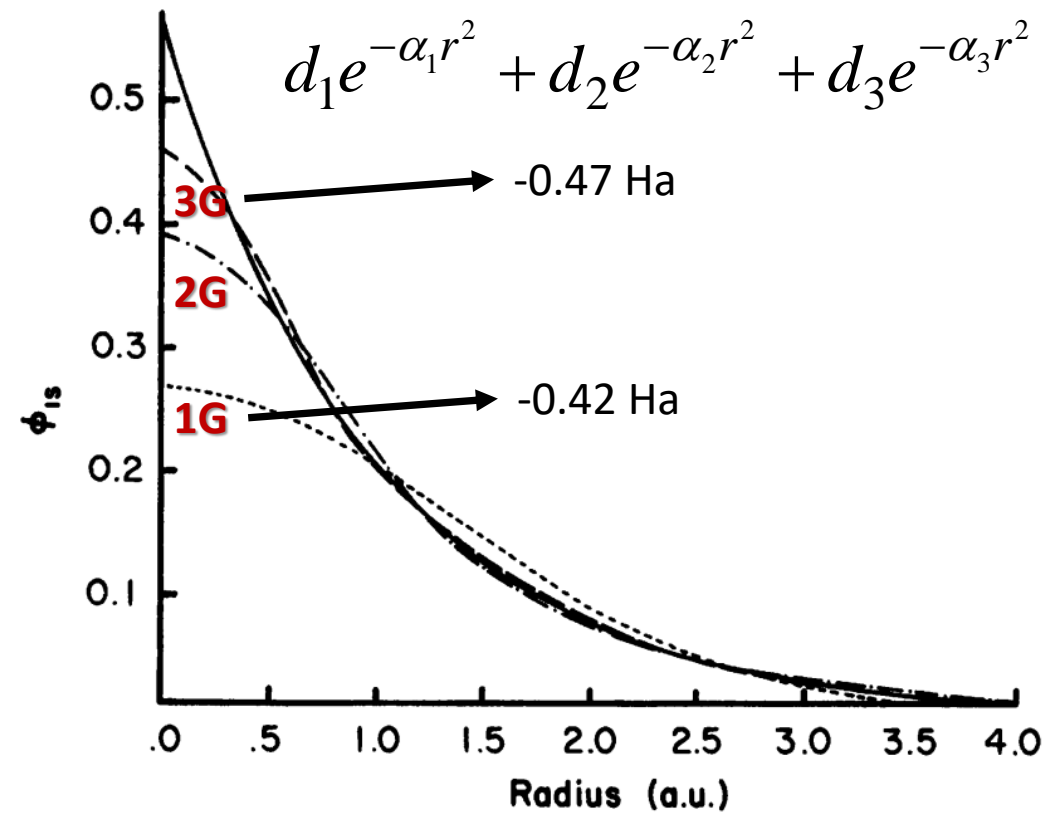
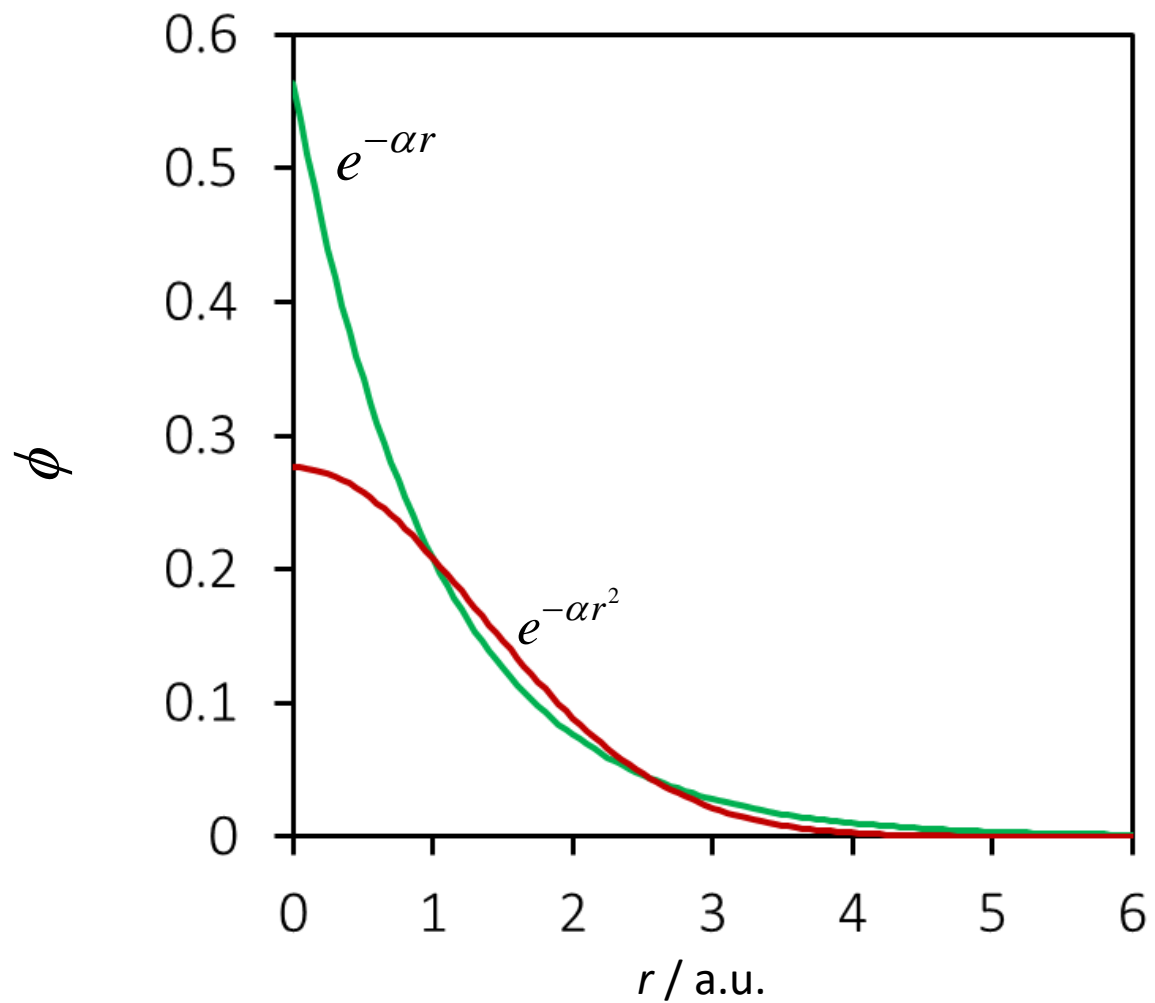


# **Trabalho Prático 4.**

Expansão de uma função em termos das funções  
de onda para uma partícula numa caixa



Attila Szabo and Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Publications Inc., New York, 1996.

## Objetivo:

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

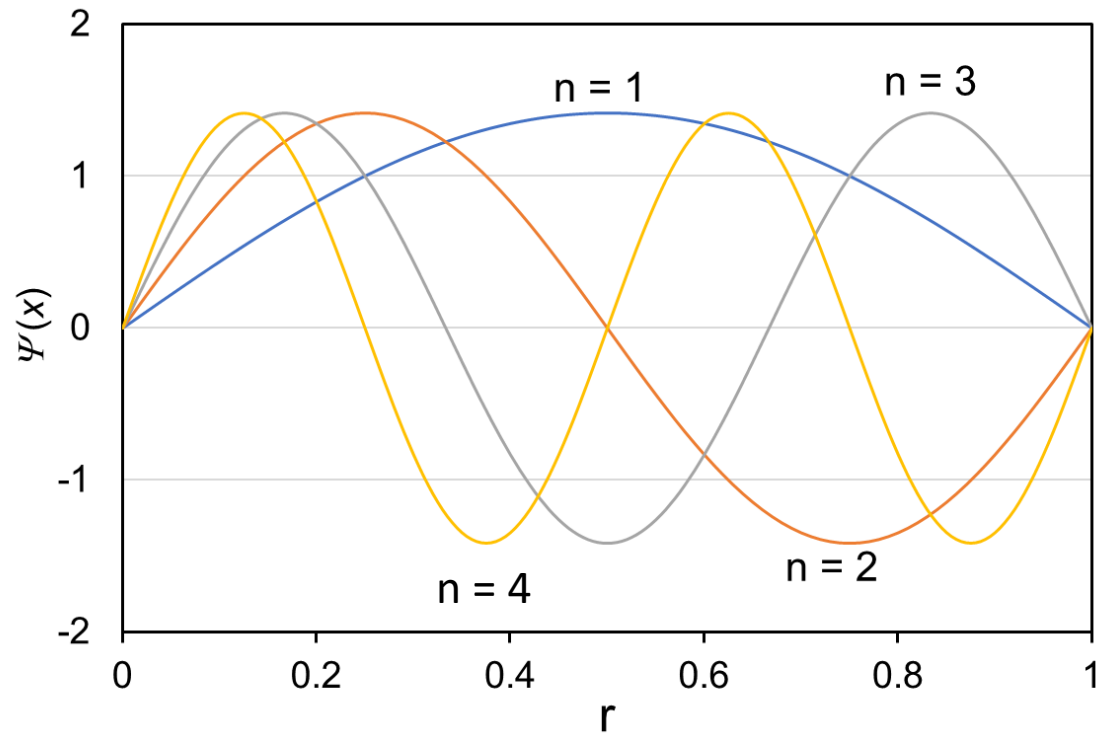
$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

e transformá-la numa função  $f(x)$ :

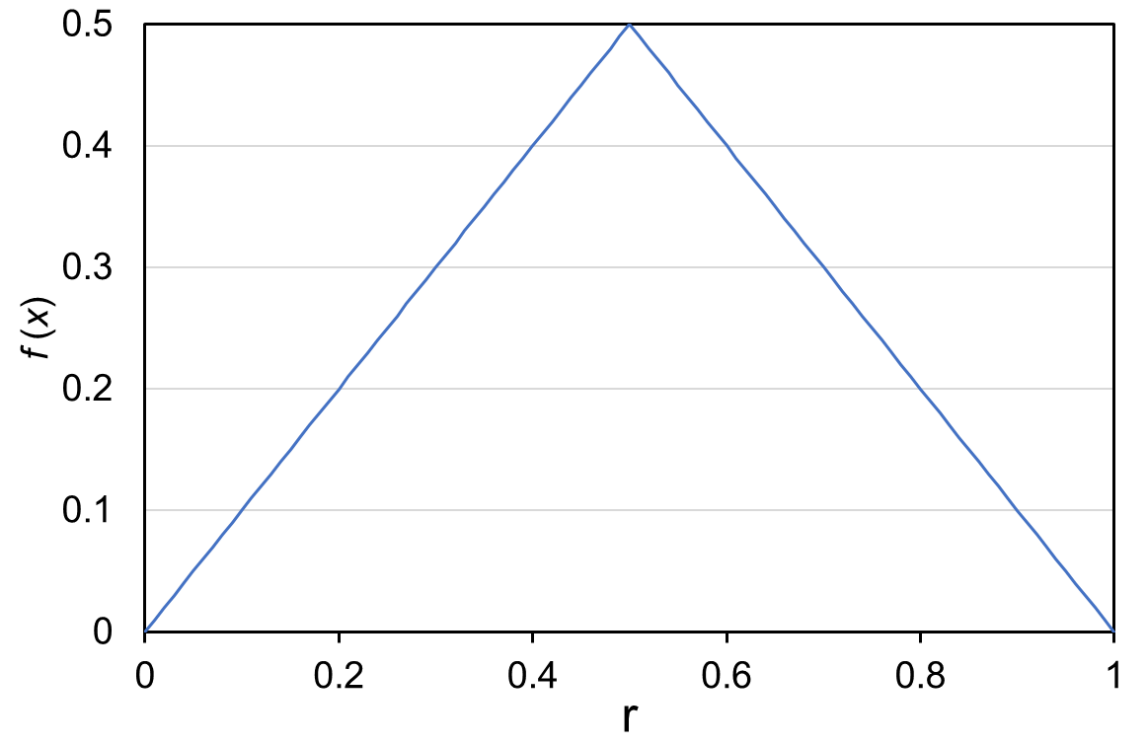
$$f(x) = \begin{cases} f(x) = x & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ f(x) = L - x & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}$$

# Por outras Palavras!!!!

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



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



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.

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

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:

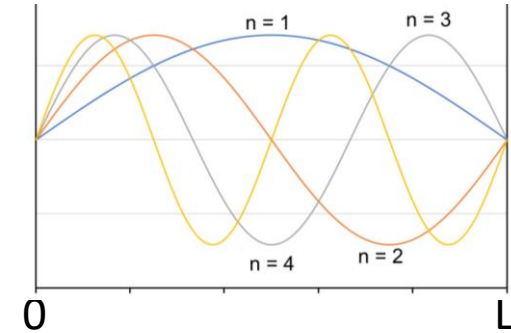
$$a_n = \int_0^L \psi_n^*(x) f(x) dx \quad (4)$$

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

$$|a\rangle = \sum_i |i\rangle a_i \quad \longrightarrow \quad \langle j|a\rangle = \sum_i \langle j|i\rangle a_i = \sum_i \delta_{ji} a_i = a_j$$

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

$$\begin{cases} f(x) = x & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ f(x) = L - x & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases} \quad \psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



Verifique que

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

$$a_n = \int_0^L \psi_n^*(x) f(x) dx$$



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?

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

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

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