SÉRIES DE TAYLOR E DE MACLAURIN

- VAMOS ASSUMIR QUE UMA CERTA FUNÇÃO $f(x)$ PODE SER EXPANDIDA COMO UMA SÉRIE DE POTÊNCIAS.

$$\boxed{f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + \dots}$$

- VAMOS ENCONTRAR OS COEFICIENTES DA EXPANSÃO AO REDOR DO PONTO $x=0$.

$$\boxed{f(0) = c_0}$$

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = c_1 + 2c_2 x + 3c_3 x^2 + \dots$$

$$\boxed{f'(0) = c_1} \therefore \boxed{c_1 = \frac{f'(0)}{1}}$$

$$f''(x) = \frac{d^2 f(x)}{dx} = 2c_2 + 3 \cdot 2\, c_3 x + \dots$$

$$\boxed{f''(0) = 2c_2} \therefore \boxed{c_2 = \frac{f''(0)}{2}}$$

$$f'''(x) = 3 \cdot 2 \cdot c_3 + \dots$$

$$\boxed{f'''(0) = 3 \cdot 2 \cdot c_3} \therefore \boxed{c_3 = \frac{f'''(0)}{3 \cdot 2}}$$

- ASSIM

$$\boxed{f(x) = f(0) + \left(\frac{df(x)}{dx}\right)_{x=0} \cdot x + \frac{1}{2!}\left(\frac{d^2 f(x)}{dx^2}\right)_{x=0} x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3 f(x)}{dx^3}\right)_{x=0} \cdot x^3 + \dots}$$

SÉRIE DE MACLAURIN ⇒ PERMITE EXPRESSAR FUNÇÕES AO REDOR DO PONTO $x=0$ (SOB CERTAS CONDIÇÕES) COMO SÉRIES DE POTÊNCIAS

• VAMOS DEFINIR UMA NOVA VARIÁVEL $y = x - x_0$. NESTE CASO, VAMOS EXPANDIR (VEJA QUE $x_0 = CTE$):

$$\boxed{f(x)} = \boxed{\sum_{i=0}^{\infty} c_i (x - x_0)^i} = \boxed{\sum_{i=0}^{\infty} c_i\, y^i} = \boxed{f(y)} = c_0 + c_1 y + c_2 y^2 + c_3 y^3 + \cdots$$

$$\boxed{\frac{dy}{dx}} = \frac{d(x-x_0)}{dx} = \frac{dx}{dx} - \frac{dx_0}{dx} = \boxed{1}$$

0

$$\boxed{dy = dx}$$

$\boxed{f(x) = f(y)}$ DESDE QUE OS PONTOS x E y SEJAM CORRESPONDENTES

• VAMOS ENCONTRAR OS COEFICIENTES DA EXPANSÃO PRÓXIMO DE $x = x_0$ $(y=0)$:

$$\boxed{y = 0} = x - x_0 \Rightarrow \boxed{x = x_0}$$

$$\boxed{f(x = x_0) = f(y=0) = c_0}$$

• $\dfrac{df(y)}{dy} = c_1 + 2c_2 y + 3c_3 y^2 + \cdots$

$$\boxed{\left(\frac{df(y)}{dy}\right)_{y=0} = c_1} \quad \text{MAS} \quad \boxed{\left(\frac{df(y)}{dy}\right)_{y=0} = \left(\frac{df(x)}{dx}\right)_{x=x_0}}$$

• $\dfrac{d^2f(y)}{dy^2} = 2c_2 + 3 \cdot 2c_3 y + \cdots$

$$\boxed{\left(\frac{d^2f(y)}{dy^2}\right)_{y=0} = 2c_2} \quad \text{MAS} \quad \boxed{\left(\frac{d^2f(y)}{dy^2}\right)_{y=0} = \left(\frac{d^2f(x)}{dx^2}\right)_{x=x_0}}$$

ASSIM:

$$\boxed{f(x) = f(y) = f(y=0) + \left(\frac{df(y)}{dy}\right)_{y=0} y + \frac{1}{2!}\left(\frac{d^2f(y)}{dy^2}\right)_{y=0} y^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3f(y)}{dy^3}\right)_{y=0} y^3 + \cdots}$$

$$\boxed{f(x) = f(x_0) + \left(\frac{df(x)}{dx}\right)_{x=x_0} (x-x_0) + \frac{1}{2!}\left(\frac{d^2f(x)}{dx^2}\right)_{x=x_0} (x-x_0)^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3f(x)}{dx^3}\right)_{x=x_0} (x-x_0)^3 + \cdots}$$

SÉRIE DE TAYLOR $\Rightarrow$ PERMITE EXPRESSAR FUNÇÕES AO REDOR DE UM PONTO $x = x_0$ COMO SÉRIES DE POTÊNCIAS

EX: EXPANDA A FUNÇÃO $f(x) = e^x$ COMO SÉRIE DE MACLAURIN

$$f(x) = f(0) + \left(\frac{df(x)}{dx}\right)_{x=0} x + \frac{1}{2!}\left(\frac{d^2 f(x)}{dx^2}\right)_{x=0} x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3 f(x)}{dx^3}\right)_{x=0} x^3 + \cdots$$

TODAS AS DERIVADAS DE $e^x \Rightarrow e^x$

$f(0) = e^0 = 1$

$f'(0) = e^0 = 1$

$f''(0) = e^0 = 1$

$$\boxed{e^x} = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots = \boxed{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}}$$

EX: EXPANDA A FUNÇÃO $f(x) = \text{sen}(x)$ COMO SÉRIE DE MACLAURIN

$$f(x) = f(0) + \left(\frac{df(x)}{dx}\right)_{x=0} x + \frac{1}{2!}\left(\frac{d^2 f(x)}{dx^2}\right)_{x=0} x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3 f(x)}{dx^3}\right)_{x=0} x^3 + \cdots$$

$f(0) = \text{sen}(0) = 0$

$f'(x) = \cos(x) \therefore f'(0) = \cos(0) = 1$

$f''(x) = -\text{sen}(x) \therefore f''(0) = -\text{sen}(0) = 0$

$f'''(x) = -\cos(x) \therefore f'''(0) = -\cos(0) = -1$

$f''''(x) = \text{sen}(x) \therefore f''''(0) = \text{sen}(0) = 0$

$f'''''(x) = \cos(x) \therefore f'''''(0) = \cos(0) = 1$

$$\boxed{\text{sen}(x) = 1 \cdot x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 + \cdots}$$

$$\text{sen}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

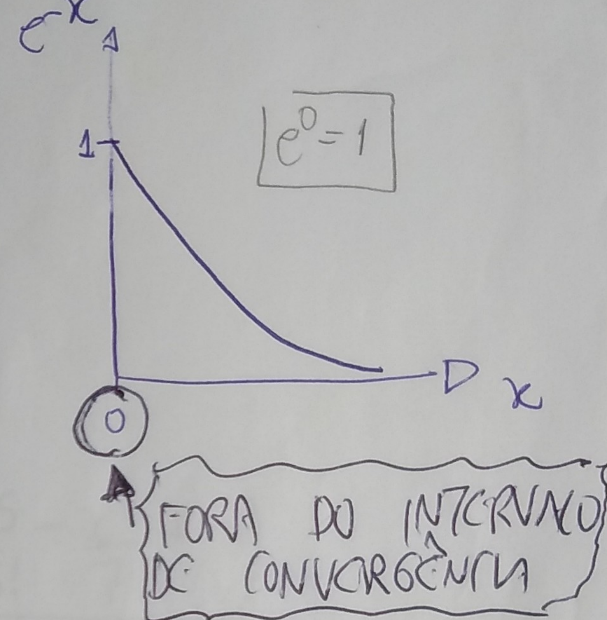
APLICAÇÕES DE SÉRIES

① CÁLCULO DE INTEGRAIS:

$$\boxed{I = \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}\,dx} \quad \times \left(\frac{e^{-x}}{e^{-x}}\right)$$

• ASSIM:

$$I = \int_0^\infty \frac{x^3 \cdot e^{-x}}{1 - e^{-x}}\,dx$$



MAS:

$$\boxed{\frac{1}{1-t} = \sum_{n=0}^\infty t^n} \qquad \text{SE} \qquad |t| < 1$$

• VEJA QUE $e^{-x} < 1$ SE x É POSITIVO, COMO INDICADO PELOS LIMITES DA INTEGRAL. ENTÃO:

$$I = \int_0^\infty x^3 e^{-x} \cdot \frac{1}{1-e^{-x}}\,dx = \int_0^\infty x^3 e^{-x} \cdot \sum_{n=0}^\infty (e^{-x})^n\,dx$$

$$I = \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty x^3 e^{-x} (e^{-x})^n\,dx = \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty x^3 (e^{-x})^{n+1}\,dx = \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty x^3 \cdot e^{-x(n+1)}\,dx$$

$$\boxed{\int_0^\infty x^p e^{-a x}\,dx = \frac{p!}{a^{p+1}}} \qquad \boxed{\begin{array}{l} p = 3 \\ a = (n+1) \end{array}}$$

$$I = \sum_{n=0}^\infty \frac{3!}{(n+1)^4} = 6 \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(n+1)^4} = 6 \sum_{m=1}^\infty \frac{1}{m^4} = \boxed{6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4}} = \boxed{\frac{\pi^4}{15}}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} m = n+1 \\ n = m-1 \end{array}}$$

$$\Updownarrow$$

$$\boxed{\sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}}$$

② DETERMINAÇÃO DE LIMITES:

EX: AVALIE O RESULTADO DO SEGUINTE LIMITE USANDO (a) A REGRA DE l'HÔPITAL E (b) A SÉRIE DE MACLAURIN

$$\boxed{l = \lim_{x \to 0} \frac{\operatorname{sen} x}{x} = \frac{0}{0}}$$ (INDETERMINADO)

(a) REGRA DE l'HÔPITAL:

$$\boxed{\lim \frac{f(x)}{g(x)} = \lim \frac{f'(x)}{g'(x)}}$$

$$\boxed{l} = \lim_{x \to 0} \frac{\operatorname{sen} x}{x} = \lim_{x \to 0} \cos x = \boxed{1}$$

(b) $$l = \lim_{x \to 0} \frac{\operatorname{sen} x}{x} = \lim_{x \to 0} \frac{\left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots\right)}{x}$$

$$\boxed{l} = \lim_{x \to 0} \left(1 - \frac{x^2}{3!} + \frac{x^4}{5!} - \frac{x^6}{7!} + \cdots\right) = \boxed{1}$$

EX: TEORIA DE EINSTEIN PARA A CAPACIDADE CALORÍFICA DE UM CRISTAL

$$\boxed{C_V = 3R\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{-\Theta_E/T}}{\left(1-e^{-\Theta_E/T}\right)^2}}$$

$R \to$ CTE DOS GASES

$\Theta_E \to$ TEMP. DE EINSTEIN (CONSTANTE)

MOSTRE QUE ESTA EQUAÇÃO ESTÁ DE ACORDO COM O LIMITE DE DULONG E PETIT ($C_V \to 3R$) EM ALTAS TEMPERATURAS.

• VAMOS SUBSTITUIR:

$$\boxed{\frac{\Theta_E}{T} = x}$$

$$C_V = 3R\, x^2 \frac{e^{-x}}{(1-e^{-x})^2}$$

$$\boxed{\lim_{T\to\infty} C_V = \lim_{x\to 0} C_V = \frac{0}{0} = ?}$$

• VEJA QUE $x \to 0$ EM ALTAS TEMPERATURAS.

$$e^{x} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots \qquad \boxed{x \to -x}$$

ENTÃO:

$$\boxed{e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!} + \dots = 1 - x + O(x^2)}$$

TERMOS QUE DEPENDEM DE x^2 E DE MAIORES POTÊNCIAS

$$C_V = 3R\,x^2 \frac{1-x+O(x^2)}{[1-(1-x+O(x^2))]^2} = 3Rx^2 \frac{[1-x+O(x^2)]}{[x+O(x^2)]^2}$$

$$\boxed{\lim_{T\to\infty} C_V} = \lim_{x\to 0} C_V = \lim_{x\to 0}\left(3Rx^2 \cdot \left(\frac{1-x+O(x^2)}{x^2+O(x^3)}\right)\right) = \lim_{x\to 0}\left(3R\cancel{x^2}\,\frac{1}{\cancel{x^2}}\right) = \boxed{3R}$$

REGRA DE SELEÇÃO DE ESPECTRO VIBRACIONAL INFRAVERMELHO

- MOMENTO DE TRANSIÇÃO $(i \to f)$ PARA MOLÉCULA DIATÔMICA:

$$\boxed{M_T = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x)\, \hat{\mu}\, \psi_f(x)\, dx}$$

$\psi_i^* \Rightarrow$ FUNÇÃO DE ONDA DO ESTADO INICIAL (COMPLEXO CONJUGADO)

$\psi_f \Rightarrow$ FUNÇÃO DE ONDA DO ESTADO FINAL

$\hat{\mu} \Rightarrow$ OPERADOR DO MOMENTO DE DIPOLO

AS FUNÇÕES $\psi_{VIB} \to 0$ QUANDO x SE AFASTA DA ORIGEM

ONDE $\boxed{x = r - r_e}$

$r_e \Rightarrow$ DISTÂNCIA DE EQUILÍBRIO (CTE)

- O MOMENTO DE TRANSIÇÃO É PROPORCIONAL À INTENSIDADE DA BANDA
- PARA ESTIRAMENTO (USANDO SÉRIE DE TAYLOR):

$$\hat{\mu}(x) = \mu_e + \left(\frac{d\mu}{dx}\right)_{x=0} \cdot x + \frac{1}{2!}\left(\frac{d^2\mu}{dx^2}\right)_{x=0} \cdot x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{d^3\mu}{dx^3}\right)_{x=0} \cdot x^3 + \dots$$

$\boxed{\text{ONDE: } \mu_e = \mu(x=0)}$

- ASSIM

$$M_T = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \mu_e \psi_f\, dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \left(\frac{d\mu}{dx}\right)_{x=0} \cdot x\, \psi_f\, dx + \dots$$

- MAS:

$\mu_e = CTE$

$\left(\frac{d\mu}{dx}\right)_{x=0} = CTE$

$$\boxed{\left(\frac{d^n\mu}{dx^n}\right)_{x=0} = CTES}$$

FUNÇÕES ORTOGONAIS

- ENTÃO, TRUNCANDO A SÉRIE NO SEGUNDO TERMO:

$$M_T \approx \mu_e \underbrace{\cancel{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j\, dx}}_{\boxed{0}} + \left(\frac{d\mu}{dx}\right)_{x=0} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* x\, \psi_j\, dx$$

$$M_T \approx \left(\frac{d\mu}{dx}\right)_{x=0} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* x\, \psi_j\, dx$$

- VEJA QUE $M_T = 0$ SE $\left(\frac{d\mu}{dx}\right)_{x=0} = 0$ (MOLÉCULAS DIATÔMICAS HOMONUCLEARES)