C.d.L. in Chimica e Tecnologie per l'Ambiente e per i Materiali, curriculum Ambiente, Energia, Rifiuti 10. 11. 2010

1. Calcolare i seguenti limiti:

   (a) $\lim_{x\to 1} \frac{1+\cos \pi x}{x^2-2x+1}$, (b) $\lim_{x\to 0^+} \frac{x}{\ln x}$, (c) $\lim_{x\to 0^+} x^2 \ln x$,

   (d) $\lim_{x\to 0^+} (\operatorname{sen} x)^x$, (e) $\lim_{x\to 0} \left(\frac{1}{e^x-1} - \frac{1}{x}\right)$, (f) $\lim_{x\to +\infty} \left(\frac{x^2+3x}{x^2+1}\right)^x$.

2. Scrivere lo sviluppo in serie di Taylor della funzione
$$f(x) = x^4 - 2x^3 + 2x^2 - 7x + 1$$
prendendo come punto iniziale $x_0 = 2$.

3. Scrivere lo sviluppo in serie di Taylor della funzione $f(x) = \ln x$ prendendo come punto iniziale $x_0 = 1$.

4. Calcolare un'approssimazione della soluzione dell'equazione
$$x - \cos x = 0$$
sostituendo la funzione $\cos x$ con il suo polinomio di Taylor $T_2(x) = T_3(x)$ di punto iniziale $x_0 = 0$. Valutare l'errore che si commette approssimando $f(x) = \cos x$ con il polinomio $T_3(x)$, per $0 < x < 1$, cioè trovare una maggiorazione del valore assoluto del resto secondo Lagrange $R_3(x)$, $0 < x < 1$.

5. Determinare i minimi e massimi relativi e i punti di flesso delle funzioni:

   (a) $f(x) = x^3 - 3x^2 - 9x$; (b) $f(x) = 1 + \frac{x}{2} + \frac{2}{x}, \quad x \neq 0$;

   (c) $f(x) = \sqrt{x}\, \ln \frac{1}{x}, \quad x > 0$; (d) $f(x) = 2\cos x + \cos 2x$.

6. 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, $a = 0,6 \text{Å}^{-1}$.

   Nota: 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 $T_2(r)$ di $V(r)$ scegliendo come 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. Calcolare k (in Jm^{-2}) di NaCl usando $T_2(r)$.

   (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.