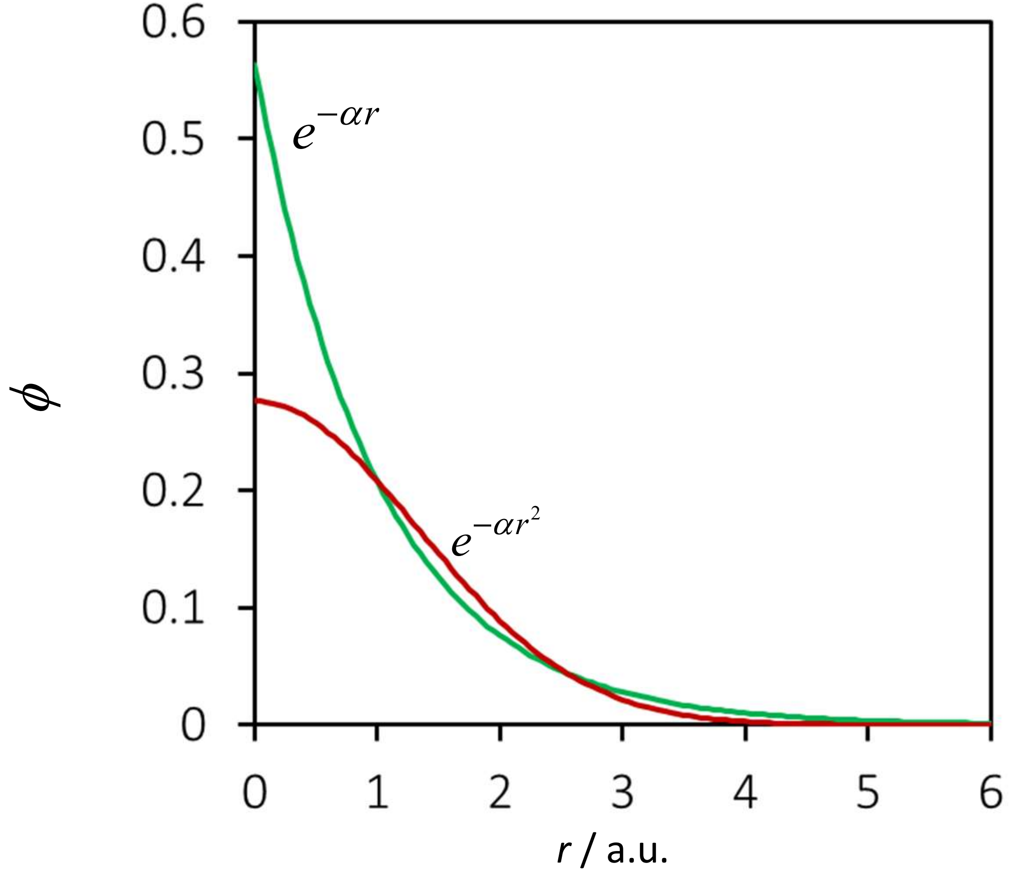
Trabalho Prático 3.

Expansão de uma função em termos das funções

de onda para uma partícula numa caixa


0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
ϕ
$e^{-\alpha r}$
$e^{-\alpha r^2}$
0
1
2
3
4
5
6
r / a.u.

Objetivo:

Pegar na função de onda para o problema de uma partícula numa caixa:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

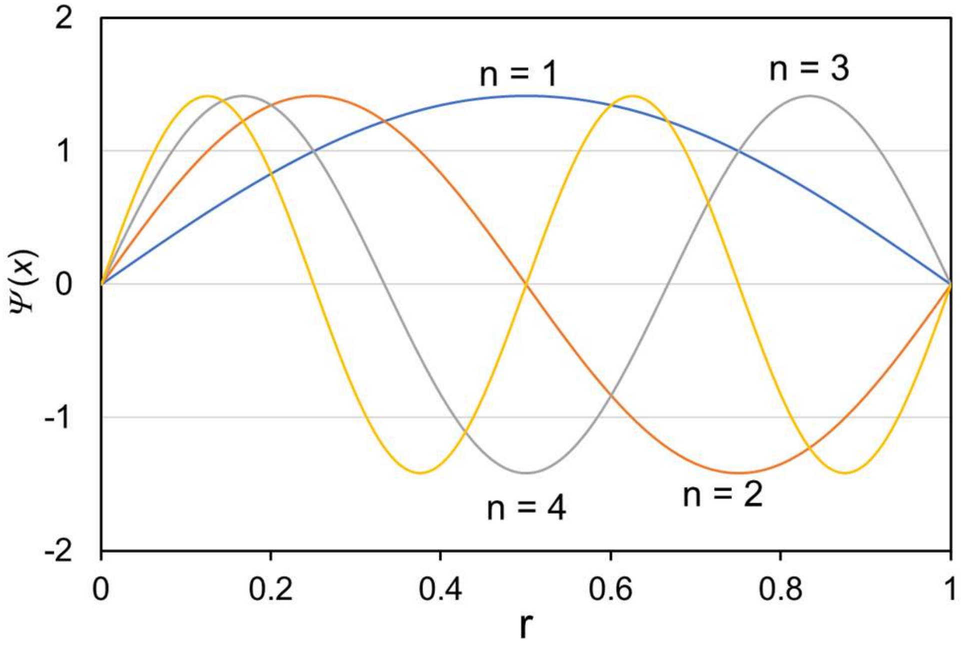
e transformá-la numa função *f*(x):

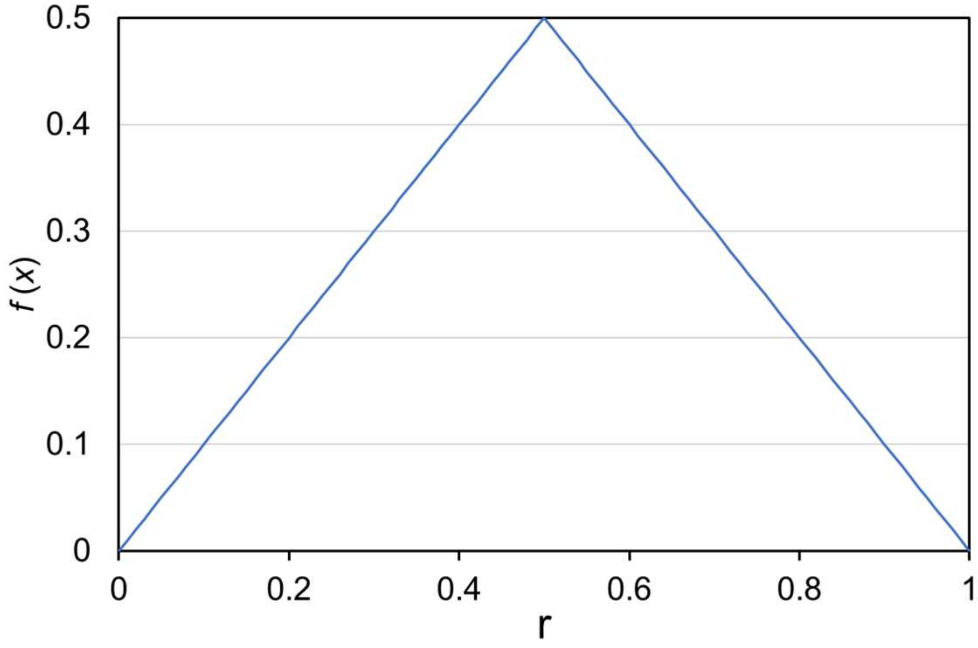
$$\begin{cases} f(x) = x & 0 \le x \le \dfrac{L}{2} \\ f(x) = L - x & \dfrac{L}{2} \le x \le L \end{cases}$$

Por outras Palavras!!!!

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

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





Para o efeito utilizamos uma expansão de uma função, i.e., uma combinação linear de funções dadas por:

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

Verifique que as funções de onda para uma partícula numa caixa são ortonormais, i.e.

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_0^L \psi_n^*(x)\ \psi_m(x)\ dx = \delta_{nm} \qquad (3)$$

Se $n = m$ então $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 1$

Se $n \neq m$ então $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0$

Demonstre que os coeficientes da expansão (2) são dados por:

$$a_n = \int_0^L \psi_n^*(x)\, f(x)\, dx \tag{4}$$

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

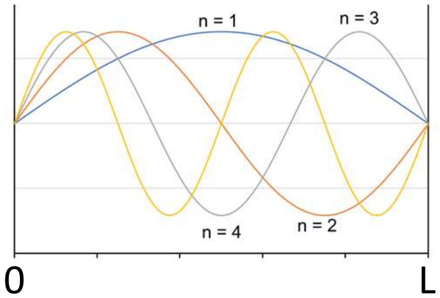
$$\langle a| = \sum_i a_i^* \langle i| \Longrightarrow \langle a|j\rangle = \sum_i a_i^* \underbrace{\langle i|j\rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_i a_i^* \delta_{ij} = a_j^*$$

A. Szabo, N.S. Ostlund; "*Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Theory*." McGraw-Hill (1996), p.11.

Verifique que $f(x)$ satisfaz as mesmas condições fronteira de $\psi_n(x)$.

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

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



Verifique que

$$a_n = \frac{(2L)^{3/2}}{(n\pi)^2} \mathrm{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

$$\boxed{a_n = \int_0^L \psi_n^*(x)\, f(x)\, dx}$$

Escreva a representação para a expansão (2) em termos de um número finito n de funções base (e.g. $n = 7$). O que se pode concluir?

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