Trabalho Prático 4b.

Expansão de uma função em termos das funções

de onda para uma partícula numa caixa

Eq. 2

$$f(x)=\begin{cases} f(x)=x & 0\le x\le \dfrac{L}{2} \\ f(x)=L-x & \dfrac{L}{2}\le x\le L \end{cases}$$

Eq. 3

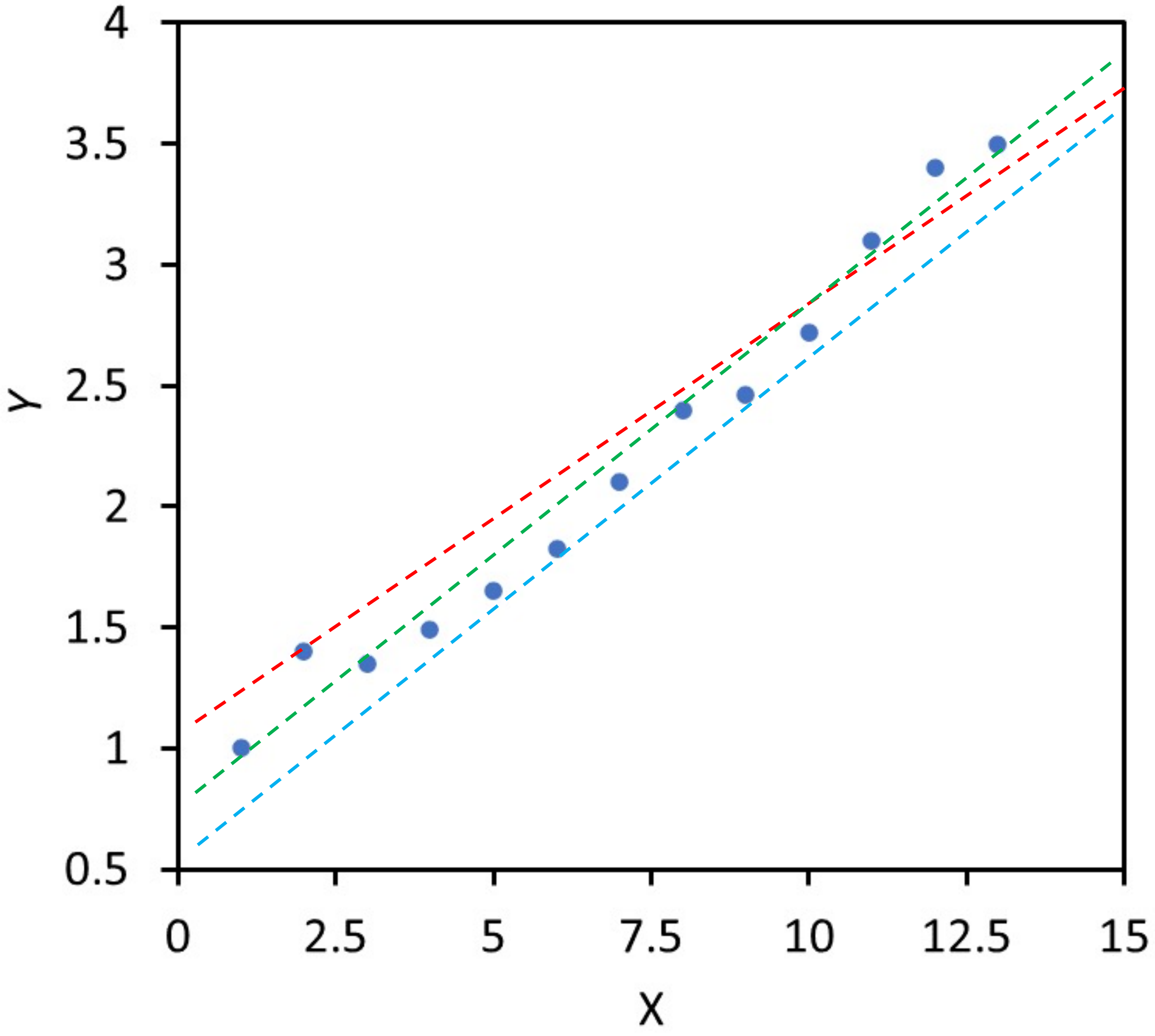
$$f(x)=\sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x)$$

1. Considerando uma caixa mono-dimensional unitária (i.e., $L = 1$), construa um programa em Python que:

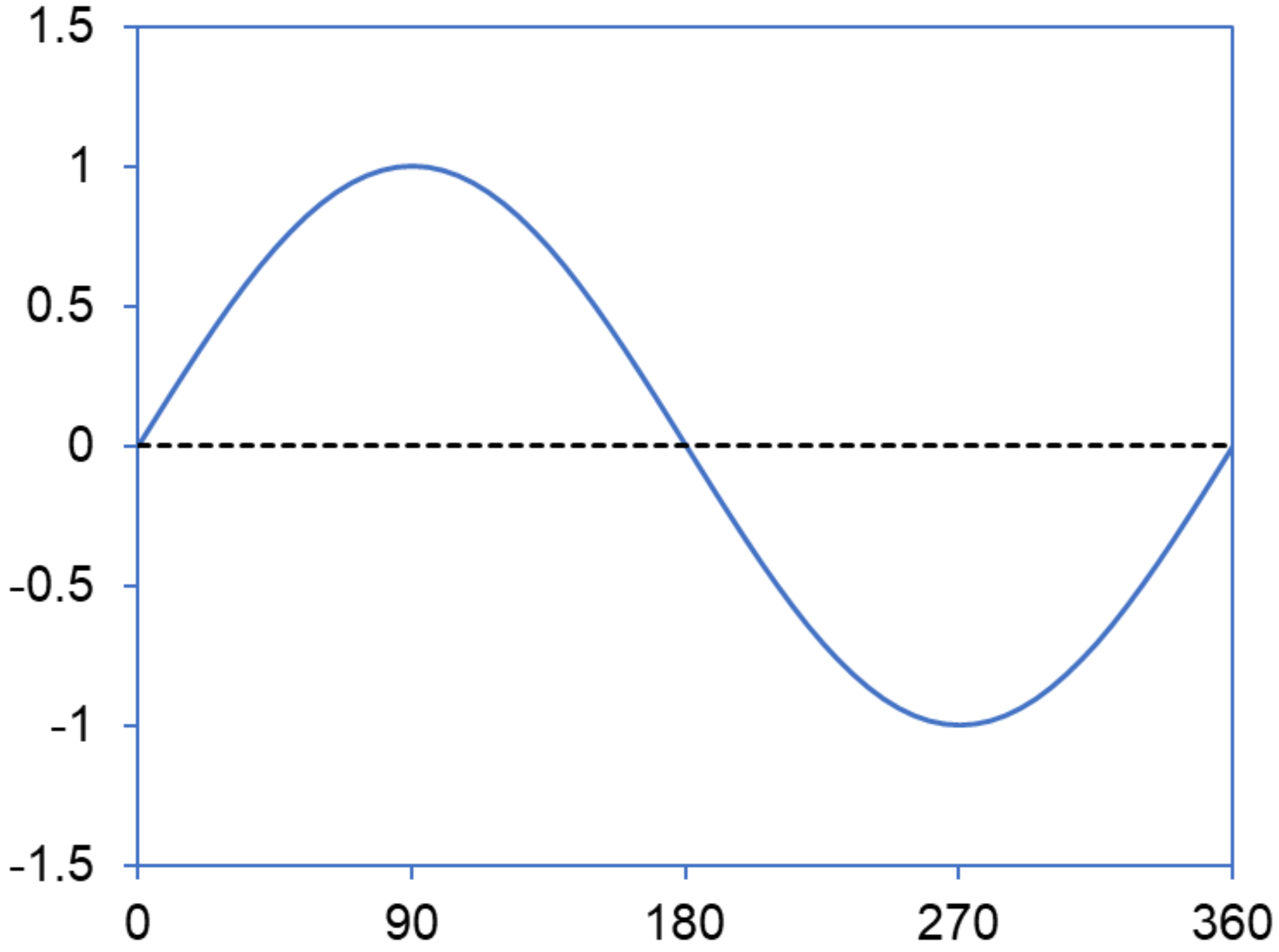
   a. Permita criar uma representação gráfica de $f(x)$ data pela equação 3 para diferentes valores de n.

   b. Utilize um critério para determinar o número de termos, n, no somatório da equação 3, necessários para obter uma representação aceitável de $f(x)$, e que indique o número de termos necessários para satisfazer essa condição.

   c. Que disponibilize os dados calculados de forma a que seja possível representar graficamente os resultados da equação 3 em função de n, e a sua comparação com a função exata $f(x)$ (equação 2).

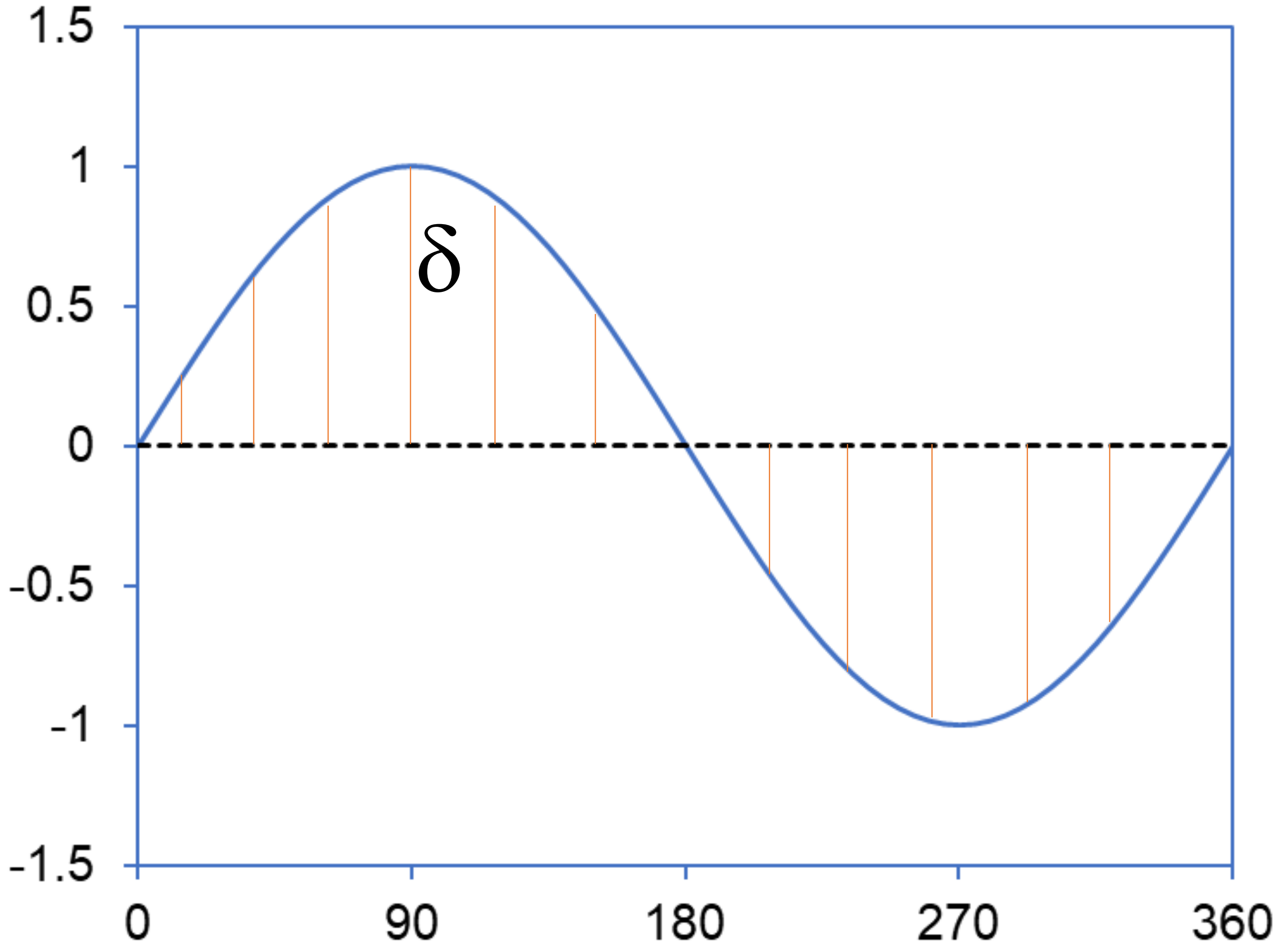


Y
X
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
0
2.5
5
7.5
10
12.5
15



$$f^*(x) = \sin(\theta)$$

$$f(x) = 0$$

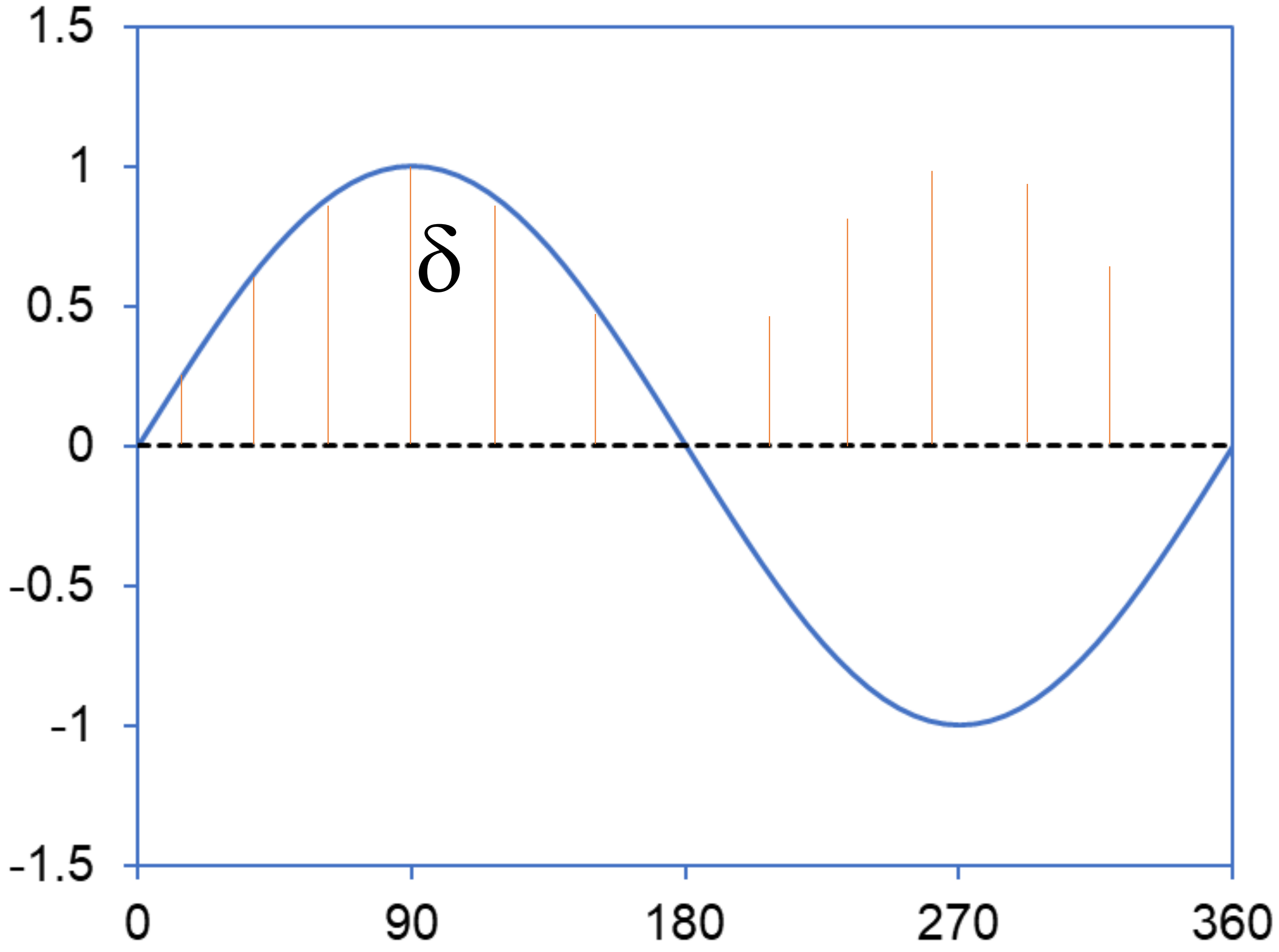


$$f^*(x) = \sin(\theta)$$

$$f(x) = 0$$

$$Erro = \sum\left(f^*(x) - f(x)\right)$$

$$Erro = 0$$



$$f^*(x) = \sin(\theta)$$

$$f(x) = 0$$

$$Erro = \sum \left| f^*(x) - f(x) \right|$$

$$Erro = \sum \left(f^*(x) - f(x) \right)^2$$

$$Erro > 0$$

$$f(x)=\begin{cases} f(x)=x & 0\le x\le \dfrac{L}{2} \\ f(x)=L-x & \dfrac{L}{2}\le x\le L \end{cases}$$

$$f^*(x)=\sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x)$$

$$Erro=\sum\left(f^*(x)-f(x)\right)^2$$

Procuramos assim o valor de *n* para o qual o erro é menor de que um dado valor (e.g., 0.01).

Calcular os valores de $f(x)$ dados pela Eq. 2 em intervalos de Δx = 0.01, e guarda-los numa lista1 (array)

$$f(x) = \begin{cases} f(x) = x & 0 \le x \le \dfrac{L}{2} \\ f(x) = L - x & \dfrac{L}{2} \le x \le L \end{cases} \qquad (2)$$

Criar uma lista2 (array) que guarda os valores do somatório na eq. 3 à medida que n aumenta

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) \qquad (3)$$

Definir n = 0 ; *Erro* = 100?!

Enquanto Erro > 0.01

Devolver os Resultados!?

n = n +1

Calcular o valor de $f(x)$ no somatório

Calcular o *Erro* entre os resultados dados pelas funções, i.e. lista1 e lista2.