



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE
HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS

COMPORTAMIENTO DE PARTÍCULAS DE PRUEBA EN
HALOS GALÁCTICOS DE MATERIA OSCURA
BOSÓNICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN FÍSICO-MATEMÁTICAS

P R E S E N T A :

PARIS ALEJANDRO DÁVALOS BRAVO

TUTOR

DR. FRANCISCO S. GUZMÁN MURILLO



MORELIA, MICHOACÁN, AGOSTO 2020

Agradecimientos

A mi madre y mi tía Norma que siempre estuvieron ahí para mí. A mi asesor que me tuvo siempre paciencia. Finalmente a mis amigos y amigas que siempre me alegraban.

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	IV
Abstract	V
1. Introducción	1
2. Métodos numéricos	6
2.1. Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias	6
2.1.1. Shooting method	10
2.2. Solución de problemas de valores iniciales asociados a ecuaciones dife- renciales parciales	14
2.2.1. Método de Líneas	15
2.2.2. Aplicación a la ecuación de Schrödinger	17
2.3. Pruebas	19
2.3.1. Prueba en la solución de la ecuación de Schrödinger	19
3. Sistema de Newton-Schrödinger	44
3.1. Solución numérica	48
3.1.1. Configuraciones de equilibrio	48
3.1.2. Evolución del sistema	50
3.2. Problema con el término de auto-interacción entre los bosones	55
3.2.1. Evolución del sistema	58

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	III
4. Partícula de prueba	72
4.1. Caso para dos partículas	77
5. Conclusiones	86

Resumen

El objetivo del presente trabajo es realizar predicciones por medio de partículas de prueba en halos galácticos de materia oscura compuesta por un condensado de Bose-Einstein. Las predicciones fueron dadas al resolver numéricamente el sistema de ecuaciones de Schrödinger-Poisson. El trabajo empieza con los resultados de la solución numérica a la ecuación de Schrödinger con distintos potenciales y compararlos con la solución exacta para así probar el código. Posteriormente se solucionó el sistema Schrödinger-Poisson para distintas configuraciones y se verificó la convergencia de las soluciones numéricas. A continuación se estudió el comportamiento de una partícula de prueba, para después estudiar la distancia entre dos partículas de prueba. Se calculó el periodo de oscilación en la distancia entre dos partículas, que es del orden de cien millones de años, por lo que los detectores de ondas gravitacionales en la Tierra no se pueden utilizar para medir la separación entre dos partículas de prueba. Los resultados de esta Tesis indican que un interferómetro capaz de medir las oscilaciones de la materia oscura galáctica tendrían que ser del tamaño del orden de la distancia entre estrellas cercanas al Sol.

Palabras claves: Schrödinger, métodos numéricos, transformada de Fourier, galaxia y Bose-Einstein.

Abstract

The objective of the present work is to make predictions by means of test particles in galactic halos of dark matter composed by a Bose-Einstein condensate. The predictions were given by numerically solving the Schrödinger-Poisson system of equations. The work begins with the results of the numerical solution to the Schrödinger equation with different potentials and comparing them with the exact solution in order to test the code. Subsequently, the Schrödinger-Poisson system was solved for different configurations and the convergence of the numerical solutions was verified. Next, the behavior of a test particle was studied, to later study the distance between two test particles. The period of oscillation was calculated at the distance between two particles, which is on the order of one hundred million years, so gravitational wave detectors on Earth cannot be used to measure the separation between two test particles. The results of this Thesis indicate that an interferometer capable of measuring the oscillations of galactic dark matter would have to be of size of order of the distance between stars close to the Sun.

Capítulo 1

Introducción

Una de las grandes preguntas de la humanidad ha sido de que está hecho lo que nos rodea. Son varias las respuestas que se han dado a lo largo de la historia, principalmente en los primeros años fueron filosóficas. No fue hasta el descubrimiento del átomo que se dio un avance significativo en la respuesta. Llegando hasta el modelo estándar en la actualidad, sin embargo, aún hay muchas incógnitas. Uno de los misterios más recientes sobre la materia que han surgido es la materia oscura.

La ecuación de Friedmann describe la expansión del universo, siendo de vital importancia para la cosmología. En dicha ecuación uno de los términos es la densidad del universo, por lo que es muy importante al dar una idea de qué está formado el universo, para que el universo sea plano, existe un valor especial de la densidad. Este valor se conoce como la densidad crítica ρ_c . Varios objetos pueden aportar a la densidad crítica como son las estrellas o planetas, sin embargo, los resultados obtenidos es que lo que observamos por medio del espectro electro-magnético es una pequeña fracción de la densidad crítica. Existe la posibilidad de que una gran cantidad de materia sea producto de objetos con una masa pequeña tales que no irradian tanto y por eso no sean detectables a los telescopios, aunque es poco probable usando las extrapolaciones de lo que se sabe actualmente. Es decir, al observar nuestros alrededores no encontramos dichos objetos con masa pequeña. Una de las razones más fuertes para creer que la materia convencional no es la única que participa en la densidad total del universo es dada por la teoría de nucleosíntesis. Esta teoría explica

la creación de los núcleos atómicos, la cual indica la densidad de la materia bariónica y se verifica que aporta poco a la densidad crítica [6].

La materia oscura se propone como una solución a varios problemas encontrados con las observaciones, donde uno de estos es el de la densidad crítica. Dicha materia se cree que no interactúa con los campos electro-magnéticos o interactúa muy débilmente tanto que es imperceptible. Esto se debe a la falta de detección directa por parte de las observaciones. Otro de los problemas que da indicios de la existencia de este tipo de materia es el de la curva de rotación galáctica, que es la velocidad de rotación del hidrógeno en la galaxia como función de la distancia R al centro de la galaxia. En la cual si se toma en cuenta sólo la materia luminosa, se esperaría que a distancias alejadas del centro de la galaxia, donde reside menor parte de materia luminosa, la velocidad rotacional debería de disminuir proporcional a la raíz cuadrada de R de acuerdo a las leyes de Kepler [13]. Sin embargo las observaciones indican que permanece aproximadamente constante para R grandes. Para mantener la velocidad rotacional constante se requiere una mayor concentración de masa de la que se detecta [6].

Otra de las evidencias observacionales que sugieren la existencia de materia oscura se presenta en los cúmulos de galaxias. Los cúmulos de galaxias al ser los objetos más grandes ligados gravitacionalmente son ideales para dar una idea de los distintos tipos de materia que existe en el cúmulo. La observación es la siguiente: las galaxias que componen el cúmulo se desplazan unas con respecto a otras con velocidades mayores a la velocidad de escape del cúmulo. Este efecto no se explica a menos de que no aplique la ley de gravitación universal de Newton o debido a que hay materia extra, que no emite luz, que la da mayor masa al cúmulo y por tanto la velocidad de escape sea mayor que la estimada con solamente la masa de las galaxias [6].

Por lo tanto hay varias evidencias observacionales de este tipo de nueva materia en el universo. Las observaciones recientes indican que el universo está compuesto de aproximadamente 23% de la materia total del universo se denomina como materia oscura, un 72% de energía oscura y un 5% de materia bariónica. Al aún no conocer la naturaleza de este tipo de materia existen una gran variedad de candidatos a materia

oscura donde el modelo CDM (Cold Dark Matter) o materia oscura fría en español, es el más estudiado en la actualidad [6], el cual propone una especie de materia que interactúa muy débilmente con radiación electromagnética y con velocidades lentas comparadas a la velocidad de la luz en la época de formación de galaxias, que a su vez presenta varios candidatos entre los que destacan las WIMP (Weakly-Interactive Massive Particle) o partículas masivas con interacción débil, que interactúan por medio de la gravedad, sin embargo uno de los problemas que presentan es que tienen la tendencia de agruparse y formar estructuras más pequeñas, como estrellas o planetas hechos de materia oscura, mientras que las observaciones indican que la estructura más pequeña son las galaxias enanas [15]. Uno de los candidatos más conocidos son las partículas supersimétricas que se comportarían como un fluido frío hecho de partículas. Sin embargo no se han detectado las partículas que predice la teoría en el LHC (Large Hadron Collider). El modelo usual de materia oscura presenta dos problemas y son que el resultado de un colapso gravitacional muestra un perfil de densidad central no suave y por otro lado predice la formación de estructuras pequeñas ligadas gravitacionalmente a las galaxias que no se han observado [4], [17].

Otro de los candidatos alternativos a las WIMP es el modelo de BEC Dark Matter (Bose-Einstein Condensate) que también aparece en la literatura como SFDM (Scalar Field Dark Matter) o campo escalar como materia oscura. El modelo propone que la materia oscura está conformada por partículas bosónicas ultraligeras, con masas en el rango de $m \sim 10^{-21} - 10^{-23}$ eV, para obtener resultados que se ajustan a las observaciones de galaxias [3]. La idea del condensado de Bose-Einstein es tener todos los átomos de un gas en su nivel mínimo de energía. La implicación es que se puede sustituir el operador que describe el estado de todas las partículas por un campo clásico, llamado la función de onda del condensado. Para realizar este paso, se requiere que la temperatura sea lo suficientemente baja y que el número de átomos sea lo suficientemente grande [7].

Para ser un modelo serio como alternativa al Λ CDM debe de emular sus predicciones correctas y corregir aquellas en las que falla el modelo. Se probó que con esta masa el modelo imita el comportamiento de la expansión cosmológica predicha. Se

ha observado que el modelo recupera los resultados obtenidos por Λ CDM a grandes escalas cosmológicas. Sin embargo, se aparta de este modelo a escalas pequeñas [4].

El sistema Schrödinger-Poisson, o también llamado Newton-Schrödinger, surge a partir del límite Newtoniano del sistema Einstein-Klein-Gordon. Este sistema es utilizado ya que de acuerdo al modelo estándar cosmológico describe la evolución como función del tiempo del campo escalar para crear estructuras unidas gravitacionalmente, las cuales al enfriarse debido a la expansión del universo pasan a ser descritas por el sistema Schrödinger-Poisson [4].

Es un sistema de dos ecuaciones, donde la primera ecuación describe el cambio temporal de la función de onda, mientras la segunda ecuación contiene información del potencial. Dicho sistema es la ecuación de Gross-Pitaevski para la función de onda y un potencial gravitacional del sistema Gross-Pitaevskii-Poisson (GPP).

La ecuación de Gross-Pitaevski representa un condensado de Bose-Einstein a temperatura menor que la temperatura crítica [7]. Un condensado de Bose-Einstein es aquel en donde las partículas que constituyen un gas al estado base. Dado el principio de exclusión de Pauli, dicho estado sólo puede ser obtenido por partículas bosónicas.

Este sistema GPP no tiene solución exacta conocida, por lo que en este trabajo en el siguiente capítulo se abordarán los métodos numéricos usados para resolver este sistema. El modelo de materia oscura bosónica se encuentra en una fase de pruebas y predicciones. En este trabajo se propone averiguar si es posible determinar la validez del modelo a escala galáctica en la Vía Láctea. La idea es la siguiente. Las soluciones estacionarias del sistema GPP son consideradas núcleos y halos de materia oscura galáctica, son estables y atractores en el tiempo. Sin embargo, oscilan con frecuencias bien definidas ante perturbaciones. Se estudia aquí la posibilidad de que mediante el comportamiento de partículas de prueba sea posible determinar si las oscilaciones corresponden a la de las soluciones estacionarias propuestas como halos, perturbadas o no. Adicionalmente, estudiando el movimiento de dos partículas de prueba, sea posible predecir los efectos de las oscilaciones del halo galáctico usando interferómetros terrestres o no.

Los resultados importantes son dos. Primero que las oscilaciones del halo imprimen

oscilaciones sobre las partículas de prueba que corresponden a las oscilaciones del halo. Y segundo, que la distancia entre dos partículas de prueba también detecta la perturbación debido a la oscilación del halo. Se determina que no es posible medir las oscilaciones de la distancia entre dos partículas con los interferómetros terrestres, pues la frecuencia de oscilación del halo es muy baja.

La tesis está organizada de la siguiente manera. En el segundo capítulo se resolverá el sistema Newton-Schrödinger. Primeramente sin el término de auto-interacción, posteriormente se contará con este término tomando en cuenta que la solución es esféricamente simétrica. En el tercer capítulo se abordará el problema de una partícula de prueba y su posición como función del tiempo, después se incluirá una segunda partícula a cierta separación pequeña de la primer partícula. Así medir el cambio entre la distancia de separación, para obtener resultados que se puedan comparar con observaciones. En el capítulo 4 se mostrarán las conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

Métodos numéricos

2.1. Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias

Se describirá la resolución de un problema de valores iniciales asociado a ecuaciones diferenciales ordinarias. El objetivo es calcular una función $y = y(x)$ que sea solución de una ecuación diferencial ordinaria en un dominio X y que cumpla una condición inicial. Es decir

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y = y(x). \quad (2.1)$$

$$X = [x_{min}, x_{max}], \quad \text{Dominio.} \quad (2.2)$$

$$y(x_0) = y_0. \quad \text{Condición inicial.} \quad (2.3)$$

Para resolver la ecuación (2.1) se requiere definir un dominio y una condición inicial. Donde $X = [x_{min}, x_{max}]$ es un subconjunto de los reales y $y(x_{min}) = y_0$ es la condición inicial. El método que se ilustra aquí sirve para construir una solución numérica en un dominio discretizado. Para empezar a trabajar con un problema de valores iniciales es preciso definir una versión discreta del problema y trabajar sobre ésta. El primer paso para construir la solución es discretizar el dominio.

La versión discreta del dominio es un subconjunto del dominio continuo, con la peculiaridad de que este subconjunto se obtiene al hacer una partición del dominio continuo.

Se definirá de tal manera que para $N \in \mathbb{N}$ y $j = 0, 1, \dots, N$, $x_j = j\Delta x + x_{min}$ y donde $\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N}$ con $x_0 = x_{min}$ y $x_N = x_{max}$. Ahora que se ha construido el dominio discreto, los valores de alguna función f sobre el dominio continuo quedan definidos solamente en los puntos del dominio discreto (x_i) . Se denotarán dichos valores por f_i .

Ahora se trabajará con la ecuación (2.1) para construir la versión discreta del problema de valores iniciales. Si se aproxima la derivada en el punto x_{i-1} tomando en cuenta la igualdad de la ecuación (2.1) y se usa una versión discreta de la derivada de y con respecto a x se tiene

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \approx f(x_{i-1}, y_{i-1}).$$

De aquí se obtiene

$$y_i \approx y_{i-1} + \Delta x f(x_{i-1}, y_{i-1}). \quad (2.4)$$

Que permite calcular y_i a partir de la información en x_{i-1} . La ecuación (2.4) define el método de Euler para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias. Es importante notar que se construye la solución de la función y en x_i a partir del valor de y en x_{i-1} y además que $x_i = x_{i-1} + \Delta x$. Por lo que la solución se está obteniendo a partir del valor de la pendiente en el punto x_{i-1} [11].

Sin embargo, ésta no es la única manera de construir una solución para y_i . No es necesario hacer la aproximación de la derivada exclusivamente en x_{i-1} . También se puede tomar en cuenta el valor de la pendiente en $x_{i-1} + \frac{\Delta x}{2}$. Al construir esta nueva versión de la aproximación se obtiene

$$\begin{aligned} k1 &= f(x_{i-1}, y_{i-1}) \\ k2 &= f\left(x_{i-1} + \frac{\Delta x}{2}, y_{i-1} + \frac{k1}{2}\right) \\ y_i &\approx y_{i-1} + \Delta x \frac{(k1 + k2)}{2}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Esta idea se ilustra mejor en las imágenes de la figura 2.1.

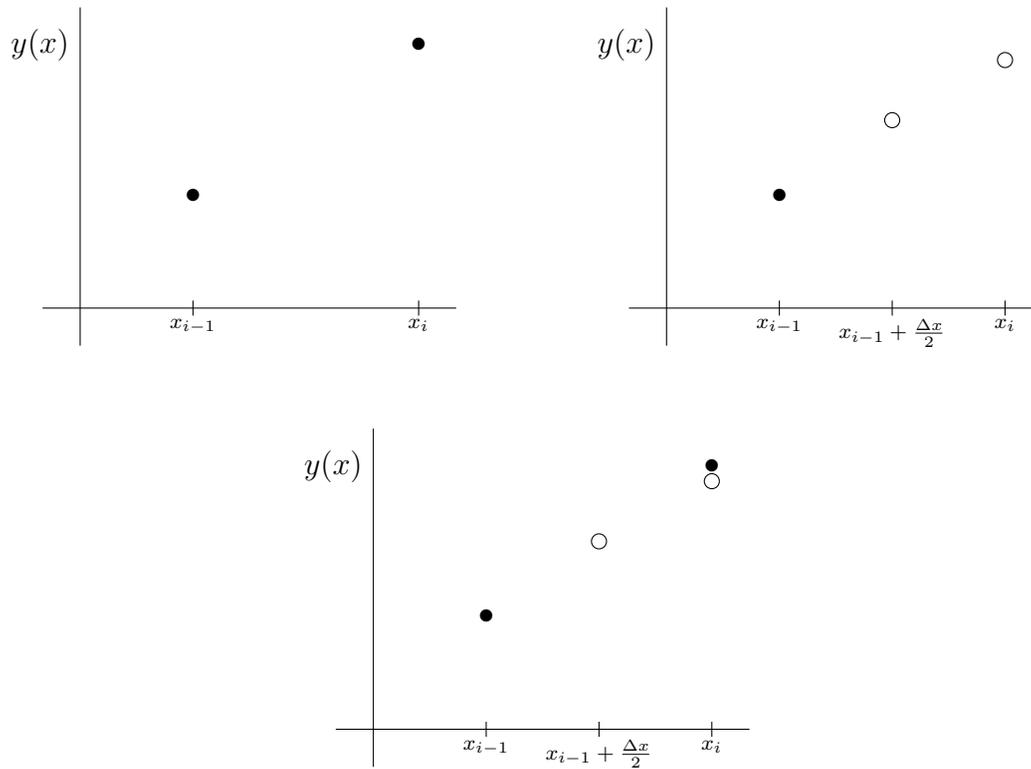


Figura 2.1: En la imagen superior izquierda se ilustra el método de Euler. En la imagen superior derecha es el segundo paso que primero requiere la información del punto medio. Y la imagen inferior es la comparación entre ambos métodos.

Pero éstas no son las únicas maneras de obtener la solución y_i en x_i . Hay muchas combinaciones que se pueden hacer para conseguir el valor en y_i . La idea de hacer este proceso se conoce como método de Runge-Kutta. La ecuación anterior se conoce como un método de Runge-Kutta de segundo orden y existen distintos métodos Runge-Kutta de segundo orden por lo que ahora se presentará una manera de obtenerlos. Se propone

$$k_1 = \Delta x f(x_{i-1}, y_{i-1}) \quad (2.6)$$

$$k_2 = \Delta x f(x_{i-1} + \alpha \Delta x, y_{i-1} + \beta k_1) \quad (2.7)$$

$$y_i \approx y_{i-1} + a k_1 + b k_2 \quad (2.8)$$

donde α , β , a y b son constantes por determinar. Para determinar las constantes de

este sistema se calcula la serie de Taylor para y_i centrada en x_{i-1}

$$y_i = y_{i-1} + \Delta x \frac{dy}{dx} \Big|_{x_{i-1}} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2y}{dx^2} \Big|_{x_{i-1}} + O(\Delta x^3).$$

Sin embargo por la ecuación (2.1) y sustituyendo la segunda derivada por la ecuación (2.1), usando regla de la cadena, se puede reescribir de la siguiente manera

$$y_i = y_{i-1} + \Delta x f + \frac{\Delta x^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right] + O(\Delta x^3),$$

donde f está evaluada en (x_{i-1}, y_{i-1}) . Ahora se expande también la ecuación (2.7) y se sustituye en la ecuación (2.8):

$$k_2 = \Delta x \left(f + \alpha \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \beta k_1 \frac{\partial f}{\partial x} \right) + O(\Delta x^3), \quad (2.9)$$

$$y_i = y_{i-1} + (a + b) \Delta x f + b \Delta x^2 \left(\alpha \frac{\partial f}{\partial x} + \beta \frac{\partial f}{\partial y} \right) + O(\Delta x^3). \quad (2.10)$$

Comparando los términos con coeficientes iguales, dan el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} a + b &= 1 \\ \alpha b &= \frac{1}{2} \\ \beta b &= \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

por lo que se ha construido el sistema para el método Runge-Kutta de orden 2 [12]. Se puede proceder de manera similar para obtener distintos Runge-Kutta de distintos órdenes. Para la mayoría de los algoritmos presentados se procedió a utilizar un

Runge-Kutta de tercer orden. El cual obedece la siguiente secuencia

$$k_1 = \Delta x f(x_{i-1}, y_{i-1}) \quad (2.11)$$

$$k_2 = \Delta x f\left(x_{i-1} + \frac{1}{2}\Delta x, y_{i-1} + \frac{1}{2}k_1\right) \quad (2.12)$$

$$k_3 = \Delta x f\left(x_{i-1} + \frac{1}{2}\Delta x, y_{i-1} + \frac{1}{2}k_2\right) \quad (2.13)$$

$$y_i = y_{i-1} + \frac{1}{6}k_1 + \frac{2}{3}k_2 + \frac{1}{6}k_3. \quad (2.14)$$

Este algoritmo es ampliamente usado ya que sólo usa tres iteraciones y es preciso para valores lo suficientemente pequeños del factor $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ [11].

2.1.1. Shooting method

El método de shooting se utiliza para resolver ecuaciones diferenciales lineales con condiciones en la frontera. Es importante notar que no se usa el valor de la derivada de la solución en un punto, sino otro punto de la solución. Problemas de la forma

$$\frac{d^2y}{dx^2} = g(x, y) \quad y=y(x) \quad (2.15)$$

$$X = [x_0, x_N] \quad \text{Dominio} \quad (2.16)$$

$$y(x_0) = a \quad \text{Condición de frontera} \quad (2.17)$$

$$y(x_N) = b \quad \text{Condición de frontera.} \quad (2.18)$$

La idea del método shooting es fijar una condición de frontera en $x = x_0$. Después “disparar” distintas trayectorias hasta dar con la otra solución que cumple $y(x_N) = b$ como se ilustra en la imagen 2.2.

Para el método de shooting se requieren los valores de la función deseada en x_0 y x_N . Se procede a resolver el problema de valores iniciales para la ecuación (2.15) empezando en $x = x_0$ y usando la condición inicial $y(x_0) = a$ y se empieza con un valor arbitrario para $y'(x_0)$. Se resuelve el problema de valores iniciales para después cambiar el valor de $y'(x_0)$ y se realiza el mismo procedimiento hasta que la solución en x_N sea igual a b con cierta tolerancia, es decir $y(x_N) = b \pm \epsilon$. Para poder resol-

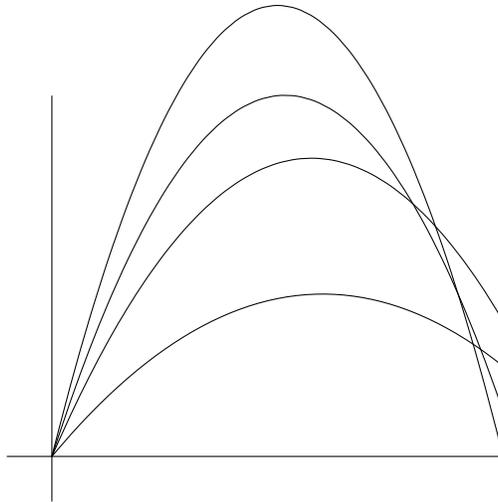


Figura 2.2: Se muestra como el shooting method mantiene una condición de frontera fija mientras se resuelve la ecuación diferencial varias veces hasta dar con la otra condición de frontera.

ver el problema primero se debe escribir la ecuación (2.15) como un sistema de dos ecuaciones de primer orden, haciendo $\frac{dy}{dx} = v$. Por lo que la ecuación (2.15) ahora es

$$\frac{dy}{dx} = v, \quad (2.19)$$

$$\frac{dv}{dx} = g. \quad (2.20)$$

La ecuación (2.19) cumple todas las características para ser un problema de valores iniciales, que ya se indicó con anterioridad como resolverlos. Sin embargo, para la ecuación (2.20) falta el valor inicial de v para poder ser un problema de valores iniciales. Es por esto que se propone un $v(x_0) = v_0$ arbitrario y se resuelve el sistema. A continuación si no se llega a la condición de frontera deseada se cambia este v_0 y así sucesivamente hasta que se cumpla la condición $|y(x_N) - b| = \epsilon$.

Un buen ejemplo para ilustrar cómo trabaja el método de Shooting es con la ecuación de Helmholtz. Recordando que la ecuación de Helmholtz se escribe de la siguiente manera

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \phi = 0, \quad (2.21)$$

la cual se puede sobrescribir como

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi = -k^2\phi. \quad (2.22)$$

Es importante ver la ecuación de esta manera porque el parámetro que ayudará a construir la solución es k , cuyo valor se va a cambiar para aproximar la solución en x_N . Todo problema que se va a resolver numéricamente, se debe de definir un dominio discreto en el que se resolverá, en este caso como ejemplo se usará el siguiente dominio $x \in [0, 1]$. Las condiciones para el shooting van a ser $\phi(0) = 0$ y $\phi(1) = 0$, por lo que se procede a reescribir la ecuación (2.22), como un sistema de dos ecuaciones ordinarias

$$\frac{d\phi}{dx} = v \quad (2.23)$$

$$\frac{dv}{dx} = -k^2\phi. \quad (2.24)$$

Se mencionó que el valor que ayudaría a construir la solución es k , esto es porque va estar cambiando el valor de k en lugar de v que es la derivada. Como v no va a estar cambiando, se va a proponer una condición inicial $v(x_0) = 1.0$. Los resultados son usando una tolerancia $\epsilon = 1 \times 10^{-8}$ y se muestran en las figuras 2.3 y 2.4 para $k = 0.5$ y $k = -0.5$ respectivamente.

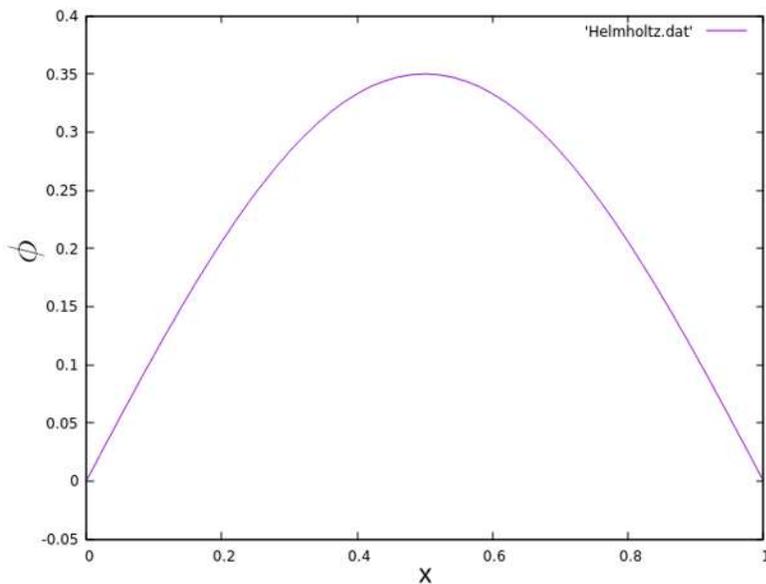


Figura 2.3: Solución de la ecuación de Helmholtz con el método de shooting, para un valor inicial de $k = 0.5$, $v = 1.0$ y una tolerancia $\epsilon = 1 \times 10^{-8}$, terminando con $k = 3.1415$.

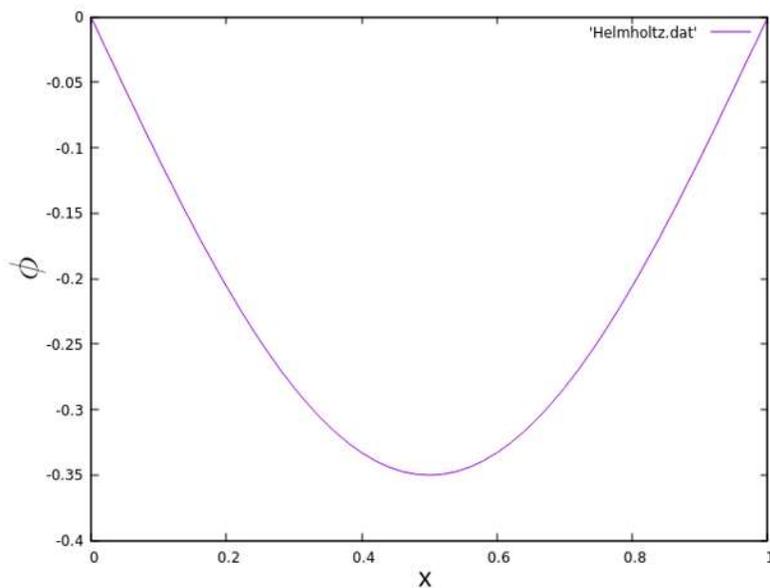


Figura 2.4: Solución a la ecuación de Helmholtz para un valor inicial de $k = -0.5$, $v = -1.0$ y una tolerancia $\epsilon = 1 \times 10^{-8}$, terminando con $k = 3.1415$.

Como se puede apreciar en las figuras 2.3 y 2.4, ambas soluciones cumplen las condiciones de frontera en x_N con la tolerancia impuesta con ϵ , sin embargo no son

la misma solución al comparar la figura 2.3 con la figura 2.4. Esto se debe a que las condiciones iniciales fueron distintas y esto impactó en la construcción de la solución. Por lo que la solución obtenida, aunque cumpla con la restricción en la frontera dependerá de las condiciones iniciales.

2.2. Solución de problemas de valores iniciales asociados a ecuaciones diferenciales parciales

Un problema de valores iniciales asociado a una ecuación diferencial parcial se define como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(t, x, u), \quad u = u(x, t) \quad (2.25)$$

$$D = X \times T, \quad \text{Dominio} \quad (2.26)$$

$$u(x, t_0) = u_0, \quad \text{Condiciones iniciales} \quad (2.27)$$

$$u(x_{min}, t) = a, \quad \text{Condiciones de frontera} \quad (2.28)$$

$$u(x_{max}, t) = b \quad \text{Condiciones de frontera} \quad (2.29)$$

donde hay una ecuación diferencial parcial involucrada y una variable u que depende del espacio y del tiempo. El dominio es $D = X \times T$ donde $X = [x_{min}, x_{max}]$ y $T = [t_0, t_n]$.

Para empezar a trabajar con este problema es necesario definir de nuevo un dominio discreto, con la diferencia de que ahora será para dos variables, comparando con la sección anterior que era para una variable en el dominio. Por lo que se requiere hacer una nueva malla.

La malla se define por $x_j = j\Delta x$ para $j = 0, \dots, N_x$, donde $\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N_x}$. Análogamente se realiza para la parte temporal de la siguiente manera $t^k = k\Delta t$ para $k = 0, \dots, N_t$ enteros y $\Delta t = \frac{t_n - t_0}{N_t}$. Los valores x_{min} y x_{max} delimitan el dominio espacial, mientras que t_0 y t_n hacen lo propio para delimitar el dominio temporal. Se puede apreciar el concepto en la figura 2.5.

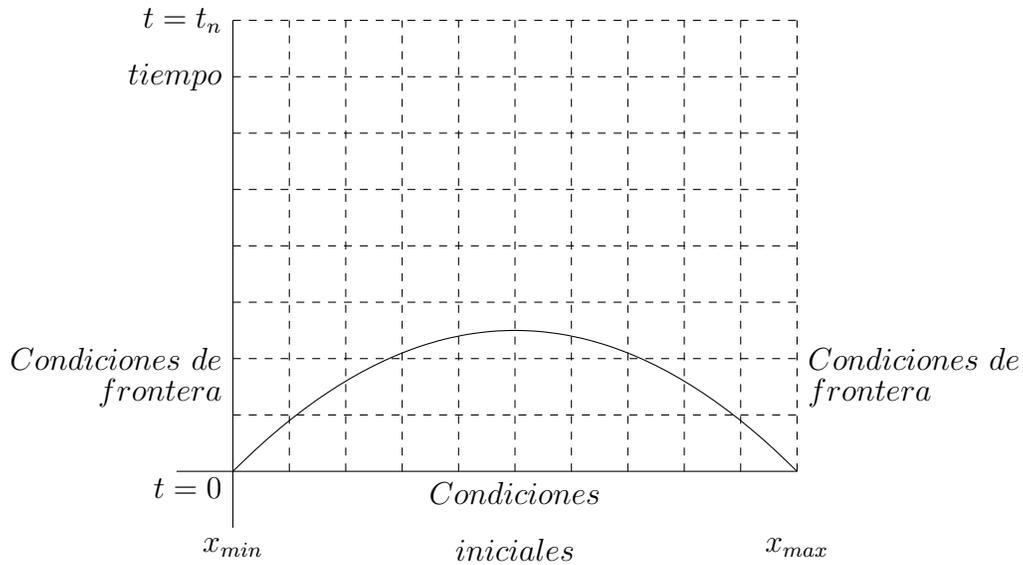


Figura 2.5: Versión discreta del problema de valores iniciales. Se tiene la condición inicial en $t = 0$ y las de frontera en x_{min} y x_{max} en el dominio tanto espacial como temporal discretizados.

Una vez definido el dominio discreto se puede abordar el problema de solucionar el problema de valores iniciales asociados a una ecuación diferencial parcial. Como se mencionó, al definir el dominio se debe aproximar a su vez las ecuaciones. Es decir, el operador diferencial ahora va a actuar sobre una función definida en una malla, por lo cual se debe definir una versión discreta del operador. Una de las condiciones a cumplir es que f , la versión continua, sea bien portada para que tenga una expansión en Serie de Taylor.

2.2.1. Método de Líneas

Para utilizar este método es necesario realizar versiones discretas para los operadores diferenciales involucrados en la ecuación diferencial parcial. A continuación se verá cómo se construye una derivada de primer orden. Dada una función f , se puede aproximar el valor de la función en un punto por medio de expansiones en serie de Taylor. El número de puntos cercanos a x_j y el orden en el que se decida truncar la aproximación determinarán el orden del error de la aproximación. Este error se

presenta ya que se aproxima la serie de Taylor en lugar de usar la fórmula exacta. El valor de f en los puntos vecinos a x_j es:

$$f(x_{j-1}) = f(x_j) - \Delta x f'(x_j) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j) + O(\Delta x^3), \quad (2.30)$$

$$f(x_j) = f(x_j), \quad (2.31)$$

$$f(x_{j+1}) = f(x_j) + \Delta x f'(x_j) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_j) + O(\Delta x^3). \quad (2.32)$$

Con estas tres ecuaciones se puede despejar la primer derivada respecto a x en x_j , al restar la primera ecuación a la tercera expresión y dividiendo entre $2\Delta x$, con un error de segundo orden

$$f'(x_j) = \frac{f(x_{j+1}) - f(x_{j-1})}{2\Delta x} + O(\Delta x^2). \quad (2.33)$$

Esta aproximación utiliza valores de la función antes y después del punto x_j por lo cual se dice que es una aproximación centrada [10]. También si Δx tiende a 0, entonces se obtiene la definición de derivada como en Cálculo de una variable. Para calcular derivadas con mayor orden de precisión es necesario truncar la serie de Taylor en órdenes más grandes y buscar una combinación lineal de éstas para encontrar la derivada requerida.

También se puede calcular la segunda derivada en x_j . Se procede de manera similar, haciendo una expansión en series de Taylor, con diferencia de que ahora se busca una combinación lineal para aislar la segunda derivada. Procediendo de manera similar se puede obtener la segunda derivada y también el orden del error. Al sumar la primera y tercera expresión, restar dos veces la segunda expresión y dividiendo entre Δx^2

$$f''(x_j) = \frac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1}))}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). \quad (2.34)$$

Con esto se puede conseguir aproximaciones de operadores diferenciales del orden que se requiera, con el requisito sobre la función de tener una expansión en series de Taylor.

Una vez obtenidos los operadores diferenciales se resuelve las ecuaciones diferen-

ciales parciales con el método de líneas. Suponiendo que la ecuación es de la forma

$$g\left(x, f, \frac{\partial f}{\partial t}, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial x'}\right) = 0, \quad (2.35)$$

donde $f = f(x, t)$, con ciertas condiciones iniciales, en un dominio dado y con condiciones de frontera. Si dicha ecuación se puede reescribir de la siguiente manera

$$\frac{\partial f}{\partial t} = rhs\left(x, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial x'}\right) \quad (2.36)$$

donde *rhs* significa la parte derecha de la derivada de f con respecto del tiempo [10]. Basta con escribir estos operadores en su versión para un dominio discreto, con lo cual se obtiene ecuaciones diferenciales ordinarias para f en cada x_i en el dominio discreto que a su vez se utilizan para construir a f en el tiempo t^{n+1} a partir de f en el tiempo t^n . Este método se conoce como el método de líneas.

2.2.2. Aplicación a la ecuación de Schrödinger

Ahora un problema de valores iniciales para una ecuación diferencial parcial. Para ello se trabajará con la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \psi, \quad (2.37)$$

con condiciones de frontera $\psi(x_{min}, t) = a$, $\psi(x_{max}, t) = b$ y condiciones iniciales $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$ y donde V es un potencial, a y b son constantes. Se resolverá en unidades atómicas, en las que se realiza una transformación de las constantes $\hbar = 1$

y $m = 1$. Entonces el problema de valores iniciales es el siguiente

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[V - \frac{\nabla^2}{2} \right] \psi \quad (2.38)$$

$$D = x \in [x_{min}, x_{max}] \times t \in [0, t_n] \quad (2.39)$$

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) \quad (2.40)$$

$$\psi(x_{min}, 0) = a \quad (2.41)$$

$$\psi(x_{max}, 0) = b. \quad (2.42)$$

Ya que ψ es una función compleja se separa a ψ en su parte real y su parte imaginaria. Se propone al potencial como una función real. Al realizar la separación de ψ se puede separar a su vez la ecuación de Schrodinger en su parte real y su parte imaginaria, que resulta de la siguiente manera

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = -\frac{\nabla^2}{2} \psi_I + V \psi_I \quad , \quad \frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \frac{\nabla^2}{2} \psi_R - V \psi_R \quad (2.43)$$

donde $\psi = \psi_R + i\psi_I$ con ψ_R y $\psi_I \in \mathbb{R}$. La evolución de datos consiste en usar la información en los tiempos anteriores para poder calcular la función deseada en tiempos siguientes. Una vez discretizados los operadores diferenciales, se puede escribir una forma semidiscreta de estas ecuaciones

$$\left. \frac{\partial \psi_R}{\partial t} \right|_{x_j} = -\frac{\psi_I(x_{j+1}) - 2\psi_I(x_j) + \psi_I(x_{j-1}))}{2\Delta x^2} + V\psi_I(j) + O(\Delta x^2), \quad (2.44)$$

$$\left. \frac{\partial \psi_I}{\partial t} \right|_{x_j} = \frac{\psi_R(x_{j+1}) - 2\psi_R(x_j) + \psi_R(x_{j-1}))}{2\Delta x^2} - V\psi_R(j) + O(\Delta x^2). \quad (2.45)$$

Se utilizó la versión en una dimensión del sistema de ecuaciones para ejemplificar mejor. Ahora se requiere de un integrador de ecuaciones diferenciales ordinarias para evolucionar datos de un tiempo a otro. Para la integración se utilizará el método de Runge-Kutta de orden 3.

2.3. Pruebas

2.3.1. Prueba en la solución de la ecuación de Schrödinger

Solución exacta para la partícula en una caja

Se trabajará primeramente con el ejemplo de una partícula atrapada en una caja sin potencial. Este problema tiene solución exacta, la cual se expondrá a continuación y al compararlas esto permitirá verificar si el resolutor numérico funciona correctamente. Se empezará por trabajar con la ecuación de Schrödinger

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi, \quad (2.46)$$

para un potencial de caja

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in (0, a) \\ \infty & x \notin (0, a), \end{cases} \quad (2.47)$$

con condiciones de frontera $\psi(0, t) = 0$ y $\psi(a, t) = 0$, donde a es el punto donde termina la caja. Para resolver el problema se propondrá que $\psi(x, t)$ se puede escribir como la multiplicación de dos funciones, es decir $\psi(x, t) = f(x)g(t)$, por lo que la ecuación (2.52) se transforma en

$$i \frac{\partial}{\partial t} f(x)g(t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x)g(t).$$

Ahora se divide entre $f(x)g(t)$, para separar la parte temporal de la espacial

$$\frac{i}{g(t)} \frac{\partial}{\partial t} g(t) = -\frac{1}{2f(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x).$$

Para que la igualdad sea posible, al ser funciones que dependen de variables independientes, deben ser constantes por lo que se iguala a una constante. Dicha constante es E , la energía, dando como resultado un sistema de ecuaciones, uno para la parte

espacial y otro para la temporal que resulta

$$i \frac{\partial}{\partial t} g(t) = g(t)E$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) = f(x)E.$$

Para la parte temporal la solución de $g(t)$ es

$$g(t) = Ae^{-iEt},$$

mientras que para la parte espacial la solución es

$$f(x) = Be^{i\sqrt{2E}x} + Ce^{-i\sqrt{2E}x}.$$

Para calcular las constantes se debe recurrir a las condiciones de frontera. Se requiere que $f(0) = 0 = f(a)$, por lo que se puede calcular los valores de las constantes B y C .

$$f(0) = Be^{(i\sqrt{2E})0} + Ce^{-(i\sqrt{2E})0} = 0$$

$$f(0) = C + B$$

$$C + B = 0$$

$$C = -B.$$

Ahora, la segunda condición de frontera implica

$$f(a) = B(e^{i(\sqrt{2E})a} - e^{-i(\sqrt{2E})a})$$

$$f(a) = 2B \sin(\sqrt{2E}a)$$

$$0 = \sin(\sqrt{2E}a)$$

$$\sqrt{2E}a = n\pi \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\sqrt{2E} = \frac{n\pi}{a}$$

Por lo que la parte espacial y temporal tienen la siguiente forma.

$$f(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$g(t) = Ae^{-iEt}.$$

Como la solución es para $\psi(x, t) = f(x)g(t)$, tanto B como A se pueden englobar en una constante única A' . Ahora para la última constante basta usar la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \psi = 1$$

$$\int_0^a dx \left(A' e^{-iEt} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right)^* \left(A' e^{-iEt} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) = 1$$

$$\int_0^a dx |A'|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = 1$$

$$|A'|^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}{4\pi n} \right]_{x=0}^{x=a} = 1 \Rightarrow$$

$$|A'|^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow$$

$$A' = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Con esto ya se tiene la solución exacta para ψ

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-iEt}, \quad (2.48)$$

que usaremos para calibrar la solución numérica.

Solución numérica para una partícula en una caja de una dimensión

Para comenzar se debe definir el dominio espacial $x \in [0, 1]$. Entonces la ecuación en este dominio es de la siguiente forma

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi, \quad (2.49)$$

que es el caso de la ecuación (2.47) para $V = 0$, lo cual se cumple en el dominio $x \in [0, 1]$, dando el siguiente sistema a resolver

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_I \quad , \quad \frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_R. \quad (2.50)$$

Ahora falta implementar las condiciones de frontera que cumple este problema, la función se deberá de anular en los extremos. Es decir $\psi(0, t) = 0$ y $\psi(1, t) = 0$. Para las condiciones iniciales a tiempo $t_0 = 0$ usaremos la solución exacta (2.48), entonces la parte real como imaginaria deben de cumplir las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} \psi_R &= \sqrt{2} \sin(n) \\ \psi_I &= 0, \end{aligned}$$

donde n es el nivel de energía que se desea para la función. Con todo esto se puede resolver la ecuación de Schrödinger para una partícula en una caja y en una dimensión al ser un problema de valores iniciales.

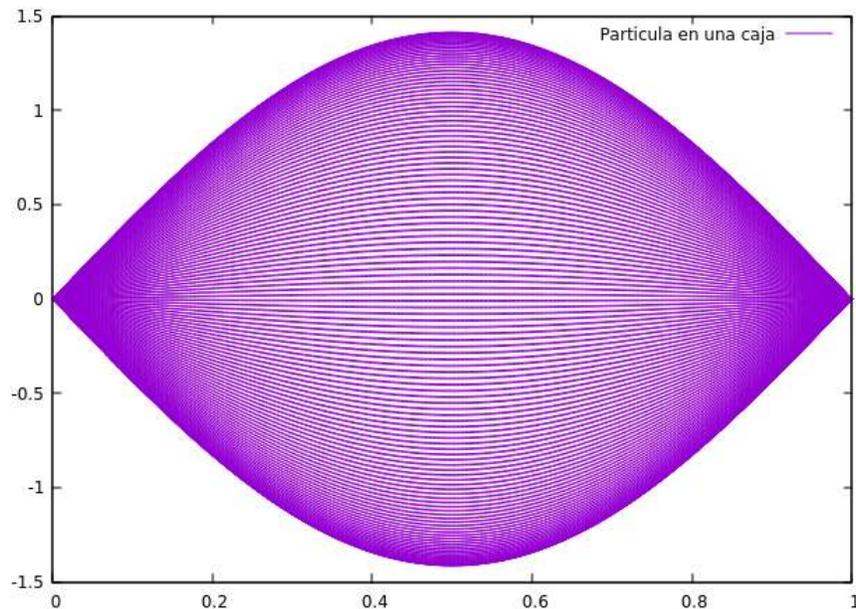


Figura 2.6: Parte real de la función de onda a distintos tiempos. Hasta llegar al tiempo $t = 7.5$ y para el nivel base de energía.

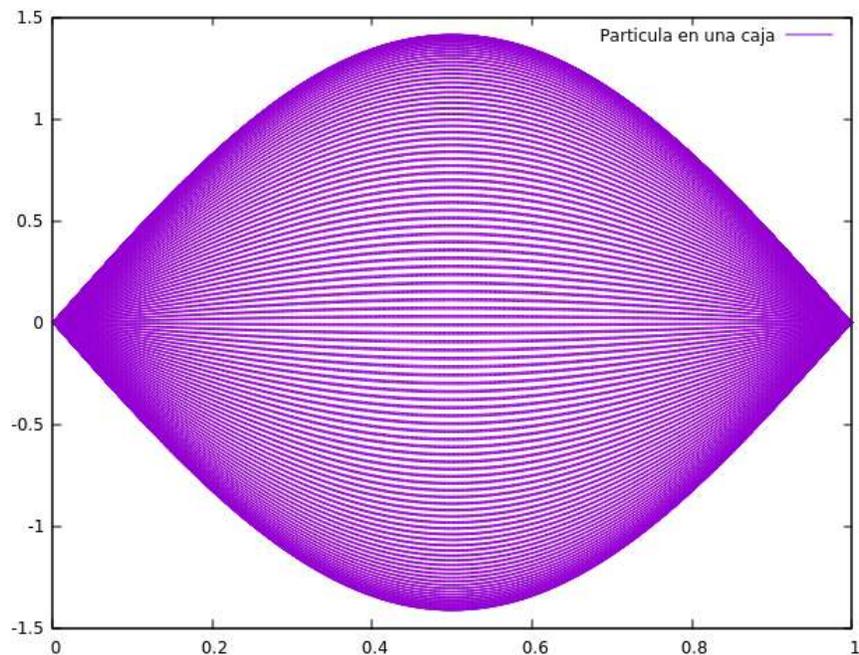


Figura 2.7: Solución exacta de la parte real de la función de onda a distintos tiempos. Hasta llegar al tiempo $t = 7.5$ y para el nivel base de energía.

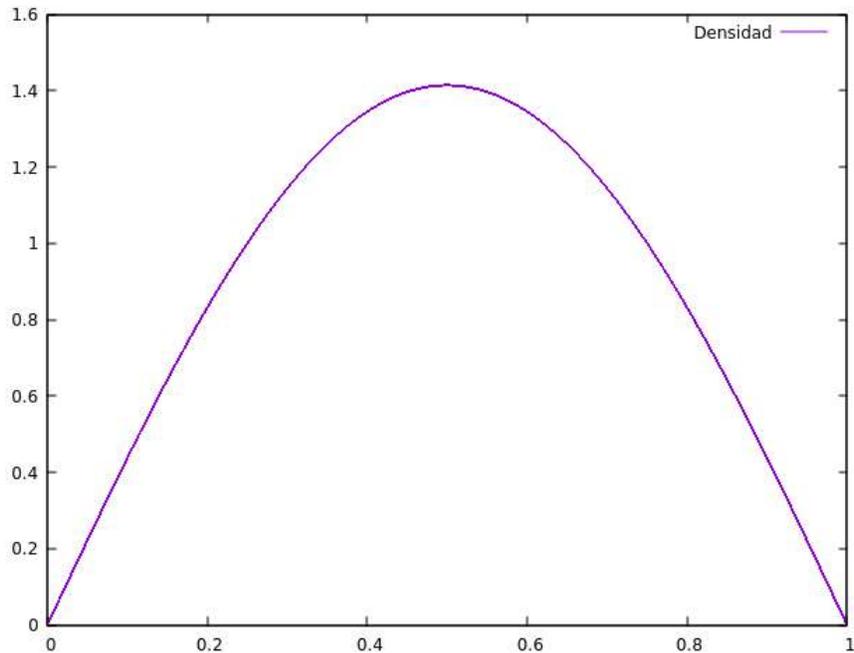


Figura 2.8: Densidad de probabilidad $|\psi_R|^2 + |\psi_I|^2$ en varios tiempos hasta llegar al tiempo $t = 7.5$. Verificando que se mantiene independiente del tiempo.

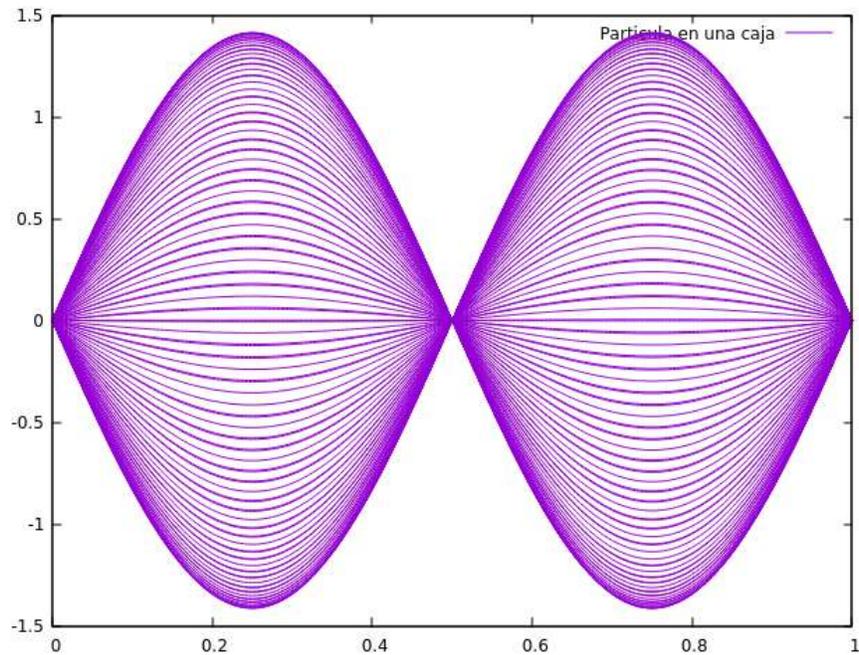


Figura 2.9: Parte real de la función de onda con $n = 2$ y a distintos tiempos hasta llegar a $t = 7.5$.

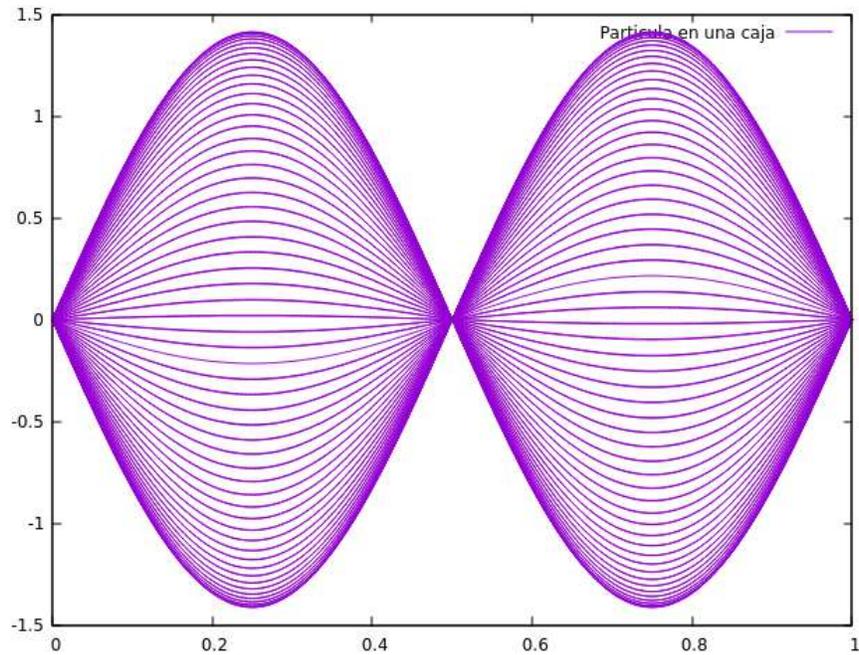


Figura 2.10: Solución exacta de la parte real de la función de onda con $n = 2$ y a distintos tiempos hasta llegar a $t = 7.5$.

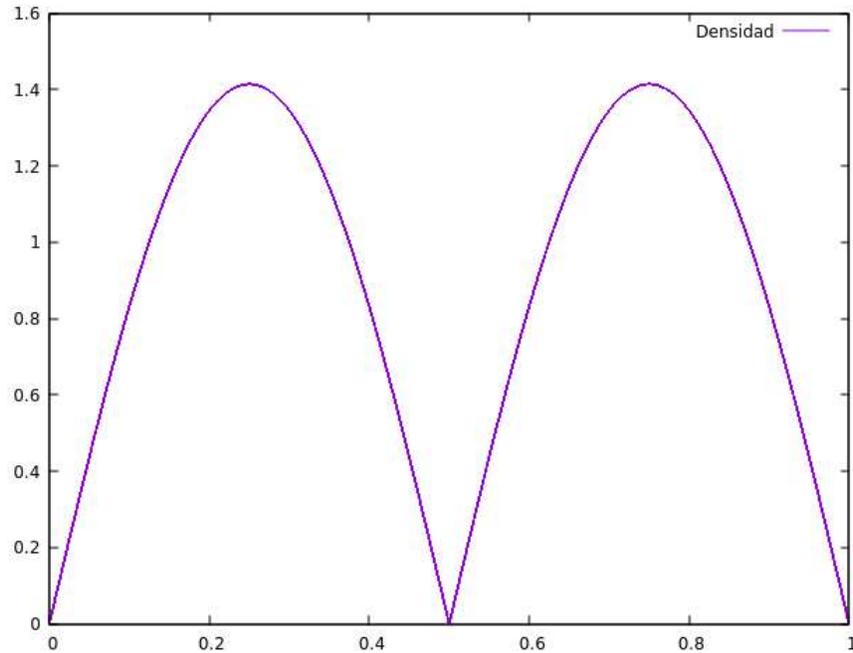


Figura 2.11: Densidad de la función de onda en varios tiempos hasta el tiempo $t = 7.5$. La cual se mantiene independiente en el tiempo.

En las figuras 2.6, 2.8, 2.9 y 2.11 se muestra la parte real de la solución numérica para $n = 1$ y $n = 2$, algo similar resulta con la parte imaginaria. Además en las figuras 2.7 y 2.10 se muestran la solución exacta para $n = 1$ y $n = 2$. Un buen indicio sobre la solución numérica es que la densidad de probabilidad para ambos casos es independiente del tiempo como se infiere de la solución exacta y de que el problema es estacionario. A pesar de que la solución tenga la forma de la solución exacta, hay siempre un error numérico. Por lo que se definirá el error como

$$error = |Re(\psi_e) - Re(\psi_n)|. \quad (2.51)$$

Donde $Re(\psi_e)$ es la parte real de la solución exacta, mientras que $Re(\psi_n)$ la parte real de la solución numérica. A continuación se verifica la convergencia de estas soluciones.

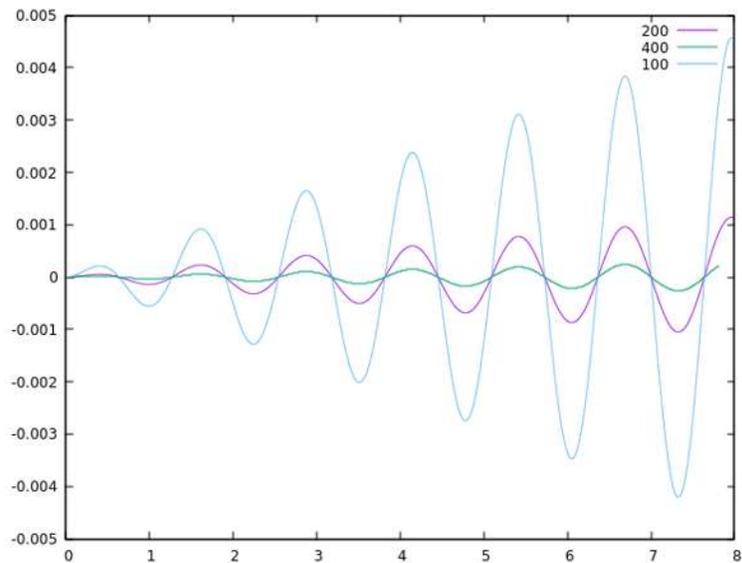


Figura 2.12: Cálculo del error u utilizando la norma L_2 a distintas resoluciones. Para $N = 100$, $N = 200$ y $N = 400$

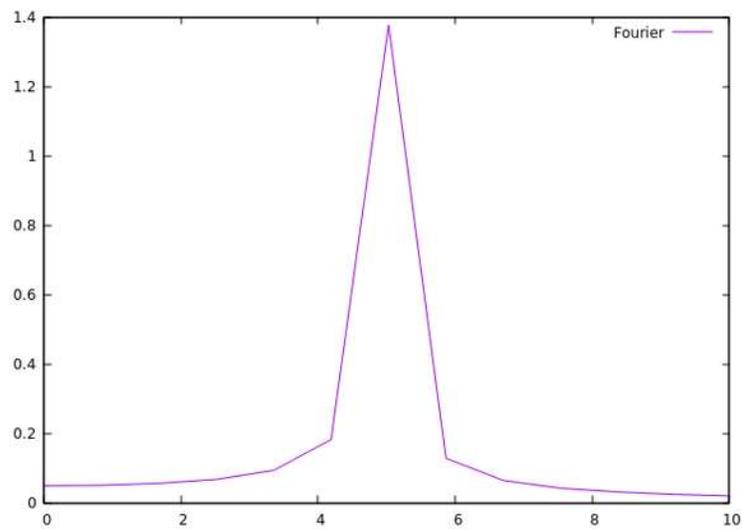


Figura 2.13: Cálculo de la transformada de Fourier del valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo, hasta $t = 18.1$.

donde el potencial es de la siguiente manera

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq l, 0 \leq y \leq l, 0 \leq z \leq l \\ \infty & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (2.53)$$

que corresponde a un cubo de lado l . También es necesario definir nuevas condiciones de frontera. Las cuales son $\psi(0, y, z) = 0 = \psi(l, y, z) = 0$, $\psi(x, 0, z) = 0 = \psi(x, l, z)$ y $\psi(x, y, 0) = 0 = \psi(x, y, l)$. De modo similar al problema unidimensional se procede utilizando separación de variables.

$$\frac{i}{g(t)} \frac{\partial}{\partial t} g(t) = -\frac{1}{2f(\vec{r})} \nabla^2 f(\vec{r}),$$

dando como resultado el siguiente sistema

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} g(t) &= g(t) E \\ -\frac{1}{2} \nabla^2 f(\vec{r}) &= f(\vec{r}) E. \end{aligned}$$

Para la parte temporal la solución es

$$g(t) = A e^{-iEt}, \quad (2.54)$$

mientras que para la parte espacial y con su debida normalización

$$f(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{l^3}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{l}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{l}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{l}\right). \quad (2.55)$$

Con n_x, n_y y $n_z > 0$ y enteros. Por lo que la solución exacta es

$$\psi(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{8}{l^3}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{l}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{l}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{l}\right) e^{-iEt}, \quad (2.56)$$

donde la energía E es

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{1}{8} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{a^2} + \frac{n_z^2}{a^2} \right). \quad (2.57)$$

Solución numérica para una partícula en una caja en tres dimensiones

Para la solución numérica del problema se empezará por definir el dominio, el cual será el cubo unitario. En el cual el potencial es 0, dando el siguiente sistema

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_I \quad (2.58)$$

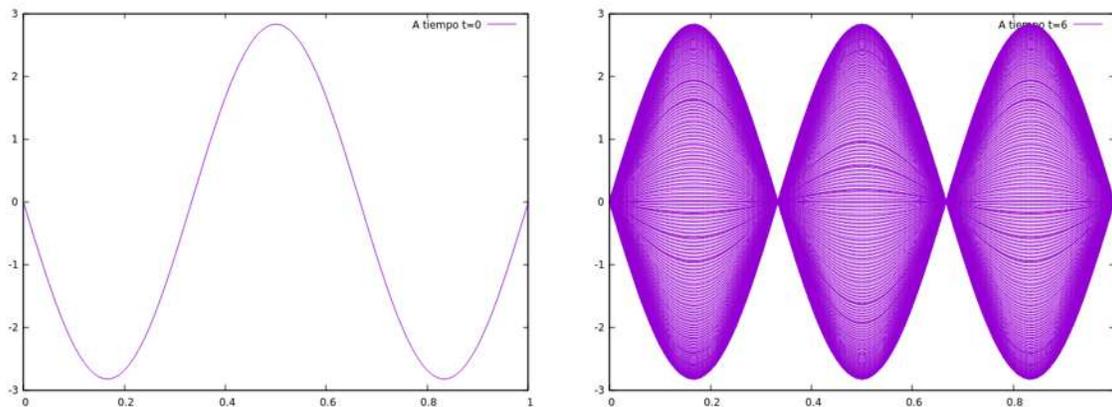
$$\frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla^2 \psi_R. \quad (2.59)$$

Al ya haber establecido las condiciones de frontera del problema sólo falta establecer las condiciones iniciales. Para el tiempo $t_0 = 0$ se usará la solución exacta al tiempo $t = 0$ las condiciones son las siguientes

$$\psi_R = \sqrt{8} \sin(n_x \pi x) \sin(n_y \pi y) \sin(n_z \pi z), \quad (2.60)$$

$$\psi_I = 0, \quad (2.61)$$

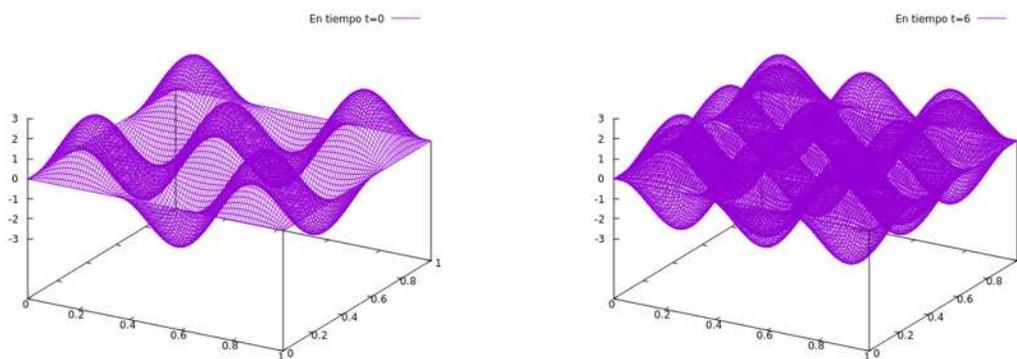
donde n_x, n_y y n_z son los números cuánticos. Con esto se puede resolver el problema de valores iniciales. Ahora se mostrará la solución para $n_x = 3$, $n_y = 3$ y $n_z = 3$. Para definir el dominio tridimensional se utilizó $x \in [0, 1]$, $y \in [0, 1]$ y $z \in [0, 1]$, donde la malla será $x_j = j\Delta x$, $y_k = k\Delta y$ y $z_l = l\Delta z$.



Para $t = 0$

como función del tiempo

Figura 2.15: Proyección de la parte real de la función de onda a lo largo del eje x . A la izquierda se muestra la condición inicial. A la derecha se muestra la parte real de la función de onda a distintos valores del tiempo hasta $t = 6$.



Para $t = 0$

como función del tiempo

Figura 2.16: Proyección de la parte real de la función de onda en el plano xy . A la izquierda se presenta la condición inicial. A la derecha se muestra la parte real de la función de onda a distintos valores del tiempo hasta $t = 6$.

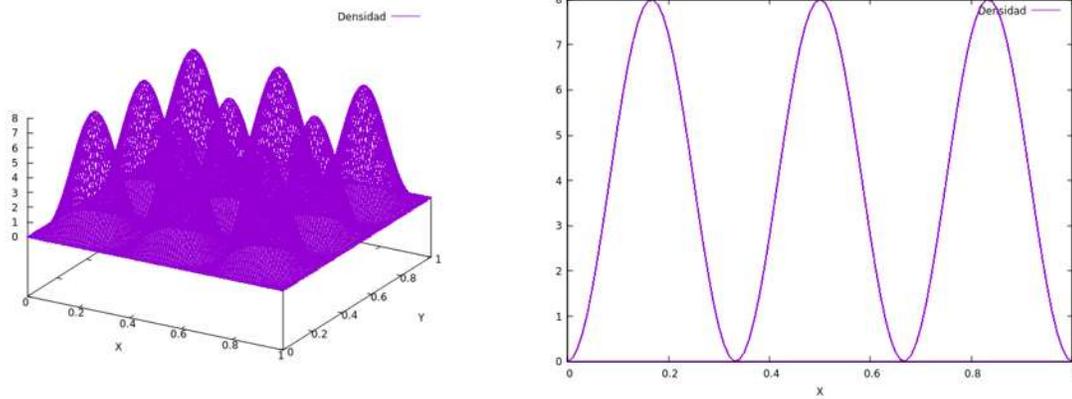


Figura 2.17: A la izquierda se muestra la proyección de la densidad en el plano xy como función del tiempo. A la derecha la proyección en el eje x de la densidad de la función de onda como función del tiempo.

Para las figuras 2.15, 2.16 y 2.17 las proyecciones que se mencionan se realizaron al tomar valores de la función de la siguiente manera: $\psi_R = \psi_R(i, j, \frac{N_z}{2})$ para la proyección en el plano xy y $\psi_R = \psi_R(i, \frac{N_y}{2}, \frac{N_z}{2})$ siendo la proyección en el eje x con $i = 0, 1, \dots, N_x$ y $j = 0, 1, \dots, N_y$. Es importante notar en la figura 2.17 cómo la densidad de probabilidad se mantiene independiente del tiempo en ambas proyecciones. Característica importante al tratarse de una solución estacionaria. Ahora se presentará la integral de la densidad de probabilidad en la figura 2.18, la cual permanece cercana a 1 como función del tiempo, dando una buena prueba sobre la unitariedad de la solución.

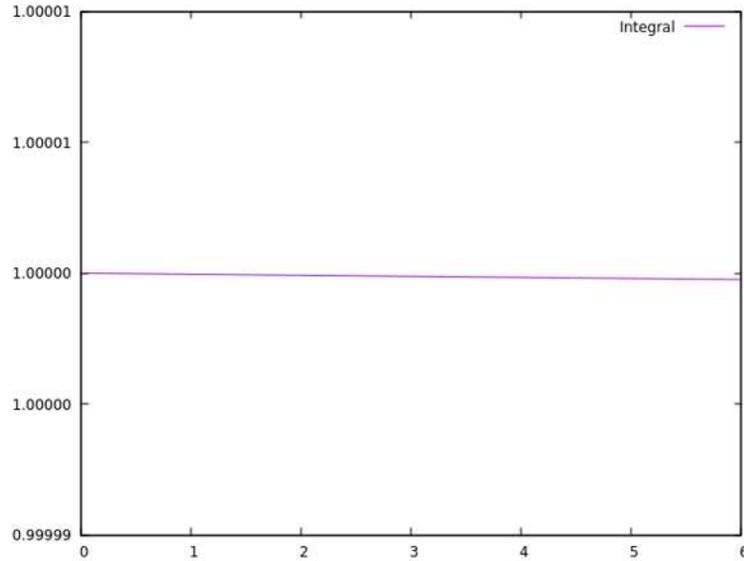


Figura 2.18: Valor de la integral de la densidad de probabilidad $N = \int |\psi|^2 d^3x$ como función del tiempo hasta $t = 6$.

Solución exacta para una partícula en un oscilador armónico de una dimensión

El segundo caso de prueba es el oscilador armónico cuántico, el cual tiene por hamiltoniano $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$, y se quiere resolver

$$\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t}. \quad (2.62)$$

Nuevamente el sistema tiene soluciones estacionarias y se propone que ψ se puede escribir de la forma: $\psi(x, t) = f(x)g(t)$, es decir que se procede por el método de separación de variables, con lo cual la ecuación (2.62) queda de la siguiente forma:

$$i\frac{\partial}{\partial t}f(x)g(t) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(x)g(t) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2f(x)g(t). \quad (2.63)$$

Se busca separar la parte temporal de la espacial por lo que basta dividir la ecuación por $f(x)g(t)$. Dando una nueva ecuación de la forma

$$\frac{i}{g(t)} \frac{\partial}{\partial t} g(t) = -\frac{1}{2f(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2.$$

Para que estas condiciones se cumplan, al ser funciones independientes, se debe igualar el sistema a una constante E . Por lo que resulta un sistema de dos ecuaciones:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} g(t) &= E g(t) \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 f(x) &= E f(x). \end{aligned}$$

Para la parte temporal ya se había solucionado una ecuación del mismo tipo ya se conoce la solución y no es necesario volverla a escribir. Lo que importa ahora es resolver la parte espacial. Para la cual se va a utilizar la notación de Dirac. Se empezará por definir operadores para \hat{X} y para \hat{P}

$$\begin{aligned} \hat{X} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \\ \hat{P} &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} p, \end{aligned} \tag{2.64}$$

con esto \hat{H} en la ecuación (2.62) se puede escribir como:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{X} + \hat{P}). \tag{2.65}$$

Es importante mencionar que la definición para \hat{X} y \hat{P} conserva las dimensiones. Ahora se definirán dos nuevos operadores utilizando \hat{X} y \hat{P} , conocidos como el operador de creación y operación de aniquilación respectivamente

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}), \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}). \end{aligned}$$

Ahora se introducirá el operador de número

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}.$$

Al hacer uso de estos operadores se puede ver que la ecuación (2.65) se puede escribir como

$$\langle \hat{H} \rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.66)$$

Utilizando la ecuación anterior y sabiendo que

$$\hat{N}|\psi\rangle = n|\psi\rangle,$$

Se obtiene que

$$\hat{H}|\psi\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |\psi\rangle. \quad (2.67)$$

Para calcular el estado base se debe cumplir $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$, ya que $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$. Usando la definición del operador \hat{a} así como la ecuación (2.65) se tiene

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} p \right] |\psi_0\rangle = 0. \quad (2.68)$$

A continuación se utiliza la representación $|x\rangle$ para obtener:

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \psi_0 = 0. \quad (2.69)$$

Por lo tanto basta con solucionar una ecuación diferencial de primer orden. La solución general es de la siguiente forma

$$\psi_0(x) = C e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}. \quad (2.70)$$

Para calcular la constante C , basta con normalizar la función.

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0^* \psi_0 &= 1 \\
\int_{-\infty}^{\infty} dx (C e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}) (C e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}) &= 1 \\
\int_{-\infty}^{\infty} dx C^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} &= 1 \\
C^2 \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}} &= 1 \Rightarrow \\
C &= \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}}
\end{aligned}$$

Al tener el estado base basta utilizar los operadores que anteriormente se introdujeron para calcular el resto de los estados

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\psi_0\rangle. \quad (2.71)$$

Por lo que se puede calcular el valor de ψ_n :

$$\psi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!} \frac{\hbar}{m\omega} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{m\omega x}{\hbar} - \frac{d}{dx} \right]^n e^{-0.5 \frac{m\omega}{\hbar} x^2}. \quad (2.72)$$

Recordando que los polinomios de Hermite son de la forma

$$H_n = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad (2.73)$$

conocida como la fórmula de Rodrigues, se puede probar usando recursión y las relaciones de recurrencia de los polinomios de Hermite que se pueden escribir de la siguiente manera

$$H_n(x) = \left(2x - \frac{d}{dx} \right)^n. \quad (2.74)$$

Con lo cual la solución para ψ_n sería:

$$\psi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-0.5 \frac{m\omega}{\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right). \quad (2.75)$$

Teniendo así la función de onda para el estado n [8]. Esta solución se utilizará para

validar el código que se usa para calcular las soluciones numéricas.

Solución numérica para una partícula en un oscilador armónico para una dimensión

Se procede de la misma manera que la partícula atrapada en una caja sin potencial. Es decir se propone una separación para la ecuación en su parte real y su parte imaginaria, también se trabajará en unidades atómicas. Separando la parte real y la imaginaria de la función de onda $\psi = \psi_R + i\psi_I$ queda el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_I + \frac{1}{2} x^2 \psi_I \quad \frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_R - \frac{1}{2} x^2 \psi_R. \quad (2.76)$$

Como en casos anteriores también falta definir el dominio el cual será $x \in [-10, 10]$.

Las condiciones iniciales del sistema serán

$$\psi_R(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{1}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) \quad (2.77)$$

$$\psi_I(x, 0) = 0. \quad (2.78)$$

Al ya tener las condiciones iniciales y el dominio, sólo bastan las condiciones de frontera las cuales son

$$\psi(-10, t) = 0 \quad \psi(10, t) = 0. \quad (2.79)$$

Teniendo así todo para resolver el problema numéricamente, a continuación se adjuntarán los resultados obtenidos para un nivel de energía igual a 2, en un tiempo $t = 7.68$ y de la parte real de ψ_R en la figura 2.19. En la figura 2.23 se muestra la solución exacta de la parte real.

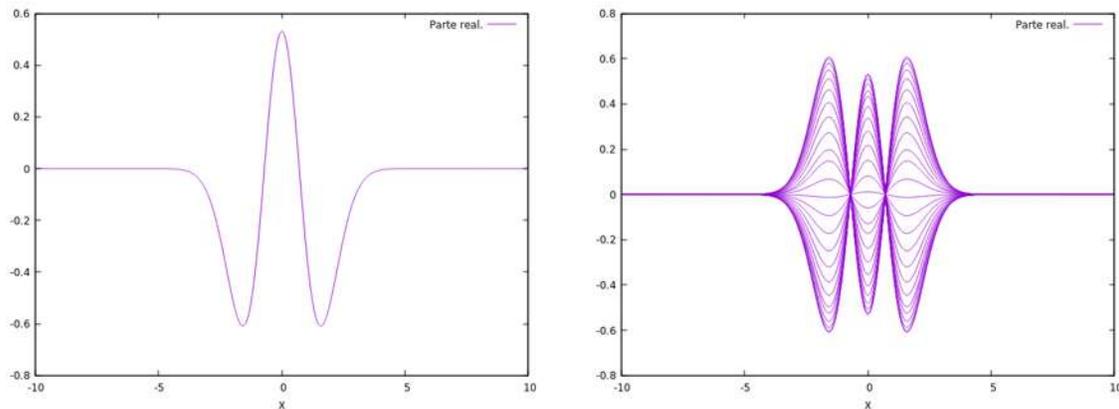


Figura 2.19: A la izquierda, parte real de la ecuación de onda a tiempo inicial. A la derecha, parte real de la ecuación de onda en distintos tiempos hasta $t = 47.5$.

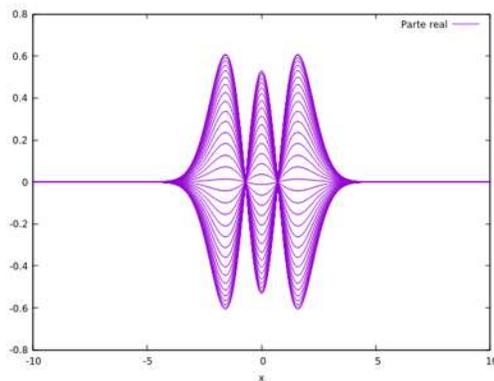


Figura 2.20: Solución exacta de la parte real de la ecuación de onda en distintos tiempos hasta $t = 47.5$.

En la figura 2.21 se muestra el gráfico para la integral de la densidad como función del tiempo hasta $t = 7.68$. A su vez la densidad de probabilidad como función del tiempo. La cual se mantiene constante en el tiempo, algo importante para verificar la solución numérica ya que para la solución exacta la densidad de probabilidad no depende del tiempo.

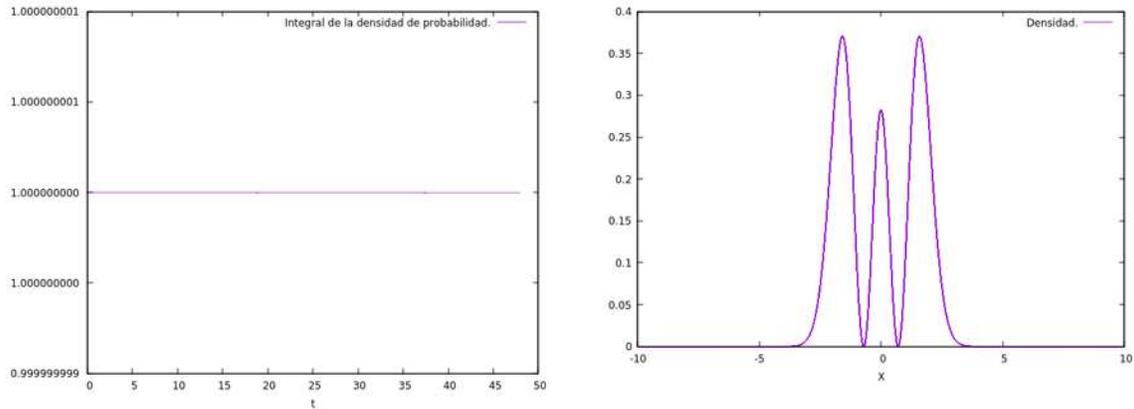


Figura 2.21: A la izquierda, valor de la integral de densidad como función del tiempo. A la derecha, valor de la densidad de probabilidad para $n = 2$ en varios tiempos. Es importante notar que ambas se quedan constantes en el tiempo.

En la figura 2.21 se muestra que el valor de la integral se mantiene en 1. Algo a notar es que los valores eran tan cercanos a 1 que el graficador los interpretaba como 1 como se ve en la imagen. Por lo que es un buen indicio de la solución. Se muestra en la figura 2.22 el error de ψ_R a distintas resoluciones para $N = 1000$ y $N = 2000$.

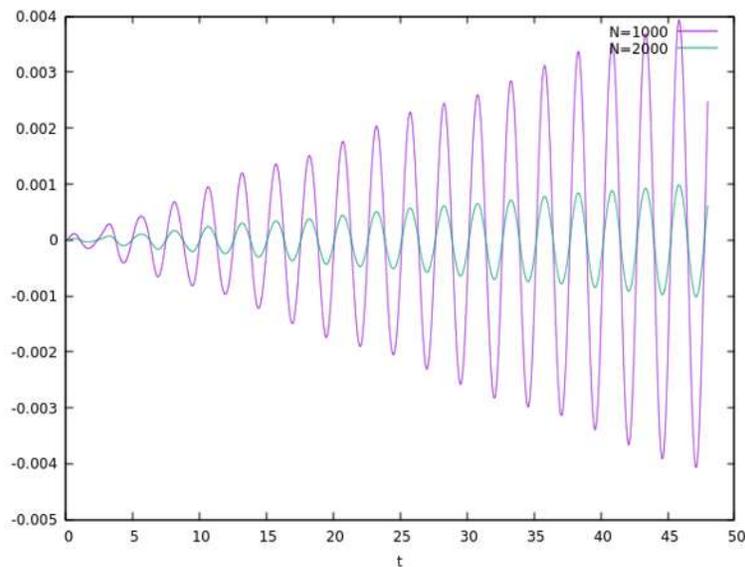


Figura 2.22: Valores del error como función del tiempo hasta $t = 47.5$ y para resoluciones de la malla $N = 1000$, $N = 2000$.

En la figura 2.22 se aprecia que al duplicar el número de puntos del dominio el error disminuye en un factor de 4. Lo cual indica la convergencia de la solución con

orden 2.

Solución exacta para una partícula en un oscilador armónico en tres dimensiones

Como anteriormente se hizo, se puede resolver este problema en 3 dimensiones. Con lo que la ecuación (2.62) se escribe

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi + \frac{1}{2} \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \psi. \quad (2.80)$$

Esta ecuación se puede reescribir de la siguiente manera

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + \frac{1}{2} \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \psi. \quad (2.81)$$

Con esto el Hamiltoniano H se puede escribir de la forma $H = H_x + H_y + H_z$. Para

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{P_x^2}{2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \\ H_y &= \frac{P_y^2}{2} + \frac{1}{2} \omega^2 y^2 \\ H_z &= \frac{P_z^2}{2} + \frac{1}{2} \omega^2 z^2. \end{aligned}$$

La solución para la ecuación (2.80) se puede obtener al resolver para H_x , H_y y H_z , cuyas soluciones son las del oscilador unidimensional. Así

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z), \quad (2.82)$$

para ψ dados por la ecuación (2.75) [8]. Teniendo así la solución exacta.

Solución numérica para una partícula en un oscilador armónico en tres dimensiones

Para la solución numérica se definirá el dominio primero. Sea $D = [-10, 10] \times [-10, 10] \times [-10, 10]$. Se procede a separar la ecuación como en los casos anteriores

en su parte real e imaginaria. Obteniendo de esta manera el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_I + \frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2) \psi_I \quad (2.83)$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla^2 \psi_R - \frac{1}{2} (x^2 + y^2 + z^2) \psi_R. \quad (2.84)$$

Teniendo como condiciones iniciales

$$\psi_R(x, y, z, 0) = \left(\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}^3 2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!}} \right) e^{-\frac{(x^2+y^2+z^2)}{2}} H_n \quad (2.85)$$

$$\psi_I(x, y, z, 0) = 0 \quad (2.86)$$

Donde H_n son los polinomios de Hermite y n_x , n_y y n_z los niveles de energía. Con todo esto se tienen los ingredientes para resolver el problema. Se muestran en las figuras 2.23, 2.24, 2.25 y 2.26 los resultados obtenidos para $n_x = 4$, $n_y = 0$, $n_z = 0$ hasta un tiempo $t = 10$.

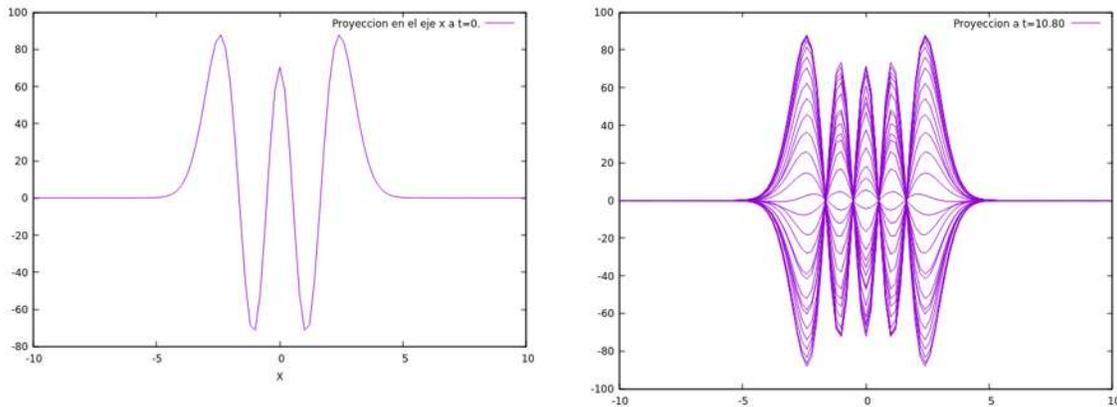
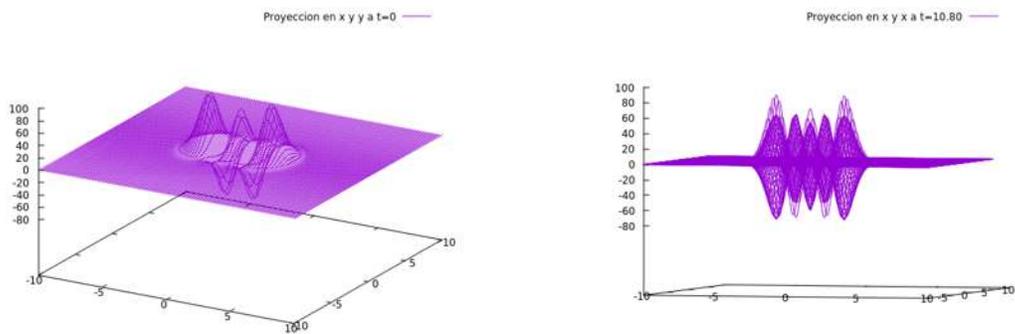


Figura 2.23: Proyecciones de la parte real de la función de onda en el eje x . A la izquierda se presenta la condición inicial del problema para $t = 0$. A la derecha se presenta en distintos tiempos hasta $t = 10$.



Para $t = 0$

Para varios tiempos

Figura 2.24: Proyecciones de la parte real de la función de onda en el plano xy . En la imagen de la izquierda se tiene a tiempo inicial. A la derecha es en varios tiempos hasta $t = 10$.

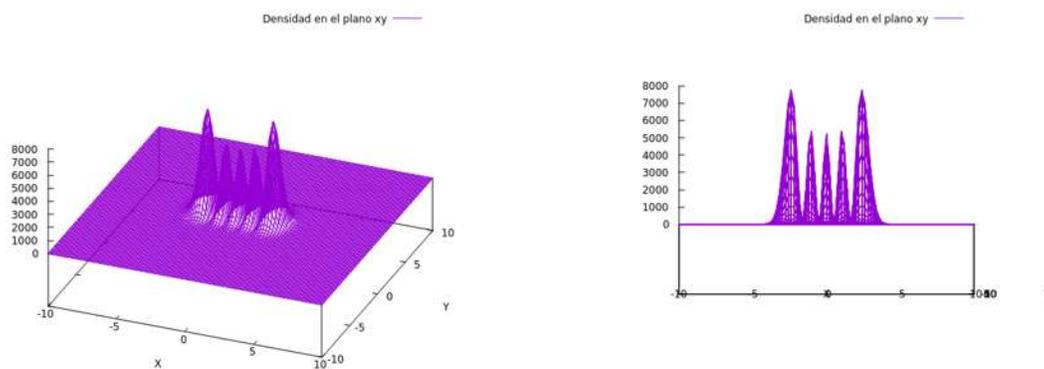


Figura 2.25: A la izquierda, proyección en el plano xy de la densidad en distintos tiempos hasta $t = 10$. A la derecha misma proyección en el plano xy de la densidad en distintos tiempos pero con distinta vista para mejor apreciación.

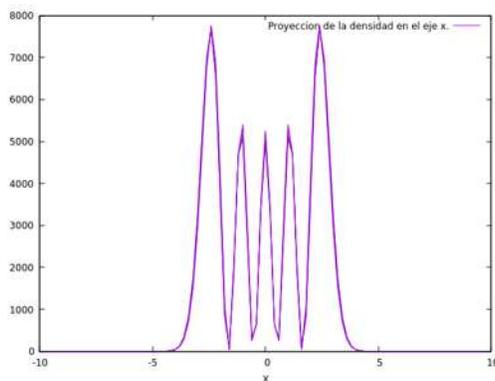


Figura 2.26: Imagen de la densidad de probabilidad proyectada en el eje x en distintos tiempos.

Para las figuras 2.23, 2.24, 2.25 y 2.26 se utilizó las proyecciones como en el caso de una partícula en una caja. Es decir $\psi_R = \psi_R(i, j, \frac{N_z}{2})$ para la proyección en el plano xy y $\psi_R = \psi_R(i, \frac{N_y}{2}, \frac{N_z}{2})$ siendo la proyección en el eje x con $i = 0, 1, \dots, N_x$ y $j = 0, 1, \dots, N_y$. Tanto en la figura 2.25 como en la figura 2.26 se observa como, aunque sean imágenes de la densidad en varios tiempos, se mantiene independiente del tiempo. Tanto para la proyección en x como para el plano xy se cumple, algo importante puesto que para la solución continua esto es una característica de la densidad. En la figura 2.27 se muestra la gráfica de la integral de la densidad de probabilidad como función del tiempo hasta $t = 10$.

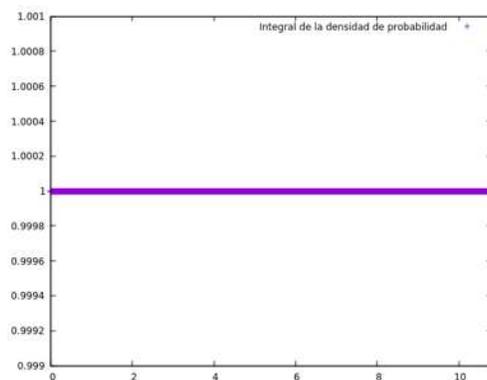


Figura 2.27: Integral de la densidad de probabilidad de la función de onda como función del tiempo.

Se constata en la figura 2.27 que el valor de la integral de la densidad se mantiene en 1 como función del tiempo, siendo lo esperado para la solución. Con esto ya se

han mostrado las herramientas numéricas necesarias para afrontar el sistema Newton-Schrödinger y se ha visto que son confiables dichas herramientas.

Capítulo 3

Sistema de Newton-Schrödinger

En el régimen Newtoniano las ecuaciones de Einstein-Klein-Gordon se reducen al sistema Schrödinger-Poisson. A su vez, las configuraciones de equilibrio se reducen al sistema Schrödinger-Poisson y pueden ser tan masivas como los halos galácticos si la masa del bosón es muy ligera [5]. Un halo galáctico es una concentración de materia que se distribuye no solamente en la región de las galaxias que contienen estrellas, sino hasta varias veces el tamaño de la galaxia, por esto es que la materia oscura es la componente dominante de materia que explica la dinámica galáctica.

La razón para considerar el régimen Newtoniano de las ecuaciones es que las galaxias no son un sistema de campo gravitacional fuerte, ni sus componentes se desplazan a velocidades relativistas. Una vez que una fluctuación de materia oscura evoluciona separada de la expansión cósmica, el colapso y evolución posteriores se describen bien por la dinámica Newtoniana, ya sea con este candidato de materia oscura o cualquier otro. Las ecuaciones del sistema Schrödinger-Poisson son las siguientes

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U + \frac{4\pi\hbar^2}{m}|\psi|^2 \right] \psi \quad (3.1)$$

$$\nabla^2 U = 4\pi Gm|\psi|^2, \quad (3.2)$$

donde U es el potencial gravitacional generado por la materia oscura constituida por bosones, m es la masa del bosón y ψ es la función que describe la dinámica de los

bosones. En la interpretación colectiva en la que ψ no representa una partícula sino un ensamble de bosones, la ecuación (3.1) no es la ecuación de Schrödinger para una partícula, sino la ecuación de Gross-Pitaevskii, la cual describe un sistema de bosones todos en su estado base, es decir, en un estado de condensado de Bose-Einstein. Usando el siguiente cambio de variables $x \rightarrow \frac{mc}{\hbar}x$, $y \rightarrow \frac{mc}{\hbar}y$, $z \rightarrow \frac{mc}{\hbar}z$, $t \rightarrow \frac{mc^2}{\hbar}t$, $\Lambda \rightarrow \frac{c^2}{2mG}\Lambda$ y la función de onda $U \rightarrow \frac{1}{mc^2}U$, donde m es la masa del bosón ultraligero [3] y así deshacernos de las constantes, el sistema anterior se puede escribir como

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + U + \Lambda|\psi|^2 \right] \psi \quad (3.3)$$

$$\nabla^2 U = |\psi|^2, \quad (3.4)$$

donde el término $\Lambda|\psi|^2\psi$ corresponde al de las auto-interacciones entre los bosones. El sistema (3.3) y (3.4) es el que se resolverá numéricamente en el resto del trabajo al no contar con solución exacta conocida.

Suponiendo que el sistema tiene simetría esférica, es decir $\psi = \psi(r, t)$ y $U = U(r, t)$, y que la dependencia temporal de la función de onda es armónica, o sea $\psi = e^{i\omega t}\phi(r)$, el sistema se convierte en un problema de eigenvalores. Se obtiene lo siguiente

$$|\psi|^2 = \psi^*\psi = \phi(r)^2.$$

Sustituyendo en la ecuación (3.4)

$$\begin{aligned} \nabla^2 U = |\psi|^2 = \phi(r)^2, & \Rightarrow \\ U = U(r) \end{aligned}$$

por lo cual, el potencial no va a depender del tiempo [1]. Al tener simetría esférica se tienen que reescribir las ecuaciones (3.3) y (3.4). Basta con escribir el operador ∇^2

en coordenadas esféricas.

$$\begin{aligned}\nabla^2 f(r) &= \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} f \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \left(2r \frac{d}{dr} f + r^2 \frac{d^2}{dr^2} f \right) \\ &= \frac{d^2}{dr^2} f + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} f.\end{aligned}$$

Por lo tanto para la configuración esférica el sistema de ecuaciones en coordenadas esféricas es

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + U + \Lambda \phi^2 \right] \psi \quad (3.5)$$

$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dU}{dr} = \phi^2. \quad (3.6)$$

Con esto ya se obtiene el sistema a resolver. Por otra parte las ecuaciones (3.1) y (3.2) obedecen simetrías de escalamiento dadas por

$$t \rightarrow \lambda^{-2} t^* \quad (3.7)$$

$$r \rightarrow \lambda^{-1} r^* \quad (3.8)$$

$$U \rightarrow \lambda^2 U^* \quad (3.9)$$

$$\psi \rightarrow \lambda^2 \psi^* \quad (3.10)$$

$$\Lambda \rightarrow \lambda^{-2} \Lambda^*, \quad (3.11)$$

donde λ es un parámetro arbitrario. Al sustituir en las ecuaciones (3.5) y (3.6) se obtiene

$$\begin{aligned}i \frac{\partial (\lambda^2 \psi^*)}{\partial (\lambda^{-2} t^*)} &= \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial (\lambda^{-1} r^*)^2} + \frac{2}{\lambda^{-1} r^*} \frac{\partial}{\partial (\lambda^{-1} r^*)} \right) + \lambda^2 U^* + \lambda^{-2} \Lambda^* |\lambda^2 \psi^*|^2 \right] \lambda^2 \psi^* \\ \frac{\partial^2 (\lambda^2 U^*)}{\partial (\lambda^{-1} r^*)^2} + \frac{2}{\lambda^{-1} r^*} \frac{\partial (\lambda^2 U^*)}{\partial (\lambda^{-1} r^*)} &= |\lambda^2 \psi^*|^2.\end{aligned}$$

Usando las fórmulas de la regla de la cadena se tiene

$$i \frac{\partial (\lambda^2 \psi^*)}{\partial t^*} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^{*2}} + \frac{2}{\lambda^{-2} r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \right) + \lambda^2 U^* + \lambda^{-2} \Lambda^* |\lambda^2 \psi^*|^2 \right] \psi^*$$

$$\frac{\partial^2 (\lambda^2 U^*)}{\partial r^{*2}} + \frac{2}{\lambda^{-2} r^*} \frac{\partial (\lambda^2 U^*)}{\partial r^*} = |\lambda^2 \psi^*|^2.$$

Al ser λ un parámetro puede salir de las derivadas

$$i \frac{\partial (\psi^*)}{\partial t^*} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^{*2}} + \frac{2}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \right) + U^* + \Lambda^* |\psi^*|^2 \right] \psi^*$$

$$\frac{\partial^2 (\lambda^2 U^*)}{\partial r^{*2}} + \frac{2\lambda^2}{r^*} \frac{\partial (U^*)}{\partial r^*} = \lambda^2 |\psi^*|^2.$$

Obteniendo

$$i \frac{\partial \psi^*}{\partial t^*} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^{*2}} + \frac{2}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \right) + U^* + \Lambda^* |\psi^*|^2 \right] \psi^*$$

$$\frac{\partial^2 U^*}{\partial r^{*2}} + \frac{2}{r^*} \frac{\partial U^*}{\partial r^*} = |\psi^*|^2.$$

Esto quiere decir que se obtiene el mismo sistema para las variables y funciones originales t^*, r^*, U^*, Λ^* y ψ^* que para las variables y funciones originales de t, r, U, Λ y ψ , por lo que una vez que se haya encontrado una solución al sistema de Schrödinger-Newton, hay un conjunto de soluciones relacionadas por una transformación de escala [2].

Al estar trabajando con el límite Newtoniano se pueden estimar los valores de expectación de cantidades físicas, donde los valores de expectación son los siguientes

$$K = -\frac{1}{2} \int \psi^* \nabla^2 \psi d^3x \quad (3.12)$$

$$W = -\frac{1}{2} \int \psi^* U \psi d^3x \quad (3.13)$$

$$I = \int \Lambda |\psi|^4 d^3x \quad (3.14)$$

para la energía cinética, la energía gravitacional y la energía de auto-interacción res-

pectivamente. La energía total del sistema viene dada por $E = K + W + I$. Una de las relaciones más importantes que se tiene que cumplir es la relación del teorema de virialización $2K + W + 3I = 0$. Dicho teorema relaciona la energía cinética de un sistema con su energía potencial y la energía de autointeracción [3].

3.1. Solución numérica

3.1.1. Configuraciones de equilibrio

Para solucionar el sistema Schrödinger-Poisson, se requiere elegir una función ψ a tiempo inicial que después empieza a evolucionar. El caso que interesa es el de una configuración de equilibrio del sistema Schrödinger-Poisson. Éstas son soluciones esféricamente simétricas estacionarias, cuya construcción supone simetría esférica y una dependencia temporal del tipo $\psi = e^{i\omega t}\phi(r)$. Se imponen además condiciones de regularidad en el origen con un valor central de la función de onda $\phi(0) = \phi_0$ y perfil plano $\partial_r\phi(0) = 0$. Por otra parte, se pide que la configuración sea localizada, es decir, que la función de onda y su derivada tiendan a 0 conforme r tiende a infinito $\phi(r \rightarrow \infty) = 0$. Con estas condiciones las ecuaciones (3.6) y (3.20) se convierten en un problema de eigenvalores

$$\frac{d^2\phi}{dr^2} = 2(U - \omega) - \frac{2}{r}\frac{d\phi}{dr} + \Lambda\phi^2 \quad (3.15)$$

$$\frac{d^2U}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dU}{dr} = \phi^2, \quad (3.16)$$

donde ω es el eigenvalor del problema, para resolver el sistema anterior se utilizó el método de shooting, el cual cambia el valor de ω para un valor central dado de ϕ , ϕ_0 . Esta construcción de la solución representa configuraciones de equilibrio, las cuales poseen las características que en el límite continuo la función de onda oscila con frecuencia constante ω , implicando que $\rho = |\phi|^2$ y también el potencial gravitacional permanecen independientes del tiempo. Sin embargo, no estamos trabajando en el límite continuo y se está trabajando con las versiones discretas del problema. Por lo

que si se supone que se tiene la solución $\psi(0,0) = \psi_0$ y $\rho(0,t) = \rho_0$, las condiciones para las configuraciones de equilibrio no se cumplirán de manera estricta, en lugar de ello la densidad $|\psi|^2$ oscila ligeramente debido a las aproximaciones numéricas [3].

Ahora se darán los valores numéricos para construir una configuración de equilibrio por el método de shooting. El dominio numérico para la construcción de la configuración de equilibrio será $r \in [0, r_{max}]$. Las condiciones de frontera serán $\phi(0) = \phi_0$, $\phi'(0) = 0$, $\phi(r_{max}) < \epsilon$, $\phi'(r_{max}) < \epsilon$, $U(0) = U_0$, $U'(0) = 0$, $U(r_{max}) = -\frac{M}{r_{max}}$ y $U'(r_{max}) = \frac{M}{r_{max}}$ donde la masa M se calcula de la siguiente manera

$$M = \int |\psi|^2 r^2 dr. \quad (3.17)$$

El factor de r^2 aparece al tratarse de una integral volumétrica y por usar coordenadas esféricas. Es importante mencionar que mientras para la mecánica cuántica $|\psi|^2$ corresponde a la densidad de probabilidad en este caso no, en su lugar corresponde a la densidad de materia al ser un sistema macroscópico.

A continuación se procederá a resolver el problema usando $r_{max} = 50$, suponiendo que el valor central de la función de onda es $\phi_0 = 1$. Automáticamente, al tratarse de $t = 0$, la parte imaginaria de $\psi(r,0)$ es igual a 0. Debido a las propiedades de escalamiento de las soluciones, basta con resolver el caso con $\phi_0 = 1$ y a partir de éste construir toda la familia de soluciones con cualquier valor central positivo de la función de onda. Debido a las propiedades de escalamiento de las soluciones, basta con resolver el caso con $\phi_0 = 1$, y a partir de éste construir toda la familia de soluciones con cualquier valor central positivo de la función de onda. Debido a esta propiedad, consideramos esta configuración como los datos iniciales para resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo a continuación.

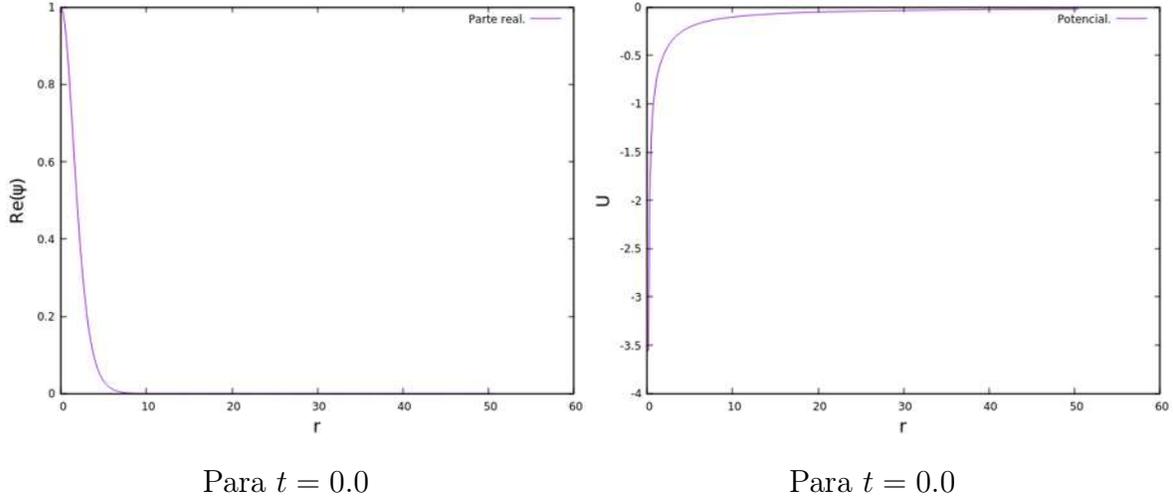


Figura 3.1: Del lado izquierdo se presenta la parte real de la función de onda de la configuración de equilibrio. En la parte derecha se muestra el potencial gravitacional asociado a dicha solución.

En la figura 3.1 se muestran los datos iniciales para comenzar a resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo.

3.1.2. Evolución del sistema

Una vez construidas las configuraciones de equilibrio, se considerarán éstas como condiciones iniciales para resolver la dinámica del sistema GPP (Gross-Pitaevskii Poisson). Para evolucionar el sistema como función del tiempo se realiza lo ya hecho en el capítulo anterior de descomponer la función en su parte real y su parte imaginaria $\psi = \psi_R + i\psi_I$. Por el momento se considera el caso sin autointeracción $\Lambda = 0$, y se estudiará el caso general en la siguiente sección. Las ecuaciones de evolución del sistema GPP (3.5) y (3.6) resultan ser de la siguiente forma

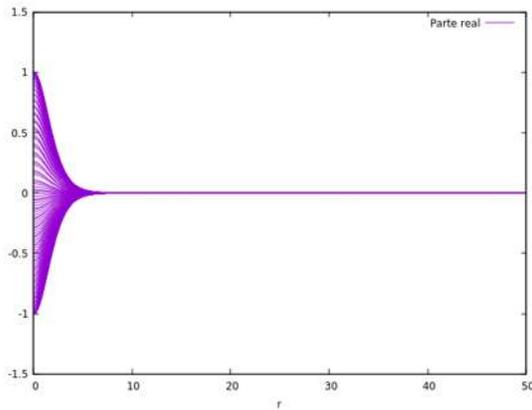
$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + U \right] \psi_I \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - U \right] \psi_R \quad (3.19)$$

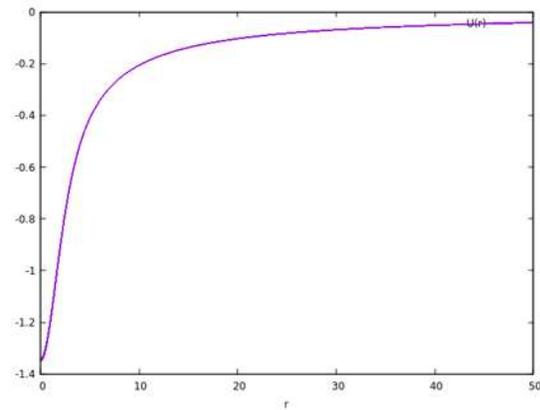
$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dU}{dr} = |\psi|^2. \quad (3.20)$$

Teniendo el dominio, las condiciones iniciales y condiciones de frontera para el sistema de ecuaciones se pueden resolver el sistema numéricamente. Ahora se mostrarán los resultados cuando se evoluciona en el tiempo la configuración de equilibrio de la figura 3.1.

En la figura 3.2 se puede apreciar como la función de onda si cambia en el tiempo mientras que el potencial U permanece constante. A su vez en la figura 3.3 la densidad se mantiene constante lo cual indica que no hay intercambio de materia en el sistema.



Hasta $t = 564$



Hasta $t = 564$

Figura 3.2: A la izquierda parte real de la función de onda a distintos tiempos y a la derecha el potencial U en distintos tiempos.

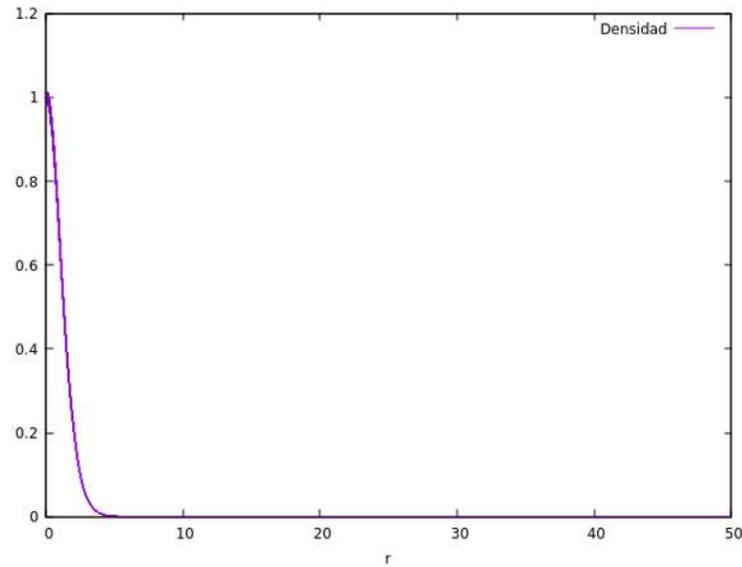


Figura 3.3: Evolución de la densidad $|\psi|^2$ en el tiempo hasta $t = 564$. La cual se mantiene aproximadamente independiente del tiempo.

Como se ve en la figura 3.4, la función de onda oscila con la frecuencia ω y con amplitud 1, mientras que la densidad central oscila con una frecuencia baja y una amplitud muy cercana a cero. Este comportamiento verifica la hipótesis de que la solución es estacionaria, es decir, la función de onda depende armónicamente del tiempo y la densidad se mantiene aproximadamente independiente del tiempo.

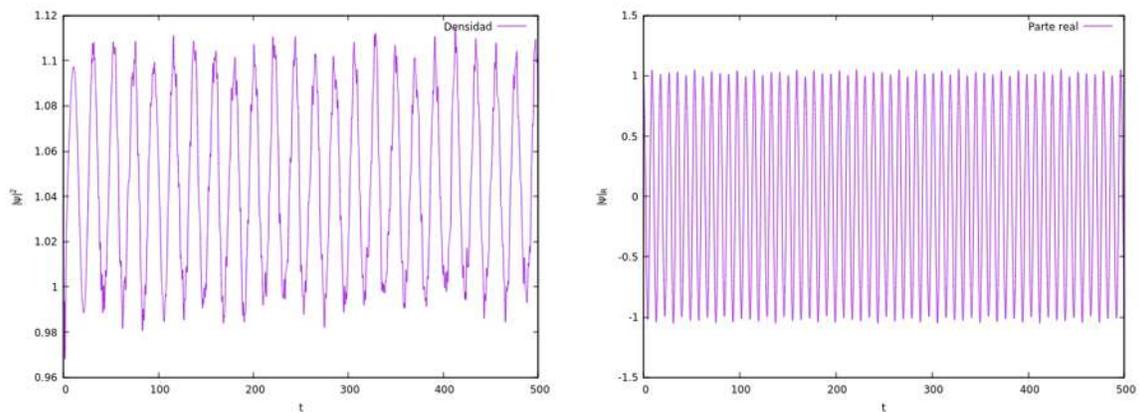


Figura 3.4: A la izquierda densidad evaluada en el origen como función del tiempo y a la derecha valor central de la parte real de la función de onda.

A continuación se verificará la convergencia de la solución.

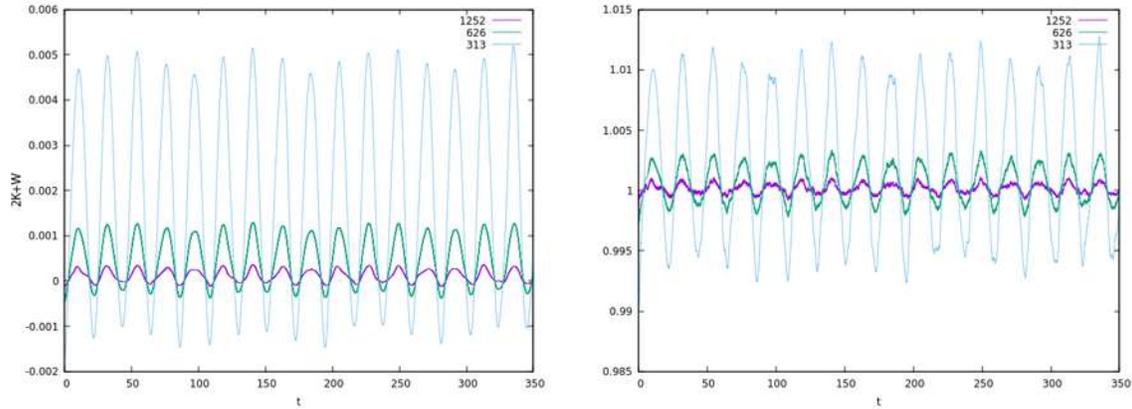
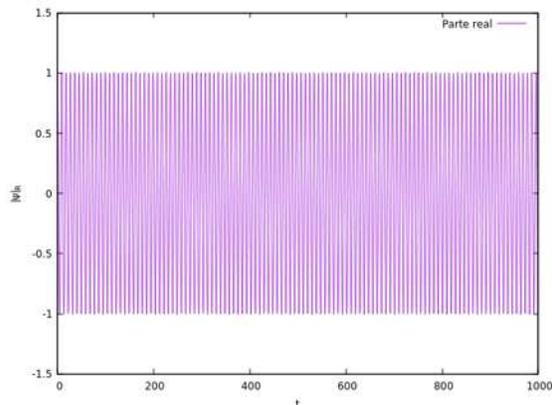
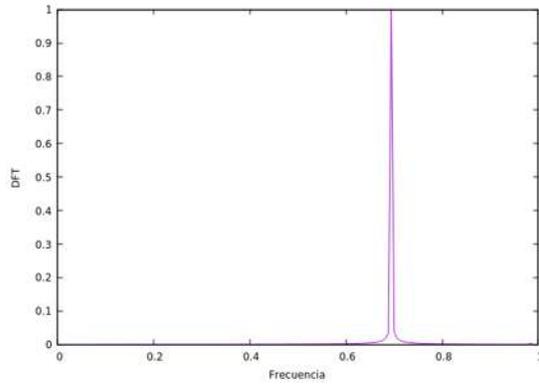


Figura 3.5: A la izquierda valor de la función $2K + W$ usando las resoluciones de $N = 313$, $N = 626$ y $N = 1252$ como función del tiempo hasta $t = 350$. A la derecha valor central de la densidad usando resoluciones con $N = 313$, $N = 626$ y $N = 1252$ como función del tiempo hasta $t = 350$.

Como se observa en la figura 3.5 al duplicar la resolución, el valor de la función $2K + W$ converge a 0, a su vez el valor de la densidad converge a 1. Esto es importante ya que es la solución exacta de la función $2K + W$ es cero, sin embargo por errores numéricos la solución numérica no es exactamente cero. En el caso de la función $2K + W$, al duplicar la resolución el valor disminuye cuatro veces, lo cual indica que esta función converge con segundo orden a cero. La solución corresponde a un valor ω específico que se utilizó para construir las configuraciones de equilibrio y esta ω es la frecuencia de oscilación de ψ . Para verificar que la evolución de la configuración es correcta se calcula la transformada de Fourier del valor central de la función de onda y se espera que corresponda con $\omega = 0.697$ siendo el valor que resultó del shooting. Se mostrará a continuación en la figura 3.6.

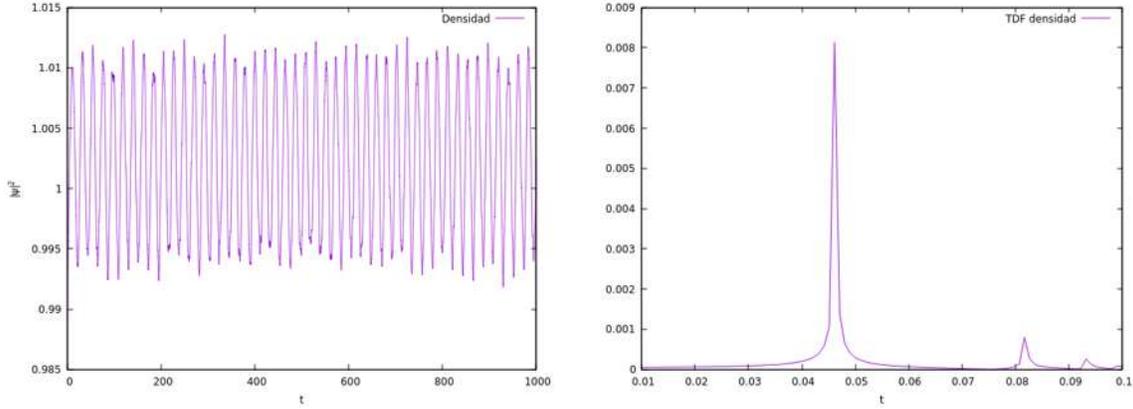


Parte real de la función de onda en el origen como función del tiempo.



Transformada de Fourier directa de la función de onda.

Figura 3.6: A la izquierda se muestran los datos que se utilizaron para la transformada de Fourier. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos que presenta un pico de máxima potencia en torno al valor 0.697, lo cual coincide con el valor obtenido de la construcción de equilibrio ω .



Densidad central como función del tiempo.

Transformada de Fourier directa de la densidad central de la función de onda.

Figura 3.7: A la izquierda se muestran los datos que se utilizaron para la transformada de Fourier. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos.

La figura 3.6 muestra que la frecuencia de oscilación de la función de onda obtenida de la evolución coincide con la frecuencia que corresponde a la configuración de equilibrio. La figura 3.7, por otra parte, muestra la frecuencia de oscilación de la densidad de la configuración, que es la frecuencia de la oscilación con la que la configuración responde a las perturbaciones [1].

3.2. Problema con el término de auto-interacción entre los bosones

En la sección pasada se resolvieron las ecuaciones (3.5) y (3.6) para el caso de $\Lambda = 0$. Ahora se procederá a resolver el caso cuando $\Lambda \neq 0$. Las ecuaciones a resolver son las siguientes

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + U + \Lambda |\psi|^2 \right] \psi \quad (3.21)$$

$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dU}{dr} = |\psi|^2. \quad (3.22)$$

Como en la sección anterior, se procederá a construir las configuraciones de equilibrio para después evolucionarlas. El dominio será para todos los casos de $r \in [0, 50]$ y

$t \in [0, 500]$. Las condiciones de frontera para el sistema son $\psi(0) = \psi_0$, $\psi'(0) = 0$, $\psi(r_{max}) = \epsilon$, $\psi'(r_{max}) < \epsilon$, $U(0) = U_0$, $U'(0) = 0$, $U(r_{max}) = -\frac{M}{r_{max}}$ y $U'(r_{max}) = \frac{M}{r_{max}^2}$. Donde M corresponde a la fórmula de la ecuación (3.17). Con esto ya se puede resolver por medio del shooting para $\psi(0, 0) = 1$ y con la condición que la parte imaginaria fuera igual a 0. A continuación se presentarán las soluciones para el problema de valores iniciales con distintos valores de Λ en las figuras 3.8, 3.9, 3.10 y 3.11.

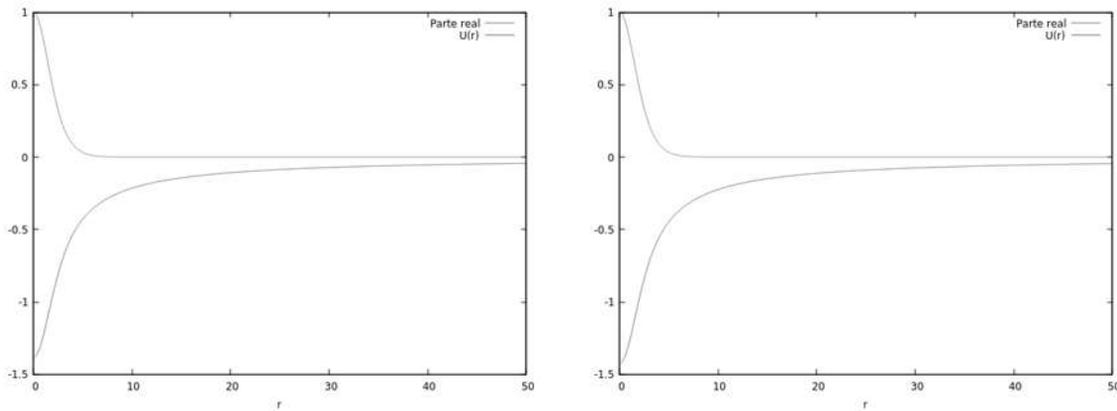


Figura 3.8: Se muestran la parte real de la función de onda y el potencial gravitacional. A la izquierda para $\Lambda = 0.05$ y a la derecha para $\Lambda = 0.1$

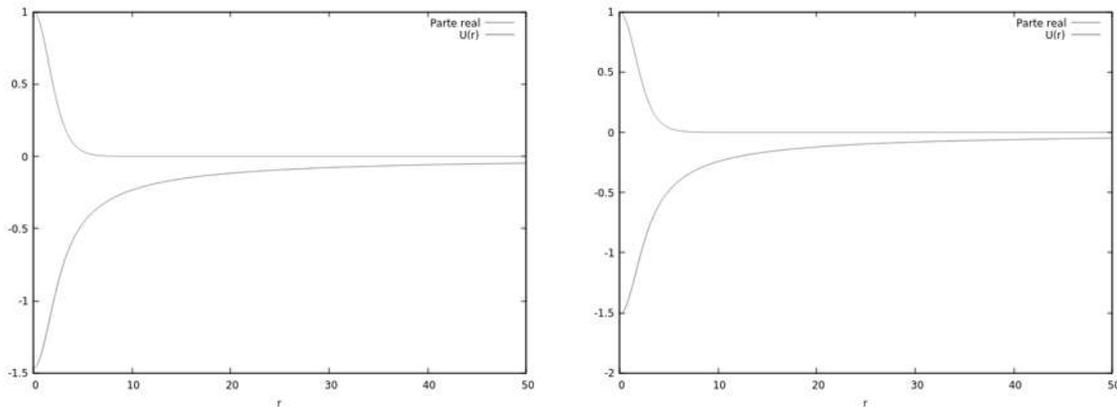


Figura 3.9: Se muestran la parte real de la función de onda y el potencial gravitacional. A la izquierda para $\Lambda = 0.15$ y a la derecha para $\Lambda = 0.2$

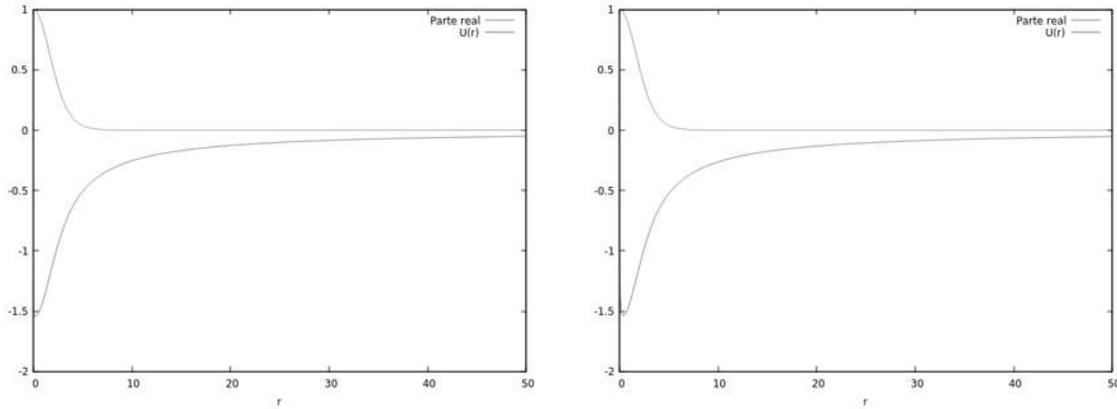


Figura 3.10: Se muestran la parte real de la función de onda y el potencial gravitacional. A la izquierda para $\Lambda = 0.25$ y a la derecha para $\Lambda = 0.3$

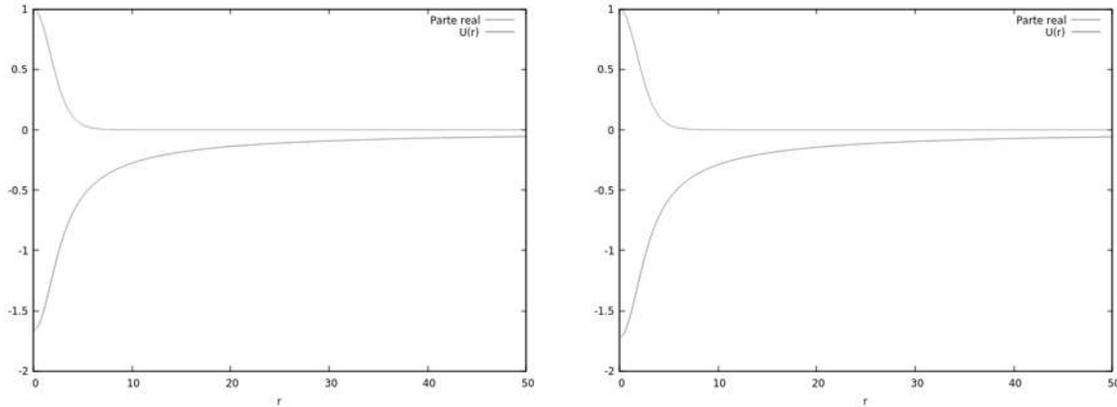


Figura 3.11: Se muestran la parte real de la función de onda y el potencial gravitacional. A la izquierda para $\Lambda = 0.35$ y a la derecha para $\Lambda = 0.4$

En las figuras anteriores no se puede apreciar de una manera clara las diferencias entre cada caso, por lo que a continuación se presentará una tabla con el valor de la masa y de ω para cada caso.

Λ	Masa de la configuración	ω
0.05	2.149	0.711
0.10	2.240	0.736
0.15	2.336	0.751
0.20	2.434	0.772
0.25	2.542	0.793
0.30	2.654	0.818
0.35	2.770	0.842
0.40	2.891	0.867

Tabla 3.1: Se muestran el valor de Λ , la masa total asociada a cada configuración y el valor de ω obtenido con el método de Shooting.

En la Tabla 3.1 se aprecia como cada configuración tiene su masa y frecuencia distinta de las demás, con lo que cada configuración se comportará distinto cuando se evolucione.

3.2.1. Evolución del sistema

Habiendo construido las configuraciones de equilibrio para distintos valores de Λ , se mostrará las propiedades de su evolución. Como ya se ha hecho en las secciones anteriores se procederá a descomponer la función en su parte real y su parte imaginaria. Por lo que las ecuaciones (3.21) y (3.22) serán

$$\frac{\partial \psi_R}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + U + \Lambda |\psi| \right] \psi_I \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial t} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - U + \Lambda |\psi| \right] \Psi_R \quad (3.24)$$

$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dU}{dr} = |\psi|^2. \quad (3.25)$$

Con estas ecuaciones y las condiciones iniciales obtenidas en la sección anterior ya se tiene todo lo necesario para resolver el problema de evolución temporal. A continuación se adjuntarán las soluciones para distintos valores de Λ .

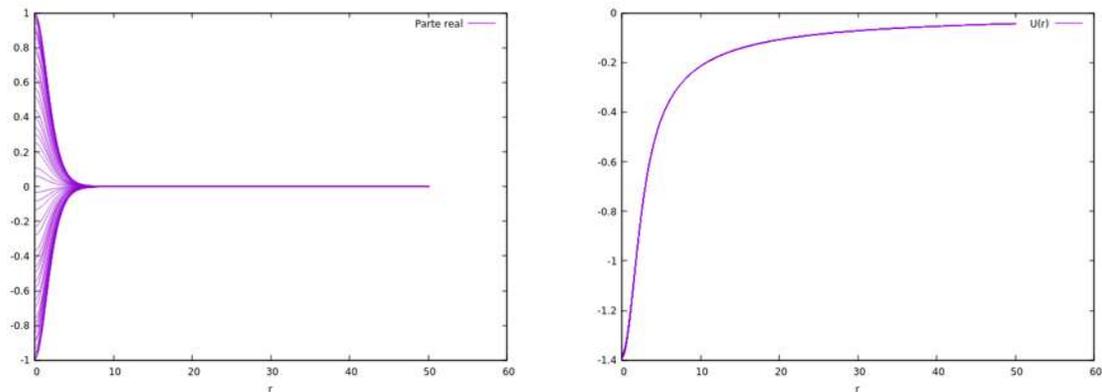


Figura 3.12: A la izquierda parte real de la función de onda y a la derecha el potencial U para distintos valores del tiempo hasta $t = 500$. Ambas para $\Lambda = 0.05$.

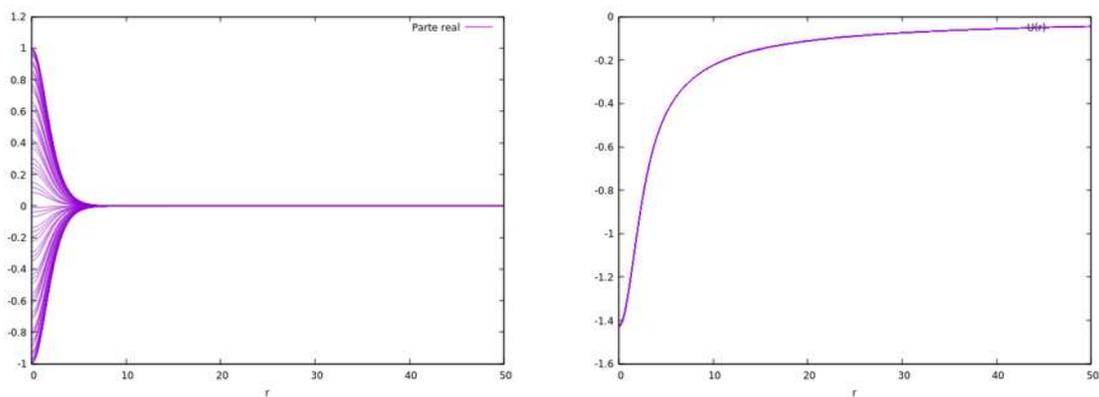


Figura 3.13: A la izquierda parte real de la función de onda y a la derecha el potencial U para distintos valores del tiempo hasta $t = 500$. Ambas para $\Lambda = 0.1$.

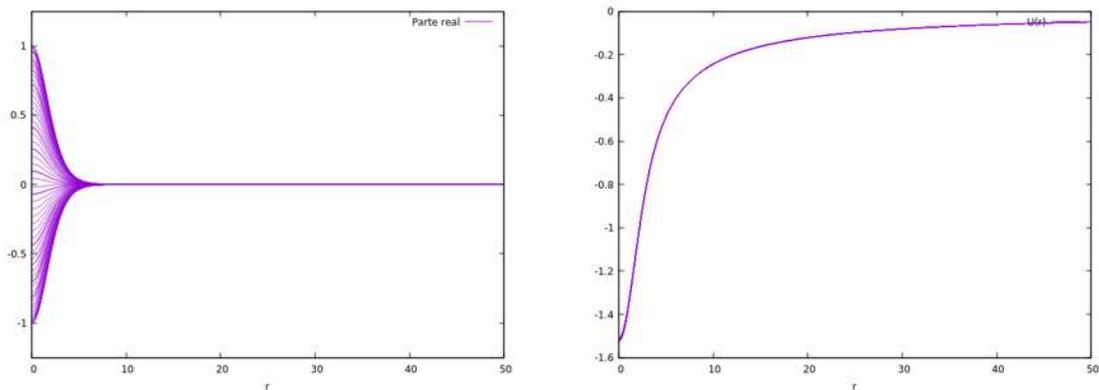


Figura 3.14: A la izquierda parte real de la función de onda y a la derecha el potencial U para distintos valores del tiempo hasta $t = 500$. Ambas para $\Lambda = 0.2$.

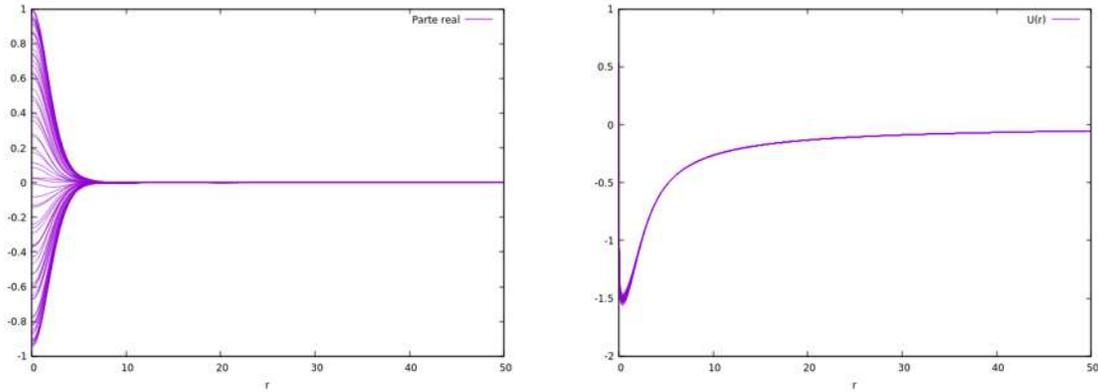


Figura 3.15: A la izquierda parte real de la función de onda y a la derecha el potencial U para distintos valores del tiempo hasta $t = 500$. Ambas para $\Lambda = 0.3$.

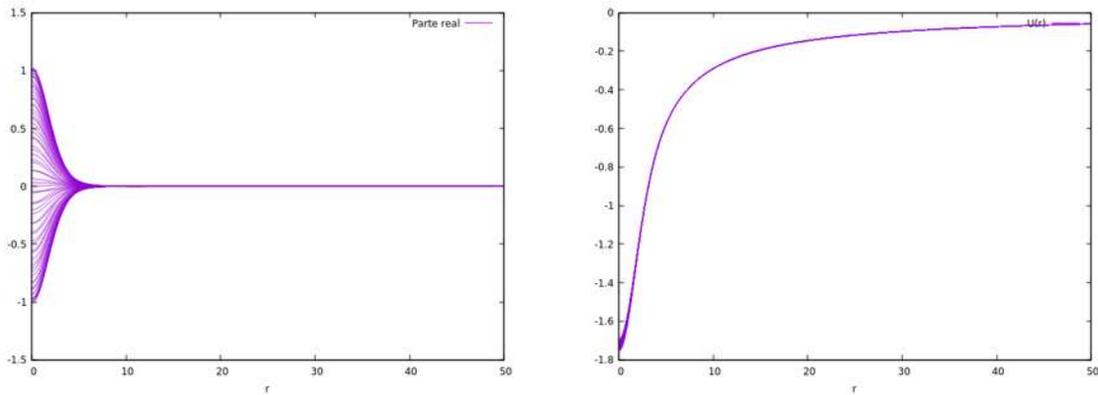


Figura 3.16: A la izquierda parte real de la función de onda y a la derecha el potencial U para distintos valores del tiempo hasta $t = 500$. Ambas para $\Lambda = 0.4$.

En las figuras 3.12, 3.13, 3.14, 3.15 y 3.16 se muestra la evolución de la parte real de la función de onda y el potencial gravitacional para los valores indicados de Λ . Al igual que en el caso de $\Lambda = 0$, la densidad oscila ligeramente al igual que el potencial gravitacional, sin embargo, la amplitud de estas oscilaciones es mayor que en el caso de $\Lambda = 0$, como se muestra a continuación la frecuencia de oscilación de la función de onda es consistente con la obtenida de la construcción de las configuraciones de equilibrio.

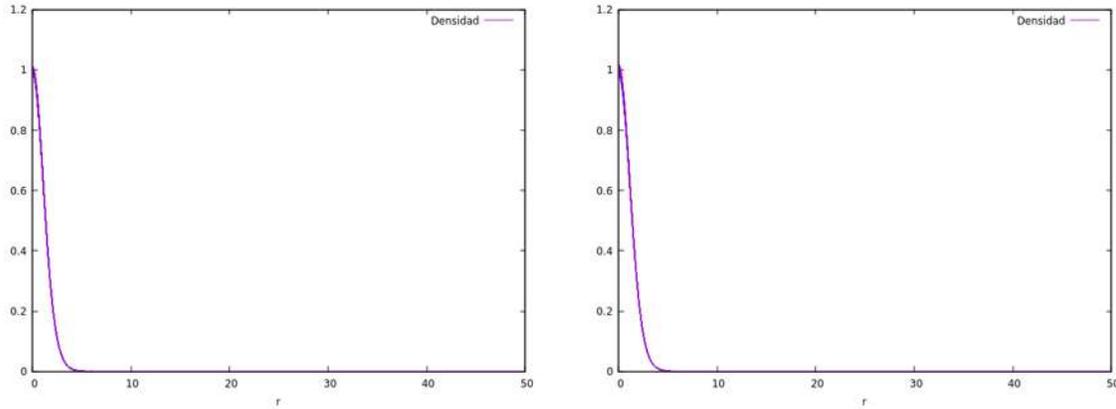


Figura 3.17: Densidad para distintos valores del tiempo, a la izquierda para $\Lambda = 0.1$ y a la derecha para $\Lambda = 0.2$.

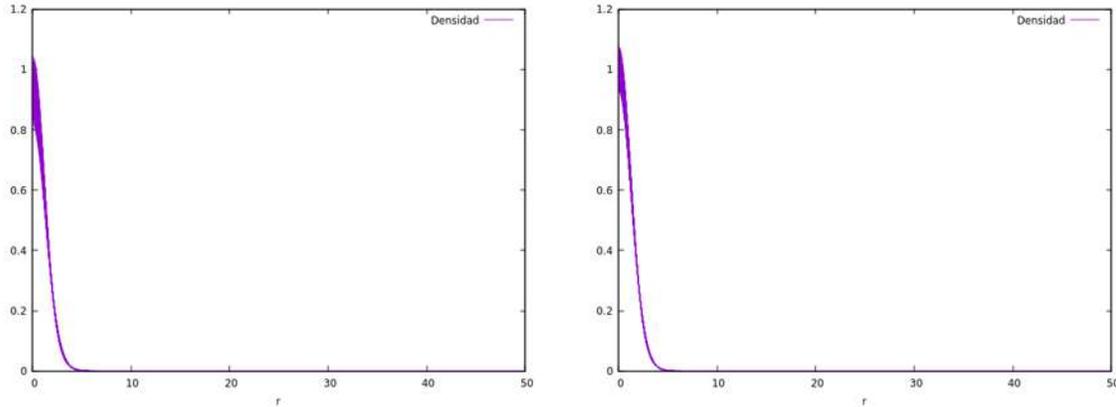


Figura 3.18: Densidad para distintos valores del tiempo, a la izquierda para $\Lambda = 0.3$ y a la derecha para $\Lambda = 0.4$.

En las imágenes anteriores se muestra el valor de la densidad de la función de onda con distintos valores de Λ . A continuación se presentará el resultado de las transformadas de Fourier de la densidad y la parte real de la función de onda en el origen y así se podrá determinar si las evoluciones son consistentes con las propiedades de las configuraciones de equilibrio para distintos valores de Λ .

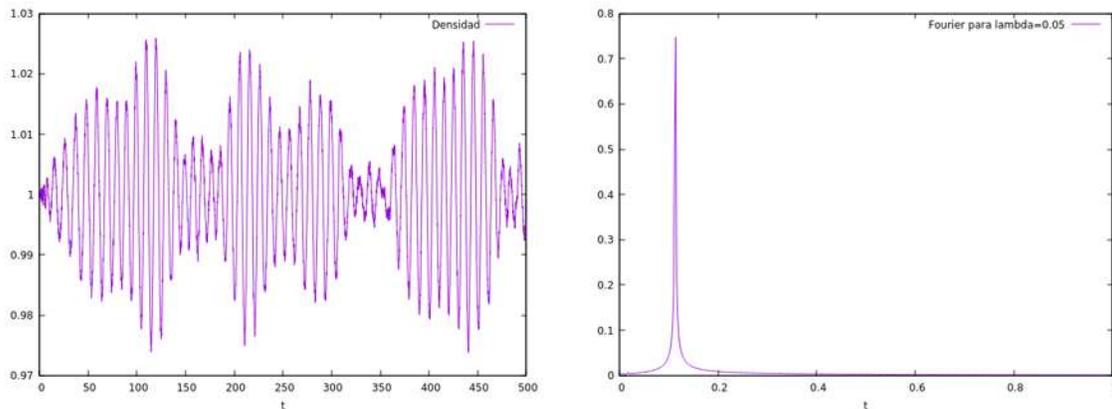


Figura 3.19: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos. Para $\Lambda = 0.05$.

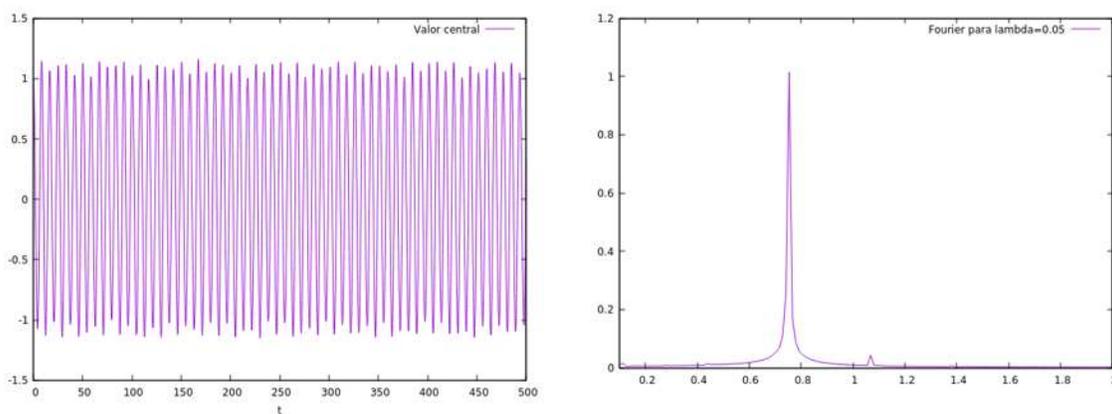


Figura 3.20: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.05$.

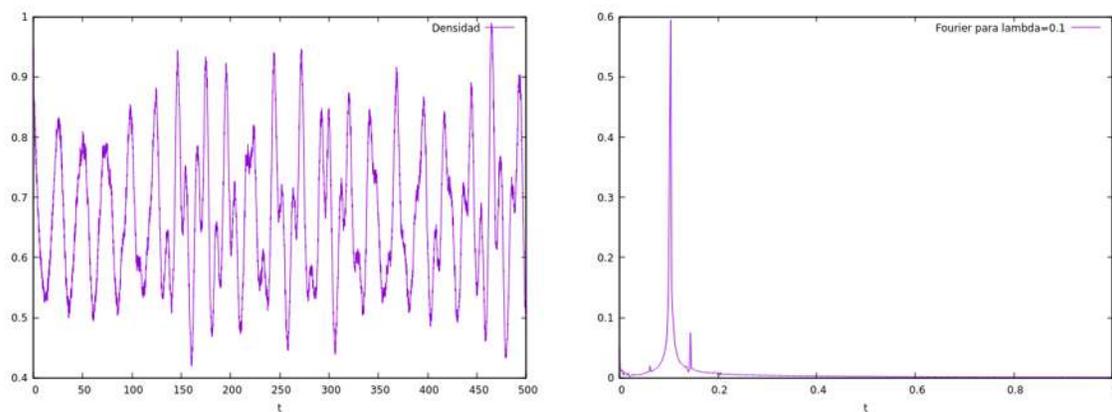


Figura 3.21: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.1$.

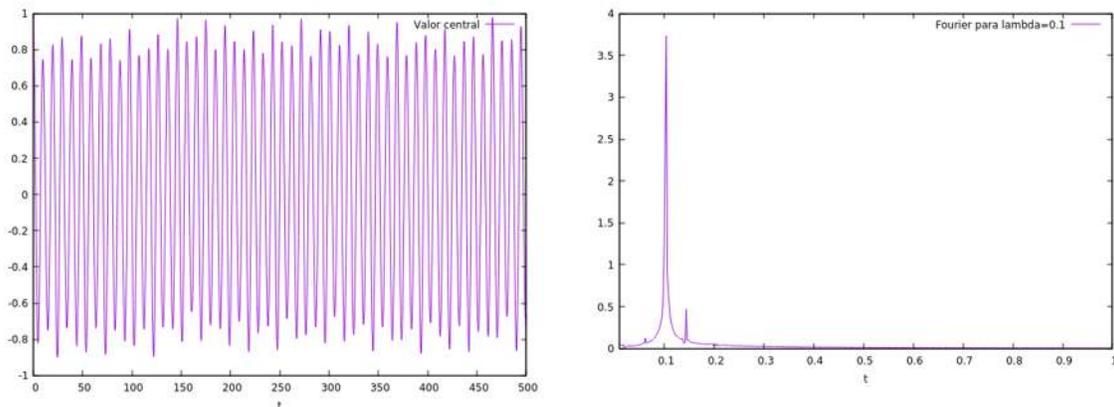


Figura 3.22: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.1$.

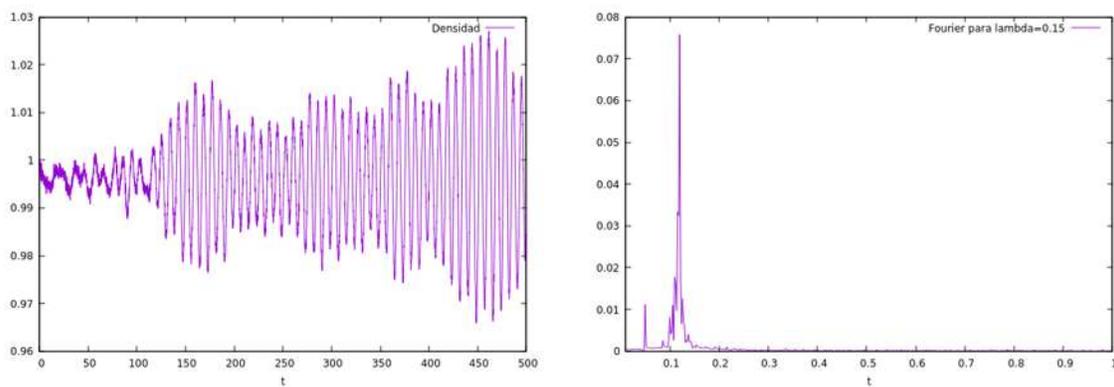


Figura 3.23: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.15$.

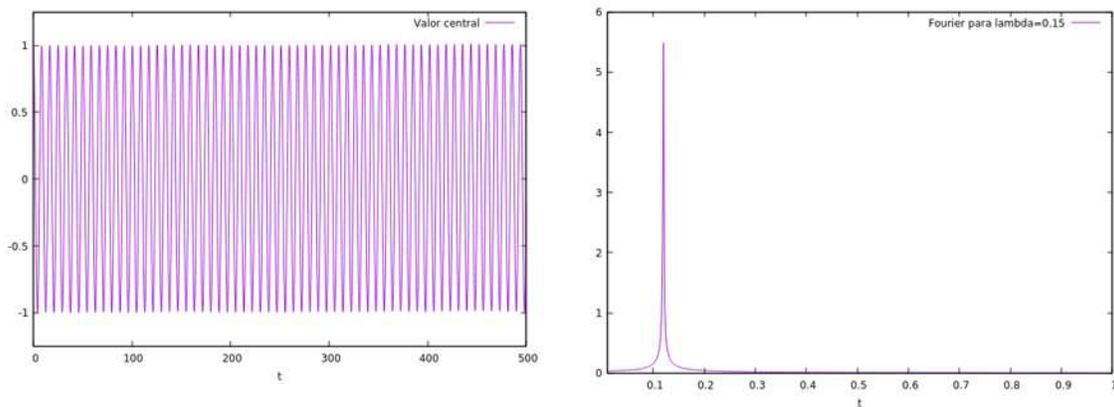


Figura 3.24: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.15$.

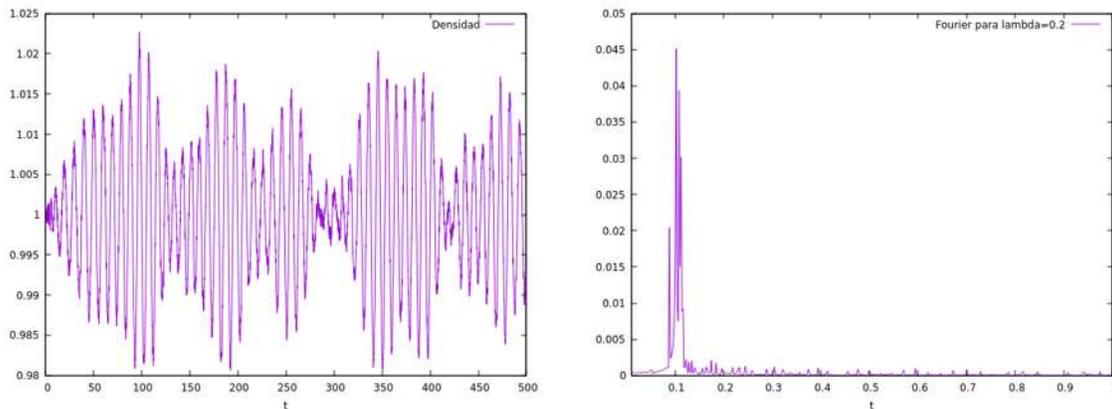


Figura 3.25: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.2$.

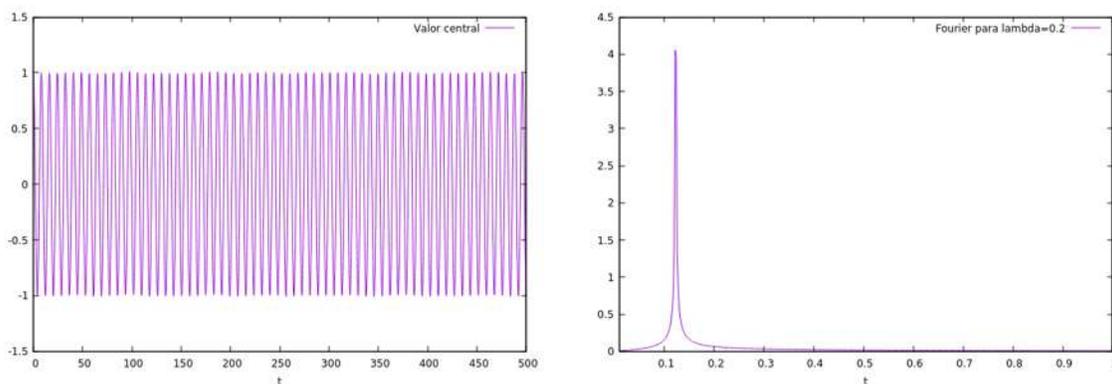


Figura 3.26: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos. Para $\Lambda = 0.2$.

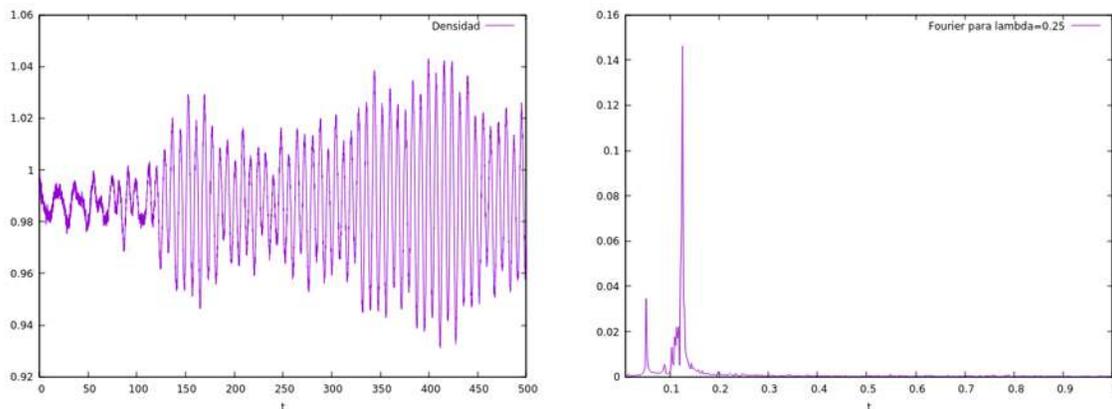


Figura 3.27: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos. Para $\Lambda = 0.25$.

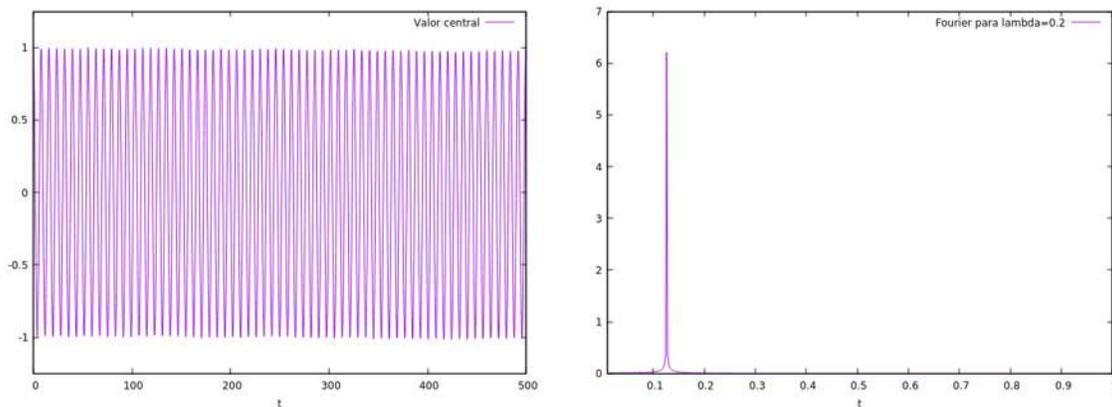


Figura 3.28: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos. Para $\Lambda = 0.25$.

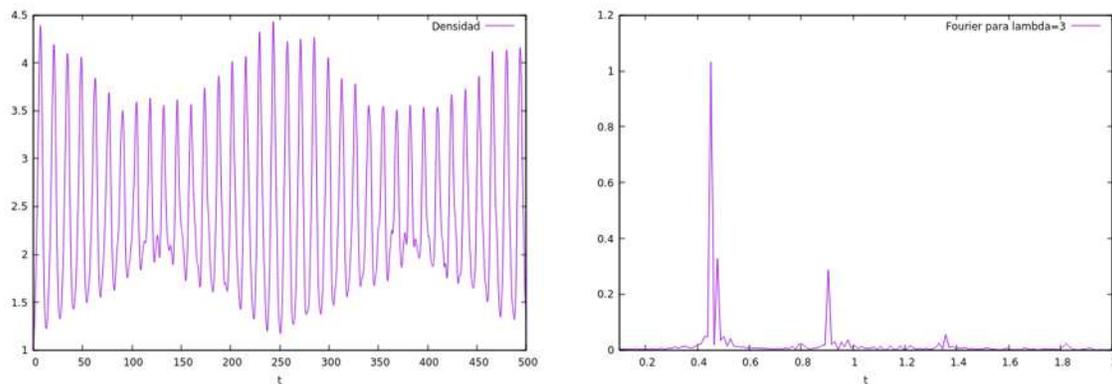


Figura 3.29: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos. Para $\Lambda = 0.3$.

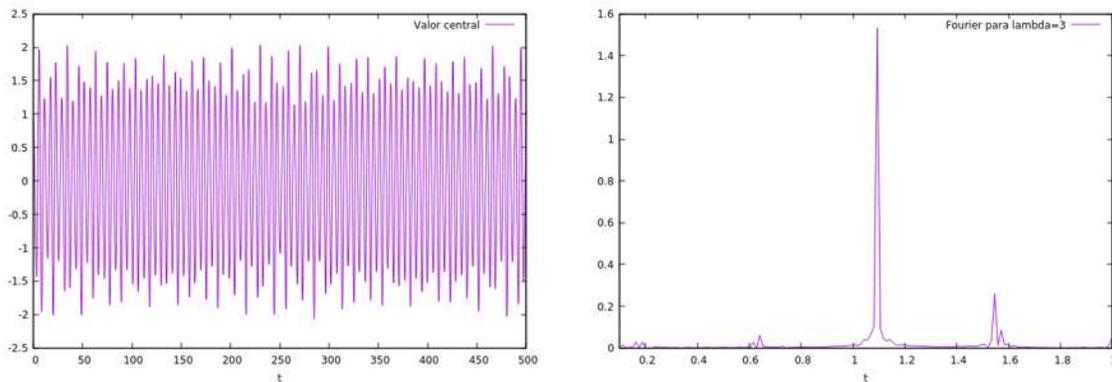


Figura 3.30: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos. Para $\Lambda = 0.3$.

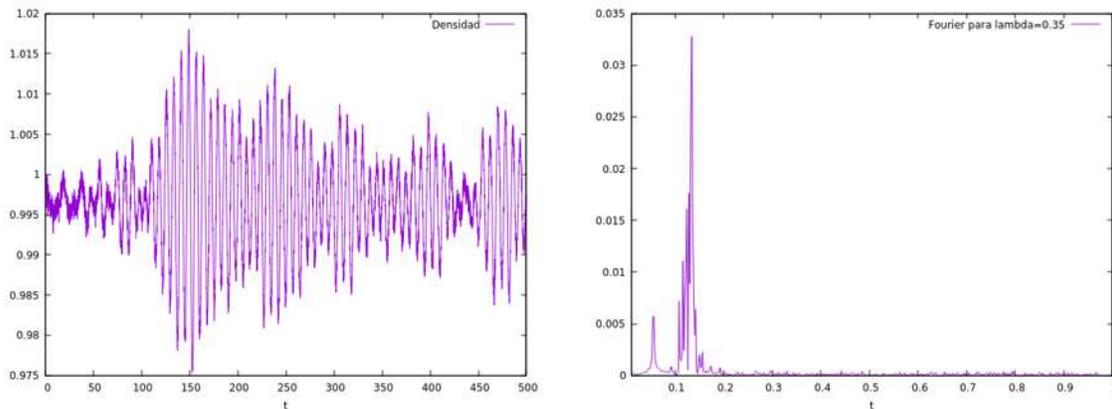


Figura 3.31: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.35$.

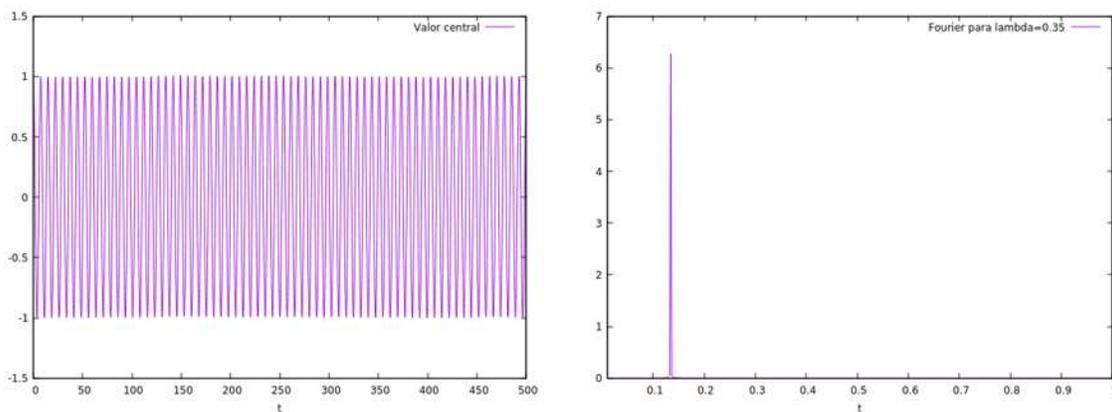


Figura 3.32: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.35$.

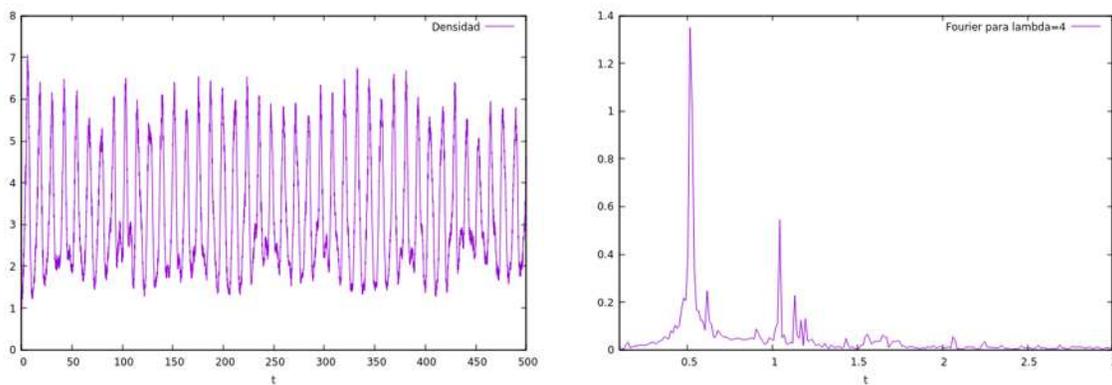


Figura 3.33: A la izquierda se muestra el valor central de la densidad como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.4$.

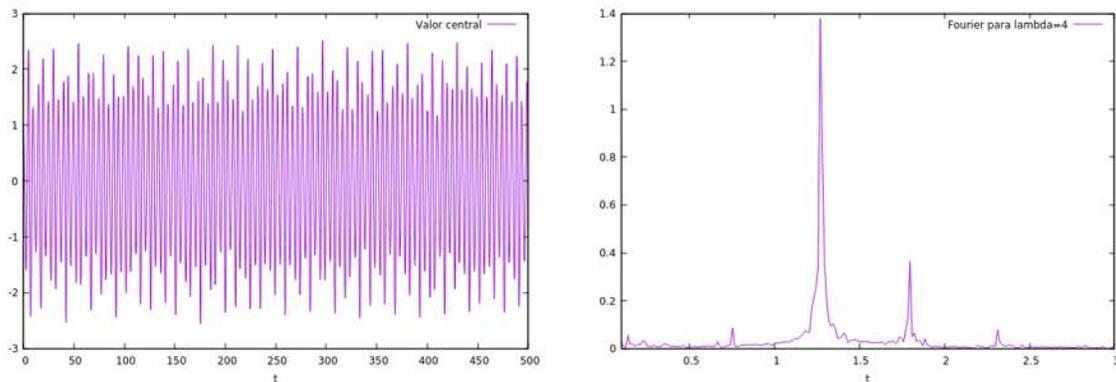


Figura 3.34: A la izquierda se muestra el valor central de la parte real de la función de onda como función del tiempo. A la derecha la transformada de Fourier de dichos datos, para $\Lambda = 0.4$.

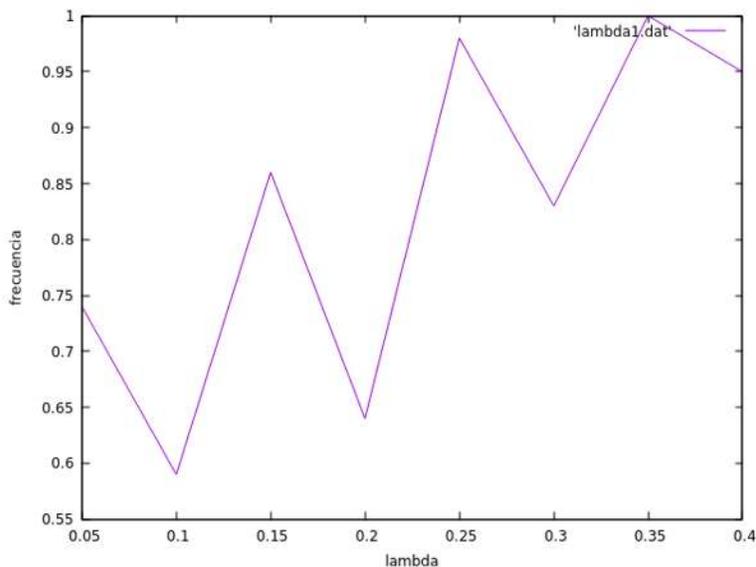


Figura 3.35: Se muestra el valor de la frecuencia calculada mediante la transformada de Fourier usando el valor central de la función de onda para $\Lambda = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35, 0.4$.

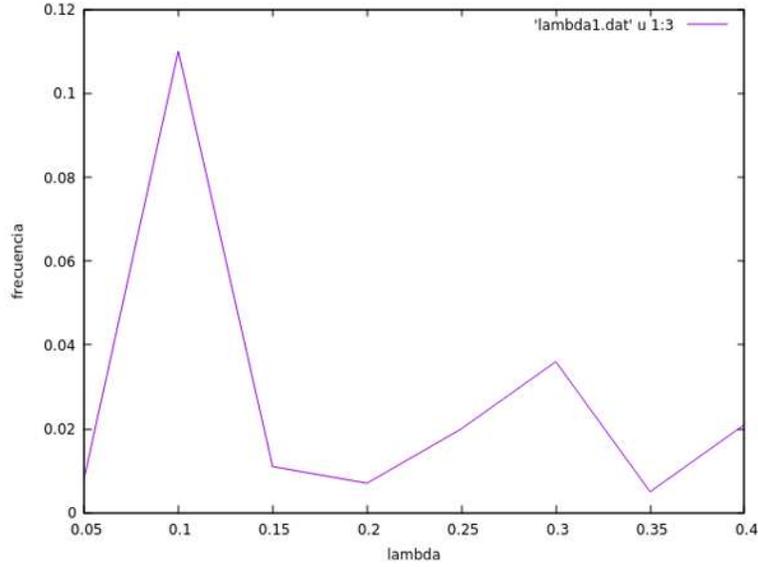


Figura 3.36: Se muestra el valor de la frecuencia calculada mediante la transformada de Fourier del valor de la densidad central para $\Lambda = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35, 0.4$.

En las figuras 3.19, 3.21, 3.23, 3.25, 3.27, 3.29, 3.31 y 3.33 se muestra el valor central de la densidad, es decir $|\Psi(0)|$, la cual se utilizó para calcular la transformada de Fourier directa. Mientras que en las figuras 3.20, 3.22, 3.24, 3.26, 3.28, 3.30, 3.32 y 3.34 se muestra el valor central de la parte real de la función de onda, siendo los datos utilizados para la transformada de Fourier directa. Estos resultados se compactan en las figuras 3.35 y 3.36 para el valor central de la función de onda y la densidad respectivamente. El cálculo de la transformada de Fourier servirá para comparar con ω obtenido con el método de Shooting que se presentará a continuación. Se utilizará el error relativo calculado con la siguiente fórmula

$$Error = \left| \frac{\omega_{shoot} - \omega_{TF}}{\omega_{shoot}} \right|, \quad (3.26)$$

donde ω_{shoot} es el valor de ω obtenido con el método de shooting y ω_{TF} es el valor obtenido de la transformada de Fourier del valor central de la parte real de la función de onda.

Λ	ω_{shoot}	ω_{TF}	Error
0.05	0.711	0.74	0.0407
0.10	0.736	0.59	0.1983
0.15	0.751	0.86	0.1451
0.20	0.772	0.64	0.1580
0.25	0.793	0.97	0.2232
0.30	0.818	0.83	0.0146
0.35	0.842	0.1	0.1876
0.40	0.867	0.94	0.0841

Tabla 3.2: Se muestran el valor de Λ , el valor de ω obtenido con el método de Shooting, el valor de ω por medio de la transformada de Fourier y el error.

En la Tabla 3.2 se observa que el error no es cero, esto se debe a los errores numéricos que se van propagando. Sin embargo, este mismo error calculado con la ecuación (3.26) es pequeño, dando una buena fiabilidad de los resultados obtenidos.

Al principio del Capítulo 3 se menciona una condición que deben de cumplir las soluciones y que dará una pista sobre la exactitud de las soluciones, es la condición de virialización. A continuación se adjuntarán las condiciones de virialización para la respectiva Λ y dadas por $2K + W + 3I = 0$.

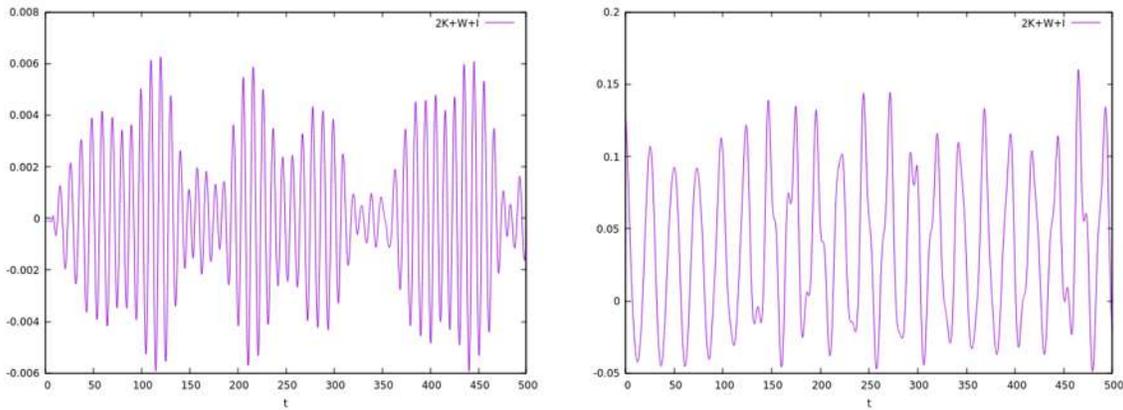


Figura 3.37: A la izquierda condición de virialización para $\Lambda = 0.05$ como función del tiempo y a la derecha condición de virialización para $\Lambda = 0.1$.

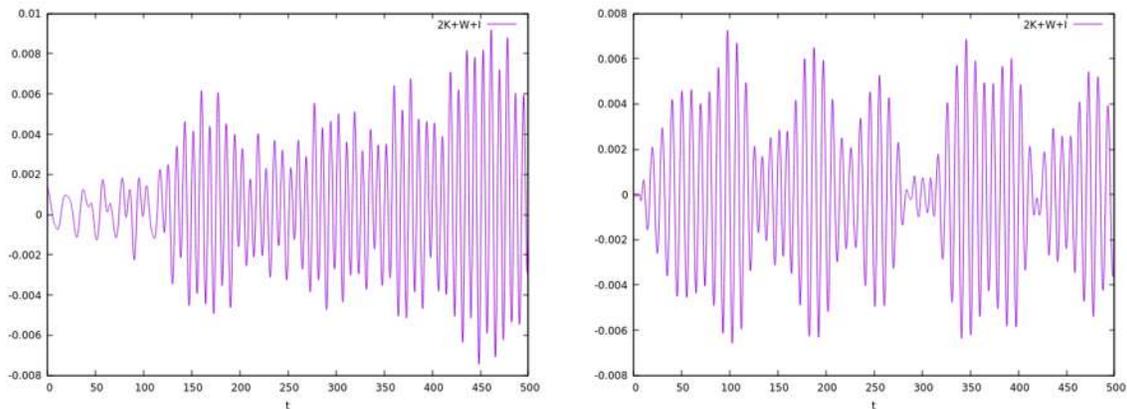


Figura 3.38: A la izquierda condición de virialización para $\Lambda = 0.15$ como función del tiempo y a la derecha condición de virialización para $\Lambda = 0.2$.

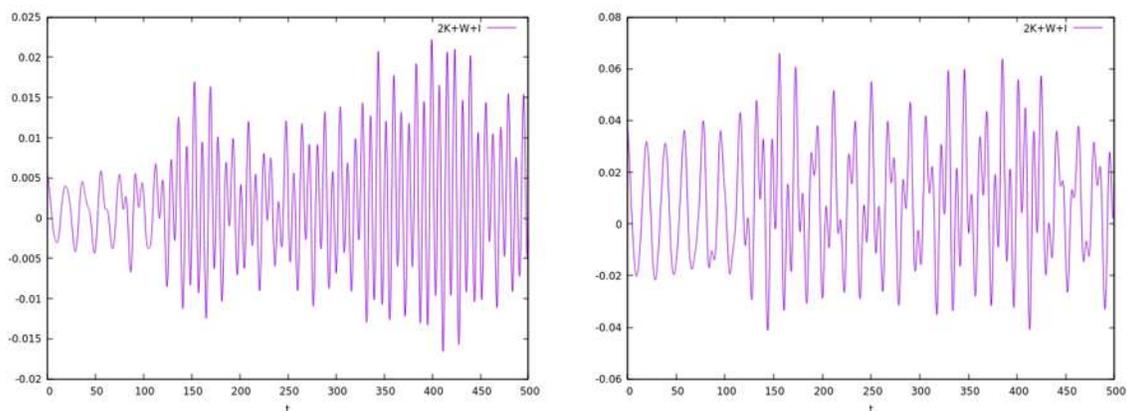


Figura 3.39: A la izquierda condición de virialización para $\Lambda = 0.25$ como función del tiempo y a la derecha condición de virialización para $\Lambda = 0.3$.

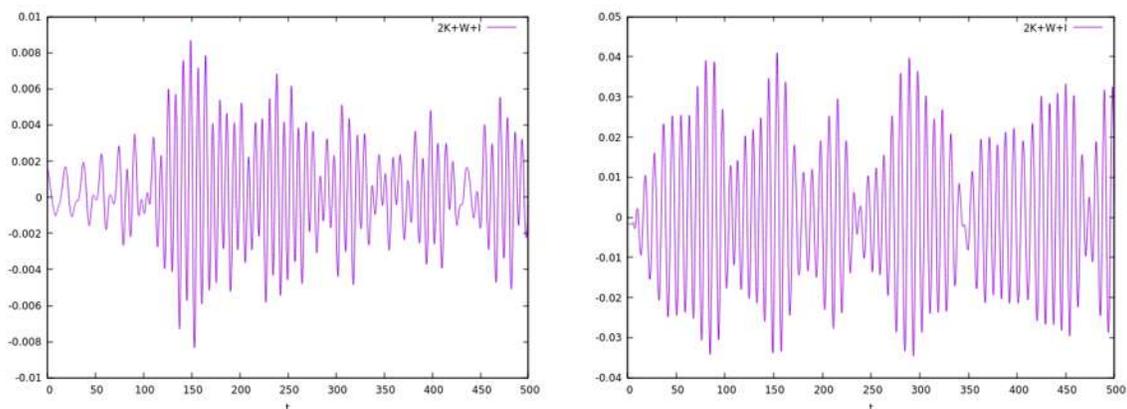


Figura 3.40: A la izquierda condición de virialización para $\Lambda = 0.35$ como función del tiempo y a la derecha condición de virialización para $\Lambda = 0.4$.

En las figuras 3.37, 3.38, 3.39 y 3.40 , la función $2K + W + 3I$ oscila alrededor del cero. Algunas configuraciones lo hacen más cercanos al cero a pesar de utilizar la misma resolución para todas las configuraciones. Dando un buen indicio sobre la fiabilidad de las soluciones numéricas.

Capítulo 4

Partícula de prueba

Como se ha mencionado, el problema de la materia oscura sigue siendo un problema abierto. Sin haberse detectado directamente y sin saber de que está compuesta, aún sigue sujeta a muchos posibles candidatos. De acuerdo a la literatura [1], [7], el modelo presentado corrige varias inconsistencias presentadas en otros modelos, además mantiene los aciertos del modelo más popular actualmente el llamado Λ CDM. Sin embargo aún falta más evidencia y predicciones correctas para aceptar o descartar este modelo. Se estudiará el comportamiento de una partícula de prueba en movimiento circular uniforme y después se colocará otra partícula a una distancia de separación pequeña. Se estará midiendo esta separación entre las partículas como función del tiempo, para saber si se puede detectar la presencia del condensado de Bose-Einstein usando un interferómetro.

Se obtendrán las ecuaciones de una partícula en movimiento circular. Primero se planteará el problema de una partícula de prueba con masa m sujeta al efecto de un campo gravitacional producido por una distribución esféricamente simétrica de masa $M(r)$, centrada en el origen de coordenadas, que en nuestro caso será la masa de una configuración de equilibrio con distintos valores de Λ . La fuerza que actúa sobre la partícula de prueba obedece la ley de gravitación universal

$$\vec{F} = -\frac{GmM}{r^2}\hat{r},$$

donde m es la masa de la partícula de prueba, r es la distancia de la posición de la partícula de prueba al origen de coordenadas, G la constante de gravitación universal y $M = M(r)$ la masa que genera el campo gravitacional al que está sujeta la partícula de prueba. Separando por sus componentes la ecuación anterior y utilizando las coordenadas $\vec{r} = r\hat{e}_r$

$$a_r = \frac{GM}{r^2},$$

$$a_\varphi = 0.$$

Tomando en cuenta la ecuación para la aceleración angular se obtiene que

$$r^2\dot{\varphi} = l, \quad (4.1)$$

donde l es una constante de movimiento y es la magnitud del momento angular. Para obtener una ecuación para r independientemente de φ se utilizará el potencial efectivo descrito por

$$U_{eff} = \frac{(ml)^2}{2mr^2} + U(r).$$

Utilizando el potencial de la fuerza gravitacional se obtiene un potencial efectivo de la siguiente manera

$$U_{eff} = \frac{ml^2}{2r^2} - \frac{GmM}{r}.$$

Para obtener las condiciones que se deben cumplir para una trayectoria circular se debe cumplir que $\left. \frac{dU_{eff}}{dr} \right|_{r=R} = 0$, donde R es el radio de la trayectoria circular. Calculando la derivada y sustituyendola en $r = R$ da como resultado

$$-\frac{l^2}{R^3} + \frac{GM}{R^2} = 0. \quad (4.2)$$

Con lo que se despeja R se obtiene una ecuación para R , que denota el radio de la

trayectoria circular de la partícula

$$R = \frac{l^2}{GM}. \quad (4.3)$$

Ahora utilizando la ecuación (4.1) e integrando se puede obtener una ecuación para φ

$$\varphi = \frac{l}{R^2}t. \quad (4.4)$$

Este desarrollo fue para el de un cuerpo en movimiento circular [13]. La ley de Gauss indica que si se tiene un objeto con simetría esférica, afecta a objetos externos como si toda su masa estuviera concentrada en el punto de su centro. También menciona que un cascarón vacío esféricamente simétrico no ejerce ninguna fuerza a cualquier objeto dentro del cascarón. Entonces, para el problema de una partícula puntual puesta en las configuraciones anteriores se reducirá al desarrollo de un cuerpo en movimiento circular. Se propondrá un radio R entre 0 y 50 para que esté dentro de la configuración, para después con este radio calcular l y a su vez φ , para distintos valores de R la masa contenida en la esfera de radio R , será distinta, pues $M = M(r)$ según la ecuación (3.17). Sin embargo, esta masa no se mantiene constante como función del tiempo por lo que va a influir en la trayectoria de la partícula.

Este tratamiento que se utilizó fue para una versión continua del problema, sin embargo, nuestras soluciones anteriormente presentadas están discretizadas. Esto quiere decir que es muy probable que conforme vaya cambiando el valor R , éste tome un valor que no esté en la discretización del dominio y en consecuencia no se pueda obtener un valor para M . Como se requiere el valor de M en cualquier punto, se va a construir utilizando el dominio discreto. Se va a tomar el valor de M en r_i y r_{i+1} , tal que $r_i < R < r_{i+1}$ y hacer una interpolación para obtener el valor en R . Se utilizó una interpolación lineal dada por

$$M = M_i + (R - r_i) \frac{M_{i+1} - M_i}{r_{i+1} - r_i}. \quad (4.5)$$

Esta fórmula se entiende mejor en la figura 4.1.

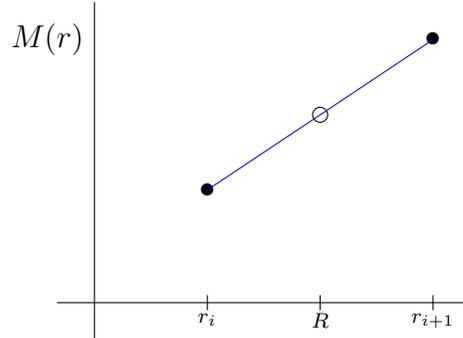


Figura 4.1: En esta imagen se explica como se obtiene el valor de la masa para un punto R , tal que no se encuentre en el dominio numérico.

En cada iteración temporal cambia el valor de R y se calcula un entero i tal que $r_i < R < r_{i+1}$, para ahí obtener M . Con estas ecuaciones y su tratamiento numérico ya es posible resolver el problema de la partícula.

A continuación se adjuntará la solución para varias distancias del centro y para $\Lambda = 0$.

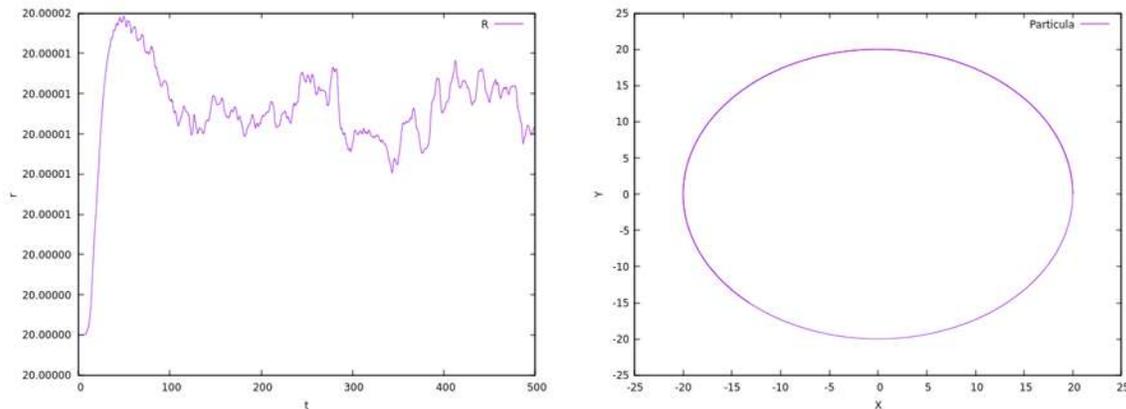


Figura 4.2: A la izquierda se muestra el cambio en el radio respecto al tiempo y a la derecha el espacio de posiciones para $R_0 = 20$.

Como se aprecia en la figura 4.2 en la parte derecha con esta condición inicial la partícula se comporta como si estuviera en un movimiento circular, sin embargo en la misma figura del lado derecho el radio va cambiando muy ligeramente, esto se debe a que las perturbaciones de la configuración son más débiles conforme más se aleja del

origen por lo que no influyen tanto sobre el movimiento de la partícula. Lo que hace que el cambio en su órbita sea demasiado ligero.

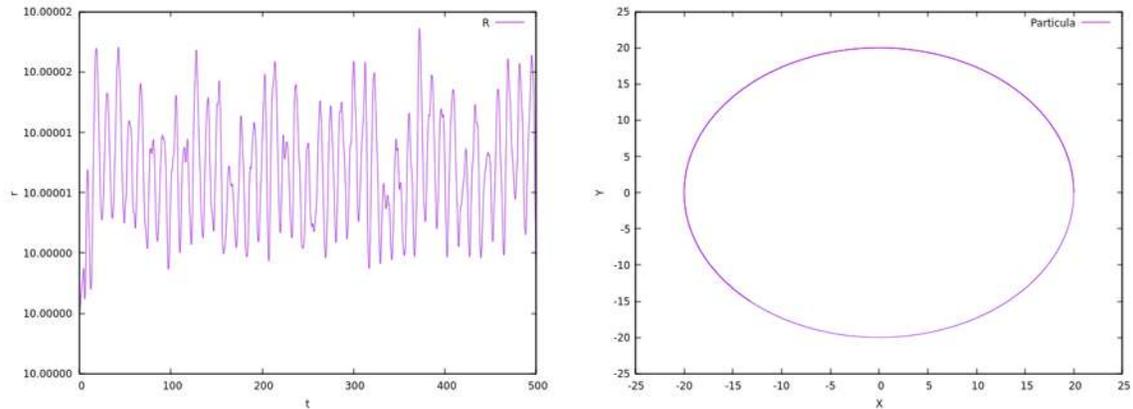


Figura 4.3: A la izquierda se muestra el cambio en el radio respecto al tiempo y a la derecha el espacio de posiciones para la condición inicial $R_0 = 10$.

La parte derecha de la figura 4.3 es muy similar a la de la figura 4.2 con radios distintos, sin embargo viendo la parte izquierda se observa que el cambio en el radio como función del tiempo es mayor como era de esperarse, ya que las oscilaciones de la configuración aumentan mientras más cerca se está del centro.

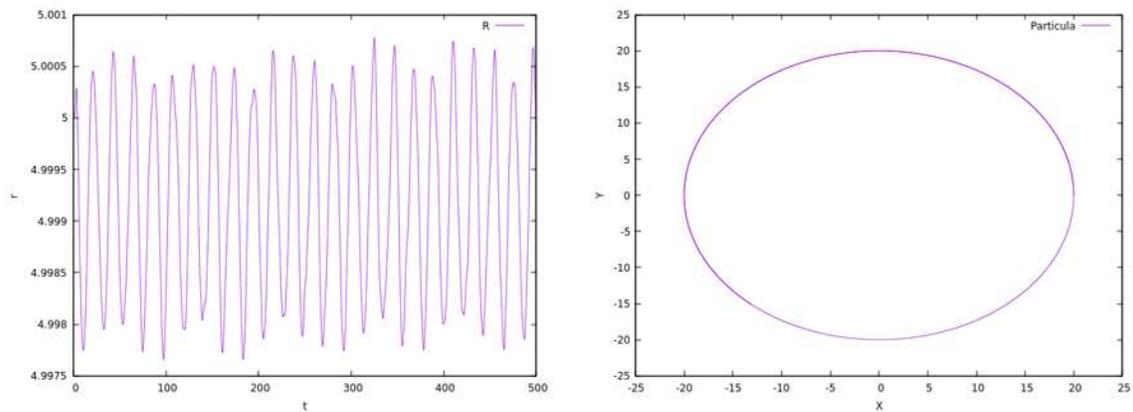


Figura 4.4: A la izquierda se muestra el cambio en el radio respecto al tiempo y a la derecha el espacio de posiciones para una condición inicial $R_0 = 5$.

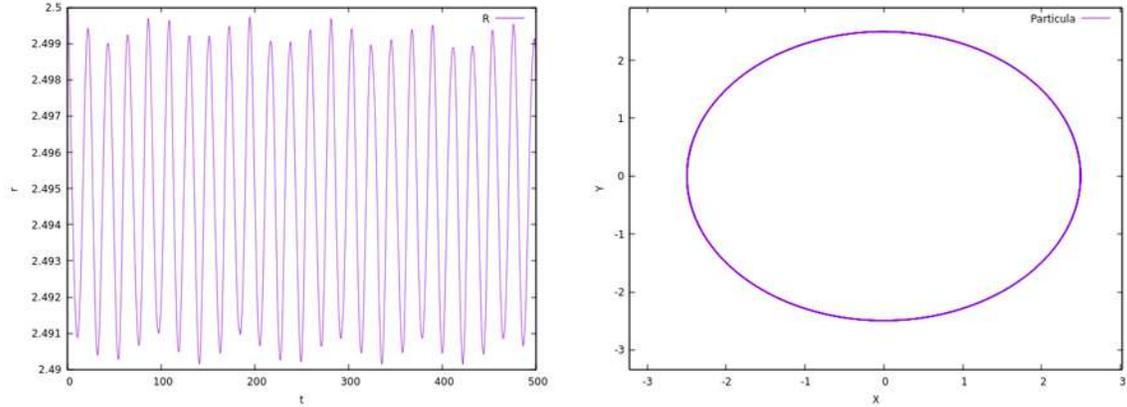


Figura 4.5: A la izquierda se muestra el cambio en el radio respecto al tiempo y a la derecha el espacio de posiciones para una condición inicial $R_0 = 2.5$.

Ahora el radio también cambia y los cambios varían hasta dos órdenes de magnitud más dependiendo de la condición inicial de R_0 , comparando con el caso para $R_0 = 20$. Sin embargo en la parte izquierda de las figuras 4.2,4.3,4.4 y 4.5 no son apreciables estos cambios.

4.1. Caso para dos partículas

A lado de la partícula descrita con anterioridad se colocará ahora una nueva partícula, tal que no se afecten entre sí y que la nueva partícula sea afectada por la gravedad debida a $M(r)$. La nueva partícula está en un principio a una distancia $R' = R_0 + \epsilon$ de la partícula original, donde ϵ es un número muy pequeño. El ángulo de inicio será el mismo para ambas partículas, sin embargo, la velocidad angular denotada por Ω si va a cambiar, ya que depende del radio. Lo que se medirá ahora es la separación entre las dos partículas. Por lo que se usarán coordenadas cartesianas para calcular la distancia entre ambas. Describiendo la posición para ambas partículas

sería de la siguiente manera

$$x = R \cos(\Omega t) \quad (4.6)$$

$$y = R \sin(\Omega t) \quad (4.7)$$

$$x' = R' \cos(\Omega' t) \quad (4.8)$$

$$y' = R' \sin(\Omega' t). \quad (4.9)$$

Con estas variables se definirá la distancia entre ambas partículas como

$$d(r, r') = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2}. \quad (4.10)$$

Ahora con esta definición se mostrarán los resultados obtenidos para distintos radios iniciales.

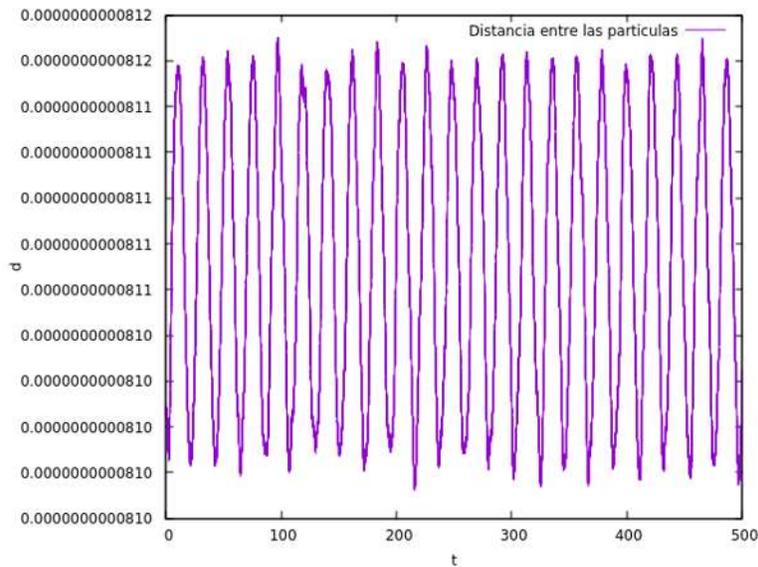


Figura 4.6: Distancia entre ambas partículas como función del tiempo hasta $t = 500$. Con un radio inicial de $R_0 = 20$ y una distancia de separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-8}$

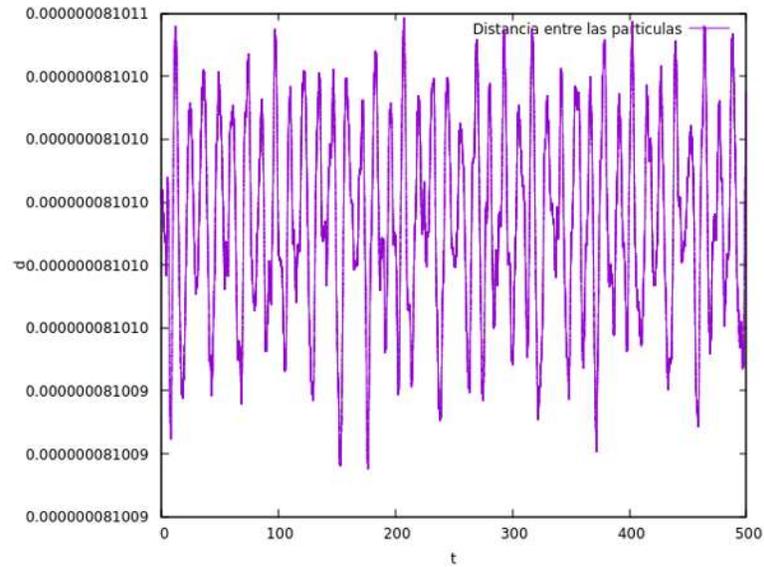


Figura 4.7: Distancia entre ambas partículas como función del tiempo hasta $t = 500$. Con un radio inicial de $R_0 = 10$ y una distancia de separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-8}$

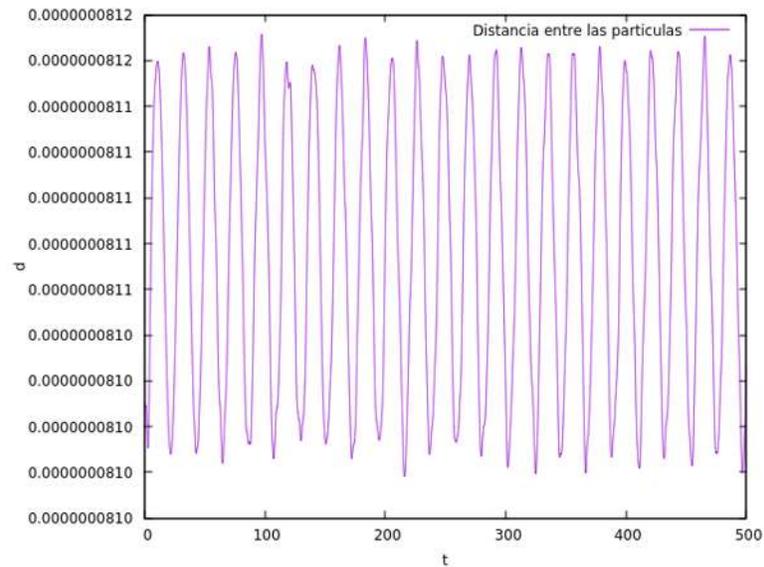


Figura 4.8: Distancia entre ambas partículas como función del tiempo hasta $t = 500$. Con un radio inicial de $R_0 = 5$ y una distancia de separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-8}$

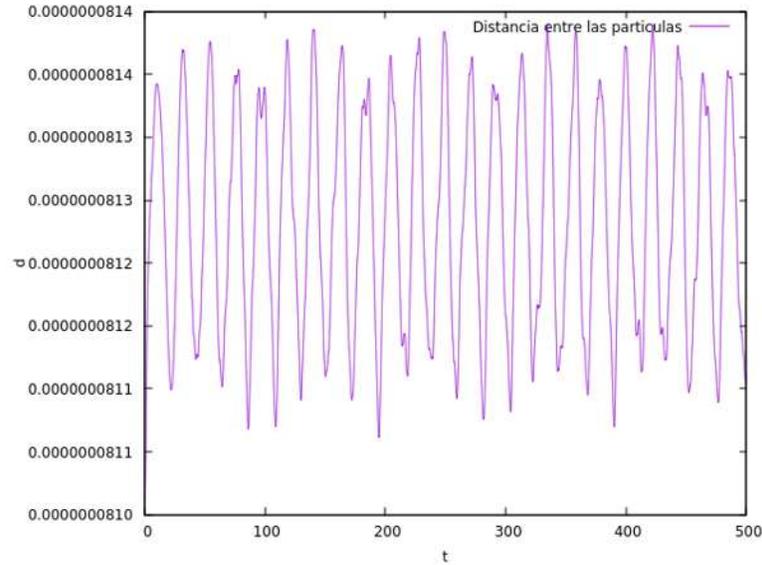


Figura 4.9: Distancia entre ambas partículas como función del tiempo hasta $t = 500$. Con un radio inicial de $R_0 = 2.5$ y una distancia de separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-8}$

Estos resultados demuestran que la separación entre las dos partículas oscila en el tiempo. Se descubrió que esta oscilación de separación se debía a que las velocidades angulares para las dos partículas son iguales. También algo importante por mencionar es que la resolución numérica impuso condiciones para la separación de las partículas ya que el efecto de corte se volvía muy notable si la separación se volvía muy pequeña. Por eso se realizó la prueba para una distancia de separación mayor y se encontró la distancia en la cual empieza a suceder. A continuación se adjuntará esta solución en la figura 4.10.

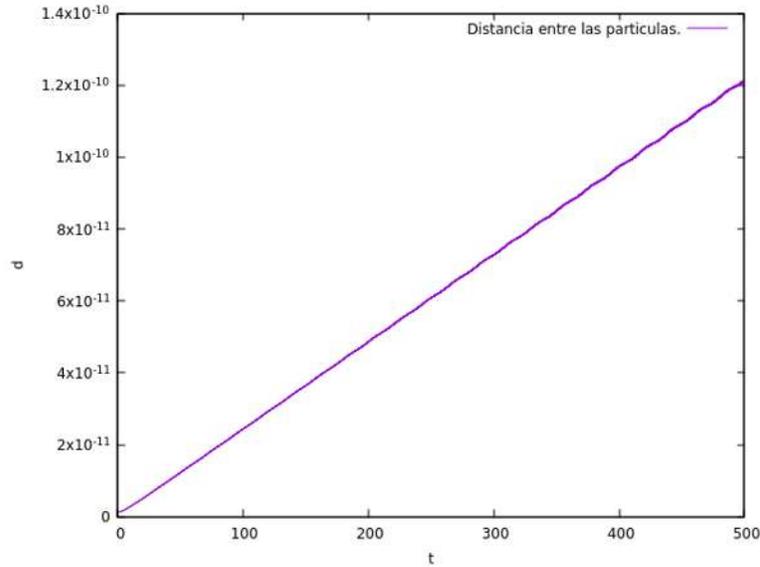


Figura 4.10: Distancia entre ambas partículas como función del tiempo hasta $t = 500$. Con un radio inicial de $R_0 = 5.0$ y una distancia de separación $\epsilon = 1.29 \times 10^{-12}$.

Como se aprecia en la imagen 4.10 la distancia como función del tiempo sigue aumentando conforme el tiempo crece y además se aprecia una función suave, a diferencia de haber utilizado una distancia de separación menor donde se aprecia una figura escalonada, dando un límite de separación que se puede utilizar y no perder exactitud en los resultados. Esto es importante porque si se transforma a unidades físicas indica la distancia de separación inicial que se debe de tener para realizar un experimento y comparar los resultados. A continuación se mostrarán los resultados de la transformada de Fourier para distintas distancias R_0 y distinto ϵ .

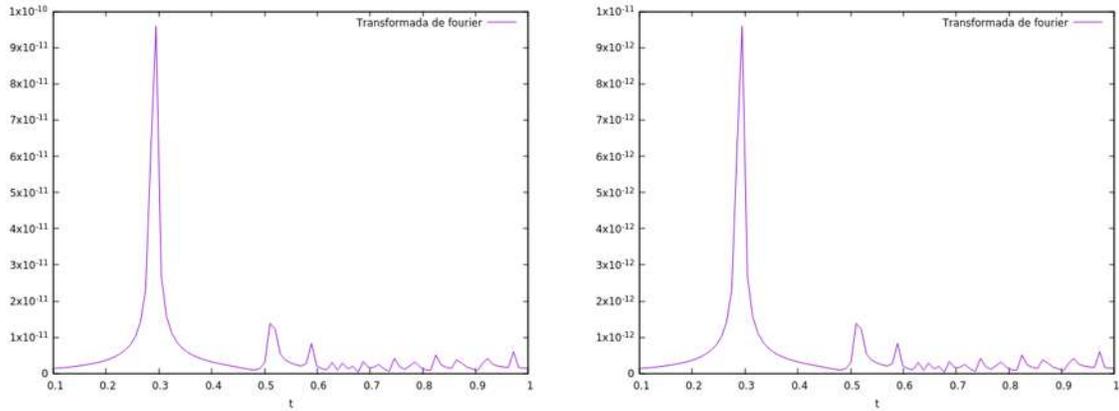


Figura 4.11: A la izquierda se muestra la transformada de Fourier para la distancia entre las dos partículas. Con $R_0 = 2.5$ y una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-8}$. Mientras a la derecha se utiliza una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-9}$ y mismo R_0 .

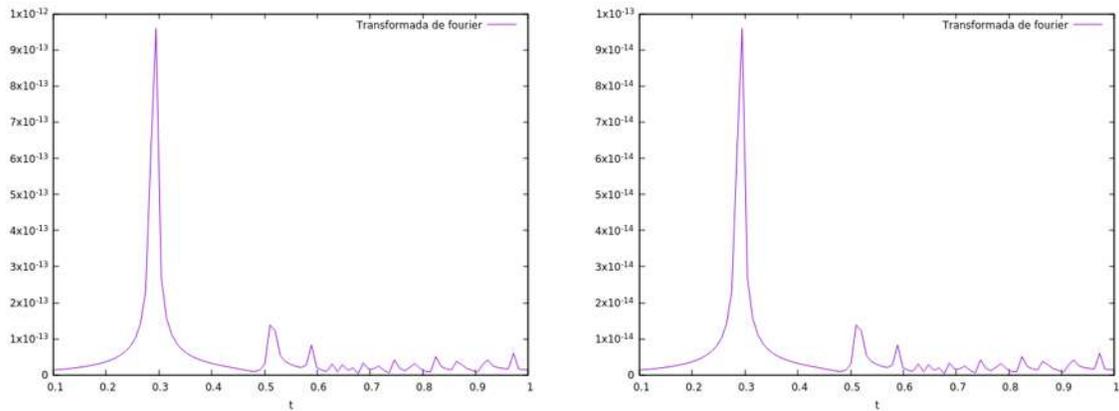


Figura 4.12: A la izquierda se muestra la transformada de Fourier para la distancia entre las dos partículas. Con $R_0 = 2.5$ y una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-10}$. Mientras a la derecha se utiliza una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-11}$ y mismo R_0 .

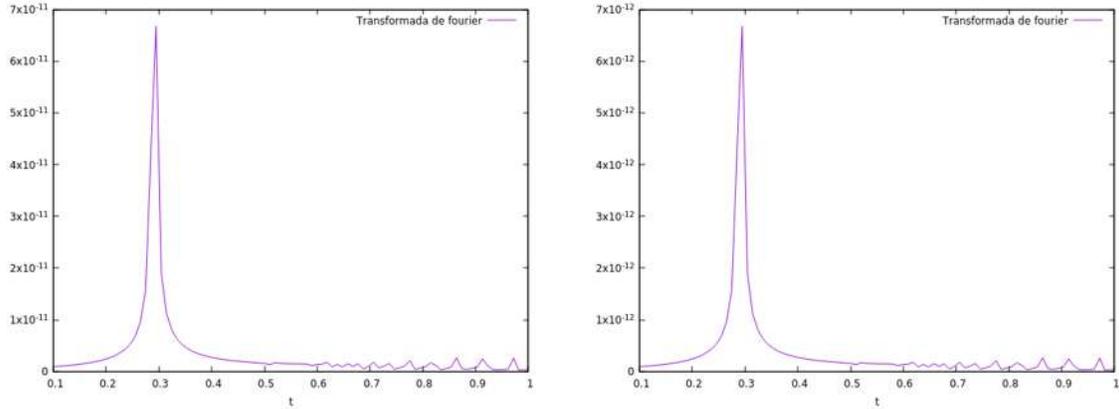


Figura 4.13: A la izquierda se muestra la transformada de Fourier para la distancia entre las dos partículas. Con $R_0 = 5$ y una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-8}$. Mientras a la derecha se utiliza una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-9}$ y mismo R_0 .

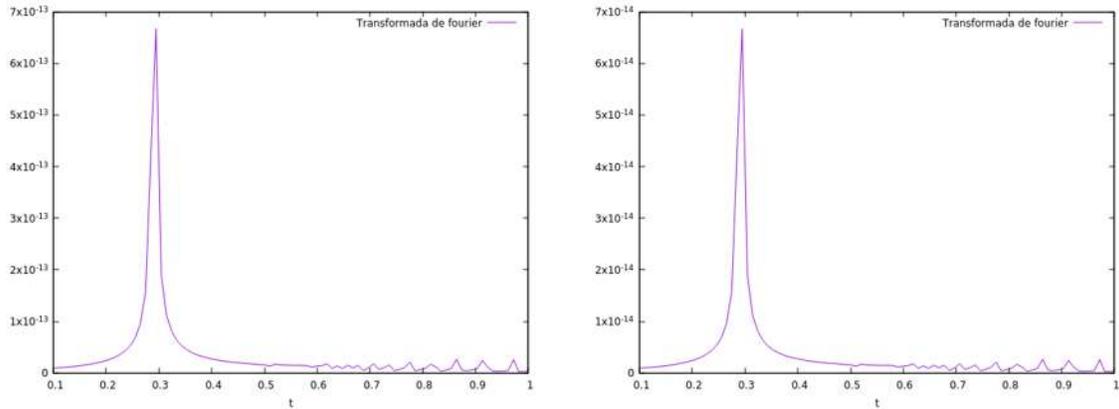


Figura 4.14: A la izquierda se muestra la transformada de Fourier para la distancia entre las dos partículas. Con $R_0 = 5$ y una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-10}$. Mientras a la derecha se utiliza una separación $\epsilon = 8.101 \times 10^{-11}$ y mismo R_0 .

En las figuras 4.11, 4.12, 4.13 y 4.14 se muestran las frecuencias de las oscilaciones de la distancia de separación entre ambas partículas. Con estos resultados se prevee que se pueda realizar una predicción de experimentos físicos donde se utilice un interferómetro. Para comparar se va a convertir los resultados de unidades de código a unidades físicas. A partir de la figura 3.4 se puede obtener el periodo $T = 21.7391$, ahora se puede calcular la equivalencia de tiempo en unidades de código a unidades físicas

$$1 = \frac{6.9 \times 10^8}{21.7391} = 31.74 \times 10^6 \text{ años.}$$

Esto es válido para un valor de $m = 2.5 \times 10^{-22}$ eV como masa del bosón y $r_c = 1$ kpc como radio del núcleo. Ahora ya es posible traducir las figuras 4.11, 4.12, 4.13 y 4.14 a unidades físicas por lo que se adjuntará a continuación una tabla

R_0	Distancia de separación	Unidades de código	Unidades físicas (años)
2.5	8.101×10^{-8}	0.294060	107.937×10^6
2.5	8.101×10^{-9}	0.295853	107.283×10^6
2.5	8.101×10^{-10}	0.295855	107.282×10^6
2.5	8.101×10^{-11}	0.294063	107.936×10^6
5	8.101×10^{-8}	0.295853	107.937×10^6
5	8.101×10^{-9}	0.297645	106.637×10^6
5	8.101×10^{-10}	0.294060	107.937×10^6
5	8.101×10^{-11}	0.294215	107.880×10^6

Tabla 4.1: Donde R_0 es la distancia desde el centro de la configuración hasta la posición de la primer partícula y la distancia de separación es la distancia entre la primer partícula y la segunda, esto para diferenciar las corridas que se iban a pasar a unidades físicas. Para el periodo de la separación entre las dos partículas se utilizó el pico más grande de las frecuencias para realizarse. Para las unidades físicas se utilizó $m = 2.5 \times 10^{-22}$ eV y $r_c = 1$ kpc.

En la tabla 4.1 se aprecia que el periodo viene dado en la mayoría de los casos por 107×10^6 años. Para poner en comparación, el sol tarda aproximadamente unos 225 millones de años en dar la vuelta a la Vía Láctea, lo cual indica la escala temporal que permite estimar el comportamiento periódico de una partícula de prueba. Los resultados de ésta tabla indican que el periodo de oscilación es independiente de si las partículas se encuentran cerca o lejos del centro de la configuración.

Una pregunta que surge es si este periodo de oscilación se puede medir con los detectores de ondas gravitacionales LIGO que han entrado en funcionamiento desde 2015 [16], diseñado para determinar oscilaciones en la separación entre partículas de prueba. La respuesta es que no es posible, debido a que la sensibilidad de LIGO es máxima en las frecuencias de 1 a algunos kHz, mientras que la frecuencia de oscilación correspondiente a $1/10^8$ años es ultrabaja, del orden de 2.9×10^{-16} Hz según los datos de la Tabla 4.1. Queda descartado también el uso del interferómetro LISA, que consiste de tres satélites en órbitas separadas por cientos de kilómetros, cuya ventana de frecuencias se encuentra entre 10^{-5} y 10^{-1} Hertz [14].

Sin embargo una posibilidad sería la observación en la posición entre el Sol y estrellas cercanas podría utilizarse como un iterferómetro capaz de medir en las frecuencias ultrabajas que predice el modelo. Esto tomando en cuenta que el sol tarda aproximadamente 230 millones de años en dar la vuelta a la galaxia, se prevé que sería una buena escala para comparar.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se presentó la evolución de halos galácticos de materia oscura compuesta por un condensado de Bose-Einstein y se estudió la posibilidad de poder predecir observaciones que confirmen la validez de ésta propuesta de materia oscura o la nieguen.

Los halos galácticos se pueden modelar como soluciones estacionarias del sistema de ecuaciones Schrödinger-Poisson, que gobierna el comportamiento dinámico del condensado. Mediante evoluciones numéricas se demostró la estabilidad de dichas soluciones y la respuesta oscilatoria ante perturbaciones, estudio que se realizó para distintos valores de la auto-interacción entre los bosones. Para lograr dichas simulaciones se programó un código que resuelve las ecuaciones del sistema Schrödinger-Poisson, y se verificó la convergencia de las soluciones numéricas.

Para lograr una predicción que permita validar o negar la factibilidad de este modelo de materia oscura, se estudió el comportamiento de partículas de prueba como función de las oscilaciones de los halos. Para ello, primero se estudió el comportamiento de una partícula de prueba y calcula el periodo de oscilación de su trayectoria alrededor de una trayectoria circular. Se encontró que el periodo de oscilación es del orden de 30 millones de años. Es un buen resultado si se considera que el periodo de traslación del sol en torno al centro de la Vía Láctea es del orden de 230 millones de años.

Un segundo experimento consistió en estudiar la distancia entre dos partículas

de prueba cercanas como función del tiempo. Esto con el objetivo de determinar la frecuencia de oscilación de dicha distancia y por tanto estimar el tipo de observación necesaria para diseñar un experimento para verificar o descartar el modelo de materia oscura.

Se encontró que el periodo de oscilación en la distancia entre dos partículas de prueba es del orden de cien millones de años, comparable con la escala de tiempo de órbita de estrellas en torno a la Vía Láctea. Esto lleva a dos conclusiones muy claras. Una es que los detectores de ondas gravitacionales en la Tierra no se pueden usar para detectar la separación entre dos partículas de prueba debido a la oscilación del núcleo del halo galáctico debido a la banda de frecuencias en que detectan. Otra es que una posibilidad es estudiar si la separación entre estrellas vecinas del Sol posiblemente ha variado en escalas de tiempo del orden de cientos de millones de años.

Bibliografía

- [1] Guzmán F.S. y Ureña-Lopez L.A, Evolution fo the Schrödinger-Newton system for a self-gravitating scalar field, Phys. Rev. D69 124033 (2004)
- [2] Guzmán F.S. y Ureña-Lopez L.A, Gravitational Cooling of Self-Gravitating Bose Condensates, The Astrophysical Journal, 645:814-819,2006 July 10 (2006)
- [3] Guzmán F.S. y Bernal Argelia, Scalar Field Dark Matter: Nonspherical Collapse and Late-Time Behavior, Phys. Rev. D74 063504 (2006)
- [4] Guzmán F.S. y Bernal Argelia, Scalar Field Dark Matter:Head-on Interaction between Two Structures, Phys. Rev. D74 103002 (2006)
- [5] Alcubierre, M., Guzmán, F., Matos, T., Núñez, D., Ureña-López, L. and Wiederhold, P., 2002. Galactic collapse of scalar field dark matter. Classical and Quantum Gravity, 19(19), pp.5017-5024.
- [6] Andrew Liddle. (2004). An Introduction to Modern Cosmology. Wiley.
- [7] Bernal, Argelia; Matos, Tonatiuh y Nuñez, Darío. Flat central density profiles from scalar field dark matter halos. Rev. mex. astron. astrofis [online]. (2008), vol.44, n.1.
- [8] Pitaevskii, L. and Stringari, S., Bose-Einstein Condensation. 1st ed. New York: Oxford University Press Inc, (2003).
- [9] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. and Laloë, F., n.d. Quantum Mechanics, (1991).

- [10] Guzmán F.S., Solución de la ecuación de onda como un problema de valores iniciales usando diferencias finitas. *Rev Mex. Fis E* 56(2010)5168
- [11] Guzmán F.S., Solving the time-dependent Schrödinger equation using finite difference methods, *Revista Mexicana de Física E* 54 (2) 120–132, (2008)
- [12] William H. Press, *Numerical Recipes in Fortran 77 The art of scientific computing*. Cambridge University: Press Syndicate of the University of Cambridge, (1986).
- [13] Knudsen, J. and Hjorth, P., *Elements Of Newtonian Mechanics*. Berlin: Springer, (2002).
- [14] lisa.nasa.gov. 2020. LISA - Laser Interferometer Space Antenna -NASA Home Page. [online] Available at: <<https://lisa.nasa.gov/>>[Accessed 16 November 2020].
- [15] Lee, Jae-Weon, Is dark matter a BEC or scalar field?. *Journal of the Korean Physical Society*. 54. 10.3938/jkps.54.2622, (2008).
- [16] B. P. Abbott et al., Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger, *Phys. Rev* (2016).
- [17] T. Matos and L. A. Ureña-López, On the Nature of Dark Matter, *Class. quantum Grav.*17, L75 (2000).