



POLITÉCNICA

UNIVERSIDAD  
POLITÉCNICA  
DE MADRID



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR  
DE INGENIEROS DE MINAS Y ENERGÍA

Proyecto Fin de Grado

Grado en Ingeniería de la Energía

# ESTUDIO NUMÉRICO DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER-NEWTON

(Numerical Study of the Newton-Schrödinger  
Equation)

Autor:

· Marcos García Barriopedro

Tutor:

· Pedro Velarde Mayol  
(Departamento de Ingeniería  
Energética)



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID  
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DE MINAS Y  
ENERGÍA



Proyecto Fin de Grado

**Estudio Numérico de la Ecuación de  
Newton-Schrödinger**

Grado en Ingeniería de la Energía

Curso académico 2022-2023

Autor:

Marcos García Barriopedro

Tutor:

Pedro Velarde Mayol

*En primer lugar, me gustaría agradecer a toda mi familia el apoyo que me han ofrecido durante estos cuatro años para poder afrontar los momentos difíciles y haber disfrutado conmigo los mejores momentos. En especial, quiero mencionar a mi pareja, Carmen, la cual ha sido el pilar fundamental a la hora de levantarme después de todos los tropiezos en esta travesía.*

*También me gustaría hacer mención a los profesores que han pasado por mi lado y en especial a mi tutor, Pedro Velarde. Gracias a él he adquirido conocimientos fuera de la rama de mis estudios que me han ayudado a perseguir lo que realmente me gusta.*

*Y por último, debo hacer una gran mención a los compañeros con los que he compartido la carrera, Marcos, Blanca, Nilo y Pablo. Sin vosotros nada hubiese sido lo mismo.*

# Resumen

En este proyecto se abordó la resolución numérica de la *ecuación de Schrödinger-Newton*, una ecuación fundamental que combina la mecánica cuántica y la gravedad. Para abordar su complejidad, se implementó el *Método Crank-Nicolson*, una técnica de discretización temporal que permite obtener soluciones numéricas estables y precisas. Además, se aplicó la *Iteración por Punto Fijo* para resolver problemas no lineales que surgen en esta ecuación.

Los resultados obtenidos revelaron el comportamiento de sistemas cuánticos bajo la influencia de la gravedad, lo que tiene importantes implicaciones en la física teórica y la astrofísica. Se observan distintos comportamientos del sistema cuántico, dependiendo de la masa del mismo.

Este trabajo subraya la utilidad de las técnicas numéricas para abordar problemas físicos complejos y resalta la importancia de comprender la ecuación de Schrödinger-Newton en el contexto de la física contemporánea. También identifica áreas potenciales para futuras investigaciones en la intersección entre la mecánica cuántica y la relatividad general.

# Abstract

In this project, we tackled the numerical solution of the *Schrödinger-Newton equation*, a fundamental equation that combines quantum mechanics and gravity. To address its complexity, we implemented the *Crank-Nicolson Method*, a temporal discretization technique that allows for stable and accurate numerical solutions. Additionally, *Fixed-Point Iteration* was applied to solve nonlinear problems arising in this equation.

The obtained results revealed the behavior of quantum systems under the influence of gravity, which has significant implications in theoretical physics and astrophysics. Different behaviors of the quantum system are observed, depending on its mass.

This work underscores the utility of numerical techniques in addressing complex physical problems and highlights the importance of understanding the Schrödinger-Newton equation in the context of contemporary physics. It also identifies potential areas for future research at the intersection between quantum mechanics and general relativity.

# Índice

Agradecimientos . . . . .	I
Resumen . . . . .	II
Abstract . . . . .	III
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Contexto . . . . .	1
1.2. Alcance . . . . .	2
1.3. Estructura del Documento . . . . .	2
<b>2. Introducción a la Mecánica Cuántica</b>	<b>4</b>
2.1. Historia de la Física Moderna . . . . .	4
2.2. Conceptos Previos . . . . .	6
2.3. Matemáticas de la Cuántica . . . . .	7
2.4. Ecuación de Schrödinger-Newton . . . . .	10
2.5. Método de Crank-Nicolson . . . . .	12
<b>3. Resolución del Problema</b>	<b>15</b>
3.1. Método Numérico . . . . .	15
3.2. Programa Potential . . . . .	19
3.3. Programa Hamiltonian . . . . .	19
3.4. Programa CrankNichol_FixPoint . . . . .	19
<b>4. Resultados</b>	<b>20</b>
4.1. Resultados obtenidos . . . . .	20
4.1.1. Consideraciones Previas . . . . .	20
4.1.2. Simulación con $m=0,01\mu$ . . . . .	23
4.1.3. Simulación con $m=1\mu$ . . . . .	24
4.1.4. Simulación con $m=4\mu$ . . . . .	25
4.1.5. Simulación con $m=100\mu$ . . . . .	26
4.1.6. Comparación de Simulaciones . . . . .	27
4.2. Objetivos logrados . . . . .	27
4.3. Problemas encontrados . . . . .	28
<b>5. Conclusiones y trabajos futuros</b>	<b>30</b>
5.1. Conclusiones . . . . .	30
5.2. Lineas futuras . . . . .	31
<b>6. Realización del Proyecto</b>	<b>33</b>
6.1. Metodología . . . . .	33

6.1.1. Recopilación de Información . . . . .	34
6.1.2. Aprendizaje sobre el tema . . . . .	34
6.1.3. Realización del Código . . . . .	34
6.1.4. Redacción del Proyecto . . . . .	34
6.2. Programación Temporal . . . . .	35
6.3. Presupuesto . . . . .	36
6.4. Impacto Medioambiental . . . . .	38
<b>Bibliografía</b>	<b>40</b>
<b>Anexos</b>	<b>42</b>
<b>A. Gráficas de Operación del Programa</b>	<b>43</b>
<b>B. Programas de Simulación en Coordenadas Esféricas</b>	<b>45</b>
B.1. Programa Hamiltonian_Esf.m MatLab . . . . .	45
B.2. Programa Potential_Esf.m MatLab . . . . .	45
B.3. Programa CrankNicol_FixPoint_Esf.m MatLab . . . . .	46
B.4. Programa script_CrankNicol_FixPoint_Esf.m MatLab . . . . .	48
B.5. Programa Hamiltonian.py Python . . . . .	53
B.6. Programa Potential.py Python . . . . .	53
B.7. Programa CrankNicol_FixPoint.py Python . . . . .	54
B.8. Programa script_CrankNicol_FixPoint.py Python . . . . .	55
<b>C. Abreviaturas</b>	<b>56</b>
C.1. Acrónimos . . . . .	56
C.2. Unidades de Medida . . . . .	56

# Índice de tablas

6.1. Tiempos de trabajo del personal que interviene en el mismo. . . . .	36
6.2. Tabla presupuestaria del personal: Alumno y tutor. . . . .	36
6.3. Desglose de los precios de Software y Hardware utilizados en la realización del trabajo. . . . .	37
6.4. Presupuesto final, teniendo en cuenta impuestos. . . . .	38
6.5. Emisiones de Carbono del Uso del Ordenador . . . . .	39

# Índice de figuras

2.1. Precesión de la orbita de mercurio alrededor del Sol. Fuente: Wikipedia . . .	4
2.2. Distribución de Plank para distintas temperaturas del cuerpo negro. Fuente: Wikipedia . . . . .	5
2.3. Representación del experimento de la doble rendija llevado a cabo por Davisson y Germer en 1927. Fuente: Wikipedia . . . . .	6
2.4. Representación del colapso de la función de onda tras la medida de un observable. Fuente:[1] . . . . .	7
2.5. Función de onda solución a la ecuación de Schrödinger para un pozo de potencial infinito. Fuente:hyperphysics.phy-astr.gsu.edu . . . . .	9
3.1. Esquema de procedimiento del código empleado para la resolución de Newton-Schrödinger	18
4.1. Representación de dos las dos funciones entre una iteración con un error del orden de $10^{-7}$ . . . . .	21
4.2. Representación de dos las dos funciones entre una iteración con un error del orden de $10^{-9}$ . . . . .	22
4.3. Representación de dos las dos funciones entre una iteración con un error del orden de $10^{-10}$ . . . . .	22
4.4. Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de $0,01\mu$ . . . . .	23
4.5. Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de $0,01\mu$ . . . . .	23
4.6. Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de $1\mu$ . . . . .	24
4.7. Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de $1\mu$ . . . . .	24
4.8. Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de $4\mu$ . . . . .	25
4.9. Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de $4\mu$ . . . . .	25
4.10. Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de $100\mu$ . . . . .	26
4.11. Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de $100\mu$ . . . . .	26
4.12. Evolución temporal de $\langle u r u \rangle$ para las distintas masas simuladas a lo largo del apartado de resultados. . . . .	27
4.13. Evolución temporal de $\langle u \hat{H} u \rangle$ para las distintas masas simuladas a lo largo del apartado de resultados. . . . .	27

6.1.	Estructura de descomposición del proyecto. . . . .	33
6.2.	Diagrama de Gantt del proyecto . . . . .	35
A.1.	Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.3(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.1(b)) para un sistema con una masa de $0,01\mu$ . . . . .	43
A.2.	Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.2(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.2(b)) para un sistema con una masa de $1\mu$ . . . . .	43
A.3.	Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.3(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.3(b)) para un sistema con una masa de $4\mu$ . . . . .	44
A.4.	Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.4(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.4(b)) para un sistema con una masa de $100\mu$ . . . . .	44



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Contexto

Desde tiempos inmemorables, la física ha sido una disciplina que busca incansablemente unificar todas las leyes que gobiernan el universo en una única teoría coherente, conocida como la “teoría del todo”. Esta ambiciosa teoría tiene como objetivo fundamental abarcar y explicar las cuatro interacciones fundamentales que rigen nuestro universo: la fuerza nuclear fuerte, la fuerza nuclear débil, la fuerza electromagnética y la fuerza gravitatoria.

En la actualidad, las dos teorías que mejor describen y unifican tres de estas fuerzas son el “Modelo Estándar” y la “Teoría de la Relatividad General” de Albert Einstein. El Modelo Estándar es una teoría cuántica de campos que describe las interacciones débil, fuerte y electromagnética entre partículas subatómicas con gran precisión. Por otro lado, la Teoría de la Relatividad General de Einstein proporciona una descripción satisfactoria de la gravedad como una curvatura del espacio-tiempo debido a la presencia de masa y energía.

No obstante, la unificación de estas teorías ha sido un desafío importante en la física teórica. Aquí es donde entra en juego la ecuación de Schrödinger-Newton (SN), también conocida como ecuación de Schrödinger-Poisson. Esta ecuación es un intento de combinar los efectos cuánticos de la mecánica cuántica con los efectos gravitacionales descritos por la gravedad newtoniana.

La ecuación de SN fue propuesta por Lajos Diosi y Roger Penrose en sus artículos [2] y [3], donde se presenta una modificación no lineal de la ecuación de Schrödinger, que es fundamental en la mecánica cuántica y describe la evolución de la función de onda de una partícula. El término no lineal en esta ecuación proviene del campo gravitatorio newtoniano, que se determina mediante la ecuación de Poisson y que afecta la dinámica de la función de onda.

Lo más intrigante de la ecuación de Schrödinger-Newton es que, debido a su potencial gravitatorio, se teorizó que la función de onda colapsa sin necesidad de medición [4]. Esto ha llevado a especulaciones sobre si esta ecuación podría ofrecer una solución para el problema de la medida en la mecánica cuántica, donde la función de onda colapsa al ser observada. Sin embargo, es importante destacar que la ecuación de Schrödinger-Newton

sigue siendo una propuesta teórica y no ha sido confirmada experimentalmente.

En resumen, la búsqueda de una teoría del todo que unifique las cuatro fuerzas fundamentales de la naturaleza sigue siendo un objetivo fundamental en la física teórica, y la ecuación de Schrödinger-Newton representa un intento interesante de combinar la mecánica cuántica con la gravedad. Sin embargo, esta área de investigación sigue siendo un campo activo de estudio y debate en la comunidad científica.

## 1.2. Alcance

El alcance de este trabajo se enfoca en el análisis numérico de la ecuación de Schrödinger-Newton, utilizando un esquema Crank-Nicolson en combinación con el método de iteración de punto fijo. Esta investigación representa un esfuerzo significativo para avanzar en nuestra comprensión de la física cuántica en presencia de la gravedad y tiene aplicaciones potenciales en diversas áreas de la ciencia y la tecnología.

En primer lugar, la aplicación del método Crank-Nicolson a la ecuación de Schrödinger-Newton es fundamental para capturar con precisión la evolución temporal de sistemas cuánticos en un entorno gravitatorio. La discretización temporal proporcionada por este esquema numérico permite estudiar cómo la función de onda de una partícula o sistema evoluciona a lo largo del tiempo, teniendo en cuenta tanto los efectos cuánticos como los gravitatorios. Esto es esencial para comprender fenómenos complejos y dinámicos en escalas microscópicas y gravitatorias.

La inclusión de la iteración de punto fijo añade una dimensión adicional a la resolución de la ecuación de Schrödinger-Newton. Dado que esta ecuación es no lineal, la iteración de punto fijo es una herramienta poderosa para encontrar soluciones numéricas precisas. Esto es crucial para obtener resultados confiables y coherentes en escenarios cuánticos-gravitatorios, donde las interacciones son altamente no lineales y complejas.

El alcance de este trabajo se extiende al análisis de fenómenos cuánticos en entornos gravitatorios, abriendo la puerta a investigaciones de vanguardia en la intersección de la física teórica y numérica.

## 1.3. Estructura del Documento

Este trabajo se ha dividido en tres secciones claramente diferenciadas:

1. En primer lugar, se realiza un breve introducción de la física moderna y la mecánica cuántica para asentar la base teórica y poder introducir el concepto de la ecuación de Schrödinger-Newton y el método numérico aplicado a esta.

2. En segundo lugar, se desarrolla toda la aplicación del método numérico a nuestro problema y se desarrolla el algoritmo que sigue el programa desarrollado.
3. Por último, se presentan los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas en el espectro de masas y se finaliza con los comentarios y conclusiones referentes a la realización del proyecto.

# Capítulo 2

## Introducción a la Mecánica Cuántica

En este capítulo asentaremos las bases de la matemática y la física necesaria para poder abarcar el estudio que se lleva a cabo en el desarrollo del mismo. Se iniciará con una breve introducción a la historia de la mecánica cuántica con unos conceptos previos, y se finalizará con las ecuaciones a tratar y la explicación del método numérico aplicado a estas en el desarrollo del trabajo.

### 2.1. Historia de la Física Moderna

La física se basa en relacionar las observaciones de la realidad que nos rodea medidas experimentalmente con el cálculo matemático. Es decir, en cuantificar los fenómenos de la naturaleza.

Hasta el final del siglo XIX se pensaba que la física newtoniana podría explicar cualquier observación experimental. Sin embargo, hubo ciertos resultados matemáticos que no predecían las observaciones dadas en los laboratorios.

Un ejemplo de esto, fue la observación de la trayectoria que tiene mercurio orbitando alrededor del Sol. Se observó que este realizaba una precesión (fig 2.1), lo cual no coincidía con los cálculos de la física de Newton. No sería hasta 1915, con la presentación de la Teoría de la Relatividad General de Einstein, que se pudo explicar este fenómeno con sus ecuaciones de campo, mediante la cuales también se puede llegar a las ecuaciones que formuló Newton en su momento.

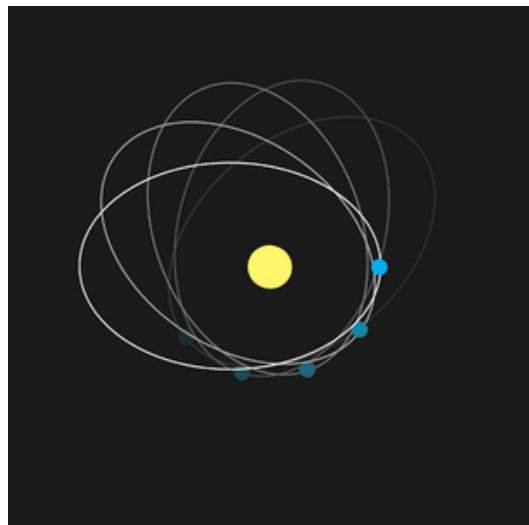


Figura 2.1: Precesión de la órbita de mercurio alrededor del Sol. Fuente: Wikipedia

La mecánica cuántica nace a inicios del siglo XX, al realizar experimentos para analizar el espectro de emisión del cuerpo negro, el cual se pensaba que al tener un cuerpo en equilibrio termodinámico con la radiación incidente, la radiación emitida debía ser proporcional al cuadrado de la frecuencia de la radiación emitida. Esto significaba que a altas frecuencias (ultravioleta) la radiación debía portar cantidades desorbitadas de energía,

lo cual no mantenía relación con la conservación de la energía.

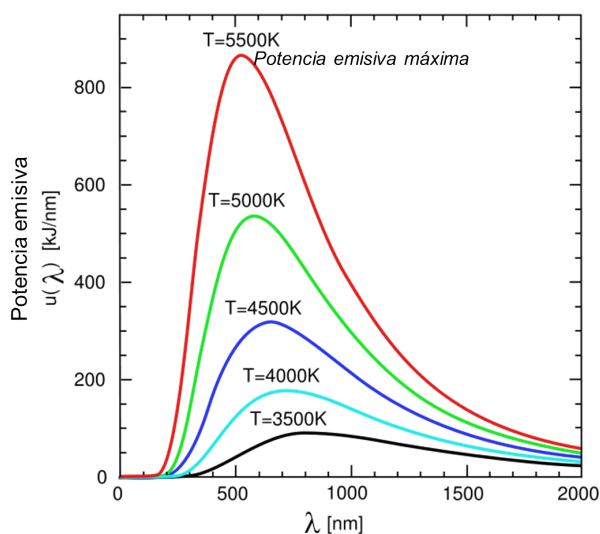


Figura 2.2: Distribución de Planck para distintas temperaturas del cuerpo negro. Fuente: Wikipedia

de Davisson y Germer (fig 2.3), mediante el cual se demostraba el comportamiento ondulatorio de las partículas con masa.

A medida que la mecánica cuántica se desarrolló, revolucionó nuestra comprensión del mundo microscópico. Surgieron conceptos clave como la dualidad onda-partícula, los estados cuánticos y el principio de incertidumbre, desafiando a la física clásica. La función de onda, descrita por la ecuación de Schrödinger, se convirtió en un componente central de la mecánica cuántica, proporcionando una descripción probabilística del comportamiento de las partículas.

Además, la teoría introdujo el concepto de niveles de energía *cuantizados*<sup>1</sup>, que explicaba fenómenos como las líneas espectrales discretas de los átomos. La mecánica cuántica ha encontrado aplicaciones en diversos campos, incluyendo la química cuántica, la física del estado sólido y la computación cuántica, impulsando avances tecnológicos y ampliando nuestro conocimiento de los bloques fundamentales del universo.

En suma, la transición de la física clásica a la mecánica cuántica marcó un cambio profundo en nuestra comprensión del mundo físico. Resolvió discrepancias en las observaciones experimentales y abrió el camino para descubrimientos innovadores. Hoy en día, la

<sup>1</sup>Los estados cuantizados están restringidos a valores discretos o cuantizados en lugar de tomar cualquier valor continuo

Para conciliar esta idea, en 1900, el físico alemán Max Planck propuso su modelo heurístico conocido como la Ley de Planck:

$$I(\omega, T) = \frac{2\pi\omega^2}{c^2} \frac{h\omega}{e^{\frac{h\omega}{kT}} - 1}$$

la cual solucionaba el problema planteado de la catástrofe del ultravioleta, introduciendo así la primera semilla en la historia de la cuántica.

Posteriormente, en 1925, Erwin Schrödinger formuló la ecuación que lleva su nombre, dando origen a los cimientos de la Mecánica Cuántica. Con esta teoría, se pudo dar explicación a experimentos que se desarrollaron en los años posteriores, como el experimento de la doble rendija

mecánica cuántica sigue siendo un pilar de la física moderna, inspirando la investigación y la innovación en la búsqueda de una comprensión más completa del universo.

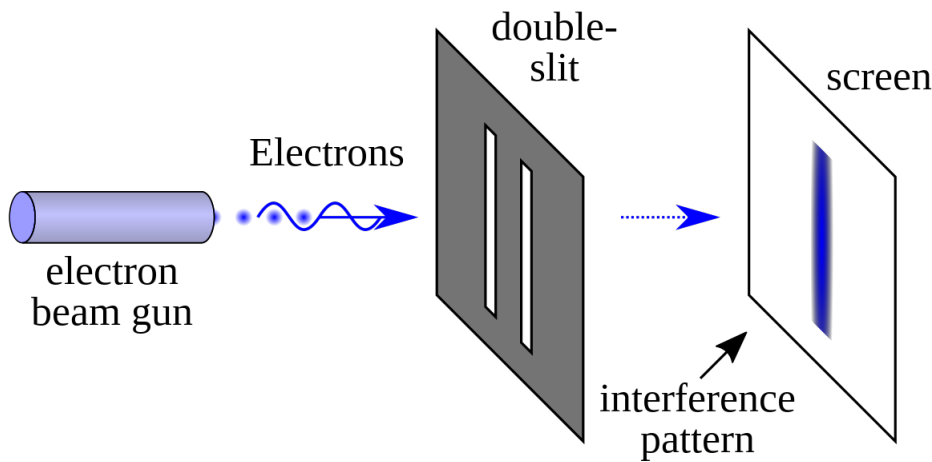


Figura 2.3: Representación del experimento de la doble rendija llevado a cabo por Davisson y Germer en 1927. Fuente: Wikipedia

## 2.2. Conceptos Previos

Antes de comenzar con la teoría fundamental, se debe realizar una breve explicación del término *Función de Onda*, el cual es imprescindible comprender en mecánica cuántica.

Al trabajar con mecánica clásica, toda partícula puede ser localizada en un punto localizado, y estudiar la evolución que presenta este.

Mientras, en el caso de la mecánica cuántica, se estudia la evolución de la función de onda,  $\psi(x, t)$ , que como su propio nombre indica, está definida en todo el espacio.

En la formulación moderna, la función de onda es interpretada como un objeto mucho más abstracto, que representa un elemento de un cierto espacio de Hilbert de dimensión infinita que agrupa a los posibles estados del sistema [5].

La función de onda también posee una interpretación estadística, donde el cuadrado de la función de onda representa la probabilidad de encontrarse la partícula en un punto. Con mayor precisión, esto se puede definir como:

$$\rho(t) = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx$$

donde  $\rho(t)$  representa la probabilidad de encontrarse una partícula en un punto entre  $a$  y  $b$  en un tiempo  $t$ . Esta es la interpretación estadísticas de Born.

Esta interpretación estadística da lugar a una especie de indeterminación, ya que aún sabiendo toda la información que proporciona un sistema cuántico (la función de onda), no se puede predecir con certeza en un experimento la posición de la partícula [6].

Sin embargo, si se realiza una segunda medida del estado cuántico, este devuelve el mismo valor. Es decir, tras haber medido el observable, la función de onda es alterada y esta colapsa en una delta de Dirac, de forma instantánea y discontinua, en el valor medido. A esto se le conoce como *la interpretación de Copenhague* y está representado en la figura 2.4.

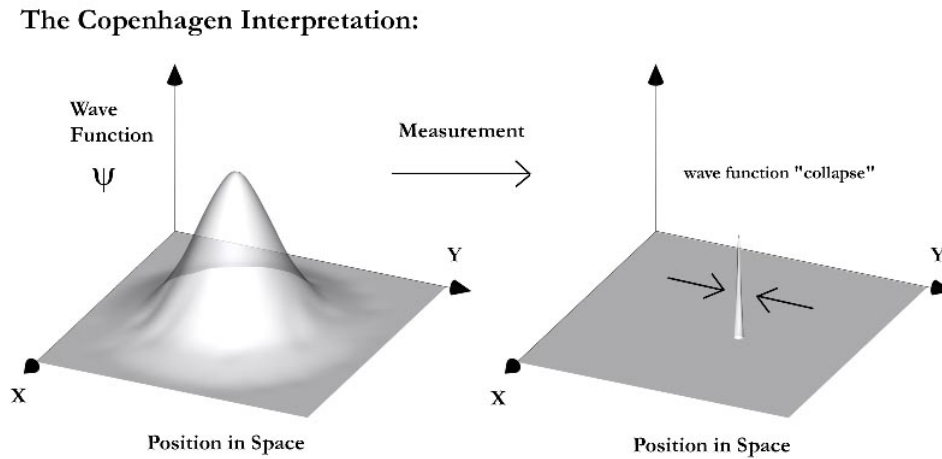


Figura 2.4: Representación del colapso de la función de onda tras la medida de un observable.

Fuente:[1]

## 2.3. Matemáticas de la Cuántica

La ecuación de Schrödinger fue propuesta por el físico Erwin Schrödinger en el año 1925, la cual describe la evolución de una partícula cuántica sin tener en cuenta los efectos relativistas.

A inicios del siglo XX, varios experimentos habían determinado que partículas como el fotón se comportaban como una onda a la hora de propagarse y como una partícula a la hora de interactuar, es decir, presentaban una dualidad onda-partícula. En 1923, el físico francés, Louis de Broglie, ante este comportamiento, propuso generalizar esta hipótesis a todas las partículas conocidas hasta el momento, y asignarlas una onda asociada, que viene dada por los siguientes parámetros:

$$E = \hbar\omega \quad (2.1)$$

$$p = \hbar k \quad (2.2)$$

donde  $h$  es la constante de Plank,  $\omega$  es la frecuencia de la onda y  $k$  el número de onda. Y la onda tomaría la siguiente forma:

$$\psi = e^{i(kr - \omega t)} \quad (2.3)$$

por lo que para obtener las expresiones 2.1 y 2.2, basta con aplicar los siguientes operadores a la ecuación de la onda asociada:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.4)$$

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \quad (2.5)$$

Ya conociendo los operadores 2.4 y 2.5, se introducen en la ecuación de relación energía-momento o relación de dispersión:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (2.6)$$

y se aplican a una función de onda:

$$\hat{E}\Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi \quad (2.7)$$

con lo que se obtiene la Ecuación de Schrödinger para una partícula libre.

Del mismo modo, se pueden aplicar los operadores de energía y momento a la relación de dispersión relativista que viene dada por:

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \quad (2.8)$$

lo que daría:

$$\hat{E}^2\Psi = (c^2\hat{p}^2 + m^2c^4)\Psi \longrightarrow \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = \frac{\partial^2}{\partial r^2}\Psi - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\Psi \quad (2.9)$$

obteniéndose así la ecuación de Klein-Gordon, la cual no puede utilizarse consistentemente como una ecuación en la amplitud de una onda, debido a que al estar elevado al cuadrado el término de la energía, la densidad de probabilidad de la función de onda, tendría una solución positiva y una negativa, lo cual no es consistente.

Más tarde, en 1928, el ingeniero y matemático Paul Dirac presentaría la ecuación que lleva su nombre, que no sería mas que linealizar la ecuación de Klein-Gordon, dando lugar a:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left( \alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha_j \hat{p}_j c \right) \Psi \quad (2.10)$$

donde  $\alpha$  representan las matrices  $4 \times 4$  de Dirac, las cuales están directamente relacionadas con el *spin* de las partículas.

En el caso de este trabajo, nos enfocaremos en trabajar con la ecuación de Schrödinger,

la cual hemos presentado anteriormente en 3.1 para una partícula libre. En este caso, trabajaremos con esta ecuación sometida a un potencial gravitatorio, por lo que debemos modificar 3.1 y añadirle el término potencial:

$$\hat{E}\Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + V(r)\Psi \quad (2.11)$$

o, de una forma más generalizada:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi} \quad (2.12)$$

En el caso del término potencial, este se ha introducido como un término generalizado ya que, en el transcurso de este trabajo se desarrollará en más detalle.

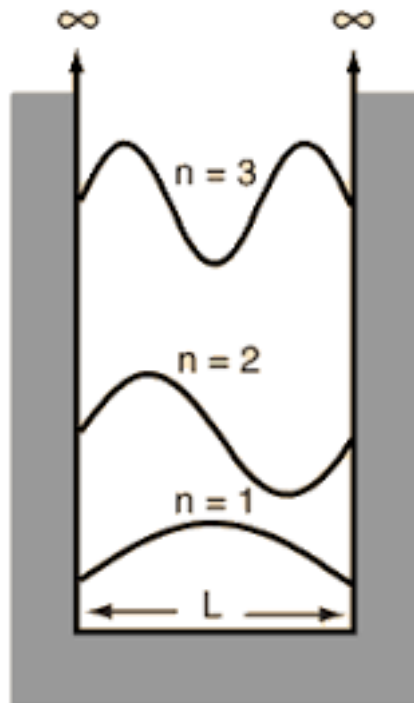


Figura 2.5: Función de onda solución a la ecuación de Schrödinger para un pozo de potencial infinito.

Fuente:hyperphysics.phy-astr.gsu.edu

Otro factor a comentar es la norma de la función de onda, la cual se debe conservar a lo largo del tiempo, como se demuestra en 2.13, lo cual implicará ciertos condicionamientos a la hora de hacer un estudio numérico, como se verá más adelante.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi|\Psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi \right) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi \right) dx = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi \right) \Bigg|_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad (2.13) \end{aligned}$$

## 2.4. Ecuación de Schrödinger-Newton

Esta idea, fue propuesta por Lajos Diósi [2] y Roger Penrose [3], con el objetivo de obtener una descripción dinámica del colapso de la función de onda. Recientemente, se le ha vuelto a dar importancia a esta ecuación debido a su conexión con la idea de la gravedad cuántica.[7]

Realmente, el problema de la gravedad es el hecho de cuantizar este campo. Es por, ello que en [2] y [3] se propone la idea de tratar los operadores de campo como campos cuánticos pero, en el caso del campo gravitacional, tratarlo “clásicamente”. A esta idea se le dio el nombre de *gravedad semiclásica*.

La ecuación de Schrödinger-Newton o Schrödinger-Poisson, es un variante no-lineal de la ecuación de Schrödinger con un potencial gravitatorio, solución a la ecuación de Poisson (2.15), el cual resulta de tratar la función de onda como una ‘*distribución de masa*’.

La ecuación de Schrödinger-Newton viene dada por estas dos ecuaciones acopladas:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(r, t) + m\Phi(r, t)\Psi \quad (2.14)$$

$$\Delta \Phi = Gm|\Psi(r, t)|^2 \quad (2.15)$$

aunque, puede ser reescrita en una única ecuación integro-diferencial gracias a que la ecuación 2.15 puede obtenerse mediante la función de Green, lo que da lugar a:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(r, t) + Gmm \int \frac{|\Psi(r', t)|^2}{|r - r'|} d^3r' \Psi(r, t) \quad (2.16)$$

Para una mayor rigurosidad, debemos definir de donde provienen la ecuaciones anteriormente mencionadas.

Por ello, partimos definiendo la acción clásica de la relatividad general, la acción de Einstein-Hilbert:

$$S = \frac{c^4}{8\pi G} \int R \sqrt{|g|} d^4x \quad (2.17)$$

donde  $G$  es la constante de gravitación universal de Newton,  $c$  es la velocidad de la luz,  $g$  es la métrica del espacio tiempo y  $R$  denota el escalar de Ricci.

Posteriormente, la ecuaciones de campo de Einstein provienen de realizar la derivada funcional a la acción de Einstein-Hilbert con respecto a la métrica ( $g$ ) y aplicando el principio estacionario de la acción, con esto obtenemos la siguiente ecuación:

$$G_{\mu\nu} = R_{\mu\nu} + \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = \frac{8\pi G}{c^4} \bar{T}_{\mu\nu} \quad (2.18)$$

donde  $G_{\mu\nu}$  es el tensor de Einstein,  $R_{\mu\nu}$  es el tensor de Riemann y  $\bar{\bar{T}}_{\nu\mu}$  es el tensor energía-impulso.

Esta es la ecuación clásica de gravedad de Einstein. Para pasar de una teoría clásica a una semiclásica, se intercambia el tensor energía-impulso por su valor esperado, dada una función de onda, es decir:

$$R_{\mu\nu} + \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = \frac{8\pi G}{c^4} \langle \Psi | \bar{\bar{T}}_{\mu\nu} | \Psi \rangle \quad (2.19)$$

Para llegar finalmente al potencial gravitatorio semiclásico, debemos tomar el límite no relativista para energías bajas, donde  $\langle \Psi | T_{00} | \Psi \rangle$  es mayor que los otros términos del tensor, lo que nos dará lo siguiente ([7]):

$$\Delta\Phi = G \langle \Psi | T_{00} | \Psi \rangle \quad (2.20)$$

Como se ha mencionado anteriormente, aplicando la función de Green a esta ecuación obtenemos la solución analítica explicita del potencial:

$$V = m \cdot \Phi = Gm^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\Psi(t, x')|^2}{|x - x'|} dx' \quad (2.21)$$

siendo este el caso unidimensional para una única partícula con masa  $m$ .

Volviendo al campo de la mecánica cuántica, en el caso de querer analizar un sistema con  $N$  partículas idénticas con masa, se debe fabricar un espacio de funciones  $\mathcal{H}_N$  a partir de los espacios mono partícula,  $\mathcal{H}_\infty$ , tal que:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_\infty^1 \otimes \mathcal{H}_\infty^2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_\infty^N \quad (2.22)$$

Y una base  $B_N$  de  $\mathcal{H}_N$  puede fabricarse a partir de las funciones base monopartícula, es decir:

$$\phi(t, x_1, x_2, \dots, x_N) = \phi(x_1) \cdot \phi(x_2) \cdot \dots \cdot \phi(x_N) \quad (2.23)$$

Aplicando esto a nuestro caso, que la ecuación de Schrödinger tomaría la siguiente forma ([8]):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x_1, x_2, \dots, x_N) = & - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_j \Psi(t, x_1, x_2, \dots, x_N) \\ & + G \sum_{j,k}^N m_j m_k \int \frac{|\Psi(t, x'_1, x'_2, \dots, x'_N)|^2}{|x_j - x'_k|} d^3 x'_1 d^3 x'_2 \dots d^3 x'_N \Psi(t, x_1, x_2, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (2.24)$$

Es evidente que, a la hora de querer tratar con un sistema de varias partículas, el problema se vuelve altamente complejo. Para simplificar el problema, podemos trabajar con un conjunto infinito de partículas de la misma masa, es decir,  $N \rightarrow \infty$ . Por lo que aplicaremos una aproximación de Born-Oppenheimer, asumiendo que el conjunto de

partículas comparten un centro de masas y, además se realizará una simplificación por jerarquía Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon (BBGKY), reduciendo el problema a ([7]):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \Psi(r, t) \right) + Gmm \int \frac{|\Psi(r, t)|^2}{|r - r'|} dr' \Psi(r, t) \quad (2.25)$$

lo cual es un sistema de una única dimensión ( $r$ ), que hace referencia al centro de masas de un sistema con infinitas partículas.

## 2.5. Método de Crank-Nicolson

El método de Crank-Nicolson es un método del campo del análisis numérico para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales (EDP's), basado en la discretización por medio de diferencias finitas.

Este es usado para ecuaciones en derivadas parciales parabólicas de la forma [9]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = G \left( f, x, t, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) \quad (2.26)$$

de tal manera que la parte a la derecha de la igualdad 2.26 se discretizaría en una parte explícita y otra parte implícita de tal modo que [10]:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\delta t} = \theta \cdot G_j^{n+1} \left( f, x, t, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) + (1 - \theta) \cdot G_j^n \left( f, x, t, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) \quad (2.27)$$

donde  $\theta$  es el parámetro que indica si el método que utilizamos es el método Euler explícito ( $\theta = 0$ ), Euler implícito ( $\theta = 1$ ) o Crank-Nicolson ( $\theta = 0,5$ ).

Por otro lado, las derivadas espaciales tomarían la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{f_{j+1}^n - f_j^n}{\delta x} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{\delta x^2} \end{aligned}$$

Hay que tener en cuenta que estas expresiones de las derivadas son aproximadas y el error de aproximación es de  $O(\delta x^2)$  [9].

Podemos aplicar este método, por ejemplo, a la ecuación de difusión en una dimensión:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

lo que nos daría un esquema de la siguiente manera:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\delta t} = \frac{\alpha}{2} \left[ \left( \frac{f_{j+1}^{n+1} - 2f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n+1}}{\delta x^2} \right) + \left( \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{\delta x^2} \right) \right] \quad (2.28)$$

y podemos reorganizar el esquema 2.28, dejando a la izquierda del igual la parte temporal en  $n + 1$  y a la derecha la parte temporal en  $n$ , lo que tendría la siguiente forma:

$$-r f_{j+1}^{n+1} + (1 + 2r) f_j^{n+1} - r f_{j-1}^{n+1} = r f_{j+1}^n + (1 - 2r) f_j^n + r f_{j-1}^n \quad (2.29)$$

siendo  $r$ , el número de Courant,  $r = \frac{\alpha \delta t}{2\delta x^2}$ .

Ahora se puede reescribir la ecuación 2.29 de forma matricial:

$$A f^{n+1} = T f^n$$

con:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -r & 1 + 2r & -r & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -r & 1 + 2r & -r \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ r & 1 - 2r & r & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r & 1 - 2r & r \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

si las condiciones de contorno son constantes [11].

En cuanto a la estabilidad del método, existen diversos métodos para analizar la estabilidad de una ecuación parabólica, pero el más sencillo de aplicar a un método de integración es el criterio de Von Neumann [11]. Este consiste en suponer que la solución es de la forma:

$$f(x, t) = M(t) e^{ikx}$$

y si se discretiza:

$$f_j^n = M^n e^{ik(j\delta x)}$$

Ahora, se define el término de amplificación:

$$\eta = \frac{M^{n+1}}{M^n}$$

En caso de que el factor de amplificación sea mayor que uno, es decir,  $|\eta| > 1$ ; la amplitud de la solución aumenta con el tiempo y se vuelve inestable. Por lo contrario, si  $|\eta| < 1$ , la amplitud de la solución disminuye con el tiempo y el método es estable.

En el caso del esquema Crank-Nicolson, para la ecuación de difusión, si se supone la solución exponencial compleja, obtenemos lo siguiente:

$$M^{n+1} e^{ik(j\delta x)} = M^n e^{ik(j\delta x)} + r [M^{n+1} (e^{ik(j+1)\delta x} - 2e^{ik(j\delta x)} + e^{ik(j-1)\delta x}) + M^n (e^{ik(j+1)\delta x} - 2e^{ik(j\delta x)} + e^{ik(j-1)\delta x})]$$

con lo que obtenemos un valor de amplificación:

$$\eta = \frac{1 - 4r \cdot \text{sen}^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)}{1 + 4r \cdot \text{sen}^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)}$$

y como se puede observar,  $|\eta|$  es siempre  $< 1$ , por lo que este esquema es incondicionalmente estable [11].

Además, otro factor por el cual se ha decidido usar este método, es gracias a que es un método conservativo. Esto es debido a que la multiplicación de las matrices  $A^{-1}$  y  $T$ , para la solución de del sistema de ecuaciones es unitaria.

Esta cualidad es de gran importancia ya que, en el caso de la función de onda, se ha de conservar el valor unitario de la norma de la misma, como se ha demostrado de manera analítica en :

# Capítulo 3

## Resolución del Problema

En este apartado, desarrollaremos la aplicación del método numérico explicado anteriormente a nuestro problema, además de desarrollar un código de simulación para resolver dicho problema.

### 3.1. Método Numérico

En este caso, nuestro problema viene dado por la siguiente ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + m\Phi \Psi \quad (3.1)$$

donde  $i, \hbar$  y  $m$  son la unidad imaginaria, la constante de Plank dividida por  $2\pi$  y la masa de la partícula, respectivamente.  $V$  es el potencial, que proviene de la siguiente ecuación

$$\Delta V = Gm|\Psi|^2 \quad (3.2)$$

donde  $G$  es la constante de gravitación universal.

Como el propósito de este trabajo, es hacer un análisis de esta ecuación en una dimensión en coordenadas esféricas, volveremos a reescribir 3.1 y 3.2 de la siguiente forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi(r, t) \right) + m\Phi(r, t) \Psi(r, t) \quad (3.3)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Phi(r, t) \right) = Gm|\Psi(r, t)|^2 \quad (3.4)$$

Ahora, para facilitar el trabajo con estas ecuaciones, se puede realizar el cambio de variable  $u(r, t) = r \cdot \Psi(r, t)$ . Con este cambio, las ecuaciones toman la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r, t) + m\Phi(r, t) u(r, t) \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Phi(r, t) \right) = Gm|u(r, t)|^2 \quad (3.6)$$

A la hora de discretizar este problema, se hará uso del método de diferencias finitas, por lo que las derivadas de las ecuaciones 3.3 y 3.4 toman la siguiente forma:

$$\frac{\partial u(r, t)}{\partial t} = \frac{u(r, t + \delta t) - u(r, t)}{\delta t} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial^2 u(r, t)}{\partial r^2} = \frac{u(r + \delta x, t) - 2u(r, t) + \Psi(r - \delta r, t)}{\delta r^2} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r} \right) = \frac{r_{i+1/2}^2 \Phi(r + \delta r, t) - (r_{i+1/2}^2 + r_{i+1/2}^2) \Phi(r, t) + r_{i-1/2}^2 \Phi(r - \delta r, t)}{\delta r^2} \quad (3.9)$$

Ahora, cogiendo estas ecuaciones y aplicando el esquema CN, se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{u(r, t + \delta t) - u(r, t)}{\delta t} &= -\frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(r + \delta r, t + \delta t) - 2u(r, t + \delta t) + u(r - \delta r, t + \delta t)}{\delta r^2} \\ &- \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{u(r + \delta r, t) - 2u(r, t) + u(r - \delta r, t)}{\delta r^2} + \frac{1}{2} \cdot V(r, t + \delta t)u(r, t + \delta t) + \frac{1}{2} \cdot V(r, t)u(r, t) \end{aligned}$$

donde se ha simplificado la expresión  $m\Phi$  por  $V$  y podemos observar que los parámetros de argumento  $t$  corresponden a un paso temporal y los de argumento  $t + \delta t$  corresponden al siguiente paso temporal y lo mismo para la parte espacial. Por consiguiente, reorganizaremos la ecuación, dejando en la parte izquierda el paso temporal  $t + \delta t$  (la parte implícita) y a la derecha el paso temporal  $t$  (la parte explícita). Para mayor sencillez, denotaremos con el índice  $j$  los nodos espaciales y con  $n$  los nodos temporales.

$$\begin{aligned} -\frac{i\hbar\delta t}{4m\delta r^2} u_{j+1}^{n+1} + \left(1 + \frac{i\hbar\delta t}{2m\delta r^2} + \frac{i\delta t}{2\hbar} V_j^{n+1}\right) u_j^{n+1} - \frac{i\hbar\delta t}{4m\delta r^2} u_{j-1}^{n+1} = \\ \frac{i\hbar\delta t}{4m\delta r^2} u_{j+1}^n + \left(1 - \frac{i\hbar\delta t}{2m\delta r^2} - \frac{i\delta t}{2\hbar} V_j^n\right) u_j^n + \frac{i\hbar\delta t}{4m\delta r^2} u_{j-1}^n \end{aligned}$$

Ya habiendo desarrollado el esquema podemos unificar toda la expresión como:

$$\left(I + i\frac{\delta t}{2\hbar} \hat{H}^{n+1}\right) u^{n+1} = \left(I + i\frac{\delta t}{2\hbar} \hat{H}^n\right) u^n \quad (3.10)$$

donde  $I$  representa la matriz identidad y  $\hat{H}$  representa la matriz del Hamiltoniano del sistema que viene dada por la siguiente expresión:

$$\frac{\hbar^2}{2m\delta r^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} + m \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ \cdots \\ V_{N-1} \\ V_N \end{pmatrix}^T \quad (3.11)$$

Esta matriz tiene dimensiones de  $N \times N$ , donde  $N$  representa el número de nodos espaciales.

En el caso del potencial, este se resuelve de la ecuación diferencial por el método de

diferencias finitas centradas resolviendo el siguiente sistema:

$$\begin{pmatrix} -\alpha_1 & \beta_1^{sup} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_2^{inf} & -\alpha_2 & \beta_2^{sup} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \beta_{N-1}^{inf} & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1}^{sup} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \beta_N^{inf} & -\alpha_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ \cdots \\ V_{N-1} \\ V_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Gm|u_1|^2 \\ Gm|u_2|^2 \\ Gm|u_3|^2 \\ \cdots \\ Gm|u_{N-1}|^2 \\ Gm|u_N|^2 \end{pmatrix}$$

donde la matriz tridiagonal del inicio proviene de la discretización de la derivada de segundo orden en coordenadas radiales y  $\alpha$ ,  $\beta_{sup}$  y  $\beta_{inf}$  tienen las siguientes expresiones:

- $\alpha_i = r_{i+1/2}^2 + r_{i-1/2}^2$
- $\beta_i^{sup} = r_{i+1/2}^2$
- $\beta_i^{inf} = r_{i-1/2}^2$

Como se ha dicho anteriormente, el término del potencial depende de la propia función de onda. Es por ello, que como podemos observar en la ecuación 3.10, para encontrar la solución en un paso de tiempo  $n + 1$ , necesitamos obtener el Hamiltoniano en ese paso de tiempo  $n + 1$ , lo que quiere decir que debemos conocer la función de onda en ese paso de tiempo  $n + 1$  para hallar el vector potencial,  $V$ .

Es por ello que, para este problema en concreto, es necesario el uso de un mecanismo de iteración entre pasos de tiempo que consiga converger hacia una solución.

En el caso del programa realizado en este trabajo se ha hecho uso del punto fijo, que se basa en suponer un función de onda solución a la ecuación en ese paso de tiempo, lo cual devolverá otra función.

1.  $u^{n+1*} = u^n$
2.  $u^{n+1**} = (I + i\frac{\delta t}{2\hbar}\hat{H}^{n+1})^{-1}(I - i\frac{\delta t}{2\hbar}\hat{H}^n)u^n$

Para saber si la función de onda es una solución correcta, la diferencia entre la función de onda supuesta y la de salida debería ser prácticamente 0. Para ello, se estudia el valor absoluto de la diferencia media (3.12) que hay entre dos funciones de dos iteraciones consecutivas. Si esta diferencia tiene un tendencia negativa, y su valor es cercano a 0, se puede concluir que se ha encontrado una solución en ese paso de tiempo.

$$\text{Error iteración} = \epsilon^n = \int_{-\infty}^{\infty} |u^{n**} - u^{n*}| dr \quad (3.12)$$

Para una mejor explicación, la figura 3.1 representa el esquema de pasos que sigue el código de iteración.

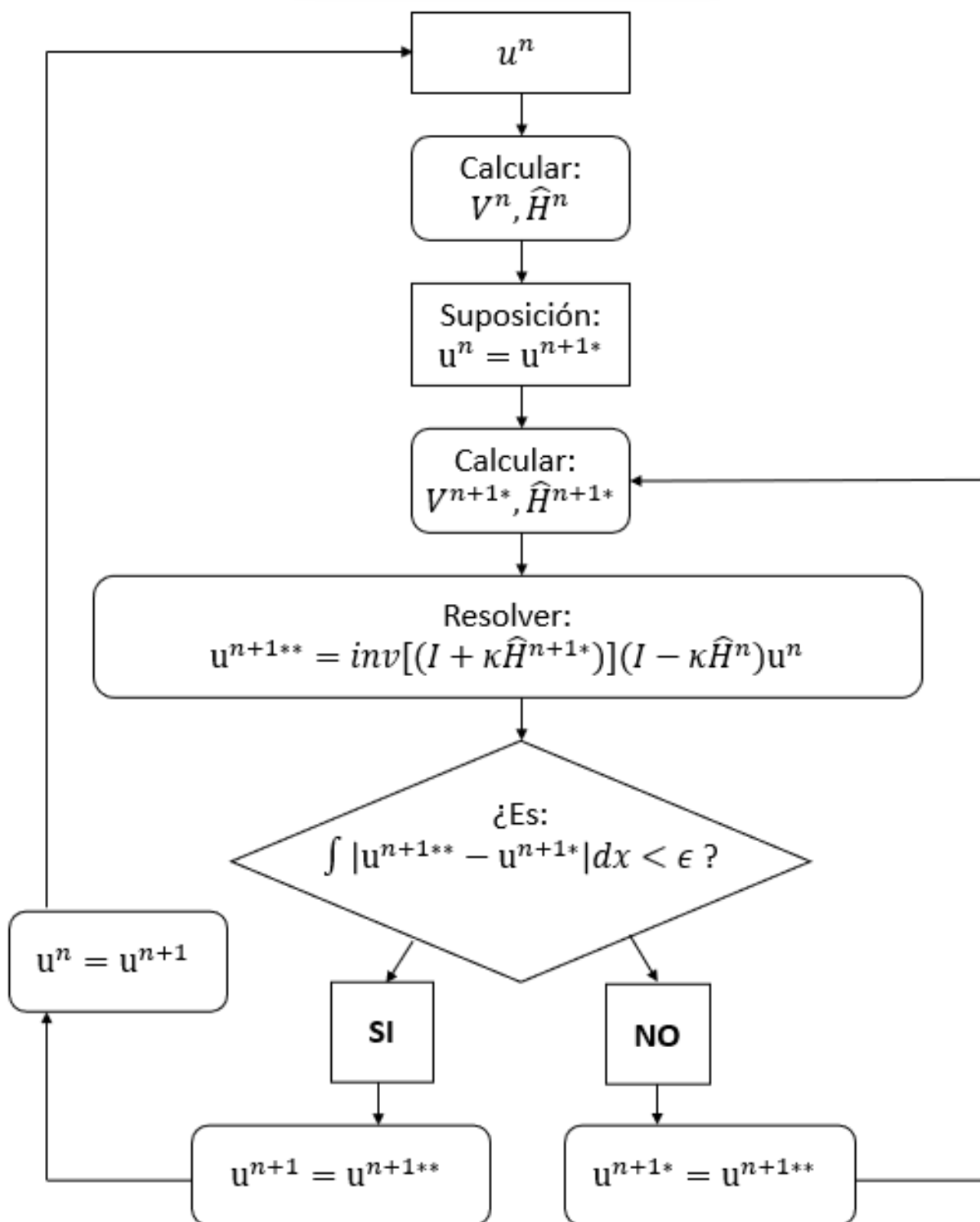


Figura 3.1: Esquema de procedimiento del código empleado para la resolución de Newton-Schrödinger

## 3.2. Programa Potential

Este programa, es una función cuyas entradas son  $(x, Psi, G, hbar, m, Type)$ , donde  $x$  representa el vector de nodos espaciales,  $Psi$  la función de onda multiplicada por  $r$   $[u(r, t)]$ , y  $G, hbar$  y  $m$  la constante de gravitación universal, la constante de Plank entre  $2\pi$  y la masa de la partícula respectivamente.

En el caso de  $Type$ , es un valor que se introduce en función del potencial que se quiera utilizar. Si:

- $Type = 1 \implies$  Potencial Armónico ( $V = \frac{1}{2}\omega x^2$ )
- $Type = 2 \implies$  Potencial de Poisson
- $Type = 3 \implies$  Potencial densidad de probabilidad ( $V = \gamma \cdot |\Psi|^2$ )

El cometido de este programa, es únicamente calcular el el vector potencial,  $V$ , mediante el método que se ha detallado en el apartado anterior.

## 3.3. Programa Hamiltonian

En el caso de esta función, tendremos como entradas  $(r, V, hbar, m)$ , donde  $x$  representa el vector de nodos espaciales,  $V$  el vector de nodos del potencial,  $hbar$  la constante de Plank reducida y  $m$  la masa de la partícula.

Su salida es la matriz Hamiltoniana, la cual se halla con el resolviendo 3.10, y en ella se establecen las condiciones de contorno, y en este caso como las condiciones son  $\Psi(0, t) = 0$  y  $\Psi(L, t) = 0$ , por lo que:

$$\begin{array}{ll} H(1, 1) = 0 & H(1, 2) = 0 \\ H(N, N) = 0 & H(N, N - 1) = 0. \end{array}$$

## 3.4. Programa CrankNichol\_FixPoint

Este programa, tiene como entradas  $(Psi, r, G, m, hbar, dt)$ , que representan exactamente lo mismo que en los anteriores programas y además se añade  $dt$  que es el paso temporal.

En este caso, el programa se encarga de realizar la iteración para buscar la solución para un tiempo  $n + 1$ . Para hallar esta solución, realiza el procedimiento expuesto en el figura 3.1. También hay que tener en cuenta que el valor de  $\epsilon$  es introducido en este programa, aunque este no este como variable de entrada.

# Capítulo 4

## Resultados

En este apartado, se desarrollará y comentará los resultados obtenidos de las distintas simulaciones realizadas con el programa. Posteriormente se analizarán los objetivos logrados y los problemas encontrados a la hora de realizar el programa y el trabajo en general.

### 4.1. Resultados obtenidos

#### 4.1.1. Consideraciones Previas

En el caso de los resultados, se van a clasificar en función de la masa de cada una de las simulaciones.

Las unidades con las que se ha trabajado en las simulaciones se han relacionado con las constantes  $\hbar$ ,  $G$  y  $L$ , que son la constante de Plank reducida, la constante de gravitación universal y el ancho de la caja del sistema, respectivamente.

En el caso de la masa, esta se relaciona de la siguiente manera:

$$\mu = \left( \frac{\hbar^2}{GL} \right)^{1/3} \approx 5,5061 \cdot 10^{-17} kg \approx 6 \cdot 10^{13} \text{ masas del electrón}$$

A este parámetro, se le denotará como unidad de masa y será el que se varíe para observar la distintas evoluciones que puede sufrir el sistema.

En cuanto a la energía, se medirá en unidades de  $e$ , que tiene la siguiente expresión:

$$e = \left( \frac{G\hbar^4}{L^5} \right)^{1/3} = 2,0222 \cdot 10^{-34} \text{ J} \quad (4.1)$$

Por último, el tiempo se ha relacionado en unidades de  $\tau$ :

$$\tau = \left( \frac{L^5}{G\hbar} \right)^{1/3} \approx 0,5218 \text{ s}$$

Como se podrá observar, en las gráficas donde se presentarán los distintos parámetros a analizar, las unidades de los ejes vendrán en unidades de metros ( $m$ ) en el caso espacial, en unidades de  $\tau$  en el caso temporal y por último, la densidad de probabilidad en unidades de  $\sqrt{m}$ .

En cada una de las simulaciones, se analizarán la evolución de la densidad de probabilidad, la evolución del máximo de la densidad de probabilidad y la evolución de la energía del sistema.

Por otro lado, también hay que tener en cuenta que valor  $\epsilon$ , el cual viene dado por la ecuación 3.12, detallada anteriormente, para considerar que la función de onda, solución en las iteraciones por punto fijo, son soluciones correctas.

Es por ello, que se analizará el valor de  $\epsilon$ , par el cual dos funciones consecutivas de una iteración ( $u^{n^{**}}$  y  $u^{n^*}$ ) pueden ser consideradas la misma función.

En las siguientes figuras, representamos la parte real de dos funciones resultantes entre una misma iteración para distintos valores del error entre las mismas, para así poder valorar a partir de que error se pueden considerar la misma función.

Como se puede observar en las figuras 4.1, 4.2 y 4.2, a partir de un orden de  $10^{-9}$ , las dos funciones se solapan y se puede suponer que es la misma función. Con esto podemos concluir que la iteración ha convergido y la solución es válida.

Por último, mencionar que, en cuanto a condiciones iniciales temporales, todas las simulaciones se han comenzado con la siguiente función:

$$u(r, 0) = r \cdot \left( e^{-\left(\frac{r}{\sigma}\right)^2} - e^{-\left(\frac{L}{\sigma}\right)^2} \right)$$

donde  $\sigma$  es la desviación típica de la Gaussiana y tiene un valor de  $\frac{L}{3}$  para todas las simulaciones.

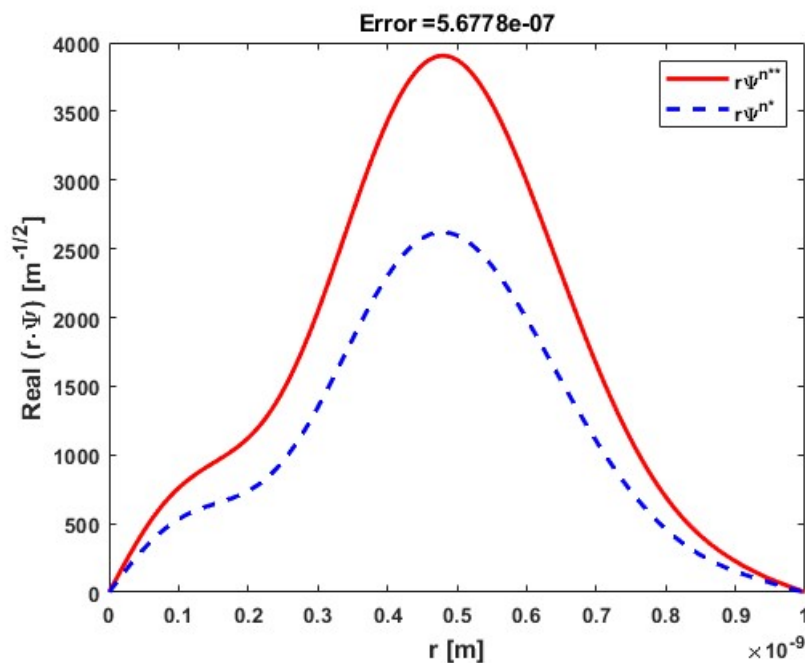


Figura 4.1: Representación de dos las dos funciones entre una iteración con un error del orden de  $10^{-7}$ .

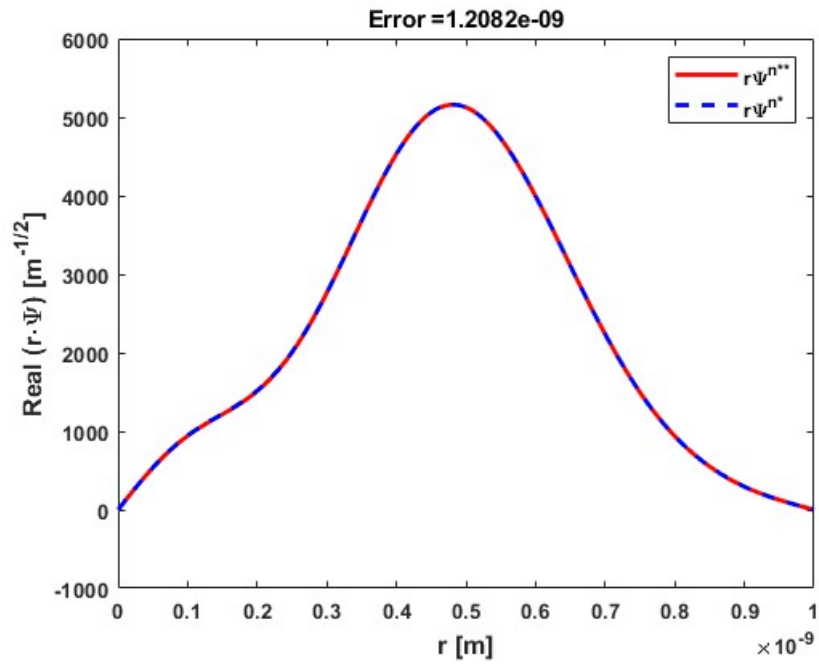


Figura 4.2: Representación de dos las dos funciones entre una iteración con un error del orden de  $10^{-9}$ .

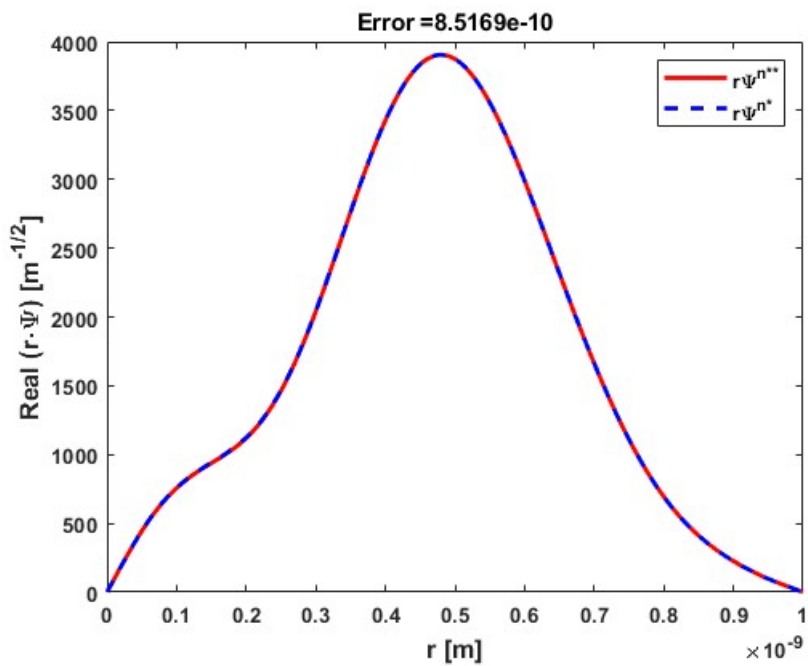


Figura 4.3: Representación de dos las dos funciones entre una iteración con un error del orden de  $10^{-10}$ .

### 4.1.2. Simulación con $m=0,01\mu$

En primer lugar, en este apartado se muestran los resultados obtenidos para un sistema con una masa de  $m = 0,01\mu$ , la cual es bastante inferior a la escala con la que se está trabando el sistema. Como se puede observar en las figuras de 4.4, la densidad de probabilidad comienza a comportarse como una partícula libre confinada en un pozo de potencial infinito. Esto se debe a que el valor del potencial no es lo suficientemente elevado como para confinar la partícula.

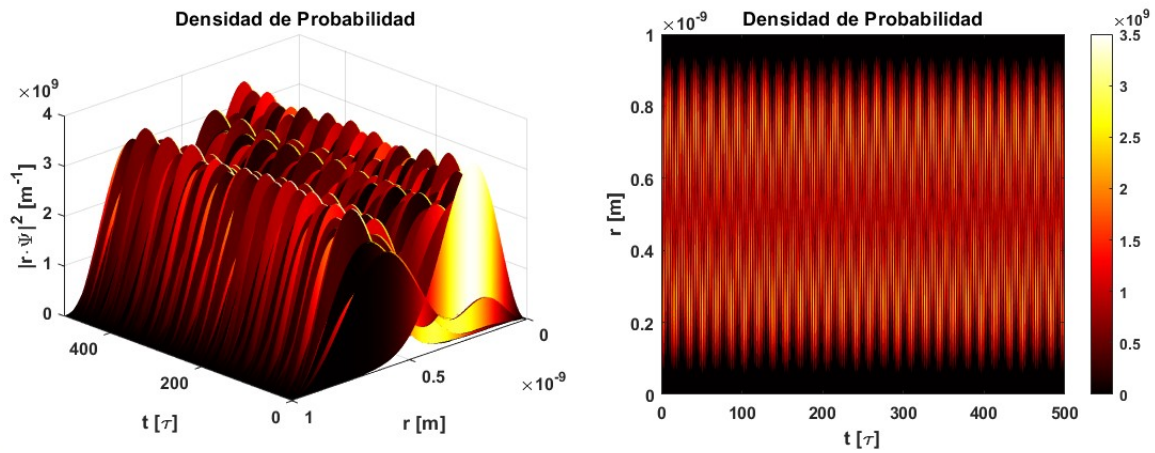


Figura 4.4: Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de  $0,01\mu$

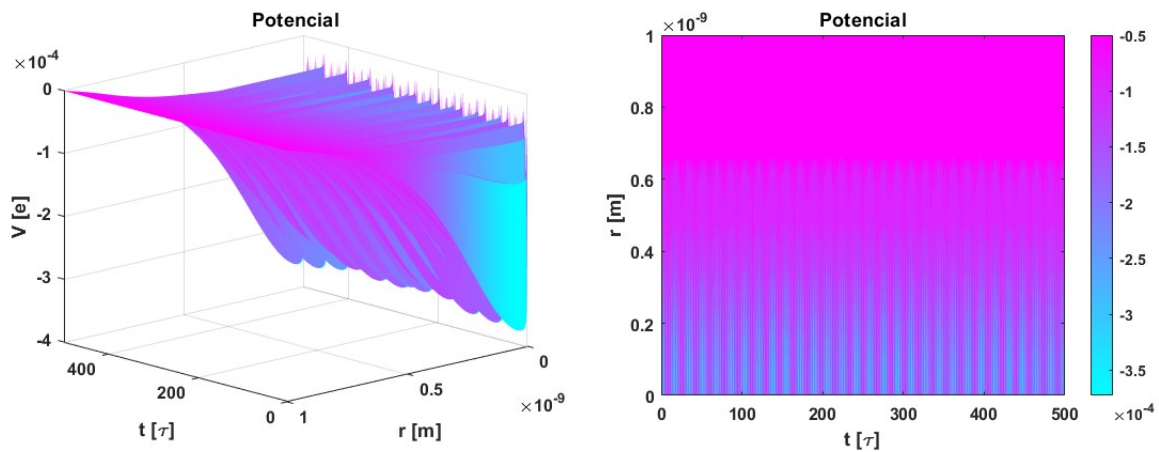


Figura 4.5: Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de  $0,01\mu$ .

### 4.1.3. Simulación con $m=1\mu$

Como continuación, realizaremos simulaciones con valores muy semejantes a las constantes definidas anteriormente. En este caso, utilizaremos una masa de  $m = 1\mu$ .

Como se puede observar en las figuras de 4.6, tenemos una evolución muy similar a la anterior simulación, en la cual la función de onda se va difundiendo por todo el ancho de la caja, pero esta vez con un carácter más oscilante.

En cuanto al potencial, en las figuras de 4.7 se puede observar como este toma una forma parecida a la de  $\Psi$  y toma valores de hasta  $-3,5e$  de energía.

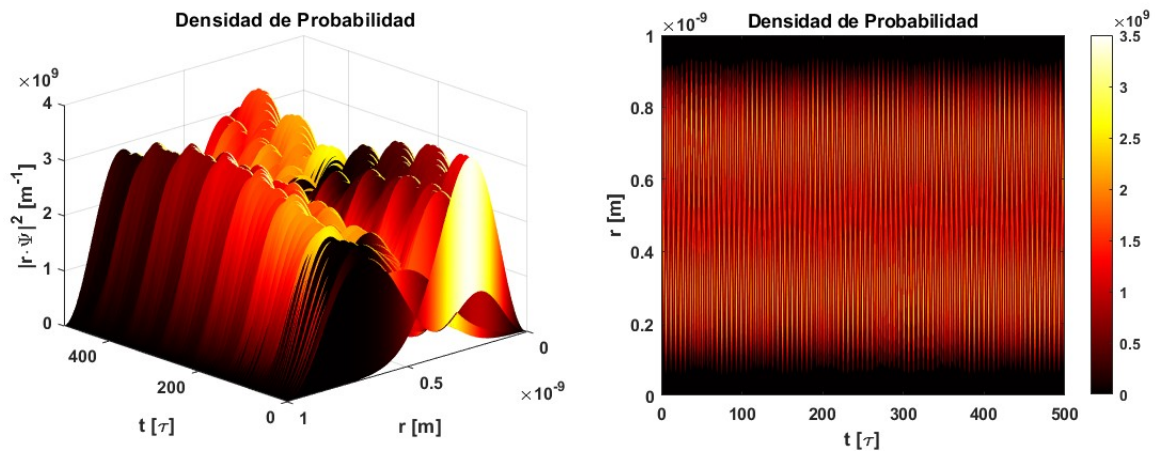


Figura 4.6: Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de  $1\mu$

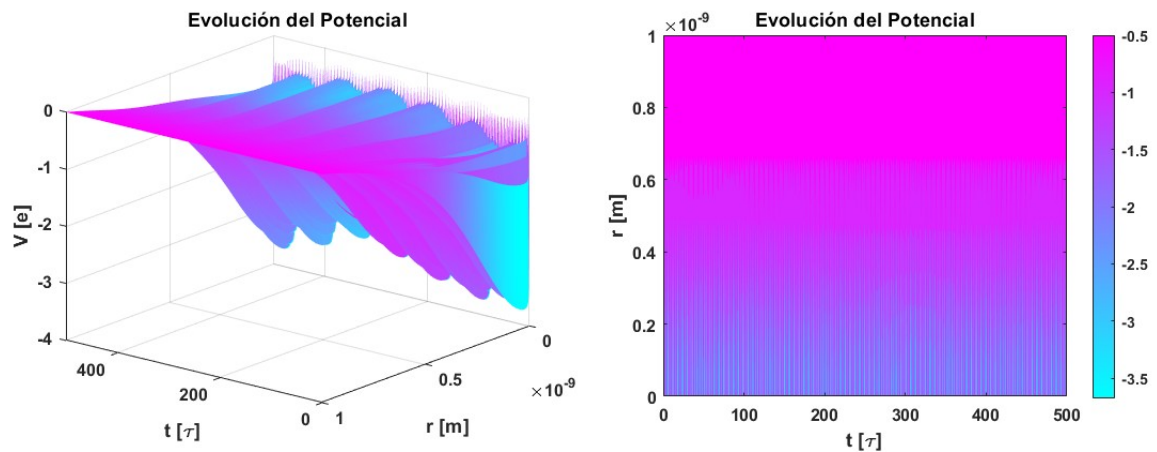


Figura 4.7: Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de  $1\mu$ .

#### 4.1.4. Simulación con $m=4\mu$

Tras haber simulado con  $m=1\mu$ , aumentamos la masa del sistema a  $m=4\mu$ . En este caso se puede observar, en las figuras de 4.8, como ahora la distribución de probabilidad si es afectada por el potencial y la mayor parte de la función queda confinada al inicio de la caja.

En cuanto al potencial, queda mucho más restringido en la parte del inicio de la caja y toma valores que alcanzan los  $-4e$ , lo que hace que aumente el poder de confinamiento.

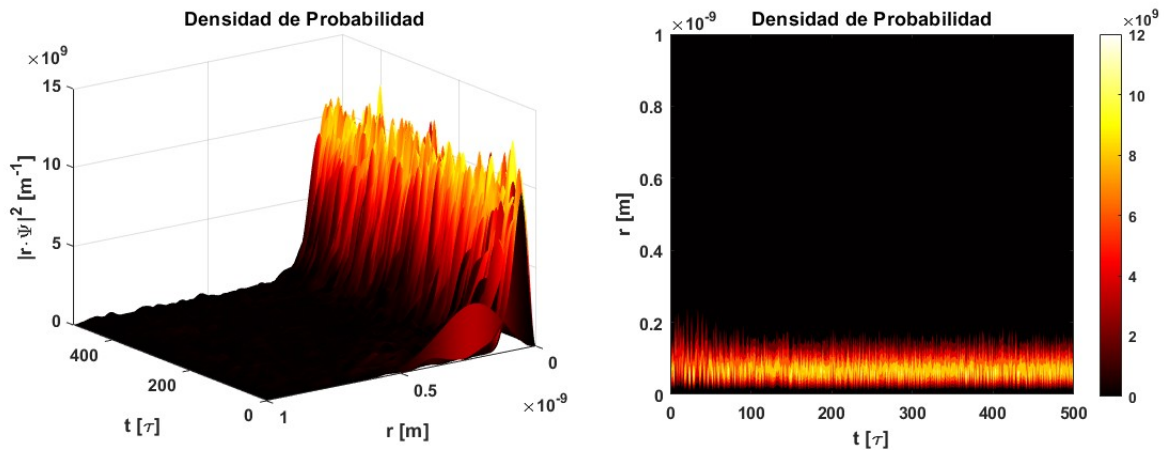


Figura 4.8: Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de  $4\mu$

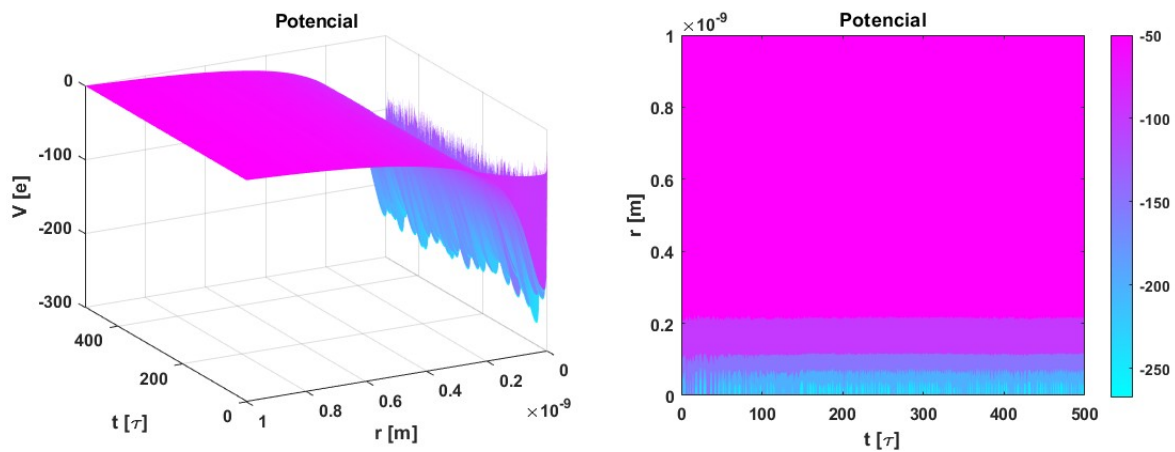


Figura 4.9: Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de  $4\mu$ .

#### 4.1.5. Simulación con $m=100\mu$

Por último, se ha realizado una simulación con una masa cien veces superior a la primera simulación. Los resultados de esta simulación son completamente anómalos, ya que la evolución de la densidad de probabilidad es constante en el tiempo, y confinada en la parte inicial de la caja como se puede ver en las figuras 4.10.

En cuanto al potencial, tiene una evolución constante al igual que la densidad de probabilidad.

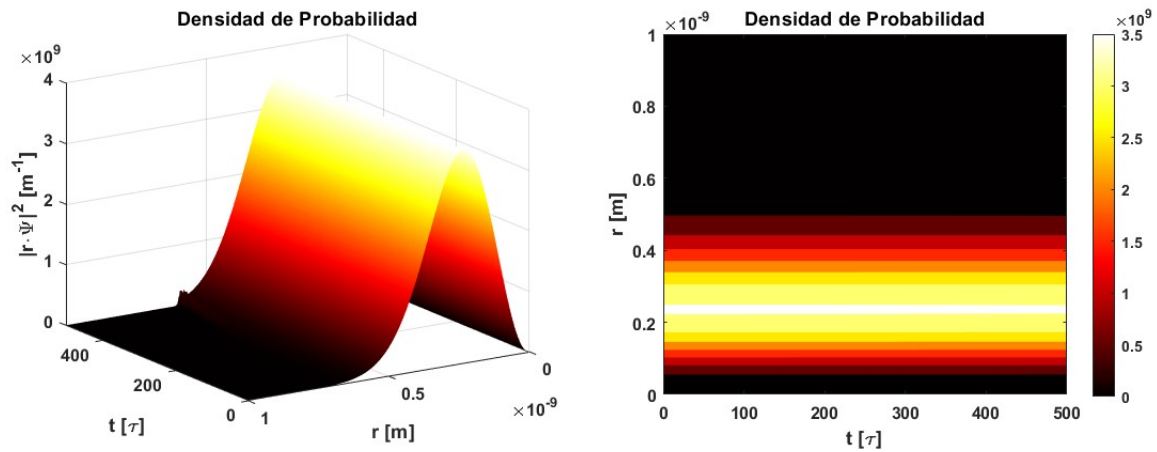


Figura 4.10: Representación de la evolución de la densidad de probabilidad con una masa de  $100\mu$

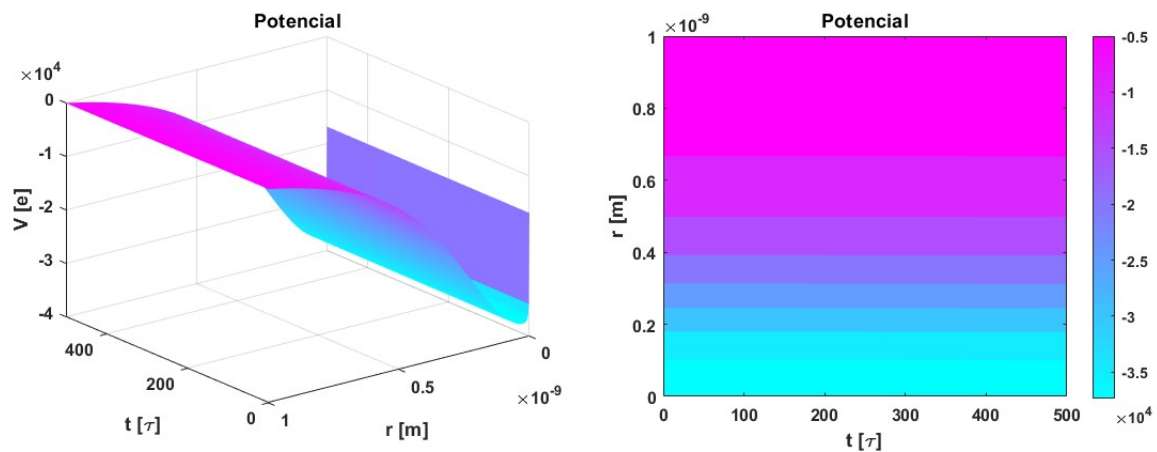


Figura 4.11: Evolución temporal del Potencial de Poisson aplicado a nuestro sistema con una masa de  $100\mu$ .

### 4.1.6. Comparación de Simulaciones

Para concluir y comparar el apartado de las simulaciones realizadas, se presentan las figuras 4.12 y 4.13 donde se pueden observar, en conjunto, los distintos resultados del promedio del radio ( $\langle r \rangle$ ) y del Hamiltoniano ( $\langle \hat{H} \rangle$ ) de las simulaciones anteriormente expuestas.

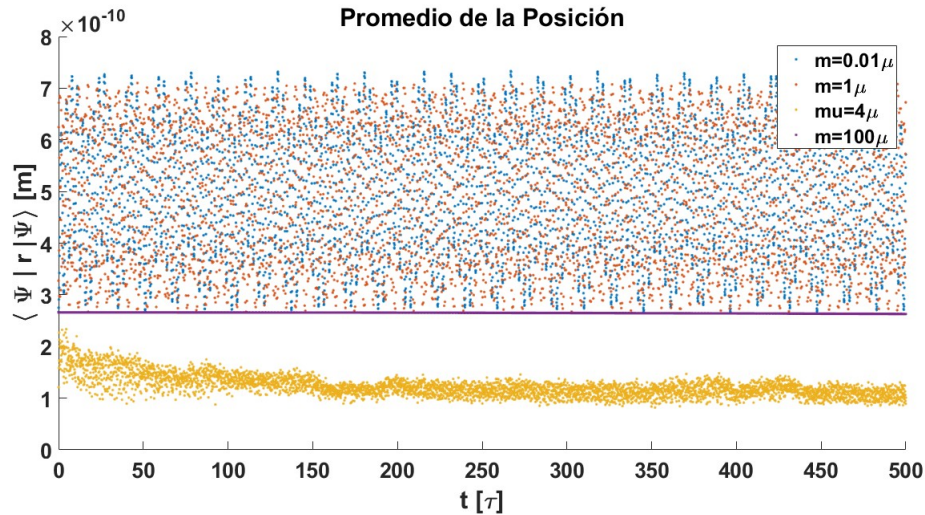


Figura 4.12: Evolución temporal de  $\langle u|r|u \rangle$  para las distintas masas simuladas a lo largo del apartado de resultados.

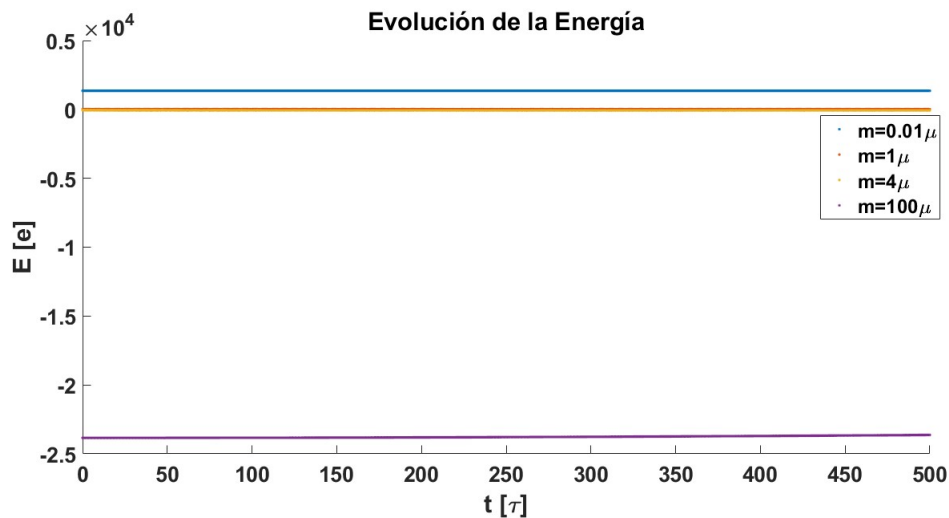


Figura 4.13: Evolución temporal de  $\langle u|\hat{H}|u \rangle$  para las distintas masas simuladas a lo largo del apartado de resultados.

## 4.2. Objetivos logrados

En el transcurso de este trabajo, se han alcanzado objetivos significativos que han contribuido de manera substancial al avance del conocimiento en el campo de la física

cuántica y la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger con términos no lineales. A continuación, se destacan los logros más destacados:

En primer lugar, uno de los logros clave es la exitosa implementación de un programa capaz de resolver la ecuación de Schrödinger con términos no lineales. Esta tarea representa un desafío computacional y matemático de gran envergadura, dado que la no linealidad agrega una complejidad adicional a la ecuación. La creación de este programa no solo demuestra una sólida comprensión de la teoría subyacente, sino que también proporciona una herramienta valiosa para futuras investigaciones en el campo de la física cuántica. La capacidad de resolver la ecuación de Schrödinger con no linealidad abre nuevas posibilidades para explorar fenómenos cuánticos en sistemas más realistas y complejos.

Además, los resultados obtenidos en este trabajo son de gran relevancia, ya que concuerdan significativamente con las predicciones formuladas por Roger Penrose en su artículo. Este aspecto es de suma importancia, ya que Penrose es un científico destacado en el campo de la física teórica y su trabajo ha sido influyente en numerosos aspectos de la cosmología y la gravedad cuántica. La consistencia entre los resultados de este trabajo y las predicciones de Penrose respalda la validez y la relevancia de la investigación realizada, y establece una base sólida para futuras investigaciones relacionadas con la gravedad cuántica.

Asimismo, es importante destacar que los resultados obtenidos en este trabajo también coinciden con investigaciones previas publicadas en otros artículos científicos. Esta coherencia con investigaciones independientes y previamente revisadas por expertos refuerza aún más la fiabilidad de los resultados y subraya la contribución significativa de este trabajo al corpus de conocimiento en el campo de la física cuántica y la gravedad.

### 4.3. Problemas encontrados

Continuando con la evaluación de los problemas encontrados durante la realización del Proyecto de Fin de Grado (PFG), es esencial abordar las dificultades inherentes al desarrollo de un programa para resolver la ecuación de Schrödinger, especialmente cuando se trata de una versión no lineal de la misma. Este desafío fundamental se relaciona con la complejidad matemática y computacional que conlleva, ya que la no linealidad introduce un nivel adicional de complicación en la búsqueda de soluciones. La resolución de ecuaciones no lineales requiere métodos numéricos avanzados y una implementación precisa, lo que puede aumentar significativamente la dificultad del problema.

Otro obstáculo importante que se ha enfrentado en el desarrollo de este trabajo es la utilización de métodos de punto fijo para encontrar soluciones. Aunque estos métodos son ampliamente utilizados en la resolución numérica de ecuaciones, no garantizan en todos

los casos la convergencia hacia una solución. Esto significa que en ciertas situaciones, como el rango de masas entre 7 y 40  $\mu$ , el programa podría no completar la iteración y detener el proceso sin encontrar una solución satisfactoria. Esta limitación puede ser frustrante y requiere un análisis cuidadoso de los parámetros y condiciones para mejorar la convergencia.

Por otro lado, la aplicación incorrecta de las condiciones de contorno representa otro desafío importante en la resolución de la ecuación de Schrödinger. Un error en la configuración de las condiciones de contorno puede llevar a la pérdida de norma, lo que significa que la función de onda ya no cumple con las propiedades de conservación físicas requeridas. Además, esto puede dar como resultado variaciones de energía del sistema, lo cual no es consistente, ya que contradice la estabilidad física de la solución. Estos problemas pueden tener un impacto significativo en los resultados obtenidos, afectando la precisión y la fiabilidad de los datos generados por el programa.

En definitiva, la realización del PFG ha enfrentado desafíos significativos relacionados con la complejidad matemática y computacional de la ecuación de Schrödinger no lineal, la convergencia de los métodos de punto fijo en ciertos casos y la aplicación precisa de las condiciones de contorno. Estos problemas son inherentes a la naturaleza de la investigación y requieren un enfoque meticuloso para superarlos. Abordar estos desafíos no solo contribuirá a mejorar la calidad de los resultados, sino que también enriquecerá la comprensión de la física subyacente y la capacidad para abordar problemas similares en el futuro.

# Capítulo 5

## Conclusiones y trabajos futuros

Con este capítulo se finaliza el trabajo presentado, en el cual se asienta una conclusión final, dados los resultados obtenidos. También se realiza un apartado comentando las líneas futuras o trabajos futuros que se proponen en relación a la continuación del estudio del tema presentado.

### 5.1. Conclusiones

La ecuación de Newton-Schrödinger es una de las herramientas más fundamentales en la física cuántica y clásica, que combina los principios de la mecánica newtoniana con los conceptos de la mecánica cuántica desarrollados por Erwin Schrödinger. En este estudio, hemos investigado cómo esta ecuación se comporta en función de la masa de la partícula en cuestión, centrándonos en dos casos extremos: masas pequeñas y masas grandes.

Nuestros resultados han revelado un comportamiento notablemente diferenciado de la ecuación de Newton-Schrödinger en estos dos casos extremos, lo que arroja luz sobre las propiedades y características de las partículas en función de su masa. A continuación, presentamos las principales conclusiones de este estudio:

1. **Comportamiento de partícula libre para masas pequeñas:** Cuando la masa de la partícula es pequeña en comparación con otras magnitudes relevantes, como la constante de Planck reducida o la energía del sistema, la ecuación de Newton-Schrödinger exhibe un comportamiento que se asemeja a una partícula libre. Esto significa que la partícula presenta características de onda significativas y una dispersión en su posición y momento que se asemeja a la predicción de la mecánica cuántica. En este régimen, las fluctuaciones inherentes de la posición y el momento son notables, lo que implica que la partícula no puede ser localizada con precisión en ningún punto del espacio y su velocidad no puede ser medida con absoluta certeza. Este fenómeno se relaciona directamente con el principio de indeterminación de Heisenberg.
2. **Comportamiento de colapso para masas mayores:** Cuando la masa de la partícula aumenta considerablemente en comparación con las magnitudes cuánticas relevantes, la ecuación de Newton-Schrödinger exhibe un comportamiento de colapso. Esto implica que la partícula tiende a comportarse más como una partícula clásica en términos de su posición y momento. En este régimen, las fluctuaciones en la posición y el momento son prácticamente despreciables en comparación con las

predicciones de la mecánica cuántica. La partícula tiende a comportarse de manera más predecible y determinista, y su posición y velocidad pueden ser medidas con una alta precisión.

3. **Transición suave entre los dos regímenes:** Es importante destacar que la transición entre el comportamiento de partícula libre y el comportamiento de colapso no es abrupta, sino que es suave y gradual a medida que la masa de la partícula aumenta. En otras palabras, no hay un límite definido en términos de masa que separa claramente estos dos regímenes. En lugar de eso, observamos una evolución continua a medida que la masa aumenta, con un cambio gradual en las características de la partícula.

Estos resultados tienen importantes implicaciones en la comprensión de la mecánica cuántica y clásica, y abren el camino a futuras investigaciones para explorar aún más esta relación intrincada entre las dos teorías fundamentales de la física.

## 5.2. Líneas futuras

A pesar de los avances logrados, queda mucho trabajo por hacer. La integración completa de la mecánica cuántica y la gravedad en un marco teórico coherente, conocida como la teoría cuántica de la gravedad, sigue siendo un objetivo desafiante y un área de investigación activa.

Los resultados obtenidos en este trabajo proporcionan una base sólida para futuros estudios y exploraciones. Aquí se presentan algunas posibles direcciones para investigaciones futuras:

- **Exploración de sistemas más complejos:** Una extensión natural del trabajo podría implicar la aplicación de tus métodos numéricos a sistemas más complejos que involucren múltiples partículas o potenciales no lineales más complejos. Esto permitiría analizar cómo interactúan las partículas en situaciones más realistas y cómo se modifican las soluciones en función de las condiciones iniciales y los parámetros del sistema.
- **Incorporación de efectos relativistas:** La relatividad general de Einstein describe la gravedad a nivel relativista, mientras que la ecuación de Schrödinger-Newton se basa en la mecánica cuántica no relativista. Investigar cómo se combinan estos dos marcos teóricos en situaciones en las que los efectos relativistas son significativos es un campo prometedor. Sería de gran interés realizar un estudio del comportamiento de la ecuación de Dirac bajo el mismo potencial gravitatorio, ya que, aunque el potencial de Poisson de lugar a las ecuaciones de Newton, este es invariante ante transformaciones de Lorentz, por lo que se podrían obtener resultados en la variante relativista.

- **Aplicaciones en cosmología:** La ecuación de Schrödinger-Newton también se ha utilizado para explorar fenómenos a gran escala en cosmología. Estudiar cómo las soluciones numéricas de esta ecuación pueden ayudar a comprender la formación de estructuras a gran escala en el universo y la dinámica de la materia oscura y la energía oscura es una vía de investigación emocionante.
- **Desarrollo de métodos numéricos más avanzados:** Investigar y desarrollar métodos numéricos más precisos y eficientes para resolver la ecuación de Schrödinger-Newton. Esto puede incluir la aplicación de algoritmos de alta precisión o técnicas de paralelización para abordar sistemas más grandes y complejos. Un ejemplo de esto puede ser la implementación de Newton-Raphson como algoritmo de iteración.
- **Comparación con experimentos:** Si es posible, buscar la manera de comparar resultados numéricos con experimentos reales o datos observacionales. Esto proporcionaría una valiosa validación empírica de los hallazgos y contribuiría a la comprensión de los sistemas físicos en estudio.

En última instancia, el análisis numérico de la ecuación de Schrödinger-Newton es un campo en constante evolución que ofrece numerosas oportunidades para realizar investigaciones vanguardistas. Explorar estas líneas futuras no solo contribuirá a expandir nuestro conocimiento en física cuántica y gravedad cuántica, sino que también puede tener aplicaciones prácticas en campos como la informática cuántica, la cosmología y más allá.

# Capítulo 6

## Realización del Proyecto

### 6.1. Metodología

En esta sección, se hace un breve resumen de trabajo desarrollado en cada uno de los apartados en los que se ha dividido el trabajo.

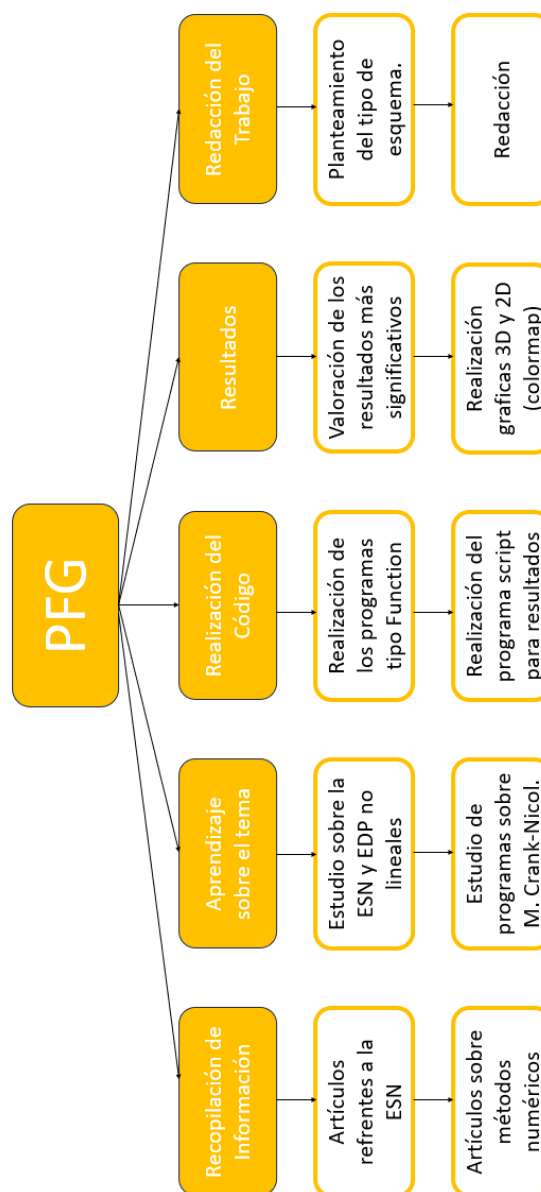


Figura 6.1: Estructura de descomposición del proyecto.

### **6.1.1. Recopilación de Información**

En la fase inicial de este proyecto, se llevó a cabo una exhaustiva recopilación de información relacionada con la ecuación de Schrödinger-Newton, abarcando desde su contexto histórico hasta desarrollos teóricos y experimentales previos. Esta etapa proporcionó una base sólida para la comprensión profunda del problema y orientó la investigación hacia áreas clave.

### **6.1.2. Aprendizaje sobre el tema**

La fase de aprendizaje desempeñó un papel fundamental, permitiendo una inmersión completa en los conceptos y principios subyacentes a la ecuación de Schrödinger-Newton. Se exploraron los fundamentos de la mecánica cuántica y la gravedad, así como sus interacciones y desafíos teóricos. Este proceso educativo fue esencial para abordar la problemática de manera efectiva.

### **6.1.3. Realización del Código**

La implementación práctica del proyecto involucró la creación de un programa computacional basado en el Método Crank-Nicolson y la Iteración por Punto Fijo. Se tradujeron los conceptos teóricos en algoritmos numéricos eficientes, lo que permitió la resolución precisa de la ecuación de Schrödinger-Newton. Se realizaron pruebas y ajustes continuos para optimizar el rendimiento del código.

#### **6.1.3.1. Obtención de Resultados**

Con el programa en funcionamiento, se procedió a realizar simulaciones y cálculos numéricos para obtener resultados significativos. Esto incluyó la observación del colapso de la función de onda, un fenómeno clave en la mecánica cuántica. Los resultados fueron analizados en detalle y comparados con predicciones teóricas y resultados experimentales previos.

### **6.1.4. Redacción del Proyecto**

La fase final del proyecto se centró en la redacción completa y detallada de los hallazgos y el proceso de investigación. Se elaboró un informe que destacaba los logros, las conclusiones y las implicaciones del estudio. Este documento sirvió como una comunicación efectiva de los resultados y contribuciones del trabajo en el campo de la física cuántica y la relatividad.

## 6.2. Programación Temporal

En esta sección se muestra la planificación temporal del PFG. Se ha realizado teniendo en cuenta las estimaciones de tiempo anteriormente citadas, con lo que la estructura es la reflejada en la figura 6.2:

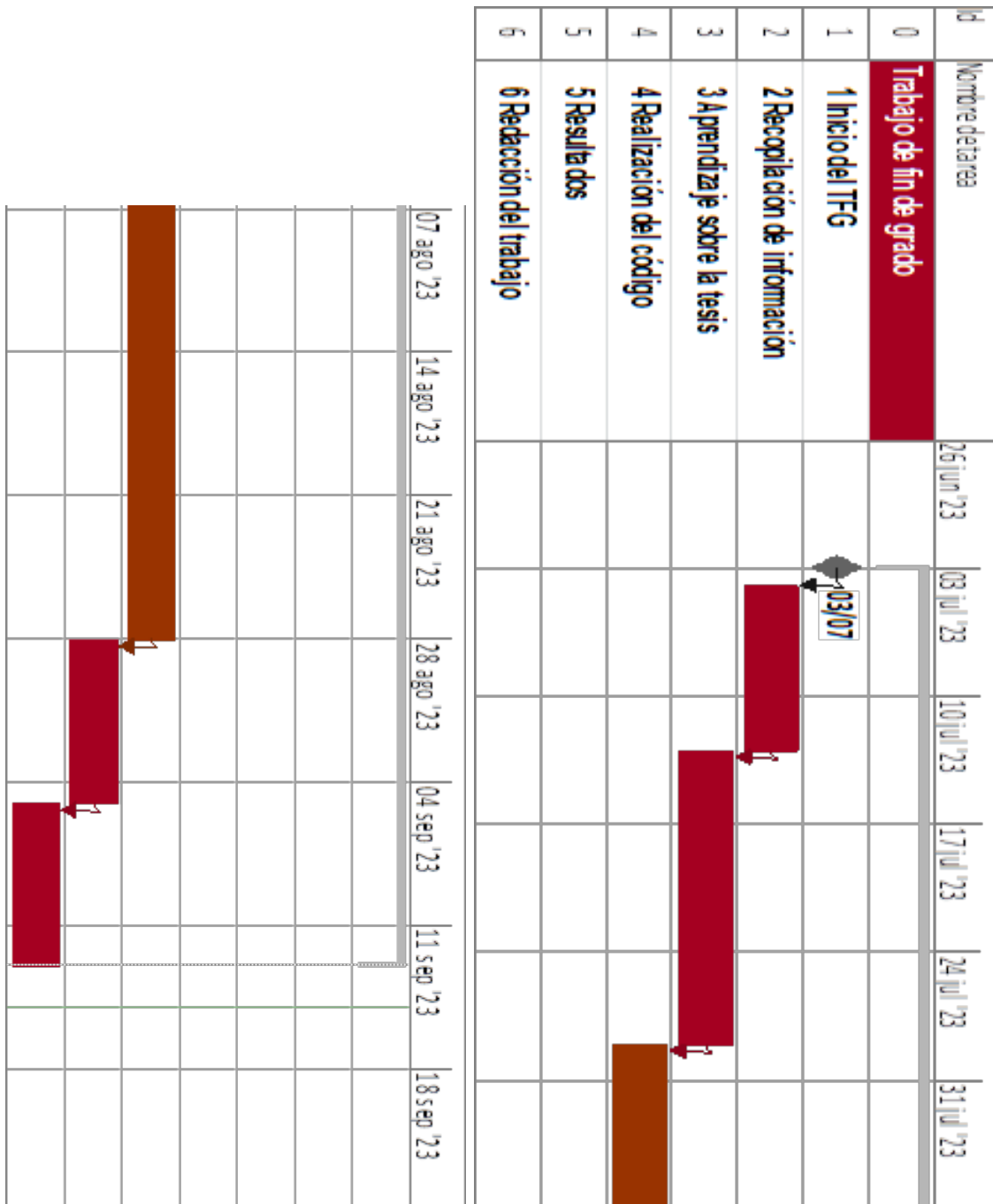


Figura 6.2: Diagrama de Gantt del proyecto

## 6.3. Presupuesto

Para poder realizar un buen desarrollo del presupuesto del trabajo realizado, se han de tener en cuenta todos los factores que intervienen en el desarrollo del mismo y tenga una influencia económica. En el caso de este presupuesto, ha sido dividido en tres pilares: trabajo del alumno, trabajo del tutor, y costes de software y ejecución.

### Personal

En el caso de las horas de trabajo por parte del tutor, Pedro Velarde Mayol, y el alumno, vienen desglosadas en la tabla 6.1 Ya con esta tabla, se puede hacer el cálculo económico

Horas del Alumno	310 H
Recopilación de información	30 h
Aprendizaje sobre la tesis	60 h
Realización del Código	120 h
Resultados	50 h
Redacción del trabajo	50 h
Horas del Tutor	60 H
Documentación	10 h
Tutorías	30 h
Revisiones de código	20 h

Tabla 6.1: Tiempos de trabajo del personal que interviene en el mismo.

de la parte del personal que ha intervenido en el realización del trabajo. Para ello, se estima que el precio por hora trabajada del alumno es de 20 €/h y el del tutor 50 €/h. Con esto, se obtiene un coste total de 9200 €.

Personal	Tiempo	Coste unidad (€/h)	Total (€)
Alumno	310 h	20	6200
Tutor	60h	50	3000

Tabla 6.2: Tabla presupuestaria del personal: Alumno y tutor.

### Software y Computación

El desarrollo del trabajo se ha llevado a cabo haciendo uso de software informático, para realizar los programas de simulación. En este caso, se ha hecho uso, en su mayoría, de **MatLab**. Pero además, todos los programas realizados en esta plataforma han sido traducidos a **Python**.

Al igual, se ha hecho uso de un portátil personal para hacer uso de las plataformas anteriormente mencionadas.

En la tabla 6.3, se indican los precios de cada uno de los elementos anteriormente mencionados. En este apartado, se podría incluir el precio del consumo eléctricos utilizados, pero tras

Hardware	Coste (€)
Portátil	700
PC sobremesa	600
Software	Coste (€)
MatLab	119
Python	0
LaTex	0
Microsoft Office	69
<b>Total</b>	<b>1488</b>

Tabla 6.3: Desglose de los precios de Software y Hardware utilizados en la realización del trabajo.

realizar varias aproximaciones se ha considerado un gasto infimo, que no tiene una gran repercusión en el presupuesto final.

### Presupuesto final

Reuniendo todos los datos económicos expuestos anteriormente, se puede realizar un tabla que refleja el precio final considerando los costes por el impuesto sobre el valor añadido (IVA). Con lo que, el precio total de la realización del siguiente trabajo posee un costo de:

Concepto	Coste (€)
Personal	9200
Software y Hardware	1488
Total	10688
Total + IVA	12.932,48

Tabla 6.4: Presupuesto final, teniendo en cuenta impuestos.

## 6.4. Impacto Medioambiental

Esta sección tiene como objetivo analizar y evaluar el impacto ambiental que conlleva la realización de un trabajo de fin de grado relacionado con la ecuación de Schrödinger-Newton, considerando el uso de un ordenador de 65W durante aproximadamente 170 horas. Se abordarán aspectos como el consumo de energía, las emisiones de carbono y las posibles medidas de mitigación.

El uso del ordenador durante 170 horas implica un consumo significativo de energía eléctrica. Para calcular el consumo, utilizamos la fórmula:

$$\text{Consumo de energía (kWh)} = \frac{\text{Potencia (W)} \times \text{Tiempo (h)}}{1000}$$

En este caso, la potencia del ordenador es de 65W y el tiempo de uso es de 170 horas, lo que da como resultado un consumo de energía de 11.05 kWh.

Las emisiones de carbono están directamente relacionadas con el consumo de energía eléctrica y dependen de la fuente de energía utilizada. Utilizando una tasa promedio de emisiones de carbono de 0.45 kg CO<sub>2</sub> por kWh (basada en la media global de emisiones de carbono por unidad de electricidad generada), podemos calcular las emisiones totales de carbono:

$$\text{Emisiones de carbono (kg CO}_2\text{)} = \text{Consumo de energía (kWh)} \times \text{Tasa de emisiones (kg CO}_2\text{/kWh)}$$

En este caso, asumimos una tasa de emisiones de 0.45 kg CO<sub>2</sub> por kWh, lo que resulta en un total de 4.97 kg de CO<sub>2</sub> emitidos.

A continuación, se muestra la tabla 6.5 que resume las emisiones de carbono producidas por el uso del ordenador durante el trabajo de fin de grado:

Realizar un trabajo de fin de grado que involucre el uso intensivo de un ordenador de 65W conlleva un impacto ambiental, principalmente debido al consumo de energía y las

Consumo de Energía (kWh)	Emisiones de Carbono (kg CO <sub>2</sub> )
11.05	4.97

Tabla 6.5: Emisiones de Carbono del Uso del Ordenador

emisiones de carbono. Sin embargo, existen medidas que pueden mitigar este impacto y hacer que la actividad sea más sostenible desde el punto de vista ambiental.

# Bibliografía

- [1] Francis en trending ciencia: El problema del colapso de la función de onda. [Online]. Available: <https://francis.naukas.com/2013/07/08/francis-en-trending-ciencia-el-problema-del-colapso-de-la-funcion-de-onda/>
- [2] L. Diósi, “Gravitation and quantum-mechanical localization of macro-objects,” vol. 105, no. 4, pp. 199–202. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960184903979>
- [3] R. Penrose, “On gravity’s role in quantum state reduction,” vol. 28, no. 5, pp. 581–600. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1007/BF02105068>
- [4] L. Diósi, “Schrödinger–newton equation with spontaneous wave function collapse.” [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/2210.15057>
- [5] “Función de onda,” page Version ID: 152409801. [Online]. Available: [https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Funci%C3%B3n\\_de\\_onda&oldid=152409801](https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Funci%C3%B3n_de_onda&oldid=152409801)
- [6] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter, *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, google-Books-ID: LWRnDwAAQBAJ.
- [7] M. Bahrami, A. Großardt, S. Donadi, and A. Bassi, “The schrödinger–newton equation and its foundations,” vol. 16, no. 11, p. 115007. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1407.4370>
- [8] D. Giulini and A. Grossardt, “Centre-of-mass motion in multi-particle schroedinger–newton dynamics,” vol. 16, no. 7, p. 075005. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1404.0624>
- [9] “Método de crank-nicolson,” page Version ID: 151594591. [Online]. Available: [https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=M%C3%A9todo\\_de\\_Crank-Nicolson&oldid=151594591](https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=M%C3%A9todo_de_Crank-Nicolson&oldid=151594591)
- [10] P. Summers, “2d heat equation modeled by crank-nicolson method.”
- [11] d. , “Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.” [Online]. Available: <https://www.uv.es/diazj/mne.tema3.pdf>
- [12] R. Harrison, I. Moroz, and K. P. Tod, “A numerical study of the schrodinger–newton equation 2: the time-dependent problem.” [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/math-ph/0208046>
- [13] On the gravitization of quantum mechanics 1: Quantum state reduction | SpringerLink. [Online]. Available: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10701-013-9770-0>

- [14] J. R. van Meter, “Schrödinger-newton collapse of the wave function,” vol. 28, no. 21, p. 215013. [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1105.1579>
- [15] P. J. Salzman, “Investigation of the time-dependent schroedinger-newton equation,” ISBN: 9780542521805. [Online]. Available: <https://www.proquest.com/docview/305031239/abstract/3EF6E125D308450DPQ/1>
- [16] J. Fuentes, “Exact and numerical solutions to the schrödinger–poisson equations.”
- [17] “Proceedings, les théories relativistes de la gravitation : actes du colloque international (relativistic theories of gravitation): Royaumont, france, june 21-27, 1959.”
- [18] L. Rosenfeld, “On quantization of fields,” vol. 40, pp. 353–356. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029558263902797>
- [19] H. P. Langtangen, “Solving nonlinear ODE and PDE problems.”
- [20] J. Wang, “Unconditional stability and convergence of cranknicolson galerkin FEMs for a nonlinear schrödingerhelmholtz system,” vol. 139.
- [21] L. Diósi, “A universal master equation for the gravitational violation of quantum mechanics,” vol. 120, no. 8, pp. 377–381. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960187906815>

# Anexos

# Apéndice A

## Gráficas de Operación del Programa

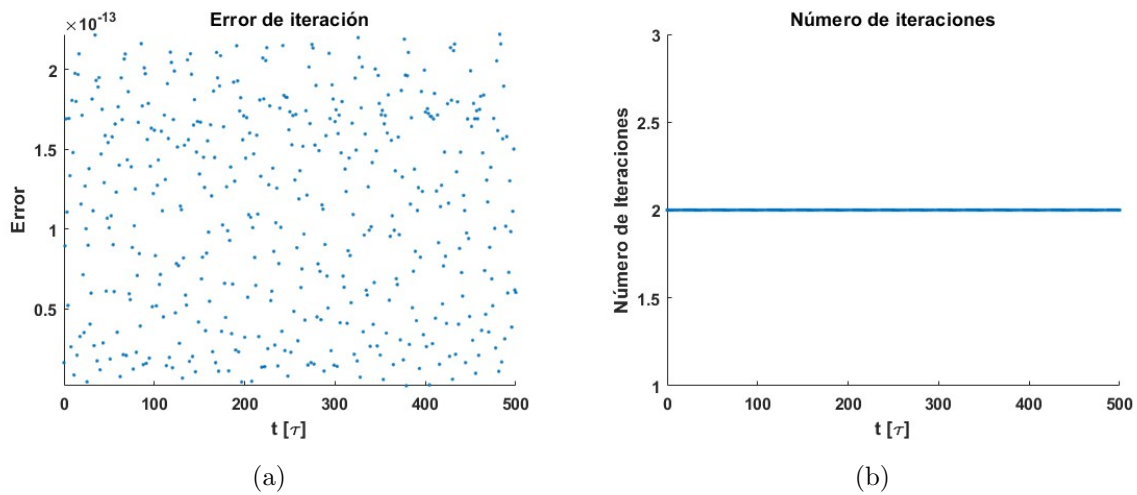


Figura A.1: Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.3(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.1(b)) para un sistema con una masa de  $0,01\mu$ .

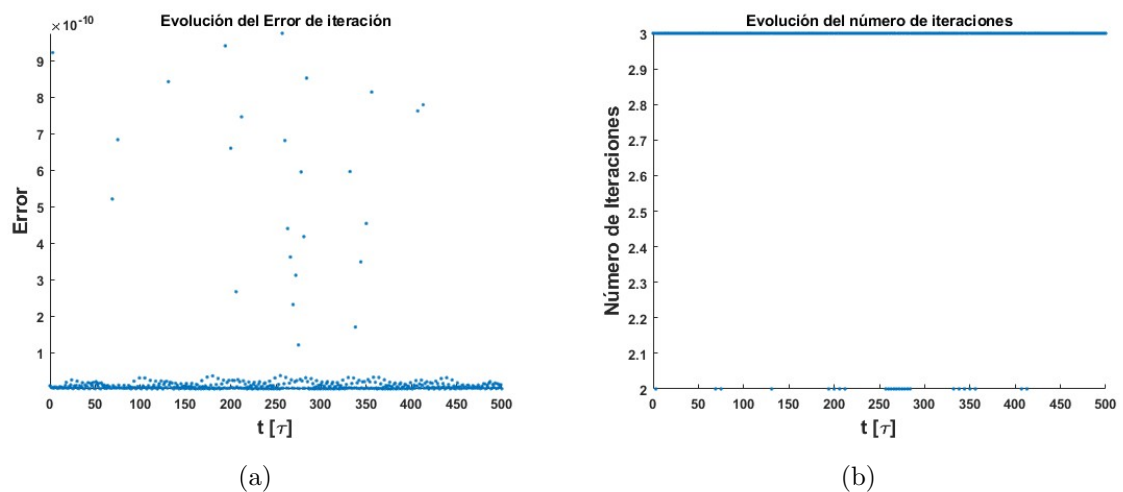


Figura A.2: Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.2(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.2(b)) para un sistema con una masa de  $1\mu$ .

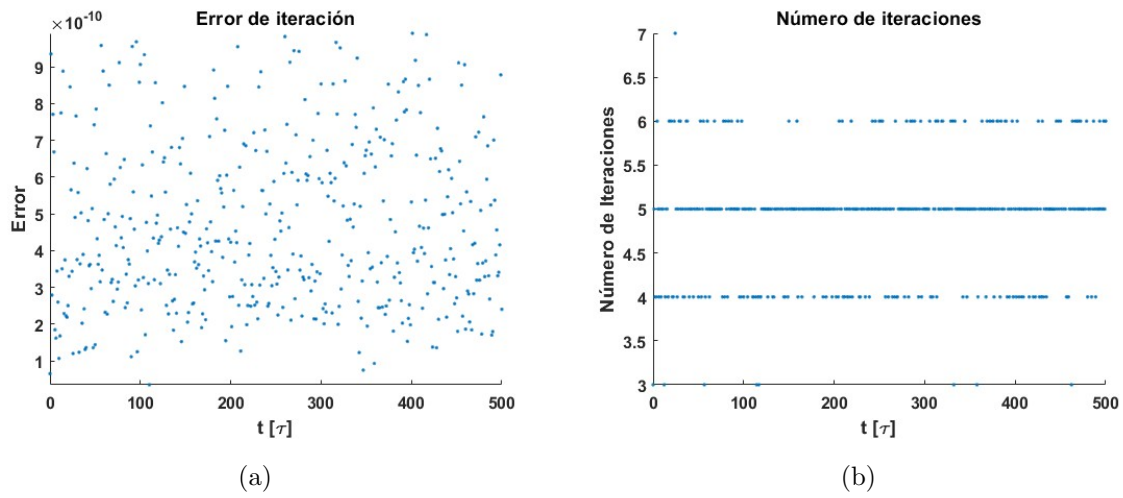


Figura A.3: Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.3(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.3(b)) para un sistema con una masa de  $4\mu$ .

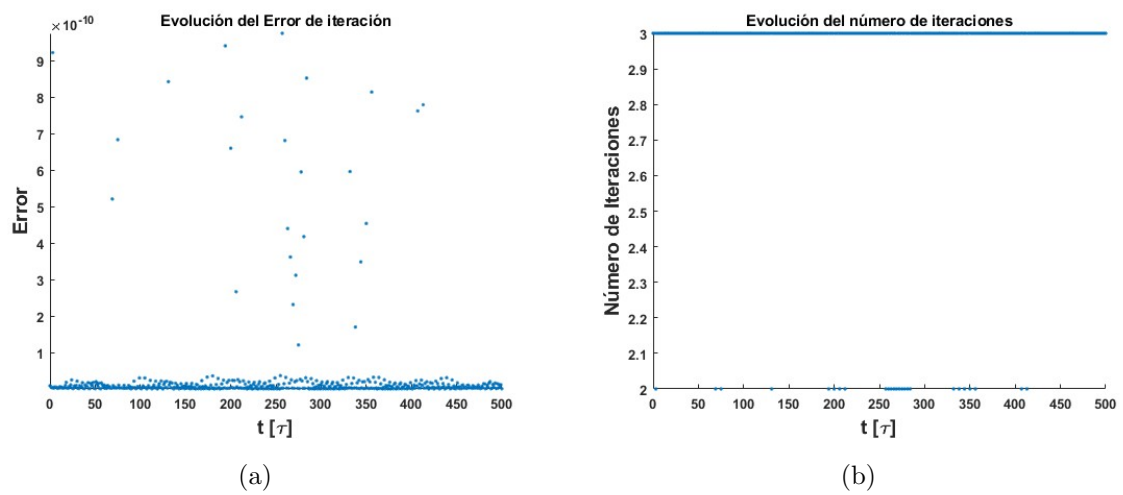


Figura A.4: Representación del error diferencial final en la iteración en cada paso temporal (A.4(a)) y número de iteraciones necesarias en cada paso temporal (A.4(b)) para un sistema con una masa de  $100\mu$ .

# Apéndice B

## Programas de Simulación en Coordenadas Esféricas

### B.1. Programa Hamiltonian\_Esf.m MatLab

```
function [H]= Hamiltonian_Esf (r,V,hbar,m,bc1,bcN)
N=length(V);
dr=abs(r(2)-r(1));

T=zeros(N,N);

T(1:1+N:N*N) = -2;
T(N+1:1+N:N*N) = 1;
T(2:1+N:N*N-N) = 1;
% T(1,1)=(T(1,1)-bc1);
% T(N,N)=(T(N,N)-bcN);

l=0;
H=(-hbar*hbar)/(2*m*dr*dr)*T+eye(N).*(V+hbar*hbar*l*(l+1)/(2*m.*r.*r))'

H(1,1)=0;
H(1,2)=0;
H(N,N)=0;
H(N,N-1)=0;
```

### B.2. Programa Potential\_Esf.m MatLab

```
function [V]=Potential_Esf (r,Psi,G,hbar,m,Type)

if Type == 1 %Potencial Arm nico
    omega=0.1;

    V=0.5/(1.6*10^(-19))*omega.*r.*r;
```

```

elseif Type == 2 %Potencial de Poisson
    dr=abs(r(2)-r(1));
    N=length(r);

    der=zeros(N,N);
    der(1:1+N:N*N) = -((r+dr/2).^2+(r-dr/2).^2);
    der(N+1:1+N:N*N) = ((r(2:N)-dr/2).^2);
    der(2:1+N:N*N-N) = ((r(1:N-1)+dr/2).^2);

    V=der\(G*m*m*dr*dr.*abs(Psi).^2);

elseif Type==3
    gamma=-(hbar^2)/(2*m*1.6*10^(-19))*100000;
    V=gamma.*abs(Psi).^2;
end

```

### B.3. Programa CrankNicol\_FixPoint\_Esf.m MatLab

```

function [Psi,V,E,i,error,stp] = CrankNichol_FixPoint_Esf(Psi0,r,G,m,hb

N = length(r);

V0 = Potential_Esf(r,Psi0,G,hbar,m,2); % Potencial en N
H0 = Hamiltonian_Esf(r,V0,hbar,m,-1,-1);
sh = (eye(N)-(1i*dt)/(2*hbar)*H0)*(Psi0);

error = 1;

i = 0;

Psi = Psi0;

while error >= 10^-9

    Psi1 = Psi;

```

```

V = Potential_Esf(r,Psi,G,hbar,m,2); % Potencial en N+1
H = Hamiltonian_Esf(r,V,hbar,m,-1,-1);
A = eye(N)+(1i*dt)/(2*hbar)*H;

Psi = (A\sh);

% Psi=Psi./(sqrt(trapz(abs(Psi).^2,r)))%-----> Renormalizaci n
error = abs(trapz(r,abs((Psi-Psi1)))));
i = i+1;

disp(i + "error = " + error)

% figure(1) %-----> Distribuci n del error
% plot(r,abs((Psi-Psi1).*r(N)),'red')
% legend(num2str(trapz(r,abs(Psi).^2)))
% hold off
%
% figure(2) %-----> Plot de Psi** con Psi*
% plot(r,real(Psi),'red','LineWidth',2)
% xlabel('r [m]','FontSize',12,'FontWeight','bold')
% ylabel('Real (r\cdot\Psi) [m^{-1/2}]','FontSize',12,'FontWeight',
% hold on
% plot(r,real(Psi1),'blue',LineStyle='--',LineWidth=2)
% title("Error =" + num2str(error))
% hold off
% legend('r\Psi^{n**}','r\Psi^{n*}')
% pause(0.0003)

if i>1000000000000
    disp("No converge")
    stp=0;
    break
else
    stp=1;
end
end
V = Potential_Esf(r,Psi,G,hbar,m,2);
H=Hamiltonian_Esf(r,V,hbar,m,-1,-1);

```

```
E=trapz(r,conj(Psi).*H*Psi);

disp("-----")
```

## B.4. Programa script\_CrankNicol\_FixPoint\_Esf.m MatLab

```
clear
close all
clc

Nu=1;
G=6.67*10^(-11);
hbar=(6.63*10^(-34))/(2*pi);
L=10^-9;

sigma=L/3;

m=Nu*((hbar^2)/(G*L))^(1/3); %0.51099895e6;

NT=9000;
v=0;

T=500*((L^5)/(G*hbar))^(1/3);
dt=T/NT;

N=450;
r=linspace(0,L,N)';

mu=0;
Psi=(r).*(exp(-(r.*r-mu)./sigma^2)-exp(-(L*L-mu)./sigma^2)).*exp(-(v*(
Psi=Psi./(sqrt(trapz(abs(Psi).^2,r))));
dr=r(2)-r(1);

c=0;
x=0;
for i=0:NT
```

```

[Psi,V,E,iter,error,stp] = CrankNichol_FixPoint_Esf(Psi,r,G,m,hbar,

%     if rem(i,NT/100)==0
% ----- Plots para visualizar en directo la funci n de onda,
% -----potencial,....
%         figure(1)
%
%         plot3(r,i*dt.*ones(1,length(r)),abs(Psi).^2,'LineWidth',1.5)
%         legend("\int|\Psi|^2 = " + num2str(abs(trapz(abs(Psi).^2,r))))
%         title('Densidad de Probabilidad')
%         zlabel('|\Psi|^2')
%         xlabel('Space')
%         ylabel('Time (s)')
%
%         hold on
%         figure(2)
%
%         plot3(r,i*dt.*ones(length(r),1),V,'Red','LineWidth',2)
%         title('Potencial')
%         zlabel('V (eV)')
%         xlabel('Space')
%         legend("t = " + num2str(i*dt),'Interpreter','latex')
%         ylabel('Time (s)')
%         hold on
%
%         figure (3)
%         plot(r,abs(Psi).^2)
%         legend("\int|\Psi|^2 = " + num2str(abs(trapz(abs(Psi).^2,r))))
%         hold off
%
%         figure (4)
%         scatter(i*dt,max(abs(Psi).^2),'.')
%         hold on
%         Psi=r.*Psi;
%     else
%     end
%         figure(1)
%         plot(r,V)
%         hold off
%

```

```

%
%     figure(2)
%     plot(r,abs(Psi).^2)
%     legend("\int |\Psi|^2 = " + num2str(abs(trapz(abs(Psi).^2,r))))
%     hold off
%
%     figure(3)
%     scatter(i,E)
%     hold on
%
%     pause(0.01)

if rem(i,NT/(N*10))==0
    x=x+1;
    tau1(x)=i*dt/(((L^5)/(G*hbar))^(1/3));
    r_prom(x)=trapz(r,r.*abs(Psi).^2);
    Energy(x)=E;
else
end
if rem(i,NT/N)==0
    c=c+1;
    rho_plot(:,c)=abs(Psi).^2;
    V_plot(:,c)=V;
    tau(c)=i*dt/(((L^5)/(G*hbar))^(1/3));
    error_plot(c)=error;
    iter_plot(c)=iter;
else
end

if stp==0
    break
else
end
end

%%

```

```
E_ad=((G*hbar^4)/L^5)^(1/3);
```

```
figure(4) % Plot del radio promedio
loglog(tau1,r_prom,LineWidth=2)
xlabel('t [\tau]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
ylabel('\langle \Psi | r | \Psi \rangle [m]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
title('Promedio de la Posici n')
xlim('tight')
```

```
figure(5) %Plot del promedio de la energ a
loglog(tau1,Energy./E_ad,LineWidth=2)
xlabel('t [\tau]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
ylabel('E [e]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
title('Evoluci n de la Energ a')
xlim('tight')
```

```
figure(6) % Plot 2D de la densidad de probabilidad
% ax1 = axes('Position',[0.1 0.1 0.7 0.7]);
% ax2 = axes('Position',[0.65 0.65 0.28 0.28]);
[Tau,R]=meshgrid(tau,r);
contourf(Tau,R,rho_plot, 'EdgeColor', 'none')
xlabel('t [\tau]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
ylabel('r [m]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
title('Densidad de Probabilidad')
colormap("hot")
colorbar
xlim('tight')
ylim("tight")
```

```
figure(7) % Plot 3D de la densidad de probabilidad
surf(Tau,R,rho_plot, 'EdgeColor', 'none')
title('Densidad de Probabilidad')
xlabel('t [\tau]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
ylabel('r [m]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
zlabel('|r\cdot\Psi|^2 [m^{-1}]', 'FontSize',12, 'FontWeight', 'bold')
colormap("hot")
xlim('tight')
ylim("tight")
```

```
figure(8) % Plot 3D del Potencial
surf(Tau,R,V_plot./E_ad,'EdgeColor','none')
title('Potencial')
xlabel('t [\tau]','FontSize',12,'FontWeight','bold')
ylabel('r [m]','FontSize',12,'FontWeight','bold')
zlabel('V [e]','FontSize',12,'FontWeight','bold')
colormap("cool")
xlim('tight')
ylim("tight")

figure(9) % Plot 2D del Potencial
contourf(Tau,R,V_plot./(E_ad),'EdgeColor','none')
xlabel('t [\tau]','FontSize',12,'FontWeight','bold')
ylabel('r [m]','FontSize',12,'FontWeight','bold')
axis("tight")
title('Potencial')
colormap("cool")
colorbar
xlim('tight')
ylim("tight")

figure(10) % Plot del n mero de iteraciones
scatter(tau,iter_plot, '.')
xlabel('t [\tau]','FontSize',14,'FontWeight','bold')
ylabel('N mero de Iteraciones','FontSize',14,'FontWeight','bold')
title('N mero de iteraciones')
xlim('tight')
ylim("tight")

figure(11) %Plot del error de iteraci n
scatter(tau,error_plot, '.')
xlabel('t [\tau]','FontSize',14,'FontWeight','bold')
ylabel('Error','FontSize',14,'FontWeight','bold')
title('Error de iteraci n')
xlim('tight')
ylim("tight")
```

## B.5. Programa Hamiltonian.py Python

```
def Hamiltonian (r,V,hbar,m) :

    N = np.size(V)
    dr = np.abs(r[2]-r[1])

    T = np.zeros((N,N))

    T = np.diag(-2*np.ones(N),0)+np.diag(np.ones(N-1),1)+np.diag(np.ones(N-1),-1)

    H = (-hbar*hbar)/(2*m*dr*dr)*T+np.eye(N)*(np.transpose(V))

    H[0,0] = 0
    H[0,1] = 0
    H[N-1,N-1] = 0
    H[N-1,N-2] = 0

    return H
```

## B.6. Programa Potential.py Python

```
def Potential (r,Psi,G,hbar,m,Type) :

    if Type == 1 : #Potencial Armnico
        omega = 1

        V=0.5*omega*r*r

    elif Type == 2 : #Potencial de Poisson
        dr = abs(r[2]-r[1])
        N = np.size(r)

        der = np.zeros((N,N));
        der = np.diag(-((r+dr/2)**2+(r-dr/2)**2),0)+np.diag(((r[1:N]-dr/2)**2),1)

        V = np.linalg.solve(der,(G*m*m*dr*dr*abs(Psi)**2))
```

```

elif Type==3 :
    gamma=-(hbar**2)/(2*m*1.6*10**(-19))*100000;
    V=gamma*abs(Psi)**2;

return V

```

## B.7. Programa CrankNicol\_FixPoint.py Python

```

def CrankNicol_FixPoint(Psi0 , r ,G,m,hbar , dt) :

    N = np.size(r)
    dx = abs(r[2]-r[1])

    V0 = Potential(r , Psi0 ,G,hbar ,m,2) # Potencial en N
    H0=Hamiltonian(r ,V0 ,hbar ,m)
    sh=(np.eye(N)-(1j*dt)/(2*hbar)*H0)
    sh=np.dot(sh , Psi0)

    error = 1
    i=0

    Psi=Psi0
    # Psi(2:N-1)=Psi(2:N-1)*(1+0.001)

    while error > 10e-9 :

        Psi1=Psi
        V = Potential(r , Psi ,G,hbar ,m,2); # Potencial en N+1
        H = Hamiltonian(r ,V ,hbar ,m)
        A=np.eye(N)+(1j*dt)/(2*hbar)*H

        Psi = np.linalg.solve(A,sh)

        f = A*Psi-sh

        error = abs(np.trapz(abs(Psi-Psi1),r))
        i = i+1
    print(i , error)

```

```
return Psi
```

## B.8. Programa script\_CrankNicol\_FixPoint.py Python

```
Nu=1
G=6.67*10**(-11)
hbar=(6.63*10**(-34))/(2*np.pi)
L=10**(-9)

sigma=L/3

m=Nu*((hbar**2)/(G*L))**(1/3);

NT=9000
v=0 #Proporcinal a la velocidad inicial de la onda
T=((L**5)/(G*hbar))**(1/3)
dt=T/NT;

N=300
r=np.linspace(0,L,N)

mu=0
Psi=r*(np.exp(-((r-mu)/sigma)**2)-np.exp(-((L-mu)/sigma)**2))*np.exp(1j*r)
Psi=Psi/(np.sqrt(np.trapz(abs(Psi)**2,r)))

for i in range(0,NT,1) :
    Psi = CrankNicol_FixPoint(Psi,r,G,m,hbar,dt)

    if i % NT/5 == 0 :

        plt.plot(r,abs(Psi/r)**2)
        plt.ylabel('Density Function')
        plt.xlabel('Space')
        plt.show()
```

# Apéndice C

## Abreviaturas

### C.1. Acrónimos

- SN: *Schrödinger-Newton*
- SNE: *Schrödinger-Newton Equation*
- PFG: *Proyecto de Fin de Grado*
- CN: *Crank-Nicolson*

### C.2. Unidades de Medida

- $m$ : Metros
- $J$ : Julios
- $Kg$ : Kilogramos
- $s$ : Segundos
- $e$ : Unidad de energía
- $\tau$ : Unidad temporal
- $\mu$ : Unidad másica



**ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR  
DE INGENIEROS DE MINAS Y ENERGÍA**

