Proposta per l’elaborato di matematica e fisica

Per lo studente

Atomo di idrogeno, studio di funzione e distribuzioni di probabilità

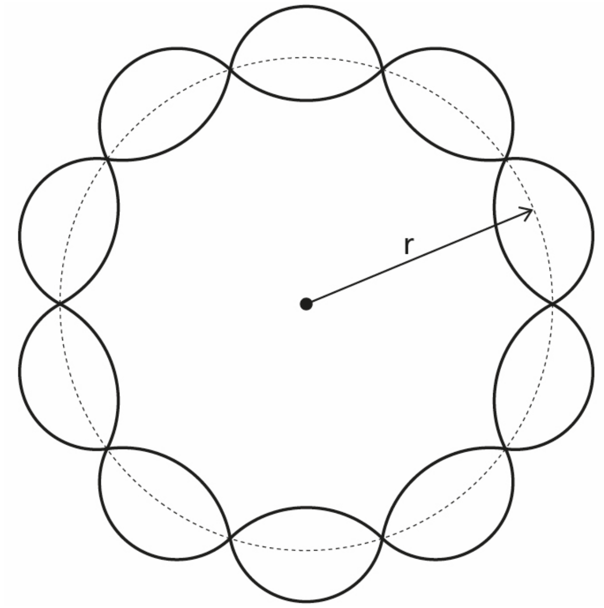
Rifletti sulla teoria

- Definisci la distribuzione di probabilità di una variabile aleatoria.
- Definisci gli integrali impropri su un intervallo illimitato. Fornisci un esempio di funzione il cui integrale improprio su un intervallo illimitato è convergente e uno di funzione il cui integrale improprio su un intervallo illimitato diverge a $-\infty$.
- Spiega il metodo di integrazione per parti.
- Descrivi la struttura dell’atomo di idrogeno con il modello di Bohr.
- Spiega il concetto di onda stazionaria e il dualismo onda-particella.
- Distingui i concetti di orbita e orbitale

Mettiti alla prova

1. Nel modello semiclassico dell’atomo di Bohr, l’elettrone gira attorno al nucleo su orbite quantizzate. Mostra come è possibile ricavare il raggio di Bohr e calcolane il valore r_B.

2. Assumi per l’elettrone una struttura ondulatoria stazionaria come in figura e verifica l’ipotesi di quantizzazione di Bohr.



3. Nel modello ondulatorio di Schrödinger, la densità di probabilità di “trovare l’elettrone nello stato fondamentale ($n = 1$) alla distanza r dal nucleo” è data dalla funzione

$$p(r) = \frac{4}{r_B^3} r^2 e^{-\frac{2r}{r_B}}.$$

Studia la funzione $p(r)$, senza calcolare la derivata seconda e verifica che il massimo della funzione coincide con il raggio di Bohr.

4. Calcola l’area sottesa dalla curva e verifica che è uguale a 1. Commenta il significato fisico del risultato.

Prosegue >>

Possibili integrazioni multidisciplinari

- A seguito dell'occupazione tedesca della Danimarca durante la Seconda guerra mondiale, Niels Bohr fuggì con il figlio negli Stati Uniti dove entrò nell'orbita del **Progetto Manhattan**. Qual è stato il ruolo del *Progetto Manhattan* nel conflitto mondiale?
  Descrivi e commenta l'*Obiettivo 16: Pace, giustizia e istituzioni forti* dell'**Agenda 2030**.
- Niels Bohr e Werner Heisenberg sono due dei tre protagonisti dell'**opera teatrale** *Copenhagen* di Michael Frayn. Confronta l'approccio di Frayn, Brecht e Dürrenmatt al tema della **responsabilità etica** degli scienziati.

Prosegue >>

Per l'insegnante

Possibili domande da fare durante il colloquio

In sede d'esame, per verificare l'effettiva comprensione della parte teorica, si possono fare allo studente le seguenti domande.

- Perché, a differenza del modello planetario di Rutherford, il modello atomico di Bohr è definito semiclassico?
- Spiega perché l'orbita dell'elettrone intorno al nucleo forma un'onda stazionaria e introduci l'ipotesi di De Broglie.
- Enuncia il teorema di De L'Hospital. Fai un esempio di limite in cui è utile applicare tale teorema.
- Definisci la distribuzione di probabilità normale.
- Definisci gli integrali impropri di funzioni con un numero finito di punti di singolarità. Fornisci un esempio di funzione il cui integrale improprio di questo tipo è convergente e uno di funzione il cui integrale improprio di questo tipo diverge a $+\infty$.

Traccia di svolgimento del *Mettiti alla prova*

1. **Ricavare il raggio di Bohr.**

   Secondo l'ipotesi di Bohr deve valere:
   $$|m\vec{v} \times \vec{r}| = n\frac{h}{2\pi}.$$
   Inoltre, dalla condizione di equilibrio sappiamo che deve valere:
   $$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}.$$
   Possiamo quindi confrontare le due espressioni:
   $$v^2 = \frac{n^2h^2}{4\pi^2m^2r^2}, \quad v^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mr} \quad \rightarrow \quad r = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi me^2} \cdot n^2.$$
   Per $n = 1$ ricaviamo $r_B = 5{,}29 \cdot 10^{-11}$ m.

2. **Verifica dell'ipotesi di quantizzazione di Bohr.**

   Dall'ipotesi di De Broglie deve valere
   $$\lambda = \frac{h}{mv}.$$
   Inoltre, dalla circolarità dell'orbita di Bohr sappiamo che
   $$2\pi r = n\lambda \ \rightarrow \ \lambda = \frac{2\pi r}{n}.$$
   Osserviamo che uguagliando le espressioni di λ ricaviamo:
   $$\frac{h}{mv} = \frac{2\pi r}{n} \ \rightarrow \ |m\vec{v} \times \vec{r}| = n\frac{h}{2\pi}.$$

3. **Studiamo la funzione $p(r)$.**

   Poiché r_B è una costante, la funzione $p(r) = \frac{4}{r_B^3} r^2 e^{-\frac{2r}{r_B}}$ può essere riscritta come
   $$p(r) = br^2e^{-ar},$$
   dove $a = \frac{2}{r_B}$ e $b = \frac{4}{r_B^3}$ sono due costanti positive.

   <u>Dominio</u>

   Il dominio naturale della funzione è $\mathbb{R}$, ma dal significato fisico della variabile possiamo assumere come dominio l'intervallo $[0; +\infty[$.

   <u>Segno della funzione</u>

   La funzione è sempre positiva e si annulla nell'origine, quindi:
   $$p(r) > 0 \ \rightarrow \ r > 0 \quad \wedge \quad p(r) = 0 \ \rightarrow \ r = 0.$$

Prosegue >>

Limiti agli estremi del dominio

Dobbiamo calcolare il limite per $r \to +\infty$. Si tratta di una forma indeterminata del tipo $0 \cdot \infty$, possiamo applicare il teorema De L'Hospital scrivendo il limite come rapporto:

$$\lim_{r\to+\infty} p(r) = \lim_{r\to+\infty} br^2e^{-ar} = \lim_{r\to+\infty} \frac{br^2}{e^{ar}} = \lim_{r\to+\infty} \frac{2br}{ae^{ar}} = \lim_{r\to+\infty} \frac{2b}{a^2e^{ar}} = 0.$$

La funzione ha un asintoto orizzontale destro di equazione $y = 0$.

Derivata prima e studio del segno della derivata prima

Calcoliamo la derivata prima della funzione:

$$p'(r) = bre^{-ar}(2 - ar).$$

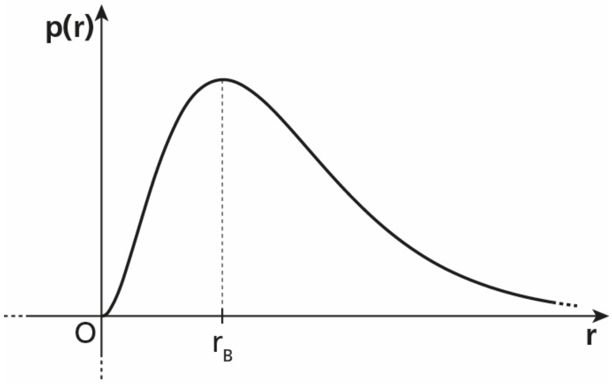
La derivata si annulla per $r = 0$ e per $r = \frac{2}{a}$ ed è positiva per $0 < r < \frac{2}{a}$.

La funzione ammette un punto di massimo relativo per $r = \frac{2}{a} = r_B$. Osserviamo che dato il comportamento agli estremi il punto è di massimo assoluto. Quindi, la funzione ammette un massimo per un valore di r pari al raggio di Bohr.

Inoltre, per $r = 0$ la funzione ammette un minimo relativo.

Grafico della funzione

Tracciamo il grafico qualitativo della funzione.



4. Calcolo dell'area.

Per calcolare l'area sottesa dal grafico nell'intervallo $[0; +\infty[$ dobbiamo calcolare l'integrale improprio:

$$\int_0^{+\infty} p(r)\ dr = \int_0^{+\infty} br^2e^{-ar}\ dr.$$

Procediamo applicando la formula di integrazione per parti ripetutamente:

$$\int_0^{+\infty} br^2e^{-ar}\ dr = b\int_0^{+\infty} r^2e^{-ar}\ dr = b\lim_{k\to+\infty}\int_0^k r^2e^{-ar}\ dr =$$

$$b\lim_{k\to+\infty}\left\{\left[-\frac{1}{a}r^2e^{-ar}\right]_0^k - \left(-\frac{1}{a}\right)\int_0^k 2re^{-ar}\ dr\right\} =$$

$$b\lim_{k\to+\infty}\left\{\left[-\frac{1}{a}r^2e^{-ar} - \frac{2}{a^2}re^{-ar}\right]_0^k + \frac{2}{a^2}\int_0^k e^{-ar}\ dr\right\} =$$

$$b\lim_{k\to+\infty}\left\{-\frac{1}{a}k^2e^{-ak} - \frac{2}{a^2}ke^{-ak} - \frac{2}{a^3}\left[e^{-ar}\right]_0^k\right\} =$$

$$b\lim_{k\to+\infty}\left\{-\frac{1}{a}k^2e^{-ak} - \frac{2}{a^2}ke^{-ak} - \frac{2}{a^3}e^{-ak} + \frac{2}{a^3}\right\} =$$

$$b\cdot\frac{2}{a^3} = \frac{4}{r_B^3}\cdot\frac{2}{\frac{8}{r_B^3}} = 1.$$

Prosegue >>

Il calcolo dell'integrale improprio conferma che la probabilità di trovare l'elettrone in tutto lo spazio, ovvero per valori di $r \in [0; +\infty[$, è uguale a 1. Quindi, la particella si trova in qualche punto tra il nucleo e l'infinito.
Il risultato classico, cioè l'orbita di Bohr, esprime la distanza a cui è più probabile rinvenire l'elettrone. La regione in cui questa probabilità è sensibilmente diversa da 0 esprime l'orbitale sferico 1s.