

Química Computacional (2020-2021)

Trabalho Prático 3b. Expansão de uma função em termos das funções de onda para uma partícula numa caixa.

De acordo com o trabalho 3a a função de onda, solução da equação de Schrödinger para o problema de uma partícula numa caixa mono-dimensional de comprimento L , é dada por:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

e pode ser utilizada para representar a função $f(x)$ no intervalo $0 \leq x \leq L$:

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

considerando:

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

onde

$$a_n = \frac{(2L)^{3/2}}{(n\pi)^2} \text{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right) \quad (4)$$

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

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

2. Faça a comparação gráfica dos dados calculados anteriormente e discuta o que é possível concluir à medida que aumenta o número de termos no somatório da equação 3?