

PERCORSI DIDATTICI

Atom in a box

di: **Isidoro Sciarratta**

scuola: **Università di Udine**

area tematica: **Scienze**

pensato per: **15 - 18**

Introduzione

La proposta “Modelli, scienze e computer nell’insegnamento della Scuola Secondaria Superiore” nasce dal desiderio di volere presentare a tutti i colleghi che insegnano le materie scientifiche di vario genere la presenza di tutta una gamma di applicazioni, per la verità poco note, ma nello stesso tempo molto utili per la didattica delle Scienze. Sono poco note prima di tutto perché nascono, in genere, oltre oceano, ed in secondo luogo perché a crearli sono semplicemente dei colleghi i cui lavori, ovviamente, non sono sorretti da una propaganda così capillare come avviene per i programmi industriali. Non di meno questi programmi risultano, per noi docenti, molto utili in quanto sono atti a rendere sicuramente più proficuo, più interessante e quindi più stimolante l’insegnamento delle varie discipline a carattere scientifico.

Essi presentano nella stragrande maggioranza dei casi un basso costo ed in alcune occasioni sono addirittura liberi. Peraltro quasi sempre l’efficacia didattica di questi prodotti, preparati con lo scopo di superare taluni nodi concettuali e/o di rendere attraente e stimolante la presentazione di argomenti magari non facilmente evidenti, è inversamente proporzionale al compenso richiesto per averli.

Ve ne sono per ogni disciplina, dalla fisica alla chimica, dalle scienze all’astronomia e così via, e per ogni livello scolastico, dalla Scuola Elementare all’Università. Un sito da cui cominciare a conoscerli può essere, ad esempio, il seguente: http://www.apple.com/downloads/macosx/math_science/

In questo indirizzo, oltre ai programmi dedicati ad altre attività, si trovano almeno una quarantina di applicazioni solo per l’insegnamento della Matematica e delle Scienze in genere: esse possono essere considerate, peraltro, il punto di partenza per scoprirne di altre.

Il sito segnalato è quello di Apple e quindi tutti i programmi girano sicuramente sul Macintosh, ma la gran parte di questi sono preparati per tutti gli ambienti: Apple, Linus e Win.

Alla luce dell’esperienza fatta personalmente con i miei studenti, non trovo azzardato dire che sicuramente, ricorrendo al loro uso in classe, ne beneficia sicuramente la didattica dell’insegnamento delle Scienze:

- a livello dei docenti perché trovano il modo e l’incoraggiamento per introdurre ed affrontare argomenti e/o temi talora molto complessi;
- a livello degli alunni perché in alcune circostanze come quelle che proporrò, possono comprendere ed apprendere subito e meglio contenuti che spesso, nella migliore delle ipotesi, sono costretti a mandare giù a memoria.

**Percorsi Didattici è un progetto proposto da:
ISTITUTO SCOLASTICO COMPRENSIVO JESI CENTRO
Visitate il sito "www.jesicentro.it"
Inviare una mail a "percorsididattici@jesicentro.it"**



"Atom in a box"

Che cosa è "Atomo in una scatola"?

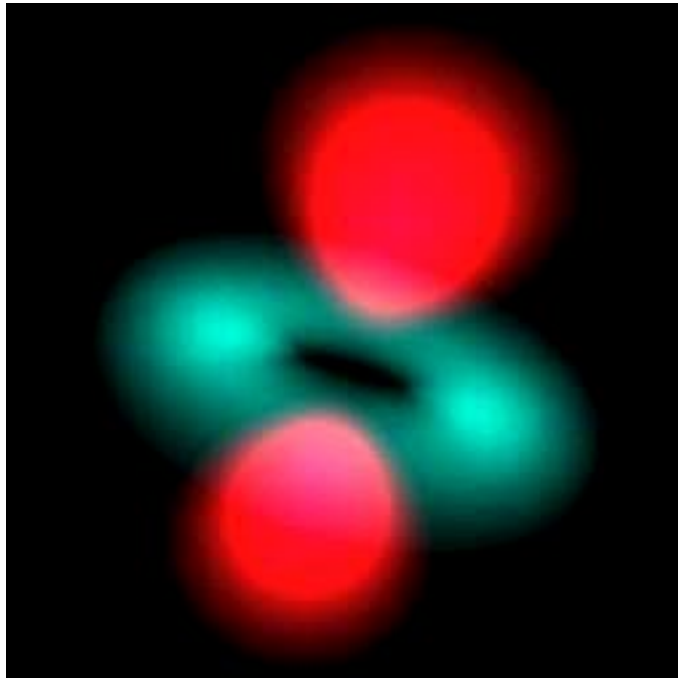


fig. 1 – orbitale atomico dell'atomo d'idrogeno

Si tratta di una pluri-premiata applicazione shareware¹ sviluppata da Dean Dager², che consente la visualizzazione in tempo reale degli orbitali atomici dell'atomo di idrogeno (fig. 1), il primo e il più facile esempio di applicazione della meccanica quantistica.

Diversamente da altri strumenti di questa categoria, questo programma riesce a rappresentare l'orbitale tridimensionale dell'elettrone calcolando e tracciando dei raggi, delle distanze.

L'orbitale rappresenta la densità di probabilità della funzione d'onda.

¹ *Shareware si dice di tutti quei software che possono essere provati liberamente, senza alcuna restrizione, e soltanto se vengono scelti per un uso continuativo, l'autore chiede una modica cifra di qualche decina di euro.*

² *Dean Dager, laureato in fisica presso l'UCLA, ha collaborato allo sviluppo del software che ha trasformato in un supercomputer il cluster di computer Power Macintosh G3 in uso presso l'UCLA e da tempo si dedica alla programmazione su Macintosh. Prima di laurearsi, aveva collaborato alla creazione di Kai's Power Tools, un insieme di filtri per l'elaborazione e la generazione di immagini per Adobe Photoshop. Recentemente ha messo a frutto il proprio talento nel campo della programmazione dedicandosi alla creazione di software per l'apprendimento come "Atom in a Box".*



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

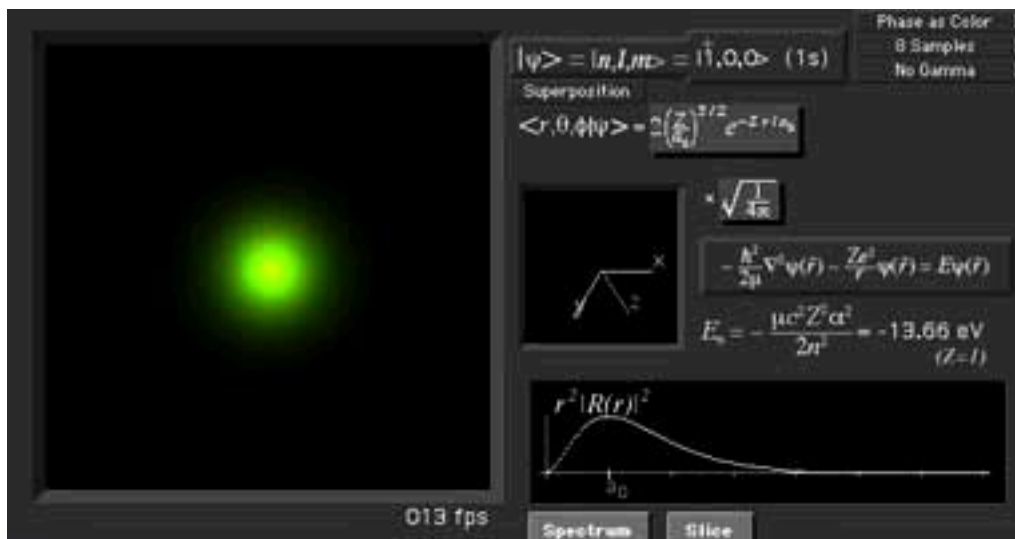


fig. 2 – orbitale 1s

La simulazione presenta inoltre i suoi risultati in tempo reale. Infatti con computer delle ultime generazioni si ottengono fino a 48 immagini per secondo ed è in grado di rappresentare tutti i 140 stati propri fino al livello energetico $n = 7$ e tutte le possibili e immaginabili transizioni fra gli stati propri. Volendo può dar luogo anche ad uno stato formato da una posizione superiore, raggiungendo 8 stati propri e permettendo, così, più di 3 *trilioni* ($3 \cdot 10^{12}$) di possibili transizioni.

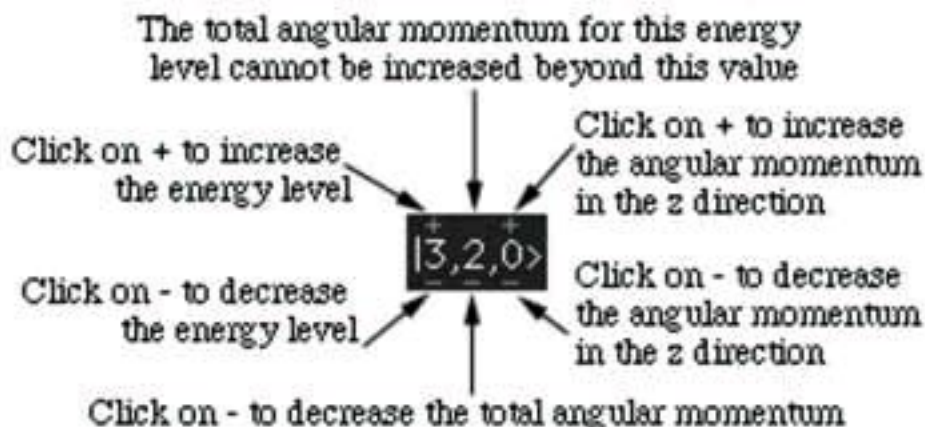


fig. 3 – pulsante di modifica dello stato mediante notazione alla Dirac

Le "nuvole" nell'immagine di figura 1 rappresentano proprio la forma degli orbitali, ovvero la distribuzione probabilistica di un elettrone legato a un nucleo di idrogeno. L'applicazione assicura nel contempo un'interfaccia utente di grande flessibilità. Il programma non si limita infatti alla visualizzazione, bensì consente agli utenti di "interagire" con gli orbitali degli atomi di idrogeno muovendo la rappresentazione grafica per ruotare l'orbitale, oppure aumentando o diminuendo lo stato di energia o momento angolare (fig. 3) e verificando gli effetti di tale modifica sulla nuvola atomica.



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

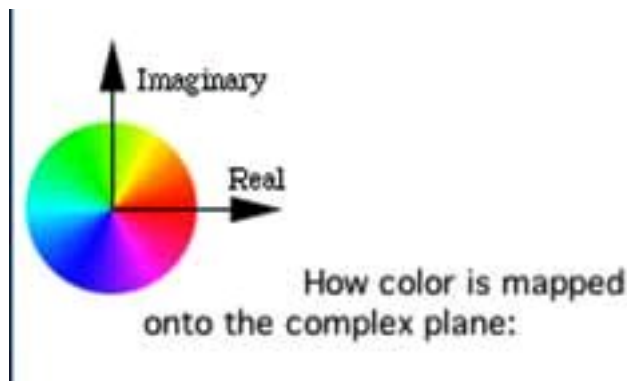


fig. 4 – mappa di corrispondenza colore - punti del piano complesso

L'applicazione consente anche la visualizzazione 3D degli orbitali (fig. 4): selezionando la modalità 3D rosso/ciano mediante il menu View Type e utilizzando un paio di occhiali per la visione 3D, l'immagine degli orbitali sembra fluttuare nello spazio tridimensionale davanti al monitor.

Atom in a Box, sviluppato da Dager in linguaggio C/C++ mediante il software CodeWarrior di Metrowerks, ha recentemente vinto il premio riservato alle realizzazioni degli studenti in occasione della nona edizione di Computers in Physics' Software Contest, il secondo riconoscimento attribuito a un software sviluppato da Dager.

Attualmente il programma viene utilizzato da docenti di chimica e fisica in varie università in tutti gli Stati Uniti. Ma il programma è noto anche in vari Paesi dell'Europa e altrove.

Per la personale esperienza fatta sul campo, avendolo utilizzato per più anni con i miei studenti, ritengo che sia utilizzabile con profitto anche dagli studenti della Scuola Media Superiore, ovviamente non entrando in alcuni dettagli che magari sono più appropriati per studenti universitari.

Giustifico la mia affermazione così: il programma consente di presentare l'atomo e le sue interazioni nel modo più attuale e rigoroso possibile, tuttavia la comprensione dei fatti proposti è assicurata perché i vari nodi concettuali, propri dell'argomento, sono tutti sviscerati ricorrendo a vari linguaggi, peraltro messi a confronto tra di loro. Fra i linguaggi usati vi sono sempre quello della simulazione e quello grafico sicuramente comprensibili a tutti. È proprio in questa molteplicità di rappresentazioni della evoluzione simulata dell'atomo di idrogeno che sta il punto di forza dell'applicativo che lo rende davvero originale, convincente e unico nel suo genere.



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

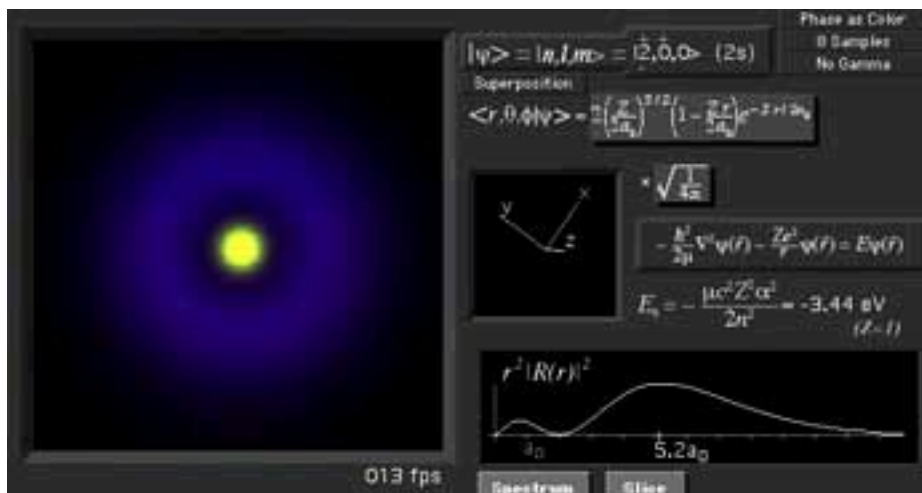


fig. 5 – orbitale 2s

La presenza dell'equazione di Schrödinger, sia pure espressa in un linguaggio simbolico e sintetico di alto livello e non noto agli studenti, non è tuttavia di peso. Se mai incuriosisce, colpisce l'attenzione. Ovviamente occorre fornire le spiegazioni a riguardo: spiegare quali compiti svolge nel contesto, compiti che si evincono con molta chiarezza proprio dall'osservare con un pò più di attenzione cosa succede in corrispondenza dei vari pulsanti.

A tale riguardo si fa notare che procedendo dall'alto verso il basso, ordinatamente, si trovano:

- 1 una prima regione dalla quale si sceglie lo stato che si vuole osservare;
- 2 la seconda e la terza che indicano le parti, radiale ed angolare, che compongono la soluzione prevista per quello stato dall'equazione di Schrödinger;
- 3 la quarta area, l'unica fissa, riporta appunto l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo;
- 4 la quinta descrive invece l'energia dello stato;
- 5 mentre a sinistra delle aree tre, quattro e cinque vi è un'area in cui una terna di assi cartesiani ortogonali indica costantemente l'orientazione dell'atomo nello spazio;
- 6 per ultimo vi è uno spazio dedicato al grafico che descrive di volta in volta la soluzione associata allo stato.

E tutto è rigorosamente interattivo, in modo coordinato.

Per rendersene parzialmente conto è sufficiente osservare ad esempio le figure 2, 5 e 6 che ritraggono l'atomo in tre differenti stati. In esse ciascuna delle aree sopra descritte indica, in base al proprio ruolo, l'evoluzione da uno stato all'altro.

E gli studenti, capiscono e si rendono davvero conto ed anzi entrano in discussione fra loro e con l'insegnante e si dimostrano interessati all'argomento. Per quella che è la mia personale esperienza non c'è miglior modo di coinvolgere una scolaresca che il portarli ad intervenire vivacemente alla discussione dei lavori ed a mano a mano procedere. Non dico impossibile, ma sicuramente è molto difficile raggiungere gli stessi risultati con una lezione frontale senza alcun supporto, e magari senza neppure un lucido esplicativo.



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

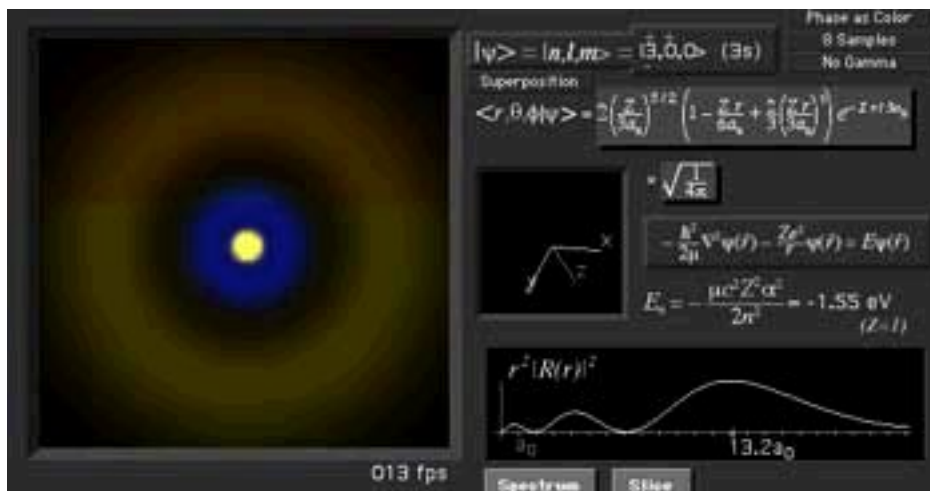


fig. 6 – orbitale 3s

Come si deve usare "Atomo in una scatola"?

L'idea dell'autore è la seguente: "come se si trattasse di un gioco!"

"Avanti, prova a realizzare qualsiasi cosa desideri".

"La maggior parte degli utenti (è sempre l'autore del programma che parla), ignora le istruzioni anche se il programma fornisce testi e fumetti di aiuto per quasi tutte le voci della finestra. La stessa guida all'uso che accompagna il programma, è stata scritta solo per chi vuole conoscere più dettagli sul programma ma non vi è nessun obbligo di lettura". In effetti il programma può essere utilizzato al solo scopo di far nascere le prime curiosità sull'argomento. In tal caso basta visionarlo solo per quello che è l'aspetto dell'animazione. E non occorre neppure essere studenti di liceo scientifico per vederlo così. Possono vederlo studenti di qualunque indirizzo e direi anche studenti di una scuola media se interessati all'argomento.

Visualizzazione

L'equazione di Schrödinger contiene la funzione ψ (psi) che è detta *funzione d'onda*. La funzione d'onda dipende da tre numeri quantici n , m , l , i cui valori si possono impostare nell'omonima finestra del programma. Il numero quantico principale n è quello che Bohr introdusse nella sua II° ipotesi parlando di quantizzazione delle orbite. Secondo Bohr le uniche orbite stabili permesse all'elettrone sono quelle per cui il momento angolare dell'elettrone risulta essere un multiplo intero del numero h (definito come $h/2\pi$). n è quindi il livello energetico dell'elettrone e va da 1 a 7.

La definizione del secondo numero quantico (l) è dovuta a Sommerfeld, che ampliò il modello atomico di Bohr. L'osservazione più accurata degli spettri di emissione rivela la presenza di più righe ravvicinate per uno stesso livello n . Questi gruppi di righe devono appartenere a orbite il cui contenuto energetico è leggermente differente. Le nuove orbite ipotizzate da Sommerfeld sono ellittiche, con il nucleo atomico che occupa uno dei fuochi. Anche la descrizione di queste orbite è quantizzata: e va da 0 a $(n-1)$ Il numero quantico magnetico m riguarda invece le proprietà magnetiche dell'atomo, ed in particolare la spiegazione che si dà dell'effetto *Zemann*: quando si avvicina un magnete alla



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

sorgente emittente si nota uno sdoppiamento di alcune righe di emissione. Ciò è dovuto al fatto che l'elettrone che ruota attorno al nucleo si può considerare come un dipolo magnetico; quando un dipolo magnetico è immerso in un campo magnetico esso tende ad orientarsi secondo questo campo e l'orientazione richiede una certa energia. Così durante l'emissione si nota che una riga, dovuta alla ricaduta da più orbite con lo stesso contenuto energetico, si divide in più righe, proprio perché ogni orbita ha modificato il proprio contenuto energetico. Anche questa proprietà si è scoperta essere quantizzata: m va da $-l$ a $+l$, zero compreso.

I numeri n , l , m definiscono un particolare orbitale. Un ulteriore numero quantico è rappresentato dal numero quantico di spin m_s . Lo spin è una proprietà fisica di un corpo in rotazione attorno al proprio asse; nel caso dell'elettrone si è scoperto che anche questa proprietà è quantizzata: cioè la rotazione avviene in un senso ($+1/2$) o nell'altro ($-1/2$). La rotazione della carica genera un particolare campo magnetico e la rotazione nel senso opposto genera un campo opposto a quest'ultimo.

In ciascun orbitale possono transitare solamente due elettroni con spin opposto: principio di esclusione di Pauli. Ciò spiega anche perché le molecole in cui gli orbitali sono totalmente occupati, non presentano proprietà magnetiche macroscopiche.

Se ci si ferma alla descrizione del numero l si ottiene una famiglia di orbitali degeneri; infatti per l uguale a:

- 0** si hanno gli orbitali s che hanno una sola orientazione e quindi possono accogliere solamente due elettroni.
- 1** si hanno gli orbitali p che hanno tre diverse orientazioni e possono accogliere sei elettroni.
- 2** si hanno gli orbitali d con cinque orientazioni possibili e quindi fino a dieci elettroni.
- 3** si hanno gli orbitali f con sette orientazioni e fino a quattordici elettroni.

La descrizione che il programma fa dell'atomo non è una descrizione classica, con gli elettroni che percorrono precise orbite attorno al nucleo come se fossero pianeti attorno al Sole. Già Heisenberg infatti aveva ravvisato i limiti di questo tipo di descrizione: per poter parlare di un'orbita "planetaria" è necessario infatti conoscere contemporaneamente la posizione e la quantità di moto dell'elettrone. Ma ciò risulta essere sperimentalmente impossibile visto che per rilevare la posizione dell'elettrone si altera la sua quantità di moto, e viceversa.

L'equazione di Schrödinger, invece, descrive l'elettrone in termini probabilistici, come la probabilità di trovare l'elettrone in una determinata posizione (y^2). Non si descrivono più le orbite ma gli orbitali: ossia regioni dello spazio in cui la probabilità di trovare l'elettrone è massima (almeno il 90%). Ciò è quanto viene visualizzato dal programma.



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

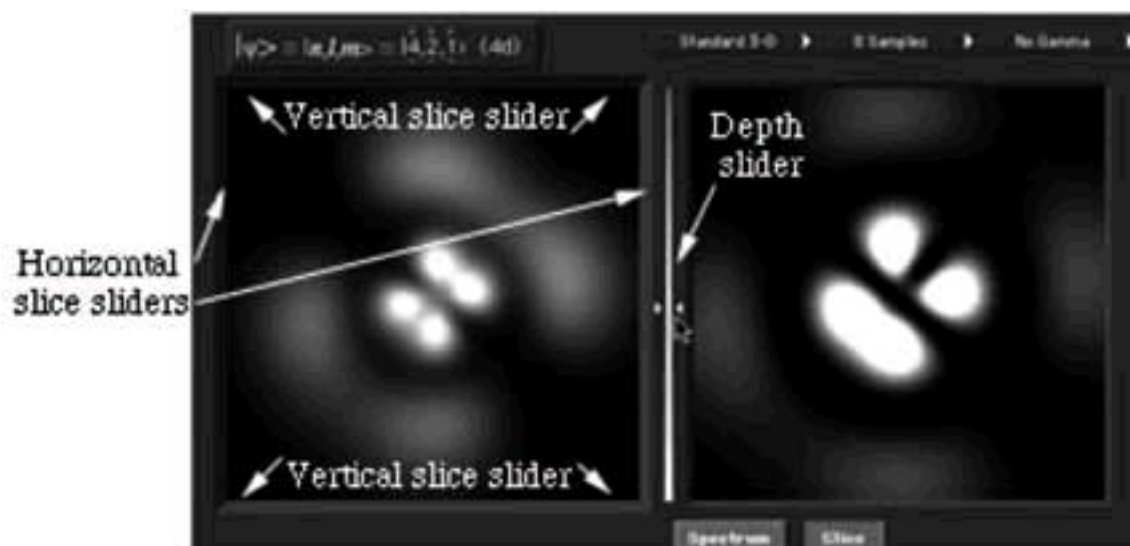


fig. 7 – si osservano i punti attraverso i quali selezionare un tipo di sezione di un orbitale

Sezioni

A questa funzione del programma si accede cliccando sul pulsante *Slice*. Il programma permette di sezionare gli orbitali atomici per una visualizzazione di essi a diversa profondità. Impostando i valori n , l , m verrà mostrato l'orbitale nella finestra di sinistra. Cliccando sul bordo inferiore è possibile operare una sezione verticale; il bordo laterale sinistro serve invece per le sezioni orizzonti; infine il bordo laterale destro serve per le sezione in profondità. Il risultato della sezione viene mostrato nella finestra sulla destra. Le immagini 7 ed 8 spiegano, appunto, come si può sezionare un orbitale nelle tre direzioni.

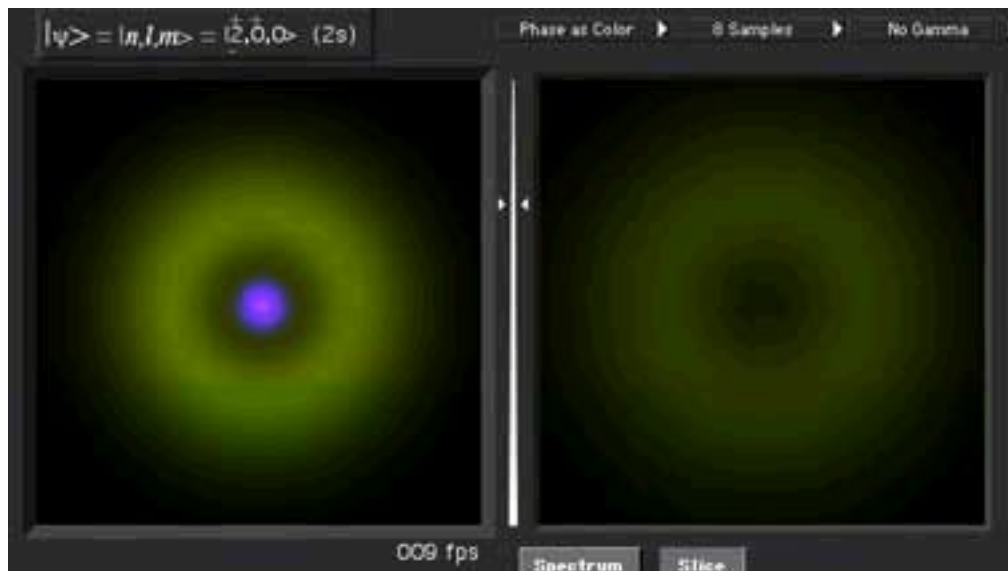


fig. 8 – una sezione dell'orbitale 2s



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

Spettro atomico

A questa funzione del programma si accede cliccando sul pulsante *Spectrum*. In tal caso il programma visualizza (fig. 9) lo spettro di emissione dell'idrogeno evidenziando la specifica riga corrispondente ad un determinato salto energetico.

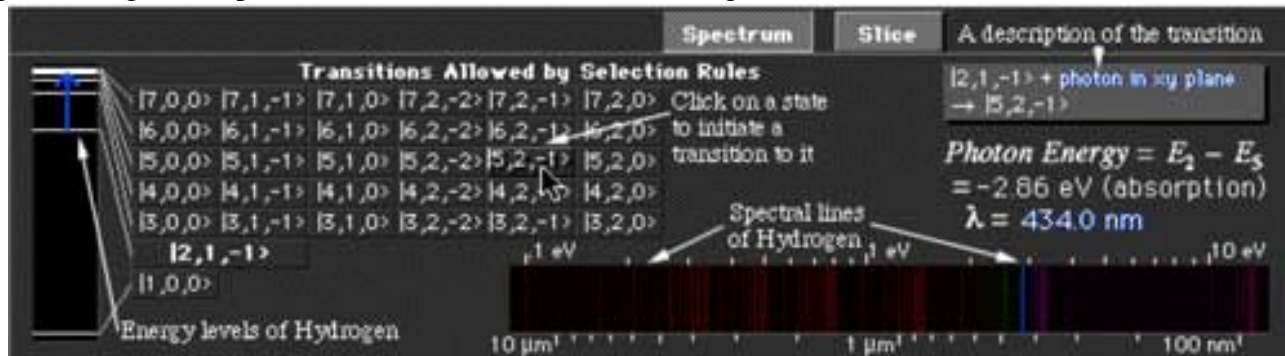


fig. 9 – finestra dello spettro atomico

Lo spettro ad emissione a righe degli atomi è una diretta conseguenza delle ipotesi di quantizzazione. L'elettrone può descrivere solo determinate orbite senza degradare rapidamente la sua energia. Queste orbite corrispondono ad un livello energetico dell'elettrone: più è esterna l'orbita (cioè più n è grande) e maggiore è il suo livello energetico.

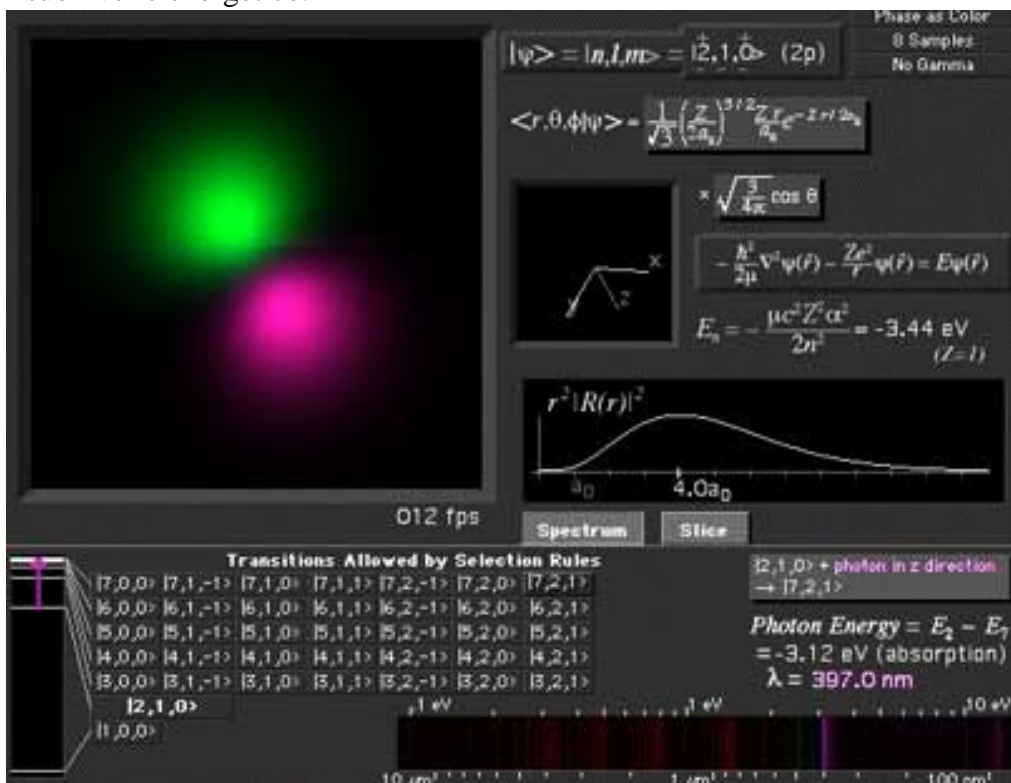


fig. 10 – vista d'insieme della interfaccia con aperta la sezione degli spettri: vi si osserva una transizione che comporta un fotone di assorbimento



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

L'unico elettrone dell'atomo di idrogeno può ricevere energia dall'esterno, eccitarsi, e quindi portarsi ad un livello energetico superiore; oppure da un livello energetico più esterno può ricadere verso un livello più interno liberando energia sotto forma di radiazione elettromagnetica. Poiché queste transizioni avvengono solamente tra stati quantizzati, altrettanto quantizzate sono le energie scambiate durante i processi di eccitazione e diseccitazione dell'atomo: cioè i fotoni assorbiti o emessi dall'atomo, durante il passaggio tra i diversi orbitali, possono avere solamente determinate lunghezze d'onda (e determinate frequenze) che dipendono dalla differenza di energia degli orbitali tra cui avviene il salto dell'elettrone. Selezionando un orbitale il programma mostra tutti gli orbitali di destinazione consentiti.

Muovendo il puntatore su uno di questi verrà visualizzata la riga assorbita (se l'orbitale di destinazione è più energetico) o emessa (se l'orbitale di destinazione è meno energetico), con l'indicazione della lunghezza d'onda del relativo fotone (figure 10 e 11).

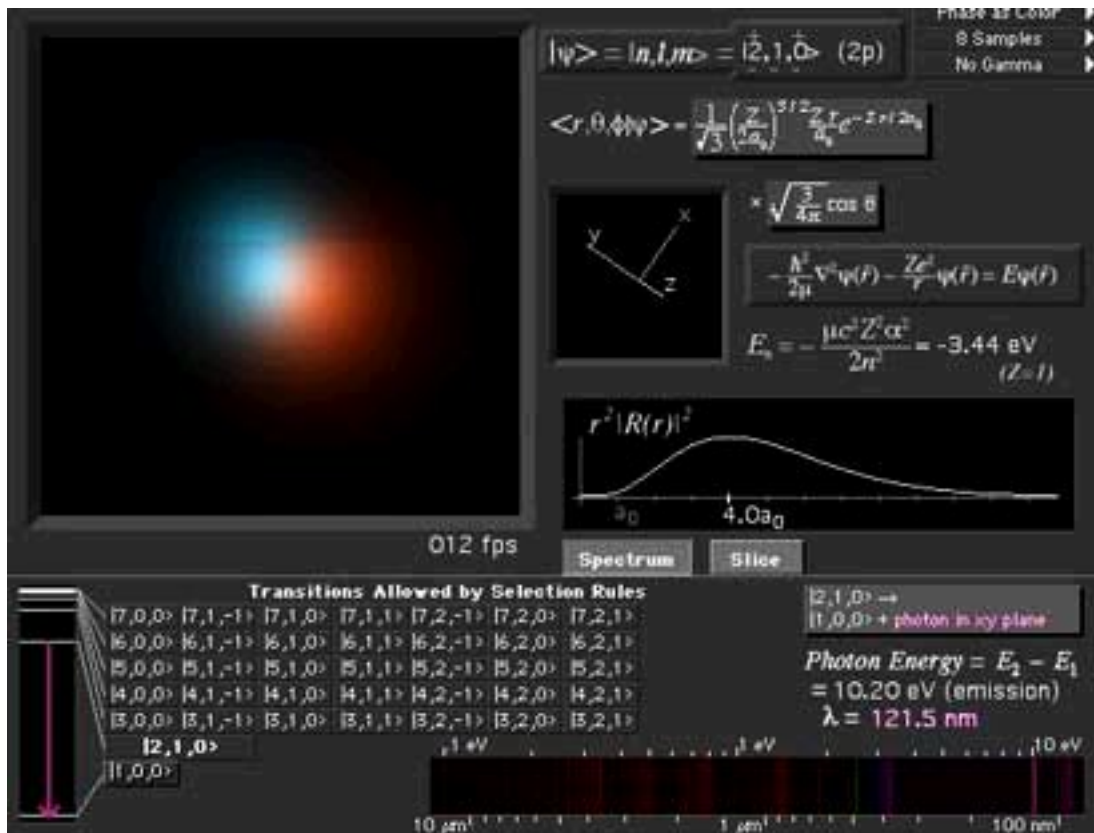


fig. 11 – ora, invece, si osserva una transizione che comporta un fotone di emissione



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

Orbitali ibridi

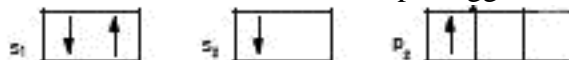
A questa funzione si accede, infine, cliccando sul pulsante *Superposition*

Lo studio dei legami chimici ha portato alla definizione di nuovi possibili tipi di orbitali: gli orbitali ibridi. Un orbitale ibrido è dato dalla fusione di due orbitali di due atomi diversi.

Ad esempio la molecola BeF_2 . La configurazione del berillio è la seguente:



Non avrebbe quindi elettroni liberi per la formazione di due legami con il fluoro. Si pensa allora alla possibilità di eccitazione di un elettrone ed il suo passaggio al livello successivo

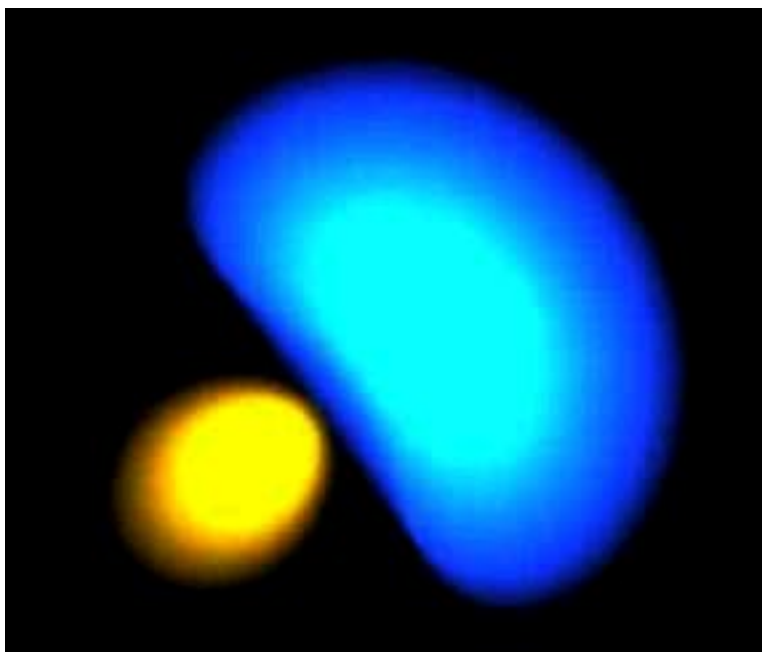


In questo caso sono possibili i legami con due atomi di fluoro, ognuno dei quali ha un elettrone libero nel livello p . Tuttavia i legami con gli atomi di fluoro dovrebbero essere diversi, visto che uno di essi si lega all'elettrone nell'orbitale s (più interno) e l'altro ad un elettrone dell'orbitale p (più esterno).

Studi condotti con la diffrazione dei raggi X mostrano però che la distanza degli atomi di fluoro dal berillio è la stessa. Si è quindi ipotizzata la formazione di orbitali ibridi: in questo caso gli elettroni di legame orbitano in un unico orbitale SP a due orientazioni.

Per realizzare la visualizzazione di questi orbitali è sufficiente indicare i numeri quantici per gli orbitali che si vogliono "fondere".

Le immagini di figura 12 sono solo una piccola mostra degli stati di sovrapposizione che si possono osservare:



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it

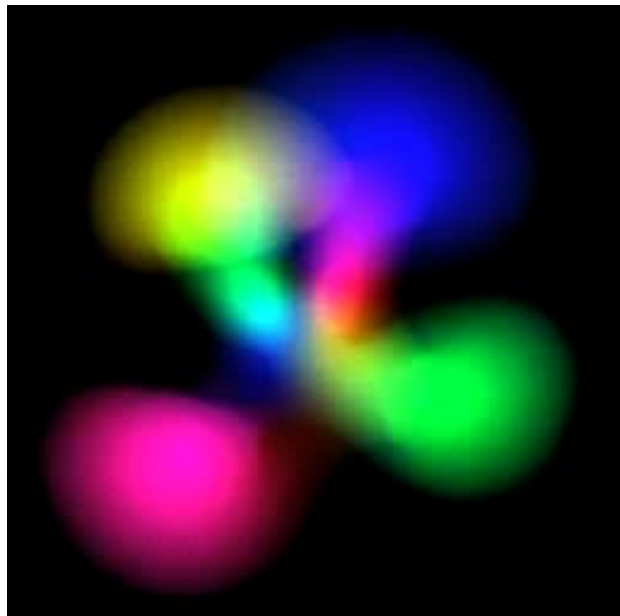
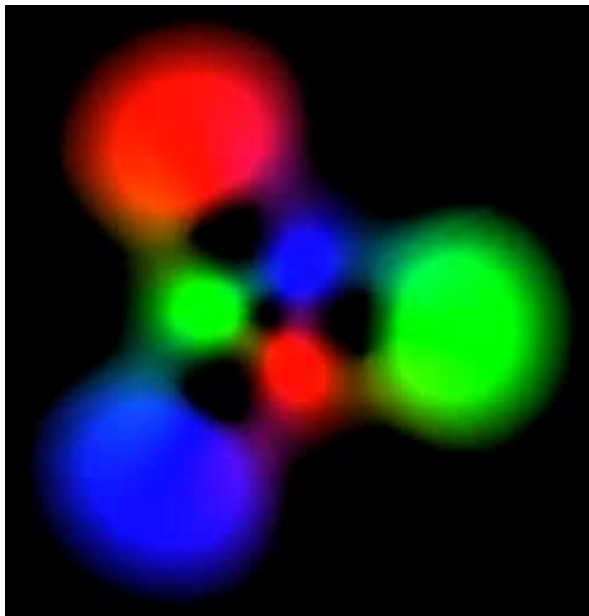


fig. 12 a), b), c) – Immagini di orbitali di sovrapposizione (ibridi)

Come si evince, anche da questa presentazione, il programma è veramente valido e completo. Il mio personale suggerimento è di provarlo. Provandolo ed usandolo in classe, ne sono uscito sicuramente arricchito e con idee più chiare in proposito in special modo dal punto di vista di come proporre l'argomento agli studenti.

Anche questi ultimi hanno apprezzato l'uso in classe di questo applicativo e dalle verifiche che ho avuto modo di fare in più occasioni ho notato dei miglioramenti nella resa degli studenti in merito a tale argomento ed ad argomenti ad esso correlati a confronto degli esiti relativi agli anni in cui ho trattato gli stessi argomenti ma senza ricorrere a questo supporto visivo.

Per maggiori informazioni, per visualizzare altre immagini a colori e, soprattutto per le animazioni, suggerisco di visitare il sito dell'autore che risponde al seguente indirizzo da dove è anche possibile scaricare una copia demo del programma:

www.dauger.com

Indicazioni bibliografiche

[1] I. Sciarratta – Insegnamento della Matematica e delle Scienze integrate – Vol. 26 A_B
N. 6 – Nov. – Dic. 2003 – Centro Ricerche Didattiche – “U. Morin” – Paderno del Grappa



www.jesicentro.it



percorsididattici@jesicentro.it