UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Equação de Schrödinger-Newton: influência da condição inicial em um modelo semi-clássico para gravitação

Marion Silvestrini

Trabalho de Conclusão do Curso de Bacharelado em Física realizado sob a orientação da Professora Dra. Carolina Brito e co-orientação do Professor Dr. Leonardo Brunnet.

Porto Alegre
Junho de 2015.

Agradecimentos

À minha família;
Às minhas amigas e colegas;
À minha orientadora e co-orientador, Professora Dra. Carolina e Prof. Dr Leonardo, por toda a ajuda;
Ao Rafael Emilio Barfknecht, pela paciência e carinho.

Resumo

Neste trabalho usamos uma aproximação semi-clássica para melhor entender a interação entre gravidade e matéria. Essa aproximação é estudada a partir da Equação de Schrödinger-Newton (SN), que consiste na Equação de Schrödinger com um potencial newtoniano clássico auto-interagente. Dependendo de parâmetros como a massa e a condição inicial, o pacote pode se manter gravitacionalmente confinado ou pode ter um comportamento difusivo, aproximadamente como partícula livre. O valor de massa cujo pacote de onda não confina nem difunde é definido como *massa crítica*, m_c.

Estudamos a dinâmica da equação SN usando duas condições iniciais diferentes: um pacote de onda com uma Gaussiana centrada na origem e um pacote de onda composto por duas funções Gaussianas, uma centrada na origem e outra em R. Este modelo foi estudado, entre outros autores, por [7, 11], onde um valor alto de m_c, na ordem de 10^9 u (unidades de massa atômica), foi encontrado. Neste trabalho procuramos alguma condição inicial (qualquer conjunto de parâmetros específicos) que diminuam a massa crítica. Foi encontrado que, usando a condição inicial com duas Gaussianas, a massa crítica encontrada é menor que a massa crítica para condição inicial com apenas uma função Gaussiana.

Abstract

In this work we use the semi-classical approximation to try a better understanding of how gravity interacts with matter. This aproximation is studied through the Schrödinger-Newton (SN) Equation, that is, the Schrödinger Equation coupled with a self gravitational newtonian potential. Depending on the parameters, such as mass and initial condition, the wave-packet can maintain itself gravitationally confined or can exhibit a diffusive behavior, similar to a free particle. The value of mass for which the wave-packet does not confine or diffuse itself is defined as the *critical mass*, m_c.

Here we study the dynamics of the SN Equation using two different initial conditions: a wave-packet with a Gaussian function peaked at the origin and a wave-packet composed by two Gaussian functions, one centered at the origin and the other at R. This model was studied, among other authors, by [7, 11], where a very large value of m_c, of order 10^9 u, was found. In this work we searched for an initial condition (any set of specific parameters) that could lower the critical mass. It was found that, using a initial condition with two Gaussians, the critical mass is lower than the critical mass for the initial condition considering just one Gaussian.

Sumário

1 Introdução **2**

2 Estimativa analítica **4**

2.1 Análise heurística da equação SN 4

2.2 Condição inicial: Pacote de onda com uma Gaussiana 5

2.2.1 Parte experimental 5

2.3 Condição inicial: pacote de onda com 2 Gaussianas 6

2.3.1 Cálculo m_c 7

2.4 CI: Gaussiana livre 8

3 Descrição do método numérico **10**

3.1 Unidades reduzidas 10

3.2 Método numérico 10

3.2.1 Construindo Q 12

3.3 Condições de contorno 13

4 Resultados **15**

4.1 Evolução da densidade de probabilidade 15

4.2 Calculando a média de r_p 17

4.3 Comparação numérico *versus* analítico 18

5 Conclusões e perspectivas **19**

A Expressão analítica de m_c para CI com duas Gaussianas **23**

Capítulo 1

Introdução

A conciliação da Teoria da Relatividade Geral com a Mecânica Quântica é um dos problemas centrais da Física Teórica contemporânea. Existem dois caminhos principais para buscar esse acordo: encontrar uma teoria adequada de gravitação quântica (como, por exemplo, Teoria de Cordas) ou modificando a Mecânica Quântica para que se consiga acoplá-la à Relatividade Geral. Autores, como nas referências [3, 12], argumentam a favor da primeira alternativa.

Caso a gravitação seja quantizada então, obrigatoriamente, a Relatividade Geral deve implicar que o aspecto quântico devido ao campo gravitacional é negligenciável para o nosso cotidiano, começando a ter efeito apenas para campos gravitacionais muito fortes, como perto de uma singularidade (buraco negro) ou no começo do universo (motivo principal por ser tão difícil medir efeitos de gravitação quântica).

As tentativas de unir as duas teorias começaram na década de 30 do século passado. Entretanto, apesar de todo o progresso nessa área, ainda falta uma teoria de gravitação quântica que possa ser usada para fazer medidas indiretas porém precisas; e dada a diferença de escalas de energia [1], medidas diretas do fenômeno de gravitação quântica parecem fora de questão.

Para conseguirmos entender melhor como a gravidade interage com a matéria, fazemos uso de uma aproximação semi-clássica, que consiste em impor que a matéria seja descrita pela Mecânica Quântica enquanto está sujeita a um campo gravitacional auto-interagente. Stephen Adler [1], ressalta que esta aproximação difere de um modelo de gravitação clássica pelo fato de o primeiro ter um potencial auto-gravitacional.

Outra simplificação a ser feita é considerar o modelo não-relativístico. Como os limites não-relativísticos da Teoria Quântica de Campos e da Relatividade Geral são, respectivamente, Mecânica Quântica e Gravitação Newtoniana, uma possibilidade é considerar matéria quântica que auto-interage gravitacionalmente via um potencial gra-

[1] Em escalas atômicas, a interação gravitacional é tão pequena que pode ser desprezada.

vitacional Newtoniano. Essa é a situação descrita pela equação de Schrödinger-Newton (SN) e que foi estudada por vários autores [4, 5, 7, 10, 11].

Consideramos uma distribuição de massa que auto-interage, gravitacionalmente, de acordo com a lei de Gravitação de Newton. Essa distribuição tem massa m e densidade de massa ϱ_m. Esses dois parâmetros estão relacionados com a densidade de probabilidade radial ρ, a partir de $\rho = \varrho_m/m$.

O potencial gravitacional Φ deve satisfazer a equação de Poisson:

$$\nabla^2\Phi = 4\pi G\varrho_m \ , \tag{1.1}$$

onde G é a constante gravitacional universal. Supondo que a matéria é descrita pela Mecânica Quântica, então a função de onda Ψ, deve estar relacionada com ρ pela relação[2] $\rho = |\Psi|^2$, onde Ψ satisfaz a equação de Schrödinger com um potencial Φ:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + m\Phi(\mathbf{r},t)\right)\Psi. \tag{1.2}$$

Combinando as equações (1.1) e (1.2) obtemos a equação de Schrödinger-Newton (SN), que será estudada neste trabalho

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - Gm^2\int_{\Re^3}\frac{|\Psi(\mathbf{r'},t)|^2}{|\mathbf{r'}-\mathbf{r}|}d^3\mathbf{r'}\right)\Psi(\mathbf{r},t). \tag{1.3}$$

O que torna a equação SN interessante é o fato que, talvez com a tecnologia de um futuro próximo, seja possível experimentos sobre este modelo semi-clássico. Sabemos que possíveis teorias consistentes tanto com a RG como com a MQ são difíceis de encontrar. Esse fato faz com que as poucas teorias que tentam descrever essa união sejam levadas muito a sério, mesmo quando não há evidências experimentais para ela, como Teoria das Cordas [8].

No primeiro capítulo, serão apresentadas as condições iniciais usadas e o cálculo analítico de m_c, lembrando que a massa crítica é o valor de massa para o qual o pacote de onda não apresenta comportamento oscilatório ou difusivo. Em seguida, no próximo capítulo, é mostrado o método numérico usado para obter a dinâmica da função de onda. No quarto capítulo, são mostrados os resultados encontrados e as análises de dados serão discutidas. Por fim, o último capítulo contém as conclusões e perspectivas do trabalho.

[2]Apesar de existirem controvérsias sobre a afirmação que a densidade de probabilidade radial e a função de onda do sistema são relacionadas, neste trabalho supomos que esta relação é válida.

Capítulo 2

Estimativa analítica

Neste capítulo serão apresentados os cálculos realizados para estimar m_c analiticamente, a partir das condições iniciais com uma e duas Gaussianas. Calcula-se o valor da aceleração do pico da função de onda e iguala-se à aceleração gravitacional para obter uma estimativa m_c. A estimativa da massa crítica usando uma condição inicial com um pacote de onda gaussiano foi calculada em [7]. Neste capítulo estendemos o resultado para o caso da função de onda com duas Gaussianas.

2.1 Análise heurística da equação SN

Como temos simetria esférica, a equação (1.3) se reduz a uma equação unidimensional com coordenada r:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - 4\pi G m^2 \int \frac{|\Psi(r',t)|^2}{|r'-r|} d^3r'\right)\Psi(r,t). \tag{2.1}$$

Por simples análise, é possível ver que, para $m >> 1$, o termo gravitacional domina na equação e, por outro lado, para $m << 1$, o termo cinético domina. Assim, é lógico pensar que existe algum valor específico de massa, chamado *massa crítica* m_c para o qual o efeito gravitacional e cinético se equiparam.

Para massa acima de m_c, dizemos que o pacote de onda dispersa, e para massas abaixo, ele se confina, ou seja, a dispersão é inibida pelo efeito gravitacional. Estimar o valor de m_c é importante, principalmente se essa estimativa nos fornecer valores de massa pequenos que apresentem fenômenos quânticos e que seja acessível experimentalmente.

2.2 Condição inicial: Pacote de onda com uma Gaussiana

Para estudar a dinâmica da equação (2.1) usamos uma condição inicial $\Psi(r, t = 0)$, que definimos como uma gaussiana com pico na origem e radialmente esférica, a saber

$$\Psi(r, t = 0) = A\, e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}. \tag{2.2}$$

Essa condição inicial foi estudada com mais detalhes por [7, 10, 11]. Os autores encontraram

$$m_c \sim \left(\frac{\hbar^2}{G\sigma}\right)^{1/3}. \tag{2.3}$$

Com essa estimativa é possível testar experimentalmente a equação (2.1) usando um sistema quântico com massa $m \gtrsim m_c$ e condição inicial como listada acima. Caso a função de onda do sistema fique confinada ao redor de um ponto de equilíbrio em vez de difundir (como a mecânica quântica prevê), então essa seria uma evidência favorecendo o modelo descrito pela equação de Schrödinger-Newton.

2.2.1 Parte experimental

Planejar um experimento para esse procedimento pode ser desafiador. A dificuldade principal se baseia no fato que, em laboratórios onde são estudados sistemas quânticos, a massa e a largura da Gaussiana (σ) devem ser muito pequenas. Como σ é inversamente proporcional à massa, um valor pequeno de σ (necessário para que haja difração) resulta em uma massa grande.

Existem os sistemas chamados "heavy", que são sistemas de alta massa cujo efeitos quânticos são experimentalmente observados. Por exemplo, os interferômetros moleculares atuais permitem construir sistemas correspondentes a um pacote de onda com $\sigma \sim 0.5\ \mu m$ e massas até $m \sim 10^3\ u$ [2]. Se utilizarmos esse valor de σ na equação (2.3), encontramos $m_c \sim 10^9\ u$, ou seja, várias ordens de grandeza maior que os valores experimentalmente acessíveis.

Ainda é necessário notar que, para uma molécula com $m \sim 10^9\ u$, não podemos afirmar que não existam interações de outra natureza, como eletromagnética.

2.3 Condição inicial: pacote de onda com 2 Gaussianas

Visando as dificuldades experimentais citadas acima, é possível pensar em uma condição inicial (CI) diferente para tentar diminuir m_c. Se a massa crítica depender da condição inicial, então existe uma possibilidade que, para alguma CI específica, haja um valor de m_c que seja praticável experimentalmente.

Utilizamos $\Psi(r,0)$ como uma superposição de duas funções Gaussianas, uma centrada na origem e a outra fora da origem. Com $\Psi_R = e^{-\frac{(r-R)^2}{2\sigma^2}}$ e $\Psi_0 = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}$, então a condição inicial completa fica

$$\Psi(r,0) = A\left(\Psi_0(r,0) + \Psi_R(r,0)\right) \tag{2.4}$$

onde A é uma constante de normalização.

Também expressamos que a função de onda, na coordenada r, é composta por duas Gaussianas. Porém, com uma visualização tridimensional (lembrando que estamos usando um modelo com simetria esférica), a função de onda não tem um formato Gaussiano. A Figura 1 ilustra a CI (2.4) em 3D: uma Gaussiana centrada na origem e uma função tipo Gaussiana centrada em R. Assim, é necessário explicitar que sempre que for mencionada o pacote Gaussiano centrado em R, queremos dizer que é uma função tipo Gaussiana, como mostrada na Figura 1.

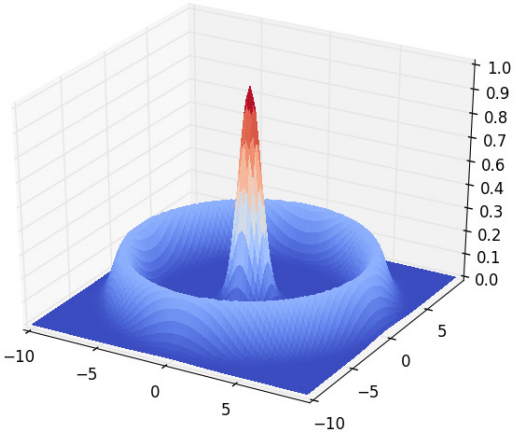

Figura 1: Ilustração da condição inicial.

2.3.1 Cálculo m_c

Para uma gaussiana. O método para encontrar a massa crítica é o mesmo que foi feito pelos autores em [7, 10, 11]. A solução da equação de Schrödinger para partícula livre (sem potencial gravitacional) para Ψ_0 é dada por [7]:

$$\Psi_{0,livre}(r,t) = (\pi\sigma^2)^{-3/4}\left(1+\frac{i\hbar t}{m\sigma^2}\right)^{-3/2} exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2\left(1+\frac{i\hbar t}{m\sigma^2}\right)}\right). \tag{2.5}$$

A densidade de probabilidade radial associada é escrita como:

$$\rho(r,t) = 4\pi r^2|\Psi(r,t)|^2. \tag{2.6}$$

Diferenciando ρ em relação a r e igualando a zero temos os pontos críticos da função e, em especial, um valor de r, definido com r_p para o qual ρ é máximo:

$$\left.\frac{\partial\rho}{\partial r}\right|_{r=r_p} = 0, \tag{2.7}$$

isto é,

$$r_p = \sigma\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t}{m^2\sigma^4}}\ . \tag{2.8}$$

Derivando r_p no tempo duas vezes obtemos a aceleração do pico do pacote de onda:

$$\ddot{r_p} = \frac{\hbar^2}{m^2\sigma^3}\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2\sigma^4}\right)^{-3/2} = \frac{\hbar^2}{m^2 r_p^3}\ . \tag{2.9}$$

Comparando essa aceleração com aceleração gravitacional $\ddot{r} = \dfrac{Gm}{r^2}$ e usando $r_p\ (t=0) = \sigma$ temos

$$m_c = \left(\frac{\hbar^2}{G\sigma}\right)^{1/3}\ . \tag{2.10}$$

É importante ressaltar que estes cálculos são apenas aproximações, pois são feitos para $t = 0$, ou seja, a dinâmica da função de onda é desconsiderada.

Para duas gaussianas. Seguimos o mesmo processo citado acima. A solução da equação de Schrödinger para partícula livre é

$$\Psi_{R,livre}(r,t) = A_1\ e^{-\frac{(r-R)^2}{2\sigma^2\left(1+\frac{i\hbar t}{m\sigma^2}\right)}} \tag{2.11}$$

com

$$A_1 = \left(\sqrt{\pi}\left(1+\frac{i\hbar t}{m\sigma^2}\right)^{3/2}\sqrt{\sigma(2R\sigma e^{-\frac{R^2}{\sigma^2}}+\sqrt{\pi}(2R^2+\sigma^2)(1+\mathrm{Erf}(R/\sigma)))}\right)^{-1}. \tag{2.12}$$

onde Erf é a função erro [1]. Assim, a função de onda para a equação de Schrödinger é $\Psi(r,t) = A(\Psi_0(r,t)+\Psi_R(r,t))$. Pela linearidade da equação de Schrödinger, Ψ será uma solução com CI $\Psi(r,0) \sim e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(r-R)^2}{2\sigma^2}}$. A densidade de probabilidade radial associada é dada por

$$\rho(r,t) = 4\pi r^2|\Psi(r,t)|^2. \tag{2.13}$$

Diferentemente do procedimento para condição inicial de uma gaussiana, a expressão encontrada é complicada e dificilmente será possível encontrar r_p como feito acima. Logo, para encontrar m_c (que depende de $\ddot{r_p}$) faremos a seguinte análise:

Se r_p é um ponto crítico de ρ, então, necessariamente

$$\frac{\partial\rho(r_p,t)}{\partial r} = 0\ . \tag{2.14}$$

Diferenciando duas vezes no tempo e resolvendo para $\ddot{r_p}$ nós obtemos $\ddot{r_p}$ como função de $t, \dot{r_p}$ e r_p

$$\ddot{r_p}(t) = f(t, \dot{r_p}(t), r_p(t)). \tag{2.15}$$

Nós estamos calculando m_c para tempo zero, e usando que $\dot{r_p}(0) = 0$, obtemos

$$\ddot{r_p}(0) = f(r_p(0)). \tag{2.16}$$

Agora apenas precisamos de $r_p(0)$. Como antes, precisamos calcular (2.14), porém, usamos $t = 0$, o que simplifica consideravelmente e então $r_p(0)$ pode ser encontrado numericamente.

Igualando $\ddot{r_p}$ com a aceleração gravitacional dada por $\dfrac{Gm}{r_p(0)^2}$ e $r_p(t=0) = \sigma$ encontramos uma expressão que é função de σ, R, m e $\hbar$. Resolvendo para m temos m_c em função de R, σ e $\hbar$. A expressão completa se encontra no apêndice A.

2.4 CI: Gaussiana livre

Também é possível considerar o caso em que temos a função de onda com uma condição inicial que tem um pacote de onda Gaussiano, centrado em R, ou seja,

[1] É fácil ver que Ψ_R recai em Ψ_0 quando $R = 0$.

$\Psi(0,x) = \Psi_R(0,x)$. Seguindo os passos da seção acima: calcular r_p, obter $\ddot{r_p}$, igualar à aceleração gravitacional e resolvendo para m, obtemos:

$$m_c = \frac{(R^2\hbar^2 + 2\hbar^2\sigma^2 + \hbar^2 R\sqrt{R^2+4\sigma^2})^{\frac{1}{3}}}{(G\sigma^2)^{\frac{1}{3}}(R^2+4\sigma^2)^{\frac{1}{6}}}, \tag{2.17}$$

que recai em $\left(\frac{\hbar^2}{G\sigma}\right)^{1/3}$ quando $R = 0$. É fácil de ver que a expressão acima só aumenta com R, ou seja, *não é possível diminuir m_c usando condição inicial que tem apenas uma Gaussiana centrada fora da origem.*

Capítulo 3

Descrição do método numérico

Neste capítulo detalhamos o método numérico usado para estudar a evolução temporal da equação (2.1). Usando a forma de Cayley é possível obter a função de onda para diferentes tempos e, a partir dela, calcular quantidades importantes, como a densidade de probabilidade radial, ρ, e a posição do pico do pacote de onda, r_p.

3.1 Unidades reduzidas

O método numérico é similar ao usado em [7] mas com diferentes unidades de massa, tempo e espaço, que são reescritas em termos de $G, \hbar$ e σ. A unidade de distância será dada por σ, $t_r = (\sigma^5/G\hbar)^{1/3}$ será a unidade de tempo e $m_r = (\hbar^2/G\sigma)^{1/3}$ a unidade de massa. É conveniente usar essas unidades reduzidas pois elas facilitam a equação de Schrödinger-Newton e reduzem o problema para apenas o parâmetro de massa. Reescrevendo a equação (2.1) com $m = m_r\,\tilde{m}$, $t = t_r\,\tilde{t}$ e $r = \sigma\,\tilde{r}$ temos

$$i\frac{\partial\Psi(\tilde{r},\tilde{t})}{\partial\tilde{t}} = \left(-\frac{1}{2\tilde{m}}\nabla_r^2 + \tilde{m}\Phi(\tilde{r},\tilde{t})\right)\Psi(\tilde{r},\tilde{t}) \tag{3.1}$$

com

$$\nabla_r^2\Phi = 4\pi\tilde{m}|\Psi(\tilde{r},\tilde{t})|^2\ . \tag{3.2}$$

Todos os resultados serão dados em termos das unidades reduzidas.

3.2 Método numérico

A equação (3.1) está escrita em termos das unidades reduzidas, mas, para simplificar a notação, nesta seção iremos substituir $\tilde{m} \to m$, $\tilde{t} \to t$ e $\tilde{r} \to r$.

Temos a equação

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi, \qquad \text{com} \tag{3.3}$$

$$H = -\frac{1}{2m}\nabla_r^2 + m\Phi. \tag{3.4}$$

Para um Hamiltoniano independente do tempo, a solução é dada por

$$\Psi(r,t) = e^{-iHt}\,\Psi(r,0). \tag{3.5}$$

Apesar de (3.4) ter uma dependência temporal, já que $\phi = \phi(r,t)$, supomos que a cada intervalo de tempo $\phi(t) = \phi$, ou seja, o potencial é constante no tempo e portanto podemos aplicar a solução (3.5).

Primeiro é necessário discretizar o tempo e o espaço, ou seja, escrevemos $t = n\Delta t$ e $r = j\Delta r$, onde n e j são inteiros e Δt e Δr são as discretizações no tempo e espaço, respectivamente. A função de onda é denotada como $\Psi_j^n = \Psi(r = j\Delta r, t = n\Delta t)$.

A forma explícita (e instável) FTCS (Forward Time Central Space) discretiza (3.5) como [6, 9]

$$\psi_j^{n+1} = (1 - iH\Delta t)\psi_j^n. \tag{3.6}$$

Por outro lado, o esquema implícito (estável) é dado por

$$\psi_j^{n+1} = (1 + iH\Delta t)^{-1}\psi_j^n. \tag{3.7}$$

Nenhuma dessas duas operações são unitárias, ou seja, não conservam probabilidade. A forma correta para diferenciar a equação SN é usando a Forma de Cayley, que consiste em uma média entre a forma explícita e a implícita do FTCS, para representar a diferenciação finita de e^{-iHt}, que é estável e unitária [9]:

$$e^{-iHt} \simeq \frac{1 - \frac{1}{2}iH\Delta t}{1 + \frac{1}{2}iH\Delta t}\,. \tag{3.8}$$

Discretizando a função de onda temos que $\Psi(r,t) \to \psi_j^{n+1}$ e $\Psi(0,t) \to \psi_j^n$ e, assim, a eq. (3.5) fica:

$$\left(1 + \frac{1}{2}iH\Delta t\right)\psi_j^{n+1} = \left(1 - \frac{1}{2}iH\Delta t\right)\psi_j^n. \tag{3.9}$$

Com manipulação algébrica, reescrevemos a equação (3.9) como

$$\psi^{n+1} = \left[2\left(I + i\frac{\Delta t}{2}H\right)^{-1} - I\right]\psi^n, \tag{3.10}$$

onde I é a matriz unitária. Assim, podemos definir a matriz tridiagonal Q

$$Q = \frac{1}{2}\left(I + i\frac{\Delta t}{2}H\right), \tag{3.11}$$

e a equação (3.10) pode ser simplificada como

$$\begin{aligned} \psi^{n+1} &= \left(Q^{-1} - I\right)\psi^n \\ &= \chi^n - \psi^n, \end{aligned} \tag{3.12}$$

onde $\chi^n = Q^{-1}\psi^n$.

3.2.1 Construindo Q

Para montar a matriz Q é necessário discretizar os dois termos do Hamiltoniano, o operador Laplaceano e o termo não linear Φ.

A componente radial do Laplaceano ∇_r^2 em coordenadas esféricas é dada por:

$$\nabla_r^2 = \begin{cases} \dfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r} & \text{se} \quad r > 0, \\ 3\dfrac{\partial^2}{\partial r^2} & \text{se} \quad r = 0, \end{cases} \tag{3.13}$$

que pode ser discretizada da seguinte forma:

$$\nabla^2 \Lambda_j^n = \begin{cases} \dfrac{1}{(\Delta r)^2}\left(\dfrac{j-1}{j}\Lambda_{j-1}^n - 2\Lambda_j^n + \dfrac{j+1}{j}\Lambda_{j+1}^n\right) & \text{se} \quad j > 0, \\ \dfrac{1}{(\Delta r)^2}\left(-6\Lambda_0^n + 6\Lambda_1^n\right) & \text{se} \quad j = 0. \end{cases} \tag{3.14}$$

O segundo termo do Hamiltoniano, Φ, é solução da equação de Poisson, equação (3.2). Aplicando o método de Green para resolver [11]:

$$\Phi = -\int_0^\infty G(r, r')|\Psi(r', t)|^2 dV' \tag{3.15}$$

onde $G(r, r')$ é a função de Green apropriada:

$$G(r, r') = \frac{1}{4\pi \max(r, r')}. \tag{3.16}$$

O resultado é dado por

$$\Phi = -4\pi m \left[\frac{1}{r}\int_0^r |\Psi(r', t)|^2 r'^2 dr' + \int_r^\infty |\Psi(r', t)|^2 r' dr'\right], \tag{3.17}$$

e essa expressão pode ser discretizada como

$$\phi_j^n = -4\pi m (\Delta r)^2 v_j^n, \tag{3.18}$$

com

$$v_j^n = \frac{1}{j}\sum_{i=0}^{j-1}|\Psi_i^n|^2 i^2 + \sum_{i=j}^{N-1}|\Psi_i^n|^2 i. \tag{3.19}$$

Agora que temos todas as partes do Hamiltoniano discretizado, podemos escrever a matriz Q da seguinte forma:

$$Q = \begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & 0 & ... \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & ... \\ 0 & a_2 & b_2 & c_2 & \\ \vdots & & & \vdots & ... \\ 0 & ... & & a_{N-1} & b_{N-1} \end{pmatrix}, \tag{3.20}$$

com

$$a_j = \beta\,\frac{j-1}{j} \quad \text{para} \qquad 0 < j \leq N-1, \tag{3.21}$$

$$b_0 = \frac{1}{2} - 6\beta - \gamma v_0, \qquad b_j = \frac{1}{2} - 2\beta - \gamma v_j \quad \text{para} \qquad 0 < j \leq N-1, \tag{3.22}$$

$$c_0 = 6\beta \qquad c_j = \beta\,\frac{j+1}{j} \quad \text{para} \qquad 0 < j < N-1, \tag{3.23}$$

e γ e β definidos como

$$\beta = -\frac{i}{8m}\frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} \qquad \text{e} \qquad \gamma = i\pi m^2(\Delta t)(\Delta r)^2. \tag{3.24}$$

Como a matriz Q (3.21) é tridiagonal, usamos o algoritmo de Thomas (útil para inversão de matrizes tridiagonais) para calcular Q^{-1} e assim estudar a evolução do sistema por interação da expressão (3.12).

3.3 Condições de contorno

Idealmente, o sistema estudado se encontra no espaço infinito, pois é unidimensional, com simetria radial e $r \in [0, \infty)$. Porém, para simulações numéricas, uma caixa infinita não é realizável. Logo, para contornar essa situação, definimos a fronteira exterior longe o suficiente da origem para evitar reflexão do pacote de onda na parede. Outra forma de evitar essa reflexão, critério utilizado pelo autor van Meter na referência [11], é usar condições de contorno de Neumann: a parte do pacote de onda que tocar a fronteira externa é eliminada da simulação.

A fim de manter a probabilidade unitária em todo o espaço, neste trabalho foi usada a primeira maneira; logo, o sistema é grande o suficiente para que o pacote de onda não

toque na parede. Na prática, para um sistema com tamanho L, a simulação acontece até o tempo em que a densidade de probabilidade radial associada à função de onda seja pequena na fronteira. Explicitamente, a simulação acontece durante $\rho(\tilde{r} = L) = 4\pi\tilde{r}^2|\Psi|^2 \leq 10^{-8}$.

Capítulo 4

Resultados

Serão apresentados, neste capítulo, os resultados da evolução temporal da equação de Schrödinger-Newton (3.1) usando as condições iniciais expressas na equação (2.4). A distância R entre os picos das duas Gaussianas é tratada como um parâmetro livre para podermos estudar sua correspondência com m_c.

4.1 Evolução da densidade de probabilidade

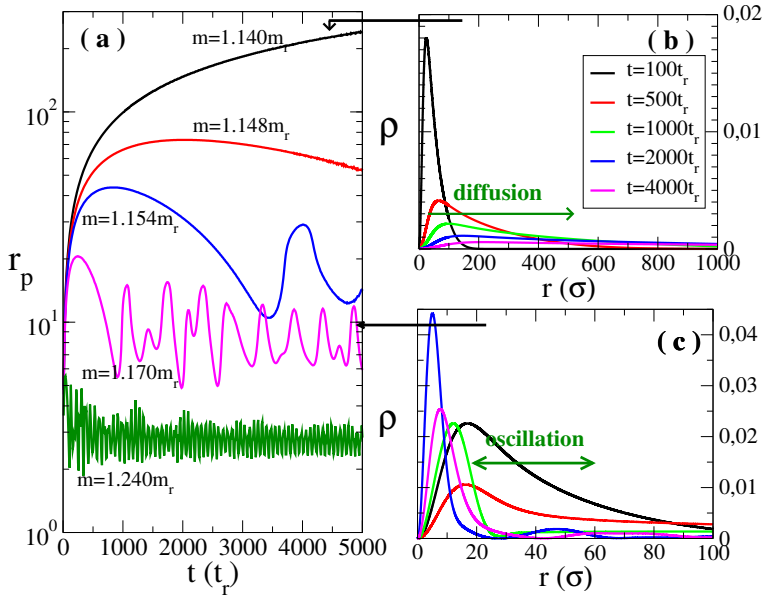

Figura 2: Resultados para $R = 0$. **(a)** Pico da densidade de probabilidade radial, r_p, em função do tempo, t_r, para diferentes massas. **(b)** Densidade de probabilidade radial (ρ) como função de r para $m = 1.14\ m_r$ a diferentes tempos. **(c)** Mesmo que **(b)**, mas com $m = 1.17\ m_r$. Distâncias e tempo em unidades de σ e t_r, respectivamente.

A Figura 2 descreve o comportamento do sistema em função do tempo para uma condição inicial particular com $R = 0$, ou seja, com o pico da Gaussiana centrada na

origem, equação (2.2). Esta figura apresenta dois resultados: no painel **(a)** temos r_p, posição do pico do pacote de onda, em função do tempo para diferentes massas e, em **(b)** e **(c)**, temos ρ em função da posição para diferentes tempos.

Na Figura 2, a legenda vale para os paineis **(b)** e **(c)**. A curva preta representa o primeiro tempo, a curva vermelha o segundo e assim por diante. Assim, notamos que no painel 2**(b)**, r_p para $m = 1.14\ m_r$ apenas aumenta a medida que passa o tempo, indicando que o pacote de onda está se dispersando. Esse fato é comprovado pelo painel 2**(a)**, pois esse também mostra um aumento da posição do pico do pacote de onda pelo tempo.

Por outro lado, a Figura 2**(c)** mostra que o pacote de onda com $m = 1.17\ m_r$ tendo um comportamento oscilatório. Esse fato também está representado na Figura 2**(a)**, onde r_p tem uma clara oscilação ao longo do tempo.

Estes resultados mostram dois regimes diferentes: (i) para m pequeno, vemos que o pacote de onda difunde e, (ii) para m grande, onde o pacote tem um comportamento oscilatório. Assim, podemos definir m_c como sendo o valor de massa para qual o sistema muda seu comportamento de difusivo para oscilatório.

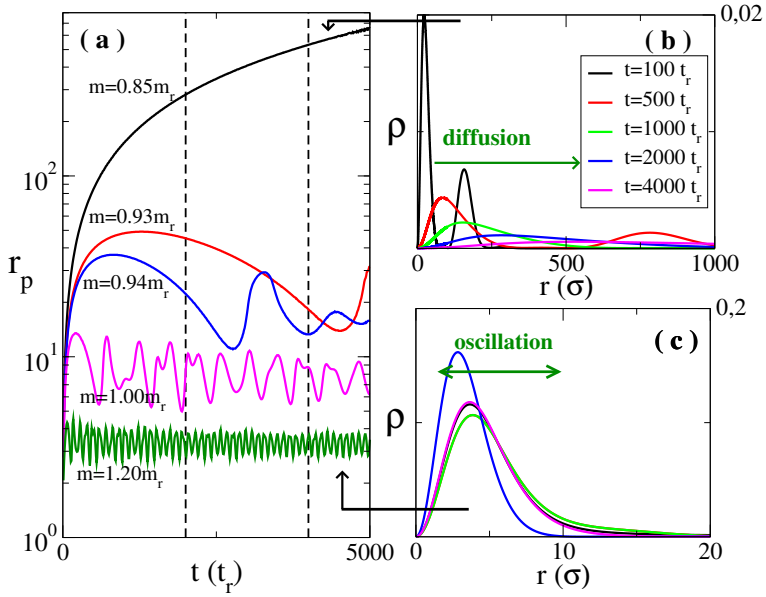

Figura 3: Resultados para $R = 5\sigma$. **(a)**: Dependência $r_p \times t_r$ para várias massas. As linhas verticais indicam o intervalo de tempo ΔT usado para medir $\langle r_p \rangle$. **(b)** e **(c)**: Densidade de probabilidade radial ρ para $m = 0.85 m_r$ e $m = 1.20 m_r$, respectivamente. Cada cor corresponde a um instante de tempo diferente.

Na Figura 3 é feita a mesma análise que na Figura 2 porém com CI diferente, como a eq. (2.4), ou seja, uma Gaussiana centrada na origem e a segunda centrada em $R = 5\sigma$. Qualitativamente, observamos que o comportamento das duas figuras é o mesmo. A diferença é *quantitativa*: a massa crítica m_c depende do valor de R.

Definição quantitativa de m_c. Acima, m_c foi definido como o menor valor de massa para o qual o comportamento do sistema é oscilatório. Porém, numericamente, essa definição é muito difícil de cumprir. Tendo em vista este fato, é necessário ter um critério para definir a massa crítica. É importante ressaltar que essa definição tem uma certa arbitrariedade, já que depende do intervalo de tempo ΔT usado para calcular a média de r_p, $\langle r_p \rangle$. Também precisamos ter certeza que o tamanho do sistema é grande o suficiente para que não haja interação do pacote de onda com a fronteira exterior. Para o sistema usado nas Figuras 2 e 3, $L = 10^4\sigma$, usamos 2000 $t_r \leq \Delta T \leq$ 4000 t_r. Esse intervalo é representado pelas linhas verticais na Figura 3**(a)**.

4.2 Calculando a média de r_p

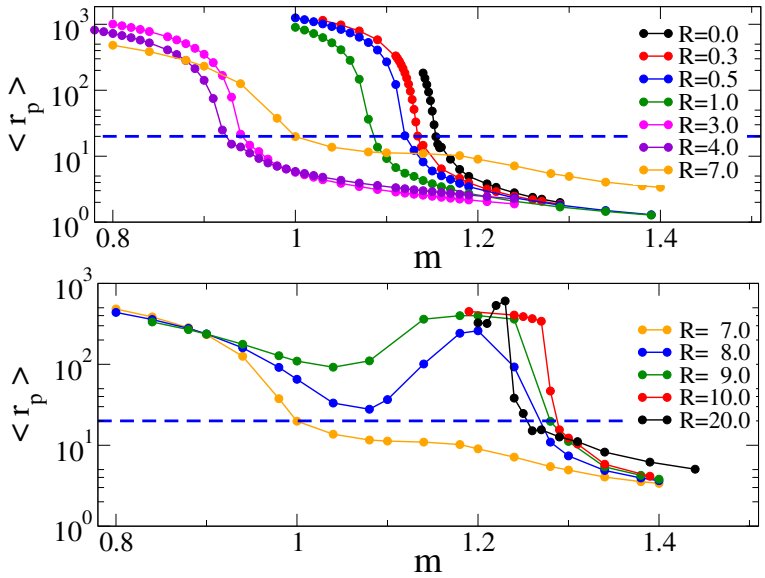

Figura 4: Valor médio de r_p *versus* m para várias condições iniciais (diferentes valores de R). A linha azul pontilhada é o limiar para definir m_c. $\langle r_p \rangle$ e R são medidos em unidades de σ e m em m_r.

Em seguida, simulamos distintas condições iniciais, ou seja, diferentes valores de R, para diversas massas. Assim, medimos o valor médio de r_p durante o intervalo ΔT e graficamos como função da massa para distintos R. Os resultados são mostrados na Figura 4.

Para todos os valores de R, a Figura 4 mostra um comportamento suave de $\langle r_p \rangle$ com m. Isto é, não existe uma modificação clara no comportamento de $\langle r_p \rangle$ para uma certa massa que sugerisse uma definição de m_c. Isso nos leva a adotar o seguinte critério para definir m_c quantitativamente. Analisamos para todos os R as curvas de r_p como função do tempo (como exemplificada nas Figuras 2-a e 3-a) e observamos que, independente

da condição inicial, quando r_p passa a uma distância de $\approx 20\sigma$ da origem, o pacote se dispersa e não é mais . Assim, definimos m_c como o valor de massa para o qual $\langle r_p \rangle = 20\sigma$ (linha tracejada azul na Figura 4).

4.3 Comparação numérico *versus* analítico

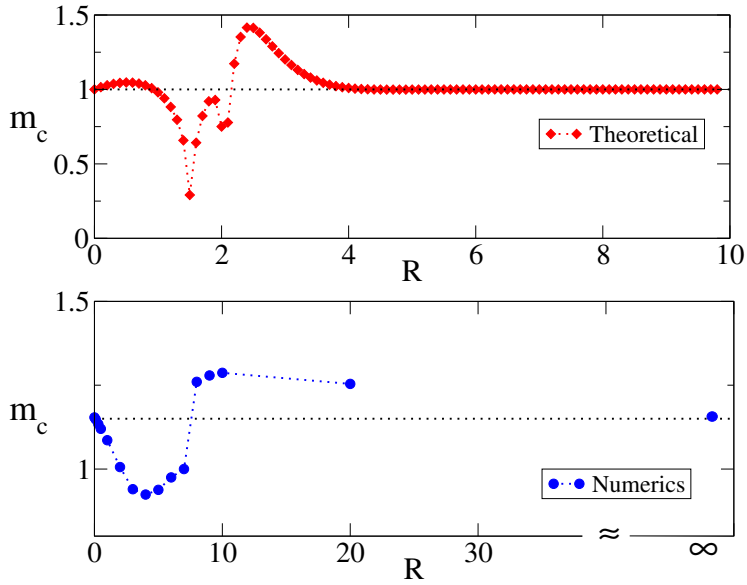

Figura 5: Massa crítica m_c em função da posição do pico da segunda Gaussiana R estimada teoricamente e calculada numericamente.

A Figura 5 resume o resultado principal deste trabalho. Ela mostra como o valor de m_c varia com R quando calculado entre 0 até ∞ por estimativa analítica e por simulações numéricas. Vemos que as duas curvas não apresentam concordância quantitativa. Por exemplo, no eixo das abcissas, R tem valores numéricos diferentes. Uma possível explicação é que a estimativa analítica não leva em conta a dinâmica do pacote de onda, usa apenas a condição inicial [1].

Apesar disso, a partir dos resultados da Figura 5, podemos inferir quatro conclusões importantes: i) m_c depende da condição inicial; ii) em particular, existe um valor mínimo de m_c, definido como m_c^{min}, menor que m_c encontrado para $R = 0$; iii) quando as duas Gaussianas estão muito longe entre si ($R \gg 1$), m_c recai para o valor no caso de uma Gaussiana ($R = 0$); e iv) m_c tem dependência não monotônica com R.

[1] Cálculo explicitado na seção (2.3.1)

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho foi estudado um modelo semi-clássico para melhor entender como a gravidade interage com a matéria. Este modelo consiste em ter uma distribuição de massa regida pela dinâmica quântica, sujeita a um potencial gravitacional autointeragente clássico. Essa situação é descrita pela equação de Schrödinger-Newton (2.1). Definimos a massa crítica, m_c, como o valor de massa onde os termos potencial e cinético do Hamiltoniano se equiparam. Numericamente, m_c foi definida como o menor valor de massa para o qual o comportamento do sistema é oscilatório.

Usando o método numérico explicitado no Capítulo 3, mais especificamente, o sistema (3.12), podemos obter a evolução temporal da função de onda Ψ. A partir de Ψ, obtemos também a densidade de probabilidade radial ρ e a posição do pico do pacote de onda r_p, Figuras 2 e 3. Essas quantidades são importantes para definirmos m_c numericamente.

Quando temos uma condição inicial formada por um pacote de onda Gaussiano centrado na origem, obtivemos analiticamente que $m_c \propto \sigma^{-1/3}$. Atualmente, existem experiências com interferômetros moleculares que conseguem chegar até $\sigma \sim 0.5\ \mu m$, que nos dá $m_c \sim 10^9\ u$. Porém, este valor de massa é muito grande se comparado aos valores atuais feitos em laboratório, $m \sim 10^3\ u$.

Levando em conta o problema citado acima, o próximo passo foi alterar a condição inicial e verificar se afetava m_c. Seguimos os mesmos passos para encontrar a estimativa analítica da massa crítica, mas agora com uma condição inicial que consiste em uma Gaussiana centrada na origem e outra Gaussiana centrada em R. Assim, encontramos a expressão que se encontra no Apêndice A.

A última Figura 5 nos mostra o resultado principal deste trabalho. Apesar de que as duas figuras não concordam *quantitativamente*, ela nos mostra bons resultados e, principalmente, vemos que *existe um valor de massa crítica mínimo quando a condição inicial consiste em duas Gaussianas*. Apesar disso, vemos que a CI proposta não é suficientemente boa, pois $m_c^{min} \approx 0.9\ m_c^{1G}$, ou seja, a massa crítica é apenas 10 %

menor do que no caso de uma condição inicial com uma Gaussiana.

A Figura 5 também nos mostra que m_c é uma função não monotônica de R. Considerando esta propriedade com o fato que encontramos um valor de massa crítica mínimo, nos dá a expectativa que exista uma condição inicial específica que reduza significativamente m_c.

Possíveis perspectivas futuras do trabalho seriam buscar novas condições iniciais que encontrem a m_c menor possível, como aumentar do número de pacotes Gaussianos ou usar outras funções como condição inicial. Todas essas modificações procuram encontrar m_c pequeno o suficiente para que haja esperança de, com a tecnologia atual ou futura, este modelo seja passível de experimentação.

Referências Bibliográficas

[1] Stephen L Adler. Comments on proposed gravitational modifications of schrödinger dynamics and their experimental implications. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 40(4):755, 2007.

[2] Markus Arndt, Anton Zeilinger, and Klaus Hornberger. Probing the limits of the quantum world. Physics World. 18:35–40, 2005.

[3] Steve Carlip. *Quantum gravity in 2+1 dimensions.* Cambridge University Press, 1998.

[4] Steve Carlip. Is quantum gravity necessary? *Class. Quant. Grav.*, 25:154010, 2008.

[5] Marcelo M Disconzi. Some a priori estimates for a critical Schrodinger–Newton Equation. *Electronic Journal of Differential Equations, Ninth MSU-UAB, Conference 20.*, pages 39–51, 2013.

[6] Alejandro L Garcia. *Numerical Methods for Physics.* Prentice Hall, 2006.

[7] Domenico Giulini and André Großardt. Gravitationally induced inhibitions of dispersion according to the Schrödinger–Newton Equation. *Classical and Quantum Gravity*, 28(19):195026, 2011.

[8] Michael B Green, John H Schwarz, and Edward Witten. *Superstring theory, vol. 1, 2.* Cambridge University Press, 1987.

[9] William H Press, Saul A Teukolsky, William T Vetterling, and Brian P Flannery. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing.* Cambridge University Press, 1992.

[10] Peter J Salzman and Steve Carlip. A possible experimental test of quantized gravity. *arXiv preprint gr-qc/0606120*, 2006.

[11] James R. van Meter. Schrödinger-Newton "collapse" of the wave function. *Class. Quant. Grav.*, 28:215013, 2011.

[12] Robert M Wald. *Quantum field theory in curved spacetime and black hole thermodynamics*. University of Chicago Press, 1994.

Apêndice A

Expressão analítica de m_c para CI com duas Gaussianas

A expressão para massa crítica obtida pelo método da seção (2.3.1) é

$$m_c = \left(\frac{A}{4B}\right)^{1/3} \tag{A.1}$$

onde

$$\begin{aligned}
A &= \hbar^2 r_p^3(0)\left(8e^{\frac{r_p^2(0)+R^2}{\sigma^2}} R\sigma^4\left(2r_p^4(0) - 7r_p^2(0)\sigma^2 + 3\sigma^4\right)\right) + \\
&+ 4e^{\frac{r_p^2(0)+R^2}{\sigma^2}}\sqrt{\pi}\sigma^3\left(2R^2+\sigma^2\right)\left(2r_p^4(0) - 7r_p^2(0)\sigma^2 + 3\sigma^4\right) \\
&+ 4e^{\frac{(r_p(0)+R)^2}{\sigma^2}}\sqrt{\pi}\sigma^5\left(2r_p^4(0) - 6r_p^3(0)R - 2R^2\sigma^2 + 3\sigma^4 + r_p^2(0)\left(6R^2 - 7\sigma^2\right)\right) \\
&+ 4e^{\frac{(r_p(0)+R)^2}{\sigma^2}}\sqrt{\pi}\sigma^5\left(r_p(0)\left(-2R^3 + 9R\sigma^2\right)\right) \\
&+ 4e^{\frac{r_p^2(0)+2R^2}{\sigma^2}}\sqrt{\pi}\sigma^3\left(2R^2+\sigma^2\right)\left(2r_p^4(0) - 7r_p^2(0)\sigma^2 + 3\sigma^4\right)\mathrm{Erf}(R/\sigma) \\
&+ e^{\frac{2r_p^2(0)+2r_p(0)R+3R^3}{2\sigma^2}}\pi^{1/4}\sqrt{\sigma^3}\Big(-8r_p^4(0)\left(R^2-\sigma^2\right) + 12r_p^3(0)\left(R^3 - 2R\sigma^3\right) \\
&+ r_p^2(0)\left(-6R^4 + 32R^2\sigma^2 - 56\sigma^4\right) + 2\sigma^2\left(R^4 - 4R^2\sigma^2 + 12\sigma^4\right) \\
&+ r_p(0)\left(R^5 - 16R^3\sigma^2 + 36R\sigma^4\right)\Big) \times \\
&\times \sqrt{\sigma\left(2e^{-\frac{R^2}{\sigma^2}} + \sqrt{\pi}\left(2R^2+\sigma^2\right) + \sqrt{\pi}\left(2R^2+\sigma^2\right)\mathrm{Erf}(R/\sigma)\right)}.
\end{aligned}$$

e

$$
\begin{aligned}
B &= G\sigma^6\Big(2e^{\frac{r_p^2(0)+R^2}{\sigma^2}}R\sigma^2\left(2r_p^4(0)-5r_p^2(0)\sigma^2+\sigma^4\right)\\
&+ e^{\frac{r_p^2(0)+2R^2}{\sigma^2}}\sqrt{\pi}\sigma\left(2R^2+\sigma^2\right)\left(2r_p^4(0)-5r_p^2(0)\sigma^2+\sigma^4\right)\\
&+ e^{\frac{(r_p(0)+R)^2}{\sigma^2}}\sqrt{\pi}\sigma^3\left(2r_p^4(0)-4r_p^3(0)R+4r_p(0)R\sigma^2+\sigma^4+r_p^2(0)\left(2R^2-5\sigma^2\right)\right)\\
&+ e^{\frac{r_p^2(0)+2R^2}{\sigma^2}}\sqrt{\pi}\sigma\left(2R^2+\sigma^2\right)\left(2r_p^4(0)-5r_p^2(0)\sigma^2+\sigma^4\right)\mathrm{Erf}(R/\sigma)\\
&+ e^{\frac{2r_p^2(0)+2r_p(0)R+3R^2}{\sigma^2}}\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{\sigma^3}\left(4r_p^4(0)-4r_p^3(0)R+4r_p(0)R\sigma^2+2\sigma^4+r_p^2(0)(R^2-10\sigma^2)\right)\times\\
&\quad\sqrt{\sigma\left(2e^{-\frac{R^2}{\sigma^2}}+\sqrt{\pi}\left(2R^2+\sigma^2\right)+\sqrt{\pi}\left(2R^2+\sigma^2\right)\mathrm{Erf}(R/\sigma)\right)}\Big).
\end{aligned}
$$