1)$$

donde $V(x)$ es el potencial del sistema, y E el nivel de energía. Si introducimos el factor

$$k = (V(x) - E)^{1/2}$$

la solución de la ecuación (1) tiene la forma

$$Z(x) = \begin{pmatrix} \cosh k(x - x_0) & k \sinh k(x - x_0) \\ \frac{1}{k} \sinh k(x - x_0) & \cosh k(x - x_0) \end{pmatrix} Z(x_0) \quad (2)$$

Donde $Z(x_0)$ tiene los valores de las condiciones iniciales del sistema.

A diferencia de la ecuación de Schrödinger, la ecuación de Dirac es un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, donde la solución es el vector de funciones solución, llamado espinor, y no la primera solución del caso no relativista dado en (2). Esto se debe a que, al expresar la ecuación de Dirac como un hamiltoniano, tiene coeficientes que son matrices en vez de valores escalares, como ocurre en el caso no relativista. En una dimensión, la ecuación de Dirac, para el caso estacionario donde el potencial es independiente del tiempo, puede escribirse en forma matricial como

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = \begin{pmatrix} 0 & m_0 - (V(x) - E) \\ m_0 + (V(x) - E) & 0 \end{pmatrix} \Psi(x) \quad (3)$$

Donde m_0 es la masa en reposo y $V(x)$ el potencial independiente del tiempo. Con las sustituciones

$$\phi = x \sqrt{m_0^2 - (V - E)^2}, \quad \sigma = \sqrt{\frac{m_0 - (V - E)}{m_0 + (V - E)}}$$

podemos escribir la solución de la ecuación (3) como

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh \phi & \sigma \sinh \phi \\ \sigma^{-1} \sinh \phi & \cosh \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(x_0) \\ \psi_2(x_0) \end{pmatrix} \quad (4) \end{aligned}$$

Afortunadamente, para el caso de los potenciales independientes del tiempo, las funciones de onda, dependientes del tiempo $\psi(x, t)$, puede describirse en función de la solución estacionaria multiplicada por un componente temporal.

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x, t_0) \quad (5)$$

3 El paquete de ondas

Las funciones de onda son soluciones a las ecuaciones diferenciales de Schrödinger o Dirac. Dichas ecuaciones se representan en términos de Hamiltonianos. Considerando que se tiene las relaciones

$$Hu_n = E_n u_n, \quad Hu_k = E(k) u_k$$

para los estados ligados y continuos respectivamente, donde E_n es un elemento del espectro continuo y u_n la solución asociada a ese valor de energía. Similarmente, los valores $E(k)$, son elementos de un rango

continuo de energía y u_k la solución propia correspondiente a ese nivel de energía. Una forma general para expresar un paquete de onda, que incluye a las regiones de energía donde se tiene un espectro continuo y donde se tiene un espectro discreto, es como se presenta en el artículo clásico de Golberg, Schey y Schwartz. [25]:

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t} u_n(x) + \int_{\mathbb{E}} a(k) e^{-iE(k)t} u_k(x) dk \quad (6)$$

donde los coeficientes a_n y $a(k)$ están definidos como

$$\begin{aligned} a_n &= \langle u_n, \psi(x, 0) \rangle \\ a(k) &= \langle u(k), \psi(x, 0) \rangle, \end{aligned}$$

y $\psi(x, 0)$ es el estado inicial del sistema.

Por conveniencia, podemos elegir el estado inicial $\psi(x, 0)$ como el Gaussiano, que sólo depende de la posición:

$$\psi(x, 0) = e^{-(x-x_0)/2\sigma^2} e^{-ik_0 x}, \quad (7)$$

donde σ representa la desviación estandar, y k_0 representa el promedio del momento. Desde el punto de vista práctico, k_0 indica el grado de contribución de la parte imaginaria y σ la longitud de la curva gaussiana.

Para el caso de la ecuación de Dirac, la ecuación (6) puede extenderse para incluir explícitamente las dos funciones que incluye el espinor solución. De esta forma, el paquete de onda, para el caso relativista, puede escribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \sum_n a_{n,1} e^{-iE_n t} u_{n,1}(x) \\ &+ \sum_n a_{n,2} e^{-iE_n t} u_{n,2}(x) \\ &+ \int a_1(k) e^{-iE(k)t} u_{k,1}(x) dk \\ &+ \int a_2(k) e^{-iE(k)t} u_{k,2}(x) dk \quad (8) \end{aligned}$$

En esta ecuación, las funciones $u_{n,1}(x)$ y $u_{n,2}(x)$ representan las dos funciones componentes del espinor correspondiente al n -ésimo valor del espectro discreto de energía. Y, de manera análoga, las funciones $u_{k,1}(x)$ y $u_{k,2}(x)$ corresponden a los componentes del espinor cuando k recorre los valores continuos del espectro.

El estado inicial $\Psi(x, 0)$ ahora es un espinor, y puede

definirse de manera análoga a (7)

$$\Psi(x, 0) = e^{-(x-x_0)/2\sigma^2} e^{-ik_0 x} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1(x, 0) \\ \psi_2(x, 0) \end{pmatrix} \quad (9)$$

De esta manera, los valores $a_{n,1}$, $a_{n,2}$, $a_1(k)$ y $a_2(k)$ de (8) se expresan como

$$\begin{aligned} a_{n,1} &= \langle u_{n,1}(x), \psi_1(x, 0) \rangle \\ a_{n,2} &= \langle u_{n,2}(x), \psi_1(x, 0) \rangle \\ a_1(k) &= \langle u_{k,1}(x), \psi_2(x, 0) \rangle \\ a_2(k) &= \langle u_{k,2}(x), \psi_2(x, 0) \rangle \end{aligned}$$

Las soluciones que se obtienen a partir de un paquete de onda se denominan soluciones de estados de energía mixtos, ya que involucran la superposición de soluciones correspondientes a estados de energía puros.

Como $|\psi(x, t)|^2$ se interpreta como la densidad de probabilidad, el paquete de onda debe cumplir que la probabilidad de encontrar a la partícula en el espacio sea 1, es decir

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Para que el paquete de onda cumpla esta propiedad debemos normalizarlo dividiendo a ψ entre su norma

$$\Psi = \frac{\psi}{\|\psi\|}$$

Así, la norma de ψ , y para el caso no relativista es

$$\|\psi(t)\| = \left(\int_{\mathbb{R}} \|\psi(x, t)\|^2 dx \right)^{1/2}$$

y en el caso relativista, la norma de un espinor ψ queda como

$$\|\psi(t)\| = \left(\int_{\mathbb{R}} (\|\psi_1(x, t)\|^2 + \|\psi_2(x, t)\|^2) dx \right)^{1/2}$$

Afortunadamente, las funciones de onda dependientes del tiempo, tienen la propiedad de la conservación de la norma, lo que nos indica que solo habrá que calcularla una vez en la simulación.

4 Las soluciones base

Las expresión de las ecuaciones de Schrödinger (1) y Dirac (3), tienen la forma conveniente de incluir el valor de energía. Lo cual, sugiere que el espectro se debe calcular antes de realizar estas computaciones y, con estas ecuaciones diferenciales podemos obtener las soluciones de cada nivel de energía.

Estas soluciones pueden obtenerse numéricamente con los métodos de Runge-Kutta si el sistema sólo requiere de condiciones iniciales. Generalmente, las soluciones de (1) y (3) involucran las condiciones iniciales $Z(x_0)$ y $\Psi(x_0)$. Si se eligen a estos estados iniciales como matrices unitarias, entonces las funciones solución que se calculan se les denominan soluciones fundamentales, y son bastante útiles en caso de que se quiera obtener soluciones con valores a la frontera utilizando métodos numéricos basados en diferencias finitas [27].

Las soluciones para cada valor de energía válido del sistema, ya sea que el espectro es continuo o discreto, forman la base de soluciones para el paquete de onda. Un aspecto fundamental en esta base de soluciones es el hecho de que no se exige que sean cuadráticamente integrables, ni normalizadas, esto es, la base de funciones para el espacio de Hilbert, donde está el paquete de onda, no necesariamente está en el espacio de Hilbert, estas soluciones se encuentran en el espacio de Banach.

Un ejemplo sencillo son las soluciones de la partícula libre para los casos de Schrödinger y Dirac, en este sistema se considera que $V(x) = 0 \forall x \in (-\infty, \infty)$ en las ecuaciones (1) y (3). Así, las soluciones base para el caso no relativista son

$$u_E = \cos \sqrt{E}(x - x_0), \quad (10)$$

y su espectro es $\mathbb{E} = \{E | E > 0\}$. Las funciones de la ecuación (10) no son cuadráticamente integrables ni normalizables, y por ende, no pertenecen al espacio de Hilbert que nos interesa.

De manera similar, para el espinor solución de la partícula libre de Dirac (11), tampoco pertenecen al espacio de Hilbert de las soluciones cuadráticamente integrables.

$$\begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \left(x \sqrt{m_0^2 - E^2} \right) \\ \left(\frac{m_0 - E}{m_0 + E} \right)^{1/2} \sinh \left(x \sqrt{m_0^2 - E^2} \right) \end{pmatrix} \quad (11)$$

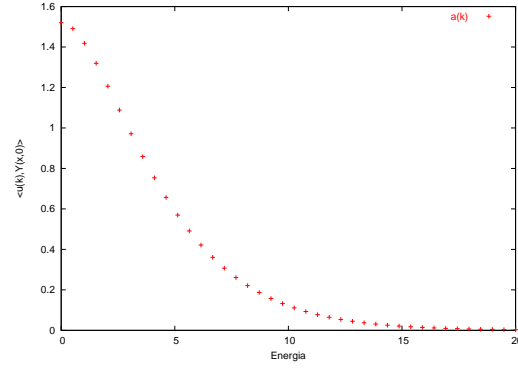


Figura 1: Coeficientes de Fourier para la partícula libre no relativista.

5 Manejo del espectro

Calcular el espectro presenta dos problemas principales: encontrarlo, y decidir su tipo. Si el espectro es continuo y de rango infinito, entonces hay que buscar mecanismos para tener una discretización para aproximarlo numéricamente.

En el caso de espectros discretos se han desarrollado diversos trabajos, por ejemplo [28],[21],[29], donde los métodos numéricos que se utilizan son el de disparo o el método de Prüfer. Brevemente, la idea del método de disparo consiste en ir variando los valores de energía, de una posible solución, hasta que el valor en la frontera se aproxime lo suficiente a la condición impuesta; los valores de energía que tengan una buena aproximación se incluyen en el conjunto de valores de energía válidos para el sistema. Por otro lado, el método de Prüfer consiste en ir recorriendo los valores de energía y ver el comportamiento asintótico de la solución, y donde existan variaciones de este valor asintótico es donde se determina la existencia de un elemento del espectro discreto.

Para el caso de espectro continuo, se puede obtener de manera analítica, o utilizando alguno de los métodos mencionados anteriormente, pero verificando que hay una región de acumulación. De hecho, sería posible meter una heurística para determinar cuando hay un punto de acumulación o una región con espectro continuo.

En ambos casos, podemos tener la existencia de una

infinidad de valores de energía que pertenezcan al espectro, y que los límites de su intervalo sean finitos o infinitos. Sin embargo, podemos utilizar los coeficientes de Fourier $a_n, a(k)$ para tener una referencia del grado de participación de las soluciones u_n y $u(k)$ en el paquete de onda. De esta manera, podemos definir si es necesario utilizar todo el rango del espectro, o solo una parte.

Por ejemplo, el espectro para la partícula libre de Schrödinger es $\mathbb{E} = \{E | E > 0\}$, y en el caso de la partícula de Dirac, el espectro es $\mathbb{E} = \{E | E < -m_0 \text{ ó } E > m_0\}$. En ambos casos se tiene un sistema con un espectro continuo y con rango infinito. La figura 1 muestra los valores de los coeficientes de Fourier $a_k(x) = \langle u_k(x), \psi(x, 0) \rangle$ para el caso no relativista, y donde el estado inicial se toma como el definido en (7) con la desviación estandar $\sigma = 1$ y el promedio del momento $k_0 = 1$. Se puede apreciar en la figura 1 que después del valor 20, aproximadamente, el valor de los coeficientes es muy cercano a cero, y por ende, se pueden desechar a partir de este valor de energía. Con lo que se reduce el espectro del rango $[0, \infty)$ al rango $[0, 20)$.

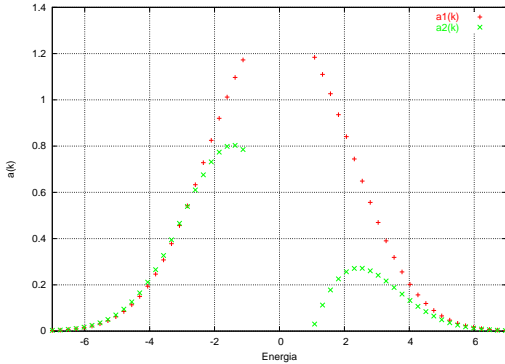


Figura 2: Coeficientes a_k para la partícula libre relativista

El mismo criterio se utiliza para el caso de Dirac. Consideremos ahora el valor de la masa en reposo $m_0 = 1$, y el estado inicial, ecuación (9), con los valores para $\sigma = 1/\sqrt{\pi}$ y $k_0 = 0.2$. La figura 2 presenta los coeficientes de Fourier para el caso de la partícula libre relativista. Podemos apreciar que podemos cambiar los rangos de energía asociados al espectro de la partícula libre relativista de los rangos $(-\infty, -1)$ y $[1, \infty)$ a los rangos $(-7, -1)$ y $[1, 7)$ respectivamente. Por otro lado, el valor del promedio del momento k_0 repercute directamente en el grado

de participación del segundo elemento del espinor: $\psi_2(x)$ de la solución, si el valor $k_0 = 0$ los coeficientes de Fourier asociados al segundo elemento del espinor son cero, lo que indica que los valores del primer elemento del espinor son los únicos que contribuyen en la construcción del paquete de onda.

6 Evolución en el tiempo

Una característica de las funciones de onda dependientes del tiempo, es que pueden descomponerse en una parte estática y una dependiente del tiempo, como se aprecia en la ecuación (5). Al hacer la discretización de la integral que representa la superposición de soluciones para el espectro continuo, uno se puede preguntar que ocurre con el componente del tiempo incluido en el paquete de onda.

Consideremos la parte de la discretización que incluye al componente del tiempo, entonces tenemos la expresión

$$\sum_{k=1}^N e^{-iE_k t}, \quad (12)$$

donde N es el número de elementos que constituyen la partición que está discretizando un rango de el espectro continuo. Esta expresión genera la aparición de ciclos en la evolución del paquete de onda. Es decir, podemos tener un tiempo t_c tal que $\Psi(x, t) = \Psi(x, t + t_c)$

La aparición de estos ciclos depende de el número de elementos que tenga la partición y de la longitud del rango de energía que se considere. Afortunadamente, no es difícil encontrar esta relación, y podemos establecer que la aparición de ciclos ocurre cada t_c unidades de tiempo donde

$$t_c = \frac{2\pi}{L_{\mathbb{E}}}(N - 1), \quad (13)$$

donde $L_{\mathbb{E}}$ es la longitud del rango que se considera, y N es el número de elementos de la partición del rango.

7 Resultados

Se han desarrollado simulaciones de paquetes de onda para sistemas basados en las ecuaciones de Schrödinger y Dirac. Las simulaciones realizadas se

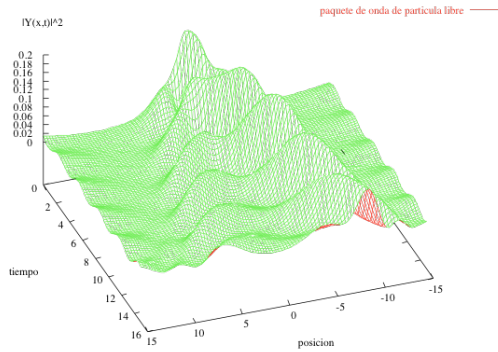


Figura 3: Paquete de onda de la partícula libre de Dirac

han hecho en base a un conjunto de soluciones estacionarias y, posteriormente se han puesto a evolucionar en el tiempo, lo cual reduce las computaciones en la simulación.

En el caso de Dirac, al trabajar con espinores, para trabajar el paquete de onda, se hace una extensión vectorial a los elementos que componen el paquete de onda, de esta forma, se encuentra un par de coeficientes de Fourier, uno para cada elemento del espinor.

En el caso de las soluciones base, se consideran únicamente las condiciones iniciales, y esto permite que se calculen numéricamente utilizando el método de Runge-Kutta, de cuarto y sexto orden, para construir las soluciones fundamentales.

Para el caso del espectro, se han utilizado métodos puramente analíticos para hallar regiones y determinar el tipo. Por el lado de la partición, pudimos establecer el fenómeno de periodicidad que se genera al crear una partición cuando se discretiza una región continua del espectro. Para establecer los límites finitos, observamos que podemos basarnos en los coeficientes de Fourier para determinar los límites máximos y mínimos de las regiones de energía.

Referente a sistemas cuánticos, en este documento hemos hecho referencias al espectro, soluciones fundamentales, y construcción de una paquete de onda para el caso mas sencillo: la partícula libre para los casos no relativistas y relativistas, principalmente porque tienen un espectro continuo y presentan soluciones base que no son cuadráticamente integrables. En el caso de la partícula libre de Dirac, conocida como el Zitterbewegung, hemos encontrado valores para la

desviación estandar y el promedio del momento, en el estado inicial $\Psi(x, 0)$ que pueden evitar la partición del paquete de onda, esto se aprecia en la figura 3.

8 Conclusiones

La construcción de paquetes de onda, como la hemos desarrollado, debe manejar por separado las regiones de energía con espectro discreto y espectro continuo. Una solución para manejar estas regiones es meter una heurística que nos ayude a determinar la distinción de tipos de espectro y sus valores. La discretización de regiones del espectro continuo induce un fenómeno de aparición de ciclos, pero no es parte del sistema cuántico. Por otro lado, la granularidad de la partición demandara mayor uso de memoria al mantener las soluciones estacionaras guardadas en memoria, lo cual si no se cuida, puede generar problemas de desborde de memoria, o alentamiento del sistema si se hace un uso excesivo de intercambio de páginas de memoria con el disco duro. Por otro lado, la generación de soluciones con problemas a la frontera que sean la base de soluciones puede realizarse utilizando métodos conocidos como el de disparo o por diferencias finitas.

Una forma de ahorrarnos muchos problemas computacionales, es utilizar el enfoque del problema singular de Sturm-Liouville, y resolver el paquete de onda, utilizando una integral de Stieltjes. Evidentemente en este enfoque el problema computacional, radica en encontrar la función espectral, pero al final vale la pena, ya que la generación de soluciones fundamentales queda reducido a una evaluación de los límites de la función espectral [3][4][5][6][7].

Referencias

- [1] Harold V. McIntosh; *“Packaging Waves”*; en preparación; Departamento de Aplicación de Microcomputadoras, Universidad Autónoma de Puebla; México.
- [2] Harold V. McIntosh; *“Symmetric and Degeneration”*; in Group Theory and its applications, Vol. 3, (Ernest M. Loebel, editor), 1972.
- [3] Harold V. McIntosh; *“Quantization as an Eigenvalue Problem”*, in Group Theory and its applications, Vol. 3, (Ernest M. Loebel, editor), 1975, pp. 333-368.

- [4] Brandas Erkki, M. Hehenberger, H. V. McIntosh, “*Dispersion Relations and Spectral Densities*”, International Journal of Quantum Chemistry, **9**, 103-117 (1975).
- [5] Hehenberger M., H.V. McIntosh y Erkki Bradas; “*Weyl’s theory applied to the stark effect in the hydrogen atom*”; Physical Review **A 10**, 1494-1506 (1974).
- [6] A. Cisneros y H.V. McIntosh; “*A Proposed Definition of Resonant States*”; International Journal of Quantum Chemistry, **28**, 135-159, 1985.
- [7] Harold V. McIntosh; “*Quantization and Green’s function for systems of linear differential equations*”; In Quantum Science: Methods and Structure, J.L. Calais, O. Goscinski, J. Linderberg and Y. Öhrn editors. Plenum Press, New York, 1976, pp. 277-294.
- [8] P.A.M. Dirac; “*The Principles of Quantum Mechanics*”; Four Edition. Oxford, 1958.
- [9] J.D. Pryce; “*Numerical solution of Sturm-Liouville problems*”; New York : Clarendon Press ; 1993.
- [10] J. Parker and C.R. Stroud, Jr.; “*Coherence and decay of Rydberg wave packets*”; Physical Review Lett. **56**, 716 (1986).
- [11] Edwin C. Kemble; “*The Fundamental Principles of Quantum Mechanics with Elementary Applications*”; Dover Publications; New York, 1958.
- [12] Sergio V. Chapa Vergara, Harold V. McIntosh; “*Ecuaciones Diferenciales y la Teoría de Weyl, Parte I: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias*”; CINVESTAV-IPN, México, 2005.
- [13] E.C. Titchmarsh; “*On the relation between the eigenvalues in relativistic and non-relativistic quantum mechanics*”; Proc. Roy. Soc. Ser. A, **266**, 33-46, 1964.
- [14] L. Greenberg and M. Marletta “*Numerical methods for higher order Sturm-Liouville problems*”. Journal of Computational and Applied Mathematics, **125**, 367-383 (2000).
- [15] P. Ghelardoni, G. Gheri and M. Marletta; “*Spectral corrections for Sturm-Liouville problems*”. Journal of Computational and Applied Mathematics, **132**, 443-459 (2001).
- [16] L. Greenberg and M. Marletta; “*Numerical solution of non-selfadjoint Sturm-Liouville problems and related systems*”. *SIAM Journal on Numerical Analysis* **38**, **6**, 1800-1845 (2001).
- [17] Bernd Thaller; “*The Dirac Equation*”; Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [18] B. Thaller; *Visual Quantum Computing*; Springer-Verlag, New York, 2000.
- [19] B. Thaller; *Visualizing the kinematic of relativistic wave packet*; arXiv:quant-ph/0409097v1Sep, 2004.
- [20] B.M. Brown, W.D. Evans; “*The Computation of the Titchmarsh-Weyl m -Function*”; on lectures in pure and applied mathematics, *spectral theory and computational methods of Sturm-Liouville problems*;
- [21] B.M. Brown, D.K.R. McCormack; “*On computer assisted proof of eigenvalues below the essential spectrum of the Sturm Liouville problem*”; 1999.
- [22] B. M. Brown, W. D. Evans and M. Plum; Proc. London Math. Soc. (3) **87** (2003), pp 419-450.
- [23] L. Sakhnovich; “*Weyl-Titchmarsh matrix functions for matrix Dirac-type*”; Inverse Problems, No 18, 2002.
- [24] B.M. Levitan, I.S. Satgsjan; “*Sturm-Liouville and Dirac Operators*”; Kluwer Academic Publishers; 1990.
- [25] A. Goldberg, H.M. Schey, J.L. Schwartz, “*Computer-Generated Motion Pictures of the One-Dimensional Quantum Transmission and Reflection Phenomena*”, Am. J. Phys. **35**, pp. 177-186, 1967.
- [26] Iwo Bialnicki-Birula, Marek Ciepak & Jerzy Kaminski; “*Theory of Quanta*”; Oxford University Press, New York, 1992.
- [27] Pereyra; “*Finite Difference Solution of Boundary Value Problem in Ordinary Differential Equations*”; On, MAA Studies in Mathematics Vol 24, “*Studies in Numerical Analysis*”, Gene H. Golub Editor. 1984.
- [28] J.D. Pryce; “*Numerical solution of Sturm-Liouville problems*”; New York : Clarendon Press ; 1993.
- [29] H.B. Keller; “*Numerical Solution of Two Point Boundary Value Problems*”; Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia Pennsylvania; 1976.