Matematica – C.d.L. in Tecnologie Chimiche per l'Ambiente e per la Gestione dei Rifiuti

23. 1. 2008

1. L'energia potenziale $V(r)$ di una molecola biatomica dipende dalla distanza r dei due atomi e può essere modellato con la funzione di Morse
$$V(r) = D(1 - e^{-a(r-r_0)})^2,$$
dove r_0 è la distanza all'equilibrio, D è l'energia di dissociazione e a è una costante che controlla la larghezza del potenziale. Per il NaCl si hanno $D = 3,7$ eV, $r_0 = 2,5$ Å, $a = 0,6\text{Å}^{-1}$.
$1\,\text{eV}$ (elettronvolt) $= 1,60217646 \cdot 10^{-19}$ J, 1 Å (ångström) $= 10^{-10}$ m.
   (a) Calcolare $\lim_{r\to+\infty} V(r)$.
   (b) Trovare il minimo e il punto di flesso di $V(r)$.
   (c) Calcolare il polinomio di Taylor di $V(r)$ del secondo grado e di centro r_0.
   (d) Attorno al suo minimo si può approssimare l'energia potenziale con una parabola, cioè $V(r) \approx \frac{1}{2}k(r-r_0)^2$, dove k è la costante di forza del legame tra i due atomi. Si usi il risultato di (c) per calcolare k (in Jm^{-2}) di NaCl.
   (e) Rappresentare approssimativamente in un grafico l'andamento del potenziale di Morse di NaCl, indicando esplicitamente sul grafico la scala e i valori dei parametri.

2. Calcolare gli integrali: (a) $\displaystyle\int_0^2 \frac{1}{4+\frac{1}{2}x}\,dx$, (b) $\displaystyle\int_1^3 \frac{1}{x\sqrt{4+x^2}}\,dx$, (c) $\displaystyle\int_0^{+\infty} xe^{-x}\,dx$.

   Suggerimento: per (b) si usi la sostituzione $t = \sqrt{4+x^2}$.

3. Calcolare la soluzione $y = y(x)$ del seguente problema di Cauchy:
$$\begin{cases} y'' + 2y' + 5y = 0 \\ y(0) = 0 \\ y'(0) = 6\,. \end{cases}$$

4. Si consideri la funzione
$$z = f(x,y) = x^2 + y^2 + 2y - 1, \quad (x,y) \in \mathbf{R}^2\,.$$
   (a) Disegnare la curva di livello della funzione f per la quota $z = 2$.
   (b) Calcolare il gradiente della funzione f (in un punto generico).
   (c) Trovare i minimi e i massimi relativi della funzione f.

5. Calcolare numericamente gli integrali definiti degli esercizi 2a e 2b, utilizzando sia il metodo dei trapezi sia il metodo di Simpson. Esprimere i risultati sia nella forma di un numero razionale che di un numero decimale con almeno 6 cifre dopo la virgola.

Matematica – C.d.L. in Tecnologie Chimiche per l'Ambiente e per la Gestione dei Rifiuti 23. 1. 2008

1. L'energia potenziale $V(r)$ di una molecola biatomica dipende dalla distanza r dei due atomi e può essere modellato con la funzione di Morse

$$V(r) = D(1 - e^{-a(r-r_0)})^2,$$

dove r_0 è la distanza all'equilibrio, D è l'energia di dissociazione e a è una costante che controlla la larghezza del potenziale. Per il NaCl si hanno $D = 3,7$ eV, $r_0 = 2,5$ Å, $a = 0,6\text{Å}^{-1}$.
1 eV (elettronvolt) $= 1,60217646 \cdot 10^{-19}$ J, 1 Å (ångström) $= 10^{-10}$ m.

   (a) Calcolare $\lim_{r \to +\infty} V(r)$.
   (b) Trovare il minimo e il punto di flesso di $V(r)$.
   (c) Calcolare il polinomio di Taylor di $V(r)$ del secondo grado e di centro r_0.
   (d) Attorno al suo minimo si può approssimare l'energia potenziale con una parabola, cioè $V(r) \approx \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$, dove k è la costante di forza del legame tra i due atomi. Si usi il risultato di (c) per calcolare k (in Jm^{-2}) di NaCl.
   (e) Rappresentare approssimativamente in un grafico l'andamento del potenziale di Morse di NaCl, indicando esplicitamente sul grafico la scala e i valori dei parametri.

2. Calcolare gli integrali: (a) $\displaystyle\int_0^2 \frac{2}{3 + \frac{1}{3}x}\,dx$, (b) $\displaystyle\int_1^3 \frac{1}{\sqrt{x^2+4}}\,dx$, (c) $\displaystyle\int_3^{+\infty} \frac{1}{x^2-4}\,dx$.

   Suggerimento: per (b) si usi la sostituzione $t = x + \sqrt{x^2+4}$.

3. Calcolare la soluzione $y = y(x)$ del seguente problema di Cauchy:

$$\begin{cases} y'' - 2y' + 17y = 0 \\ y(0) = 0 \\ y'(0) = 4\,. \end{cases}$$

4. Si consideri la funzione

$$z = f(x, y) = 1 - x^2 - y^2 - 2y, \quad (x, y) \in \mathbf{R}^2\,.$$

   (a) Disegnare la curva di livello della funzione f per la quota $z = -2$.
   (b) Calcolare il gradiente della funzione f (in un punto generico).
   (c) Trovare i minimi e i massimi relativi della funzione f.

5. Calcolare numericamente gli integrali definiti degli esercizi 2a e 2b, utilizzando sia il metodo dei trapezi sia il metodo di Simpson. Esprimere i risultati sia nella forma di un numero razionale che di un numero decimale con almeno 6 cifre dopo la virgola.