



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Distribuzioni energetiche nelle reazioni termonucleari

Relatore

Prof. Lorenzo Fortunato

Laureando

Mirko Torresan

Anno Accademico 2022/2023

Indice

Introduzione	v
1 Reazioni termonucleari	1
1.1 Q-value	1
1.2 Sezione d'urto σ	2
1.3 Rate	2
1.4 Distribuzione $\Phi(v)$	2
1.5 Reazioni inverse	4
2 Legge di Planck	7
3 Implementazione	11
3.1 Programma	11
3.2 Subroutine	12
3.2.1 Reazioni termonucleari	12
3.2.2 Reazioni di fotodisintegrazione	14
4 Risultati e conclusioni	17

Introduzione

Le reazioni termonucleari giocano un ruolo fondamentale nel comprendere la produzione d'energia e la nucleosintesi degli elementi nelle stelle.

Una stella nasce quando grandi quantità di gas interstellare si comprimono sotto l'azione della forza gravitazionale, convertendo energia potenziale in energia termica. Quando la densità e la temperatura diventano sufficientemente elevate le prime reazioni nucleari cominciano a consumare il combustibile più leggero, l'idrogeno ^1H , con la produzione di deuterio ^2H ed elio ^4He .

L'energia rilasciata dalle reazioni mantiene la stella in equilibrio tra pressione termica ed energia gravitazionale ad una temperatura pressoché costante, fino all'esaurimento dell'idrogeno, a quel punto la stella ricomincia a contrarsi, in un conseguente aumento della temperatura.

L'equilibrio è nuovamente raggiunto quando le condizioni sono sufficienti ad innescare le reazioni termonucleari che consumano il combustibile successivo, l'elio ^4He .

Quest'alternarsi di equilibri e contrazioni proseguono fino al momento in cui i processi di fusione nucleari nel nucleo della stella producono l'energia necessaria per contrastare la forza gravitazionale, gli ultimi nuclei prodotti sono quelli del gruppo del ferro, i quali possiedono le energie di legame maggiori e richiederebbero energia per rientrare in reazioni nucleari.

Successivamente la stella muore con eventi spettacolari, dipendenti dalla sua massa iniziale, liberando nel cosmo gli elementi prodotti fino a quel momento. Lo scopo di questa tesi è la stesura di una subroutine per *Wolfram Mathematica 13.3*® per il calcolo di rate di reazione per coppie di nuclei $\langle \sigma v \rangle$, da inserire successivamente in un programma per lo studio dell'abbondanza di elementi in funzione del tempo, la procedura utilizzata è quella riportata in [3]. Inoltre l'analisi e lo studio di questi fenomeni sono un tassello fondamentale per la comprensione della sintesi dei materiali che compongono l'universo.

In questo contesto si tratteranno solo assorbimenti fotonici e urti tra coppie di nuclei, rimandando alle fonti [6][4][2] per ulteriori fenomeni, quali reazioni a tre o più particelle nello stato iniziale, decadimenti β , etc...

Capitolo 1

Reazioni termonucleari

Le reazioni termonucleari sono i processi che producono l'energia termica che si oppone alla forza gravitazionale in una stella, rendendola stabile per lunghi periodi o determinando i cambiamenti nella sua densità, raggio e luminosità, per cui lo studio di tali processi è indispensabile per la comprensione dell'evoluzione stellare. Se consideriamo le interazioni forti tra i nuclei nella reazione $1 + 2 \rightarrow 3 + 4$ utilizzando la conservazione dell'energia troviamo:

$$Q_n = (m_1 + m_2 - m_3 - m_4)c^2, \quad (1.1)$$

dove Q_n è il Q -value ed m_i la massa della particella i -esima. Le reazioni termonucleari nelle stelle che coinvolgono nuclei più leggeri di quello del ferro sono generalmente esoenergetiche ($Q > 0$), ciò consente l'equilibrio idrostatico con la forza di gravità. Per ottenere l'energia prodotta dalle reazioni in funzione del tempo il primo passo è calcolare la probabilità che la reazione avvenga, ciò è proporzionale alla sezione d'urto. Considerando N_x ed N_y particelle per metro cubo di due specie diverse il *rate*, ovvero il tasso di reazione, vale:

$$r = N_x N_y v \sigma, \quad (1.2)$$

dove v è la velocità relativa tra le particelle e σ la sezione d'urto della reazione a quella data velocità. Passiamo ora ad esaminare i vari ingredienti che entrano in questa trattazione.

1.1 Q-value

Il Q -value risulta essere l'energia consumata o prodotta dalla reazione, legata alla differenza tra le masse dei reagenti e dei prodotti tramite la nota relazione di Einstein tra massa ed energia $E = mc^2$. Nella definizione del Q -value, in equazione (1.1), sono presenti le masse delle particelle interagenti, che nelle reazioni termonucleari sono i nuclei atomici coinvolti. Tipicamente le masse note sono però quelle atomiche, si definisce analogamente nel contesto atomico il Q -value Q_a :

$$Q_a = (M_{a,1} + M_{a,2} - M_{a,3} - M_{a,4})c^2, \quad ,$$

legato al Q -value nucleare da

$$Q_a = Q_n + m_e c^2 (Z_1 + Z_2 - Z_3 - Z_4) + B_e(Z_1) + B_e(Z_2) - B_e(Z_3) - B_e(Z_4), \quad ,$$

che grazie alla conservazione della carica diventa:

$$Q_a = Q_n + \Delta B_e. \quad (1.3)$$

Dove Z_i è il numero di protoni nell'atomo i -esimo e $B_e(Z_i)$ l'energia di legame degli elettroni con il nucleo, funzione che dipende dal numero atomico.

1.2 Sezione d'urto σ

Classicamente la sezione d'urto è definita come l'area geometrica combinata della particella proiettile e della particella bersaglio, ma le reazioni termonucleari sono governate dalla meccanica quantistica e la sezione d'urto geometrica viene sostituita da $\sigma \propto \pi\lambda^2$, dove λ è la lunghezza d'onda di de Broglie legata all'aspetto ondulatorio del processo e dipende dall'energia, quindi dalla velocità, della particella proiettile e come riportato nella Ref. [6] vale:

$$\lambda = \frac{m_1 + m_2}{m_2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m_1 E}}, \quad (1.4)$$

con E l'energia della particella proiettile nel sistema di riferimento del laboratorio, in cui la particella bersaglio viene considerata ferma.

1.3 Rate

Come accennato sopra la sezione d'urto dipende tipicamente dalla velocità relativa delle particelle, cosicché l'equazione (1.2) diventa:

$$r_p = N_x N_y v \sigma(v). \quad (1.5)$$

Dove r_p sta per *rate* parziale, ovvero riferito alle particelle x ed y con velocità relativa v. In un gas stellare, e in generale in plasm da fusione, le velocità delle particelle seguono specifiche distribuzioni di probabilità $\Phi(v)$, quindi per ricavare il *rate* totale la quantità $v\sigma(v)$ va mediata sulla distribuzione che considereremo già normalizzata. Il *rate* sarà perciò:

$$r = N_x N_y \langle \sigma v \rangle, \quad (1.6)$$

dove abbiamo introdotto

$$\langle \sigma v \rangle = \int_{v_T}^{\infty} \Phi(v) v \sigma(v) dv, \quad (1.7)$$

che rappresenta il *rate* di reazione per coppia di particelle, diviso per il volume molare delle specie prodotte si possono ricavare le moli prodotte dalla reazione nell'intervallo di tempo. Il limite inferiore dell'integrale v_T è nullo per reazioni esoenergetiche ($Q > 0$) ed assume valori non banali, $v_T \propto \sqrt{Q}$, nelle reazioni endoenergetiche ($Q < 0$), rappresenta la velocità relativa minima affinché la reazione avvenga.

Considerando la possibilità che le specie di particelle x ed y siano la medesima il *rate* totale va diviso per 2, altrimenti ogni coppia di particelle verrebbe considerato due volte, i due casi possono essere rappresentati contemporaneamente introducendo la δ di Kronecker nella (1.6) ottenendo:

$$r_{xy} = N_x N_y \langle \sigma v \rangle (1 + \delta_{xy})^{-1}. \quad (1.8)$$

1.4 Distribuzione $\Phi(v)$

Come accennato nella sezione precedente le velocità delle particelle sono descritte da distribuzioni di probabilità, in gas stellari i nuclei sono in equilibrio termodinamico e si muovono non relativisticamente, sono perciò descritti da una distribuzione di Maxwell-Boltzmann, riportata normalizzata come di consueto:

$$\Phi(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right). \quad (1.9)$$

Qui m si riferisce alla massa del nucleo d'interesse, T è la temperatura del plasma e k_B la costante di Boltzmann, notiamo che al numeratore del termine esponenziale vi è l'energia cinetica della particella $E = \frac{1}{2}mv^2$, si può quindi riscrivere la distribuzione in termini di tale energia $\Phi(E) \propto E \exp \left(-\frac{E}{k_B T} \right)$.

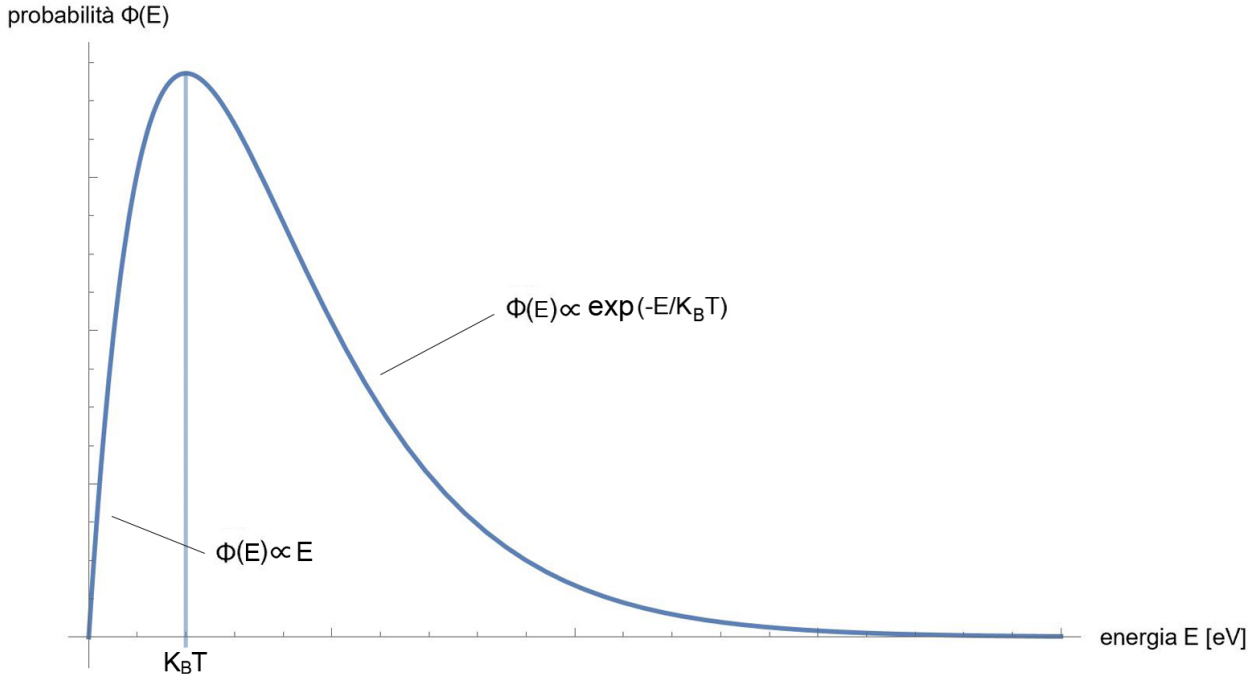


Figura 1.1: Distribuzione di Maxwell-Boltzmann generica, mostra l'andamento della probabilità di trovare una particella ad una data energia e alla temperatura T . La distribuzione presenta un massimo all'energia $k_B T$

Nelle reazioni termonucleari le particelle di tutte le specie si muovono nel sistema di riferimento del laboratorio, questo fa sì che nell'integrale di equazione (1.7) per il calcolo del *rate* di reazione compaiano due distribuzioni di probabilità, una per ogni specie. L'equazione per $\langle \sigma v \rangle$ diventa quindi:

$$\langle \sigma v \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty \Phi(v_x) \Phi(v_y) v \sigma(v) dv_x dv_y, \quad (1.10)$$

dove è stata considerata una reazione esotermica e compare ancora la velocità relativa $v = v_x - v_y$, ma ora l'integrazione è da svolgere su entrambe le velocità delle particelle. L'integrale si riscrive in coordinate intrinseche del sistema di due particelle interagenti definendo:

$$V = \frac{m_x v_x + m_y v_y}{m_x + m_y} \text{ la velocità del centro di massa,}$$

$$\mu = \frac{m_x m_y}{m_x + m_y} \text{ la massa ridotta del sistema dei reagenti,}$$

$$M = m_x + m_y \text{ la massa totale.}$$

Trovando:

$$\langle \sigma v \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty \Phi(V) \Phi(v) v \sigma(v) dV dv, \quad (1.11)$$

con le due distribuzioni delle velocità trasformate in

$$\begin{aligned}\Phi(V) &= 4\pi V^2 \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{MV^2}{2k_B T}\right), \\ \Phi(v) &= 4\pi v^2 \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T}\right).\end{aligned}\tag{1.12}$$

Facendo riferimento ai calcoli e ai simboli riportati nella Ref. [6]. Dato che la sezione d'urto dipende solo dalla velocità relativa e che la funzione $\Phi(V)$ è normalizzata possiamo integrare sulla velocità V ottenendo

$$\langle \sigma v \rangle = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty v^3 \sigma(v) \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T}\right) dv.\tag{1.13}$$

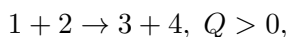
Tipicamente le sezioni d'urto vengono indicate al variare dell'energia, è quindi conveniente riscrivere l'integrale sostituendo la velocità con l'energia cinetica nel centro di massa $E = \frac{1}{2}\mu v^2$ ricavando:

$$\langle \sigma v \rangle = \left(\frac{8}{\pi\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(k_B T)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty \sigma(E) E \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE.\tag{1.14}$$

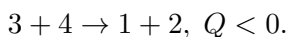
L'equazione così ricavata viene utilizzata nella (1.8) e nella *subroutine* come definizione di *rate* di reazione.

1.5 Reazioni inverse

Ai fini di ricavare i rate di reazioni per cui sono note solo le sezioni d'urto delle reazioni inverse è necessario discutere la relazione tra le reazioni e le loro inverse, sfruttando il principio del bilancio dettagliato. Ciò è rilevante anche all'aumentare della temperatura nelle stelle, dato che a basse temperature sono rilevanti solo le reazioni esotermiche:



ma all'aumentare della temperatura l'energia sarà sufficiente anche per innescare la reazione endotermica inversa, superando l'energia di soglia, uguale al *Q-value*:



Ai fini di ricavare la relazione tra σ_{12} e σ_{34} consideriamo una reazione con uno stato intermedio C , $1 + 2 \rightarrow C \rightarrow 3 + 4$, la sua sezione d'urto vale:

$$\sigma_{12} = \pi \lambda_{12}^2 \frac{2J+1}{(2J_1+1)(2J_2+1)} (1 + \delta_{12}) | \langle 3 + 4 | H_{II} | C \rangle \langle C | H_I | 1 + 2 \rangle |^2.\tag{1.15}$$

Il termine $\pi \lambda_{12}^2$ riflette il carattere quantistico della sezione d'urto, descritto in equazione (1.4), il termine $\frac{2J+1}{(2J_1+1)(2J_2+1)}$ è un termine statistico che rappresenta la probabilità di generare uno stato C con momento angolare J da due reagenti con momenti angolari J_1 , J_2 e il fattore $(1 + \delta_{12})$ considera la possibilità che le particelle reagenti siano la medesima, moltiplicando per 2 la sezione d'urto nell'eventualità. In fine, l'ultimo termine nel modulo quadro dipende dalle forze coinvolte nel processo, l'elemento di matrice $\langle C | H_I | 1 + 2 \rangle$ descrive la transizione dai reagenti allo stato intermedio tramite l'hamiltoniana H_I e allo stesso modo il termine $\langle 3 + 4 | H_{II} | C \rangle$ descrive la transizione da C ai prodotti tramite H_{II} , le interazioni coinvolte nella reazione devono necessariamente essere le stesse, cioè $H_I = H_{II}$, per una descrizione più dettagliata fare riferimento a [6]. Analogamente la reazione inversa presenta una sezione d'urto uguale a:

$$\sigma_{34} = \pi \lambda_{34}^2 \frac{2J+1}{(2J_3+1)(2J_4+1)} (1 + \delta_{34}) | \langle 1 + 2|H_I|C \rangle \langle C|H_I I|3+4 \rangle |^2 . \quad (1.16)$$

Le equazioni (1.15) ed (1.16) differiscono solo per gli indici e per l'ordine degli elementi di matrice nel termine in modulo. In generale le leggi che governano le reazioni non cambiano quando il verso è invertito, tale principio è conosciuto come invarianza per inversione temporale, e ad oggi non si conoscono processi elettromagnetici o d'interazione forte che violino tale principio. Perciò fintantoché le reazioni coinvolgono solo tali processi possiamo ricavare la relazione tra σ_{12} e σ_{34} prendendone il rapporto:

$$\frac{\sigma_{12}}{\sigma_{34}} = \frac{m_3 m_4 E_{34} (2J_3 + 1) (2J_4 + 1) (1 + \delta_{12})}{m_1 m_2 E_{12} (2J_1 + 1) (2J_2 + 1) (1 + \delta_{34})} , \quad (1.17)$$

dove abbiamo sostituito λ_{ik} con $\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu_{ik} E_{ik}}}$, equivalente all'equazione (1.4), dove μ_{ik} è la massa ridotta ed E_{ik} è l'energia nel centro di massa. Si noti che nell'equazione finale il termine dipendente da C è semplificato, pertanto la relazione è del tutto generale, e vale per ogni reazione che coinvolga solo interazioni elettromagnetiche o forti, anche se non possiedono uno stato intermedio. Per ricavare il *rate* di reazione per l'inversa riscriviamo l'equazione (1.14) con i pedici che denotano le specie:

$$\begin{aligned} \langle \sigma v \rangle_{12} &= \left(\frac{8}{\pi \mu_{12}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(k_B T)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty \sigma_{12} E_{12} \exp\left(-\frac{E_{12}}{k_B T}\right) dE_{12} , \\ \langle \sigma v \rangle_{34} &= \left(\frac{8}{\pi \mu_{34}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(k_B T)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty \sigma_{34} E_{34} \exp\left(-\frac{E_{34}}{k_B T}\right) dE_{34} . \end{aligned} \quad (1.18)$$

Ora utilizzando la (1.17), e ricordando che $E_{34} = E_{12} + Q$, il rapporto tra i *rate* di reazione si trova essere:

$$\frac{\langle \sigma v \rangle_{34}}{\langle \sigma v \rangle_{12}} = \frac{(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(1 + \delta_{34})}{(2J_3 + 1)(2J_4 + 1)(1 + \delta_{12})} \left(\frac{\mu_{12}}{\mu_{34}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right) , \quad (1.19)$$

se sarà necessario tale relazione verrà utilizzata nell'implementazione della subroutine. Dato che le quantità che precedono l'esponenziale sono dell'ordine delle unità, la relazione è dominata dall'ultimo termine. Chiaramente le reazioni inverse sono quindi altamente dipendenti dal *Q-value* e assumono più importanza alle alte temperature.

Capitolo 2

Legge di Planck

Molte reazioni nucleari nelle stelle avvengono a seguito dell'emissione o dell'assorbimento di quanti di radiazione elettromagnetica nel regime dei raggi gamma, i processi in cui il fotone viene emesso si chiamano catture radiative. Queste reazioni,

$$1 + 2 \rightarrow 3 + \gamma \quad (Q > 0),$$

hanno una grande importanza in processi stellari dato che hanno sempre un Q -value positivo, con poche eccezioni, quindi contribuiscono alla produzione d'energia, inoltre giocano un ruolo principale nella sintesi di elementi, ad esempio nella catena protone-protone. Ad elevate temperature il numero di fotoni termici con alte energie aumenta e la possibilità di reazioni inverse aumenta considerevolmente, dal momento che sempre più fotoni possiedono energia sufficiente a vincere la barriera del Q -value negativo.

$$3 + \gamma \rightarrow 1 + 2 \quad (Q < 0),$$

in questo caso nuclei pesanti sono divisi in un processo dal nome di fotodisintegrazione, analogamente alla fotoionizzazione degli atomi, con la differenza che, a causa della maggior energia di legame dei nuclei, le energie in gioco sono degli ordini dei MeV, comparate con quelle degli eV nelle ionizzazioni atomiche. Il *rate* per la fotodisintegrazione è dato da:

$$r_{3\gamma} = N_3 N_\gamma c \sigma(E_\gamma), \quad (2.1)$$

con N_γ il numero di fotoni per unità di volume, N_3 la densità numerica della specie 3, c la velocità della luce e la sezione d'urto che dipende dall'energia del fotone. Inoltre in un plasma stellare in equilibrio termodinamico la densità numerica dei fotoni dipende dalla temperatura e dalla frequenza dei fotoni stessi. Si può quindi generalizzare l'equazione (2.1) scrivendo:

$$r_{3\gamma} = N_3 \int_{E_T}^{\infty} c N_\gamma(E_\gamma) \sigma(E_\gamma) dE_\gamma, \quad (2.2)$$

In questo tipo di reazioni gli integrali nell'energia sono da svolgere a partire dall'energia E_T , che rappresenta la soglia minima sotto il quale la reazione non avviene, in pratica tale valore è l'opposto del Q -value, che in questo contesto è negativo.

La densità energetica di un'onda elettromagnetica con frequenza compresa tra ν e $\nu + d\nu$ alla temperatura T è data dalla distribuzione di Planck:

$$n(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{\exp(\frac{h\nu}{k_B T}) - 1} d\nu, \quad (2.3)$$

qui h è la costante di Planck e ν è la frequenza. Chiaramente è possibile riscrivere la distribuzione in funzione dell'energia, dato che per un fotone l'energia vale $E = h\nu$ e ricordando la definizione di $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ abbiamo:

$$n(E_\gamma)dE_\gamma = \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 \left(\frac{1}{\hbar c}\right)^3 \frac{E_\gamma^3}{\exp\left(\frac{E_\gamma}{k_B T}\right) - 1} dE_\gamma . \quad (2.4)$$

In fine il numero di fotoni con energia tra E_γ ed $E_\gamma + dE_\gamma$ per unità di volume alla temperatura T è:

$$N_\gamma(E_\gamma)dE_\gamma = \frac{n(E_\gamma)}{E_\gamma} dE_\gamma = \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 \left(\frac{1}{\hbar c}\right)^3 \frac{E_\gamma^2}{\exp\left(\frac{E_\gamma}{k_B T}\right) - 1} dE_\gamma . \quad (2.5)$$

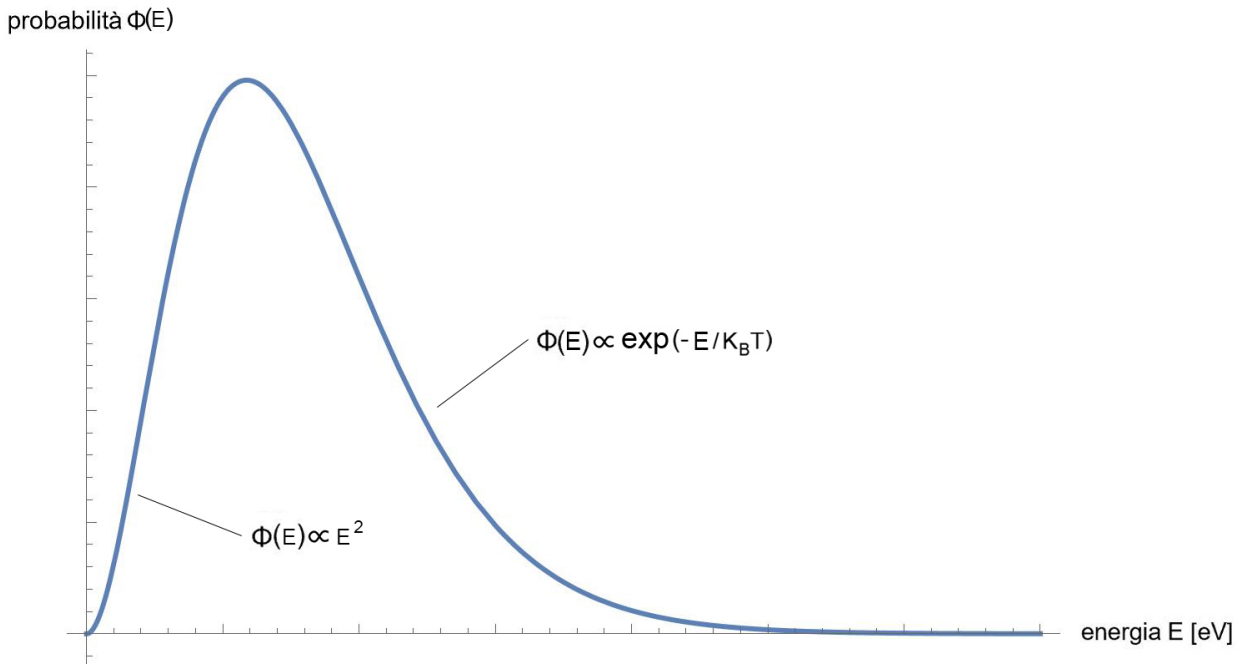


Figura 2.1: Distribuzione di Planck generica, mostra l'andamento della probabilità di trovare un fotone ad una data energia e alla temperatura T per unità di volume.

Inserendo la distribuzione (2.5) nell'equazione (2.2) e dividendo per N_3 si ricava l'equivalente del *rate* di reazione per reazioni di fotodisintegrazione, ovvero la costante di decadimento:

$$\langle \sigma v \rangle_{3\gamma} = \int_{E_T}^{\infty} N_\gamma(E_\gamma, T) c \sigma(E_\gamma) dE_\gamma . \quad (2.6)$$

L'equazione (2.6) è implementata nella subroutine per il calcolo di $\langle \sigma v \rangle_{3\gamma}$ nel caso di reazioni di fotodisintegrazione, ma sarebbe comunque possibile utilizzare la relazione (1.19) discussa nella sezione (1.5) modificata per tenere conto del fatto che ora una delle due particelle è un fotone.

La (1.16) diventa:

$$\sigma_{3\gamma} = \pi \lambda_{3\gamma}^2 \frac{2J+1}{2(2J_3+1)} (1 + \delta_{3\gamma}) | \langle 1 + 2|H_I|C \rangle \langle C|H_I I|3 + \gamma \rangle |^2 , \quad (2.7)$$

dove abbiamo usato che $2J_\gamma + 1 = 2$, dato che il fotone ha solo due direzioni di polarizzazione. Considerando poi che $\lambda_{3\gamma}^2 = \frac{1}{\hbar k^2}$, con k vettore d'onda legato al momento e all'energia del fotone

dalla relazione $p^2 = \hbar^2 k^2 = \frac{E_\gamma^2}{c^2}$, facendo il rapporto tra sezioni d'urto della sezione diretta e inversa otteniamo:

$$\frac{\sigma_{3\gamma}}{\sigma_{12}} = \frac{(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)}{2(2J_3 + 1)} \frac{2\mu_{12}c^2 E_{12}}{E_\gamma^2} \frac{(1 + \delta_{3\gamma})}{(1 + \delta_{12})} \quad (2.8)$$

In fine inserendo tale relazione nell'integrale di equazione (2.6), ricordando che $E_{12} + Q_{12 \rightarrow 3\gamma} = E_\gamma$ e facendo il rapporto con $\langle \sigma v \rangle_{12}$ si trova:

$$\frac{\langle \sigma v \rangle_{3\gamma}}{\langle \sigma v \rangle_{12}} = \left(\frac{2\pi}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (\mu_{12} k_B T)^{\frac{3}{2}} \frac{(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)}{(2J_3 + 1)(1 + \delta_{12})} \exp\left(-\frac{Q_{12 \rightarrow 3\gamma}}{k_B T}\right) \quad (2.9)$$

dove ricordiamo che $Q_{12 \rightarrow 3\gamma} = -Q_{3\gamma \rightarrow 12} > 0$. Per il calcolo completo si veda la Ref.[4]. Ai nostri fini è sufficiente sapere che è coinvolta l'approssimazione $\exp\left(\frac{E_\gamma}{k_B T}\right) - 1 \approx \exp\left(\frac{E_\gamma}{k_B T}\right)$ che rende la relazione accurata per elevati Q -value, o per valori inferiori ad 1MeV se sono coinvolte particelle cariche, per via dell'effetto tunnel quantistico. In ogni caso la relazione (2.9) non vale per reazioni del tipo (n, γ) con bassi Q -value.

Capitolo 3

Implementazione

L'obiettivo di questa tesi è la stesura di una subroutine per un programma in *Wolfram Mathematica 13.3*® che calcoli i prodotti di reazione in un plasma. Vengono considerate solo reazioni nucleari binarie, ovvero dove i reagenti iniziali sono solo due, e assorbimenti fotonici. Ovviamente vi possono essere processi più complicati, coinvolgenti reazioni ternarie, quaternarie e altri tipi di processi come i decadimenti β , come riportato nella Ref. [4], di cui noi non terremo conto in questa trattazione. In questo contesto si suppone perciò l'ambiente in equilibrio termodinamico, affinché valgano le equazioni ricavate nel capitolo 1.

3.1 Programma

Consideriamo una reazione tra due nuclei 1 e 2, il rate di variazione dell'abbondanza della specie 1 che reagisce con la specie 2 è:

$$\left(\frac{dN_1}{dt}\right)_2 = -(1 + \delta_{12})r_{12}, \quad (3.1)$$

dove N_1 è il numero di particelle del tipo 1 per metro cubo e il termine con la delta di Kronecker tiene conto della possibilità che le specie siano la medesima, ottenendo una variazione doppia. Infine, sostituendo il rate con l'equazione (1.8) troviamo:

$$\left(\frac{dN_1}{dt}\right)_2 = -N_1N_2 \langle \sigma v \rangle_{12}. \quad (3.2)$$

Chiaramente l'equazione di cui sopra tiene conto solamente di una specifica reazione nucleare $1+2 \rightarrow 3+4$ come nel capitolo 1, che consuma nel processo particelle di tipo 1 e 2. Considerando ora l'influenza di tutte le possibili reazioni nucleari binarie che coinvolgono la specie i -esima, l'equazione (3.2) assume la forma:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j,k} N_jN_k \langle \sigma v \rangle_{jk \rightarrow i} - \sum_n N_nN_i \langle \sigma v \rangle_{ni}. \quad (3.3)$$

Dove il primo termine a secondo membro somma tutti i contributi delle reazioni che hanno la specie i -esima come prodotto e il secondo termine sottrae i contributi di quelle che ce l'hanno come reagente. Si ottiene quindi un sistema di equazioni differenziali, una per ogni specie, che una volta risolto fornisce le densità numeriche di ogni nuclide al variare del tempo. La subroutine oggetto della tesi si inserisce nel programma per il calcolo del rate di reazione in equazione (3.2).

3.2 Subroutine

3.2.1 Reazioni termonucleari

La strategia utilizzata per l'implementazione consiste nella definizione dell'equazione (1.14) in un *notebook* dedicato per l'organizzazione delle funzioni utili, assieme alla funzione integranda della medesima equazione, ovvero:

$$\left(\frac{8}{\pi\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(k_B T)^{\frac{3}{2}}} \sigma(E) E \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right). \quad (3.4)$$

Successivamente la computazione della *subroutine* viene implementata direttamente nel programma per rendere le funzioni definite esternamente il più generali possibili e svolgere tutti i calcoli numerici in un solo *notebook*, non prima di aver dimensionato correttamente le grandezze in modo da ottenere un rate in $\frac{m^3}{sec}$.

All'interno del programma principale le sezioni d'urto vengono lette da un file di dati sperimentali in unità di millibarn [mb] ed in funzione dell'energia in MeV, viene quindi inizializzata la funzione $\sigma[ind][E]$ che viene definita come l'interpolazione dei dati. *ind* è la variabile che identifica l'indice di una reazione, in questo modo è possibile lavorare su più reazioni contemporaneamente e richiamare i singoli risultati assegnando un valore a *ind*, *E* è l'energia, la variabile indipendente in cui è definita la sezione d'urto. Di seguito due esempi di sezioni d'urto di reazioni i cui risultati saranno riportati nelle prossime sezioni.

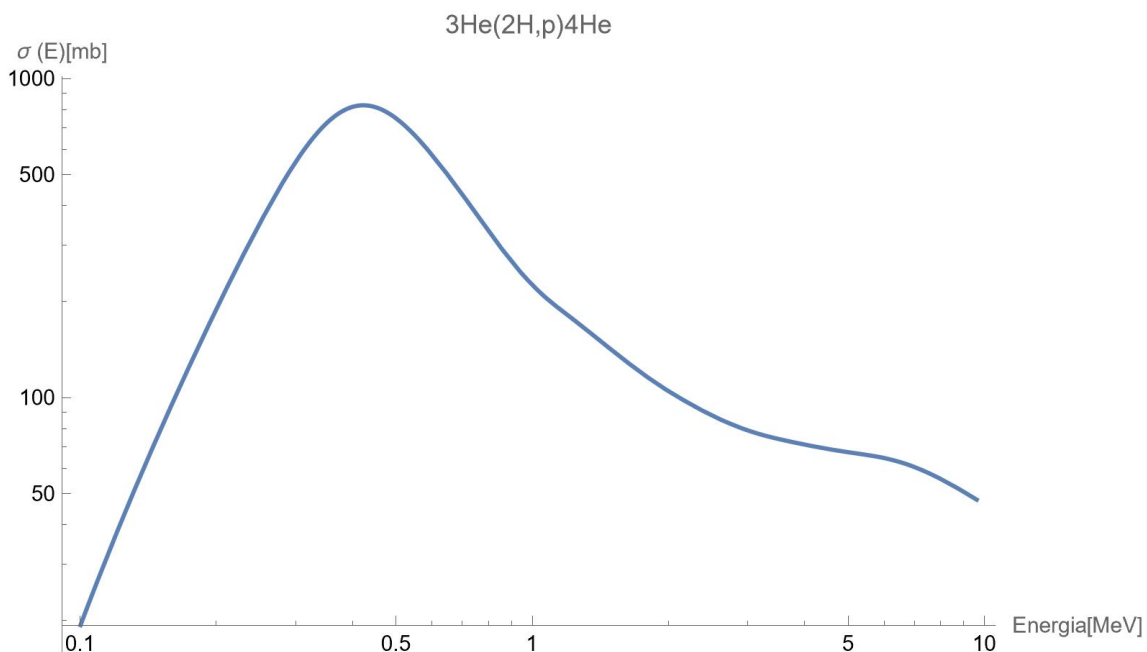


Figura 3.1: sezione d'urto della reazione ${}^3\text{He}({}^2\text{H},\text{p}){}^4\text{He}$ in scala bilogarithmica, dati presi da [1]

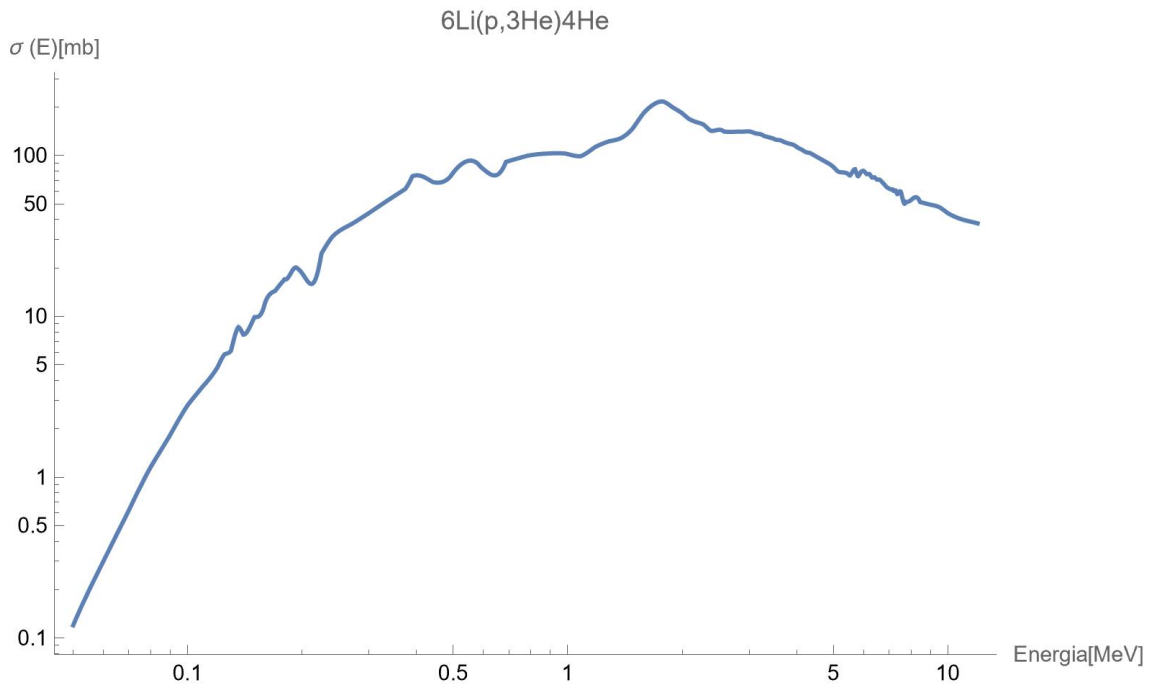


Figura 3.2: sezione d'urto della reazione ${}^6\text{Li}(p,{}^3\text{He}){}^4\text{He}$ in scala bilogarithmica, dati presi da [1]

Chiaramente, essendo delle funzioni non analitiche interpolate su dati sperimentali, le sezioni d'urto avranno un intervallo di definizione compreso tra un'energia minima ed un'energia massima, ciò influirà considerevolmente sui risultati perché non sarà possibile svolgere l'integrale di (3.4) su tutta la retta reale, sottostimando i risultati, ma per le temperatura a cui il picco dell'integrando si trova nel range di energie solamente la coda della distribuzione viene eliminata dall'integrazione e si ottengono comunque risultati accurati. I dati ricavati dalla Ref.[1] forniscono un'interpolazione delle sezioni d'urto in un intervallo di energie corrispondenti a temperature dell'ordine di 10^{10}K . Vengono presentati nelle immagini 3.3 e 3.4 i riferimenti grafici della distribuzione di Maxwell-Boltzmann a tale temperatura in relazione all'intervallo di definizione delle sezioni d'urto i cui limiti sono indicati in rosso.

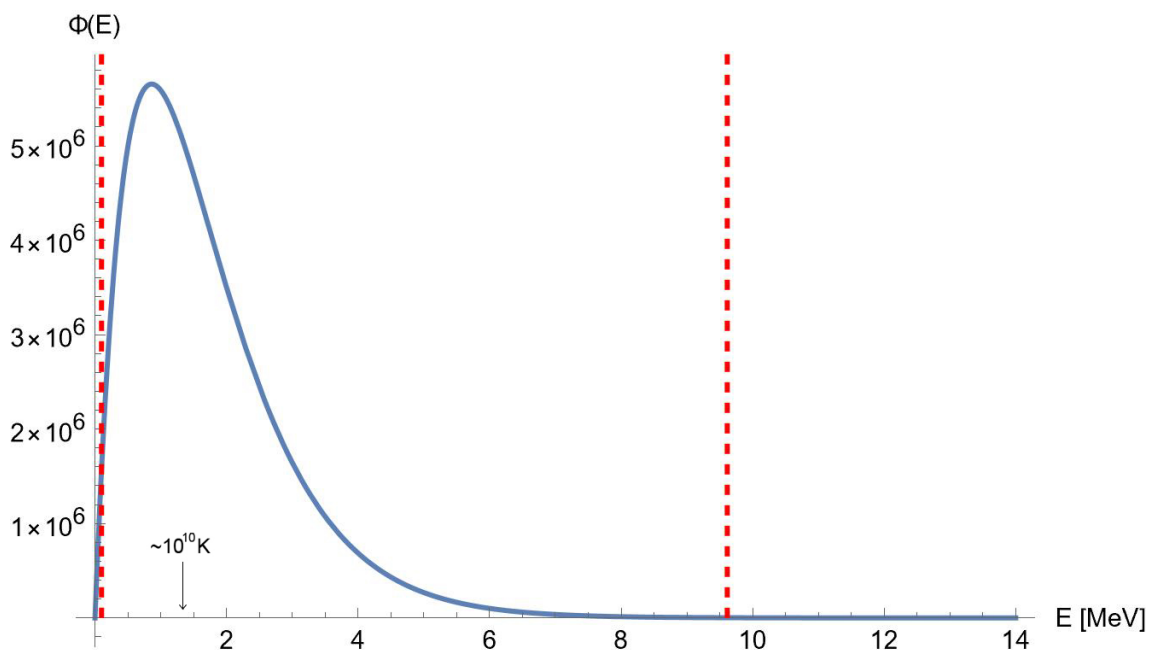


Figura 3.3: distribuzione energetica e limiti di integrazione, rispettivamente 0,1MeV e 9,61MeV, per la reazione ${}^3\text{He}({}^2\text{H},p){}^4\text{He}$

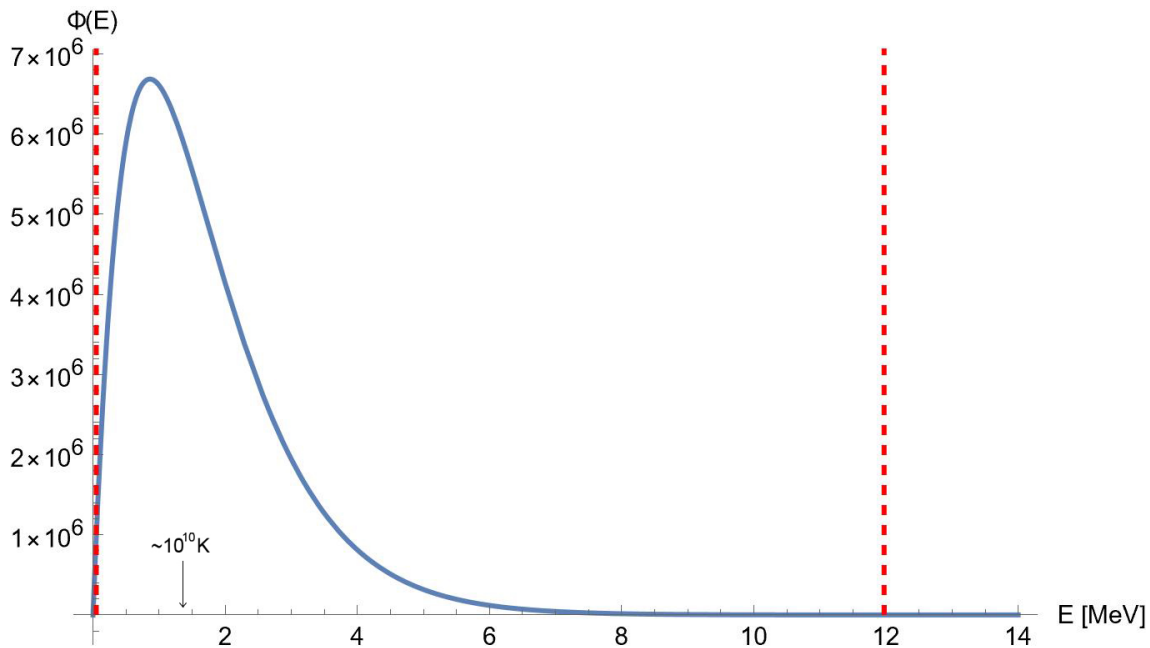


Figura 3.4: distribuzione energetica e limiti di integrazione, rispettivamente 0,05MeV e 11,97MeV, per la reazione ${}^6\text{Li}(p, {}^3\text{He}){}^4\text{He}$

Per quanto riguarda la massa ridotta è calcolata utilizzando la funzione “*IsotopeData*” di Mathematica riportata nella Ref.[5], che restituisce la massa atomica di un elemento dato come *input* sotto forma di lista, riportante in ordine il numero atomico [Z] e il numero di massa atomica [A], viene poi sottratta la massa di Z elettroni per trovare la massa della specie nucleare e in fine la massa ridotta è calcolata con $\mu[k] = \frac{m[i]m[j]}{m[i]+m[j]}$, dove *i* e *j* sono le specie coinvolte nella reazione con indice *k*.

Per le ragioni sopra discusse è quindi necessario passare come *input* alla funzione per il calcolo del *rate* anche una variabile di temperatura e i limiti di definizione della sezione d’urto, oltre alle grandezze dipendenti dalla specifica reazione, quali la sezione d’urto stessa e la massa ridotta. Tutte le variabili eccetto la temperatura sono definite come liste dipendenti da un indice per poter gestire più reazioni contemporaneamente, come già spiegato all’inizio di questa sezione.

In definitiva è sufficiente calcolare le masse ridotte per le singole reazione e richiamare la funzione $\langle \sigma v \rangle$ in un ciclo che scorra tutti gli indici di reazioni, scegliendo una temperatura adeguata per il contesto, nel nostro caso abbiamo deciso di mantenere la temperatura come variabile indipendente in modo da visualizzare i risultati in funzione di essa.

3.2.2 Reazioni di fotodisintegrazione

Nel contesto di reazioni di fotodisintegrazione la procedura di implementazione è la medesima utilizzata per le reazioni termonucleari, con ovvie differenze. Innanzi tutto, nello stesso *notebook* della maxwelliana, la distribuzione di Planck viene inizializzata assieme all’equazione (2.6) e al suo integrando. In questo caso:

$$N_\gamma(E_\gamma, T)c\sigma(E_\gamma), \quad (3.5)$$

dove $N_\gamma(E_\gamma, T)$ è la distribuzione di Planck alla temperatura T, *c* è la velocità della luce e $\sigma(E_\gamma)$ la sezione d’urto.

Le sezioni d’urto vengono lette nel programma principale nella stessa maniera delle reazioni termonucleari e definite come interpolazioni di dati sperimentali ricavati dalla Ref.[1], in Fig. 3.5 è riportato il grafico della sezione d’urto della reazione di fotodisintegrazione del deutrone in funzione dell’energia del fotone incidente.

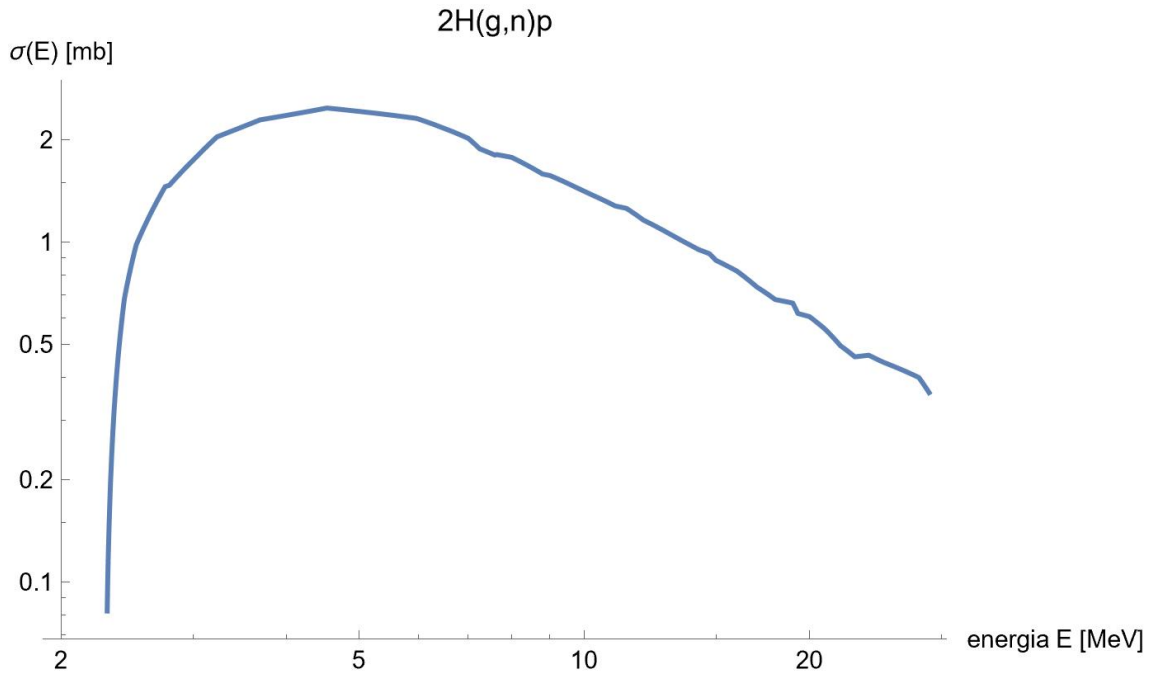


Figura 3.5: interpolazione della sezione d’urto della reazione ${}^2\text{H}(\gamma,n)\text{p}$ in scala bilogarithmica, dati presi da [1]

Le sezioni d’urto così ricavate presentano le stesse criticità del caso delle reazioni termonucleari, rimangono ovvero definite solo per un certo intervallo d’energia delimitato da un’energia minima ed un’energia massima, perciò l’integrale per il calcolo di (2.6) può essere eseguito solo su tale intervallo e non su tutta la retta reale. In questo caso però, grazie all’energia di *threshold* identificata dal *Q-value* negativo, l’integrale è già limitato inferiormente, ciò consente un’accurata stima del *rate* di reazione anche per basse temperature. La situazione è riportata in scala nei grafici seguenti, dove sono confrontate la distribuzione di Planck, la sezione d’urto e la (3.5), ovvero la convoluzione delle prime due, alle temperature di 10^9K e 10^{10}K per la reazione ${}^2\text{H}(\gamma,n)\text{p}$.

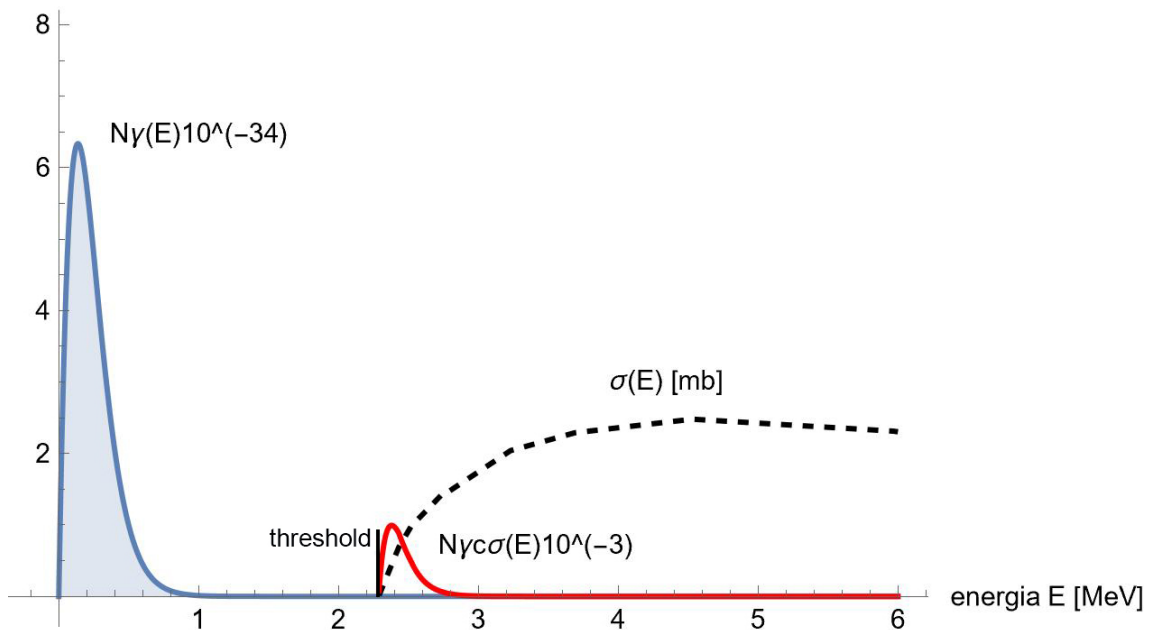


Figura 3.6: Confronto tra distribuzione di Planck a 10^9K (linea azzurra), sezione d’urto della reazione ${}^2\text{H}(\gamma,n)\text{p}$ (linea nera tratteggiata) e la loro convoluzione (linea rossa), il threshold è l’energia di legame del deuterone: 2,224 MeV

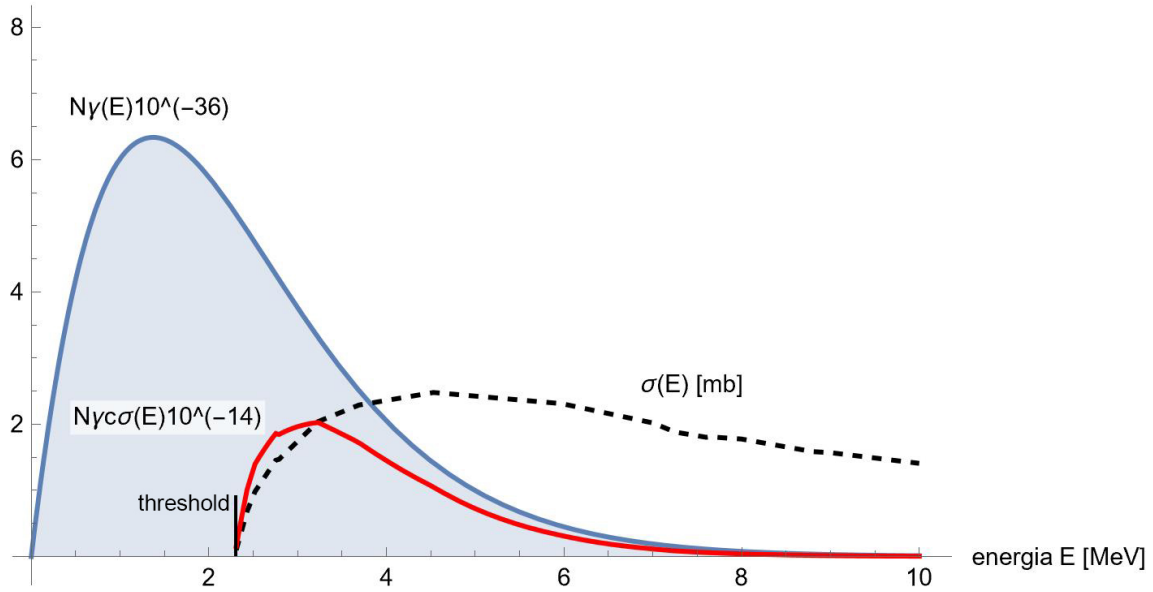


Figura 3.7: Confronto tra distribuzione di Planck a 10^{10}K (linea azzurra), sezione d'urto della reazione ${}^2\text{H}(\gamma,n)\text{p}$ (linea nera tratteggiata) e la loro convoluzione (linea rossa), il threshold è l'energia di legame del deuterone: 2,224 MeV

Si noti che le funzioni sono state riscalate per assumere lo stesso ordine di grandezza, in modo da essere visibili nello stesso grafico.

In definitiva, la funzione $\langle \sigma v \rangle_{3\gamma}$ implementata è dipendente dalla temperatura del bagno di fotoni, dalla sezione d'urto interpolata e dai due estremi dell'intervallo su cui è definita la sezione d'urto, è sufficiente richiamarla in un ciclo che scorre su degli indici che identifichino le reazioni, analogamente a come fatto per la sezione precedente.

Capitolo 4

Risultati e conclusioni

Nel capitolo 3 è stato presentato il metodo di implementazione utilizzato per introdurre la subroutine nel programma principale, in questo capitolo presenteremo dei risultati utilizzati per verificare la correttezza degli *output* confrontati con dei dati di riferimento estrapolati dal paper [7]. L'articolo presenta diverse reazioni termonucleari, come già anticipato sono state scelte per i nostri scopi le reazioni ${}^3\text{He}({}^2\text{H},p){}^4\text{He}$ e ${}^6\text{Li}(p,{}^3\text{He}){}^4\text{He}$, i cui *rate* sono presentati in $\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}\cdot\text{sec}}$ e per un range di temperature da 10^6K a 10^{10}K , è stato quindi necessario moltiplicare gli output della subroutine per il numero di Avogadro N_A e per un fattore 10^6 . I grafici seguenti mostrano i *rate* in funzione della temperatura calcolati con *Mathematica* e confrontati con i dati presi da [7] su un grafico a scala bilogarithmica.

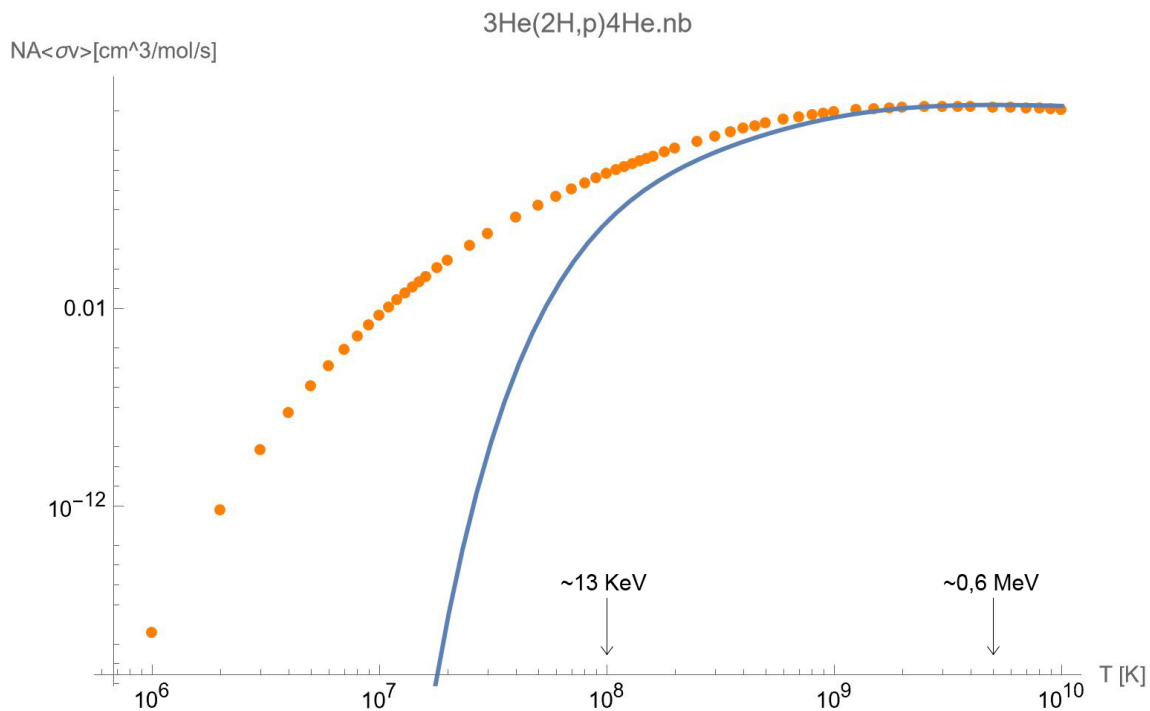
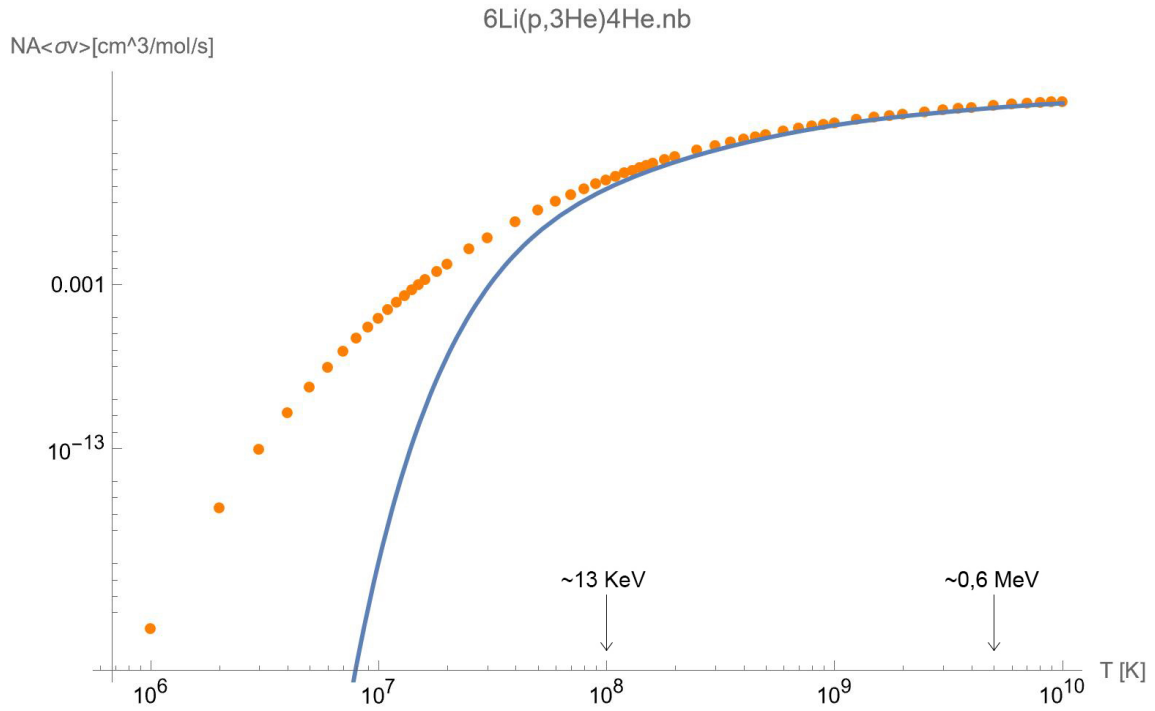


Figura 4.1: Confronto tra dati Y. Xu et al. e output della subroutine per la reazione ${}^3\text{He}({}^2\text{H},p){}^4\text{He}$


 Figura 4.2: Confronto tra dati Y. Xu et al. e output della subroutine per la reazione ${}^6\text{Li}(p,{}^3\text{He}){}^4\text{He}$

Possiamo confrontare i risultati numericamente nelle tabelle seguenti.

${}^3\text{He}({}^2\text{H},p){}^4\text{He}$		
$T[10^9 K]$	rate da Y. Xu et al. [$\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}\cdot\text{sec}}$]	rate calcolato [$\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}\cdot\text{sec}}$]
0,005	$1,11 \cdot 10^{-6}$	$7,40 \cdot 10^{-94}$
0,01	$4,15 \cdot 10^{-3}$	$1,78 \cdot 10^{-43}$
0,05	$1,62 \cdot 10^3$	$2,47 \cdot 10^3$
0,1	$6,38 \cdot 10^4$	$0,025 \cdot 10^4$
0,5	$2,31 \cdot 10^7$	$6,63 \cdot 10^6$
1	$8,49 \cdot 10^7$	$4,75 \cdot 10^7$
5	$1,53 \cdot 10^8$	$2,05 \cdot 10^8$
10	$1,17 \cdot 10^8$	$1,82 \cdot 10^8$

 Tabella 4.1: Confronto tra dati Y. Xu et al. e output della subroutine per la reazione ${}^3\text{He}({}^2\text{H},p){}^4\text{He}$

${}^6\text{Li}(p,{}^4\text{He}){}^3\text{He}$		
$T[10^9 K]$	rate da Y. Xu et al. [$\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}\cdot\text{sec}}$]	rate calcolato [$\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}\cdot\text{sec}}$]
0,005	$5,28 \cdot 10^{-10}$	$1,17859 \cdot 10^{-45}$
0,01	$8,58 \cdot 10^{-6}$	$1,43511 \cdot 10^{-20}$
0,05	32,8	1,55793
0,1	$2,31 \cdot 10^3$	$0,7252 \cdot 10^3$
0,5	$1,35 \cdot 10^6$	$0,892585 \cdot 10^6$
1	$7,05 \cdot 10^6$	$5,36305 \cdot 10^6$
5	$7,83 \cdot 10^7$	$6,18 \cdot 10^7$
10	$1,39 \cdot 10^8$	$1,15491 \cdot 10^8$

 Tabella 4.2: Confronto tra dati Y. Xu et al. e output della subroutine per la reazione ${}^6\text{Li}(p,{}^3\text{He}){}^4\text{He}$

Si può ben notare come per la reazione di ${}^6\text{Li}(p, {}^3\text{He}){}^4\text{He}$ sotto ai 10^8K il *rate* calcolato si discosti drasticamente dai valori attesi, mentre per ${}^3\text{He}({}^2\text{H}, p){}^4\text{He}$ ciò avviene già attorno ai 10^9K . Questo è ovviamente dovuto a quanto già discusso in sezione 3.2.1, infatti al diminuire della temperatura il picco della distribuzione si sposta verso energie inferiori, uscendo dall'intervallo di definizione della sezione d'urto, ciò fa sì che l'integrale venga eseguito sulla convoluzione della sezione d'urto con la coda della Maxwell-Boltzmann, che essendo a decrescita esponenziale apporta un contributo esponenzialmente inferiore.

Un'ulteriore differenza con i dati di riferimento è che nella reazione ${}^3\text{He}({}^2\text{H}, p){}^4\text{He}$ la stima del *rate* risulta maggiore rispetto ai dati alle alte temperature, ciò sembra in contraddizione con il principio di integrazione che taglia la coda della distribuzione. La spiegazione più probabile è che la differenza sia dovuta alle sezioni d'urto, le stime del programma sono infatti state calcolate a partire da delle sezioni d'urto interpolate, mentre i dati di riferimento sono stati calcolati analiticamente con un modello statistico.

Nel caso delle reazioni di fotodisintegrazione è stata utilizzata la reazione ${}^2\text{H}(\gamma, n)p$ come *benchmark*, dove un nucleo di deuterio assorbe un fotone gamma che fornisce l'energia sufficiente alla separazione in un protone e un neutrone.

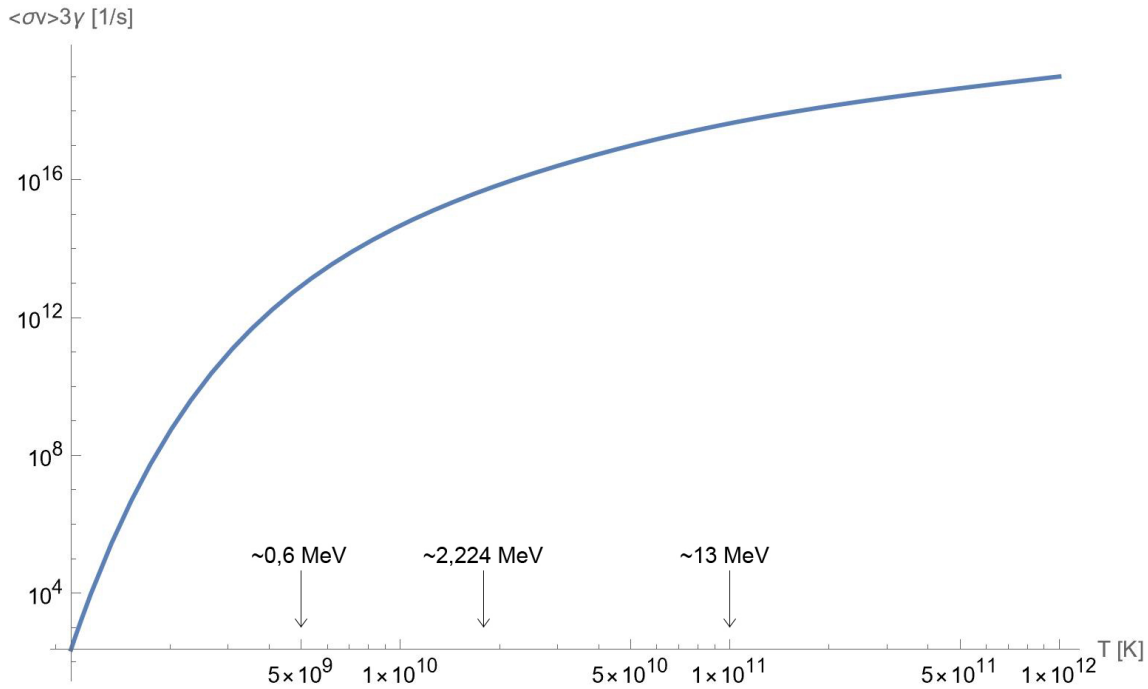


Figura 4.3: *rate* della reazione ${}^2\text{H}(\gamma, n)p$ restituito dalla *subroutine*

L'immagine 4.3 mostra il *rate* $\langle \sigma v \rangle_{3\gamma}$ della reazione di fotodisintegrazione del deutone in scala bilogarithmica, in questo caso il crollo esponenziale del *rate* per basse temperature è dovuto all'energia di *threshold* che elimina dalla convoluzione il picco della planckiana, analogamente a come succede per le sezioni d'urto delle reazioni termonucleari precedentemente discusse, ma in questo caso il comportamento è fisicamente previsto. Viceversa ci si potrebbe attendere che aumentando la temperatura a valori ancora più elevati il picco della distribuzione esca dall'intervallo di definizione della sezione d'urto e il *rate* torni a scendere assumendo valori inaccurati. Ciò avverrebbe con un andamento meno rapido che nel caso di reazioni tra nuclei dato che l'andamento della distribuzione di Planck è quadratica a basse energie, mentre quella di Maxwell-Boltzmann è lineare, perciò nella coda sinistra della planckiana sono contenuti più stati rispetto alla maxwelliana.

Nel grafico è riportato il valore di $2,224\text{MeV}$ che rappresenta l'energia di legame del deutone, si nota che il *rate* cresce prima di tale energia, ciò è dovuto al fatto che il riferimento nel grafico rappresenta

l'energia media del bagno di fotoni, ma ad energie minori sono comunque presenti fotoni nella coda della distribuzione ad energia sufficiente per innescare la separazione del deutone.

In conclusione, si può dire che la subroutine è altamente dipendente dalle sezioni d'urto, se queste fossero sostituite con una funzione analitica derivante da un modello teorico il programma fornirebbe accurate previsioni per i *rate* di reazione. In alternativa è sufficiente fare uso di sezioni d'urto interpolate su un intervallo energetico adeguato al contesto, ovvero che contenga il picco della distribuzione di Maxwell-Boltzmann alla temperatura in esame.

Bibliografia

- [1] *Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR)*. <https://www-nds.iaea.org/exfor/exfor.htm>. Accessed: giugno 2023.
- [2] A. Formicola e G. Imbriani. «Introduction to experimental nuclear astrophysics». In: *The European Physical Journal Plus* 134.3 (mar. 2019), p. 89. DOI: 10.1140/epjp/i2019-12497-1. URL: <https://doi.org/10.1140/epjp/i2019-12497-1>.
- [3] W. Raphael Hix e Bradley S. Meyer. «Thermonuclear kinetics in astrophysics». In: *Nuclear Physics A* 777 (set. 2006), pp. 188–207. DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2004.10.09. URL: <https://doi.org/10.1016%2Fj.nuclphysa.2004.10.09>.
- [4] C. Iliadis. *Nuclear Physics of Stars*. Physics textbook. Wiley, 2015. ISBN: 9783527336487. URL: <https://books.google.it/books?id=iUcKbgAAQBAJ>.
- [5] Wolfram Research. *IsotopeData*. <https://reference.wolfram.com/language/ref/IsotopeData.html>. Accessed: 30-October-2023. 2014.
- [6] C.E. Rolfs e W.S. Rodney. *Cauldrons in the Cosmos: Nuclear Astrophysics*. Theoretical Astrophysics. University of Chicago Press, 1988. ISBN: 9780226724577. URL: <https://books.google.it/books?id=BHKLFPUS1RcC>.
- [7] Y. Xu et al. «NACRE II: an update of the NACRE compilation of charged-particle-induced thermonuclear reaction rates for nuclei with mass number $A \leq 16$ ». In: *Nuclear Physics A* 918 (set. 2013), pp. 35–44. DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2013.09.07. URL: <https://doi.org/10.1016%2Fj.nuclphysa.2013.09.07>.