1 Hamiltoniano del sistema

Aclaracion: Las cantidades que denotan posicion y momento son vectoriales, el indice i denota numero de particula.

El Hamiltoniano a utilizar para un sistema de N particulas se puede expresar como

$$H(q_1, ..., q_N, p_1, ..., p_N) \equiv H(q_i, p_i) = \sum_{i=1}^{N} \frac{|p_i|^2}{2m} + \frac{1}{2} V \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} e^{-p_{ij}^2 - q_{ij}^2}, \quad (1)$$

siendo $p_{ij}^2 := |p_i - p_j|^2$, y los gradientes con respecto a p_i y q_i son

$$\begin{cases} \nabla_{p_i} H(q_i, p_i) = \frac{p_i}{m} - 2V \sum_{j=1}^{N} (p_i - p_j) e^{-p_{ij}^2 - q_{ij}^2} \\ \nabla_{q_i} H(q_i, p_i) = -2V \sum_{j=1}^{N} (q_i - q_j) e^{-p_{ij}^2 - q_{ij}^2} \end{cases}. \quad (2)$$

2 Integrador

El paso del integrador viene dado por la transformación

$$\phi_2^{\delta} = \phi_{H_A}^{\delta/2} \circ \phi_{H_B}^{\delta/2} \circ \phi_{\omega H_C}^{\delta} \circ \phi_{H_B}^{\delta/2} \circ \phi_{H_A}^{\delta/2}, \quad (3)$$

siendo δ el tamaño del paso temporal y ω un parámetro *fantasma*.

2.1 Transformación $\phi_{H_A}^{\delta/2}$

$$\begin{cases} q_i^{(n+1)} = q_i^{(n)} \\ p_i^{(n+1)} = p_i^{(n)} + \delta V \sum_{j=1}^{N} (q_i^{(n)} - q_j^{(n)}) e^{-y_{ij}^{2\,(n)} - q_{ij}^{2\,(n)}} \\ x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} + \frac{\delta}{2} (\frac{y_i^{(n)}}{m} - 2V \sum_{j=1}^{N} (y_i^{(n)} - y_j^{(n)}) e^{-y_{ij}^{2\,(n)} - q_{ij}^{2\,(n)}}) \\ y_i^{(n+1)} = y_i^{(n)} \end{cases} \quad (4)$$

2.2 Transformación $\phi_{H_B}^{\delta/2}$

$$\begin{cases} q_i^{(n+1)} = q_i^{(n)} + \frac{\delta}{2} (\frac{p_i^{(n)}}{m} - 2V \sum_{j=1}^{N} (p_i^{(n)} - p_j^{(n)}) e^{-p_{ij}^{2\,(n)} - x_{ij}^{2\,(n)}}) \\ p_i^{(n+1)} = p_i^{(n)} \\ x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} \\ y_i^{(n+1)} = y_i^{(n)} + \delta V \sum_{j=1}^{N} (x_i^{(n)} - x_j^{(n)}) e^{-p_{ij}^{2\,(n)} - x_{ij}^{2\,(n)}} \end{cases} \quad (5)$$

2.3 Transformación $\phi^{\delta}_{\omega H_C}$

$$\begin{cases} q_i^{(n+1)} = \frac{1}{2}[(1+C)q_i^{(n)} + Sp_i^{(n)} + (1-C)x_i^{(n)} - Sy_i^{(n)})] \\ p_i^{(n+1)} = \frac{1}{2}[-Sq_i^{(n)} + (1+C)p_i^{(n)} + Sx_i^{(n)} + (1-C)y_i^{(n)})] \\ x_i^{(n+1)} = \frac{1}{2}[(1-C)q_i^{(n)} - Sp_i^{(n)} + (1+C)x_i^{(n)} + Sy_i^{(n)})] \\ y_i^{(n+1)} = \frac{1}{2}[Sq_i^{(n)} + (1-C)p_i^{(n)} - Sx_i^{(n)} + (1+C)y_i^{(n)})] \end{cases} , \qquad (6)$$

siendo $S := sin(2\delta\omega)$ y $C := cos(2\delta\omega)$.
Como esta transformación es independiente del Hamiltoniano elegido, se puede pensar como:

$$\begin{bmatrix} q_i^{(n+1)} \\ p_i^{(n+1)} \\ x_i^{(n+1)} \\ y_i^{(n+1)} \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} q_i^{(n)} \\ p_i^{(n)} \\ x_i^{(n)} \\ y_i^{(n)} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+C & S & 1-C & -S \\ -S & 1+C & S & 1-C \\ 1-C & -S & 1+C & S \\ S & 1-C & -S & 1+C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_i^{(n)} \\ p_i^{(n)} \\ x_i^{(n)} \\ y_i^{(n)} \end{bmatrix}$$

Recordatorio: Las posiciones y momentos son VECTORES, por lo tanto la dimensionalidad de los vectores columna es 12x1 y la matriz A es de 12x12.