Scuola di Scienze Dipartimento di Fisica e Astronomia Corso di Laurea in Fisica

# Sviluppo di una procedura automatizzata per il calcolo di sezioni d'urto stellari

**Relatore:** 

Prof. Francesco Giacomini

**Correlatore:** 

Prof. Cristian Massimi

Presentata da: Samuele Lanzi

Anno Accademico 2021/2022

# Abstract

In questa tesi mostreremo qual è l'impatto delle sezioni d'urto di cattura neutronica  $(n, \gamma)$  mediate con la distribuzione maxwelliana di energia (MACS), sull'evoluzione delle stelle giganti rosse. Per raggiungere questo obiettivo, è stata sviluppata una procedura automatizzata per calcolare le MACS, partendo da librerie di dati nucleari valutati. Le MACS così ottenute sono state inserite come parametri di input per il codice FUNS, il quale implementa modelli di evoluzione stellare. Vengono mostrati risultati circa le abbondanze isotopiche degli elementi sintetizzati nel processo-s ottenuti usando differenti librerie. Infine viene mostrato un esempio dell'impatto dei dati ottenuti all'esperimento n\_TOF.

# Indice

A	bstra	$\mathbf{ct}$	i	ii										
El	enco	delle	figure	7 <b>i</b>										
El	enco	delle	tabelle vi	ii										
Introduzione														
1 Fisica nucleare in astrofisica														
	1.1	Evolu	zione stellare	3										
		1.1.1	Il diagramma H-R	3										
		1.1.2	Pre-main sequence	4										
	1.1.3 Main sequence													
		Ramo delle giganti rosse e la fusione dell'He $\ .\ .\ .\ .\ .$	5											
		Ramo asintotico delle giganti	6											
	1.2	Nucleo	osintesi	7										
		1.2.1	Nucleosintesi nella main sequence	7										
		1.2.2	Nucleosintesi fino al picco del ferro	9										
		1.2.3	Nucleosintesi degli elementi pesanti $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 1$	0										
		1.2.4	Il processo- <i>s</i>	3										
<b>2</b>	Sezi	ioni d'	urto, misure e valutazioni 1	<b>5</b>										
	2.1	Sezion	e d'urto indotta da neutroni 1	5										
		2.1.1	Nucleo composto	5										
		2.1.2	La formula di Breit-Wigner $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 1$	7										
		2.1.3	Reaction rate astrofisico	8										
		2.1.4	Stellar Enhancement Factor (SEF) 1	9										
	2.2	La fac	ility e le misure ad n_TOF	1										

		2.2.1	La facility $n_{-}TOF$	21
		2.2.2	La tecnica di attivazione $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	22
		2.2.3	La tecnica del tempo di volo	23
		2.2.4	Misure di cattura	24
	2.3	Librer	ie di dati nucleari valutati	26
		2.3.1	Contenuto di una valutazione ENDF $\ .\ .\ .\ .\ .\ .$ .	26
		2.3.2	Formato dei dati $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	27
		2.3.3	Utilizzo dei codici PREPRO	29
3	Pro	cedura	a automatizzata e risultati	31
	3.1	Proces	ssamento automatizzato di librerie in formato ENDF $\ .\ .\ .$ .	31
		3.1.1	Riproducibilità	32
		3.1.2	La struttura del codice $\ldots$	33
		3.1.3	Utilizzo della Continuous Integration	37
	3.2	Risult	ati	39
		3.2.1	Analisi $^{94,\ 95,\ 96}{\rm Mo:}$ confronto con i dati preliminari di n_TOF	39
		3.2.2	Risultati dei modelli astrofisici	43
Co	nclu	isioni		45
Rir	ıgra	ziame	nti	49

# Elenco delle figure

1.1	Diagramma di Hertzsprung-Russell	4
1.2	Tracce evolutive per stelle di diversa massa	6
1.3	Abbondanza isotopica relativa nel nostro sistema solare	8
1.4	La catena pp	8
1.5	Il ciclo CNO	9
1.6	Rappresentazione schematica dei processi $s$ e $r$	12
1.7	I prodotti $N_A \sigma_A^{\text{Maxw}}(kT = 30 \text{ keV})$ per gli elementi <i>s</i> -only	14
1.8	La MACS a $kT = 30$ keV per le reazioni $(n, \gamma)$	14
2.1	Rappresentazione schematica di una cattura neutronica	16
2.2	Sezioni d'urto parziali e totale per l'istopo $^{92}{\rm Zr}$	17
2.3	Una risonanza isolata ricostruita a partire dalla formula di Breit-Wigner	18
2.4	Valori del SEF in funzione della temperatura	20
2.5	Schema della facility $n\_\mathrm{TOF}$	21
2.6	(A) Tipico apparato sperimentale per la tecnica di attivazione. (B)	
	Tipico spettro neutronico dovuto all'attivazione $\ldots \ldots \ldots \ldots$	23
2.7	Rappresentazione schematica dello spettro di tempo di volo	24
2.8	Schema degli eventi di diffusione multipla che contribuiscono allo yield	25
2.9	La struttura interna di una libreria in formato ENDF	27
2.10	Struttura di una linea di un file ENDF $\ .\ .\ .\ .\ .\ .\ .$	28
2.11	Un esempio di un file in formato ENDF	28
2.12	Il file di input per l'eseguibile linear	30
2.13	Il file contenente i parametri per ricostruire le risonanze	30
2.14	Flusso di dati in ingr sso e uscita dagli eseguibili linear e ${\tt recent}$	30
3.1	Schematizzazione del problema affrontato in questo lavoro di tesi	32
3.2	Il Dockerfile per creare l'ambiente di sviluppo	33

3.3	La creazione di un container a partire da un ${\tt Dockerfile}$	33
3.4	Schema delle dipendenze da librerie esterne	34
3.5	Pipeline implementata dall'eseguibile one_element.sh	36
3.6	Organizzazione dei file di output in cartelle e sotto cartelle $\ \ .$	36
3.7	Formato tipico di una tabella ottenuta in output dal codice	37
3.8	Istruzioni contenute nel file .gitlab-ci.yml	38
3.9	Sezione d'urto e MACS della reazione $^{94}{\rm Mo}~(n,\gamma)$ $^{95}{\rm Mo}$	40
3.10	Sezione d'urto e MACS della reazione $^{95}{\rm Mo}~(n,\gamma)$ $^{96}{\rm Mo}$	41
3.11	Sezione d'urto e MACS della reazione $^{96}{\rm Mo}~(n,\gamma)$ $^{97}{\rm Mo}$	42
3.12	Abbondanze finali degli elementi sulla superficie stellare	43
3.13	Rapporti isotopici ottenuti da FUNS $\ \ldots \ \ldots$	44

# Elenco delle tabelle

1.1	Lista degli elementi $s$ -only		•				•						•				•				•			1	3
-----	--------------------------------	--	---	--	--	--	---	--	--	--	--	--	---	--	--	--	---	--	--	--	---	--	--	---	---

# Introduzione

Tutti gli atomi che compongono la Terra, compresa la vita come noi la conosciamo, sono stati forgiati all'interno delle stelle e durante le catastrofiche esplosioni di supernova. Il compito dei modelli di evoluzione stellare è quello di spiegare le abbonanze degli elementi prodotti dai processi di nucleosintesi, per farlo si basano sulle sezioni d'urto delle reazioni coinvolte, mediate con la distribuzione maxwelliana di energia delle particelle all'interno del plasma stellare.

I valori sperimentali delle sezioni d'urto di reazione sono registrati in librerie di dati valutati e continuamente aggiornate sulla base di nuovi dati nucleari prodotti dagli esperimenti. Diversi istituti internazionali (ad esempio JEFF in Europa, END-F/B negli stati uniti, JENDL in Giappone) curano queste "librerie" di dati nucleari, rilasciando periodicamente nuove versioni. I dati sono pubblicamente disponibili, ma in un formato FORTRAN che necessita di essere processato per estrarre le informazioni di interesse. È da questa necessità che si è pensato di predisporre una procedura automatizzata con lo scopo di (i) facilitare la gestione di queste librerie; (ii) calcolare la sezione d'urto stellare (cioè la media sulla distribuzione di energia delle particelle incidenti) tramite integrazione numerica; (iii) creare un file di input per i modelli di evoluzione stellare con un formato particolare.

I risultati ottenuti in questo lavoro di tesi sono stati esposti nella Poster Session della conferenza Nuclear Physics in Astrophysics - X tenutasi tra il 5 e il 9 Settembre 2022 al CERN: The impact of  $n_TOF$  data on s-process nucleosynthesis.

# 1 Fisica nucleare in astrofisica

L'origine degli elementi chimici e i relativi isotopi è strettamente legata alla storia evolutiva delle stelle.

Idrogeno, elio ed una piccola parte di litio si sono formati nella nucleosintesi primordiale, avvenuta nei primi minuti dopo il Big Bang. Successivamente l'universo, espandendo, si è raffreddato al punto di non permettere più reazioni nucleari, perciò tutti gli elementi con numero atomico Z > 3 sono sintetizzati all'interno delle stelle o durante l'esplosione stellare.

In questo capitolo andremo a parlare delle fasi principali e di maggior interesse dell'evoluzione stellare (Sezione 1.1) e di come queste si rendono protagoniste nella nucleosintesi degli elementi (Sezione 1.2).

# 1.1 Evoluzione stellare

#### 1.1.1 Il diagramma H-R

La radiazione emessa per unità di tempo dalla superficie di una stella, o luminosità, varia considerevolemente da una stella all'altra, lo stesso vale per la temperatura superficiale. Se rappresentiamo su un grafico queste due quantità possiamo vedere che sono correlate e vanno a costituire il diagramma di Hertzsprung-Russell (H-R) rappresentato schematicamente in Figura 1.1.

La maggior parte delle stelle occupano la sequenza principale (*Main Sequence*, MS), la quale si estende diagonalmente dall'alto a sinistra (stelle calde e luminose) fino in basso a destra (stelle fredde e poco luminose). Dalla MS si diparte poi il cosiddetto ramo delle giganti rosse (*Red Giant Branch*, RGB): fanno parte di questa zona stelle grandi e fredde. Alquanto al di sotto della MS c'è poi un gruppo di stelle compatte, debolmente luminose e azzurre dette nane bianche.



FIGURA 1.1: Diagramma di Hertzsprung-Russell semplificato per le stelle. Sugli assi del diagramma vengono riportate in ascissa la temperatura superficiale e in ordinata la luminosità rapportata con la luminosità solare  $L_{\odot}$ .

Nelle stelle appartenenti alla MS esiste una relazione che lega massa (M) e luminosità (L):

$$L \propto M^a$$
 (1.1.1)

dove 1 < a < 6a seconda della massa della stella.

#### 1.1.2 Pre-main sequence

Le stelle sono delle strutture autogravitanti in equilibrio termico ed idrostatico che hanno origine da una nube interstellare gassosa, composta prevalentemente da idrogeno, elio e in piccola parte, da metalli. Nelle prime fasi del collasso la stella genera energia tramite la contrazione gravitazionale, ma quando il nucleo raggiunge un sufficiente grado di densità, esso comincia a fondere l'idrogeno in elio (H-burning), producendo sempre più energia.

Quando l'H-burning diviene il processo dominante e l'energia ricavata dalla contrazione gravitazionale si è dispersa, la stella giace in un punto della sequenza principale nel diagramma H-R, dipendente principalmente dalla sua massa. Questo atto dell'evoluzione segna l'entrata della stella nella sequenza principale di età zero.

## 1.1.3 Main sequence

Stelle con massa inferiore a 0.08  $M_{\odot}$  (con  $M_{\odot}$  la massa del sole) non riescono a raggiungere temperature tali da innescare l'H-burning (~ 6 × 10<sup>6</sup> K) e si raffredderanno lentamente. Stelle con massa maggiore riescono, invece, a raggiungere una temperatura di core tale da instaurare cicli di reazioni che portano alla fusione dell'idrogeno in elio. Esistono due processi principali di fusione: la catena pp e il ciclo CNO (vedi Sezione 1.2.1). Le due hanno un'efficienza che dipende dalla temperatura: questo significa che a seconda della massa della stella potremo veder prevalere una delle due reazioni. In particolare, la catena pp è la più osservata in stelle di massa ~ 1.2 - 1.3  $M_{\odot}$ , mentre il ciclo CNO è dominante nelle stelle di massa più elevata, sebbene anche in queste stelle la catena pp sia comunque attiva con minor efficienza. Sembra quindi venir naturale dividere la MS in due parti dipendentemente dalla reazione sfruttata per l'H-burning. Distinguiamo le stelle che appartengono alla *Upper Main Sequence* che sfruttano il ciclo CNO e quelle che appartengono alla *Lower Main Sequence* che invece bruciano l'idrogeno attraverso la catena pp.

Una volta raggiunto l'equilibrio chimico e termico inizia la fase più longeva della vita di una stella, durante la quale viene trasformato prevalentemente l'idrogeno in elio.

## 1.1.4 Ramo delle giganti rosse e la fusione dell'He

La fase di H-burning, che corrisponde alla permanenza della stella nella MS, causa un'enspansione delle regioni più esterne della stella, le quali si raffreddano. Come conseguenza nel diagramma H-R la stella si sposterà verso una minor temperatura ed una più alta luminosità diventando così una gigante rossa.

Quando il nucleo di elio raggiunge le 0.5  $M_{\odot}$  si innescano le reazioni di fusione dell'elio in carbonio dette *triplo-a*. Avvenendo in un ambiente degenere l'He-burning non comporta un aumento della pressione bensì soltanto della temperatura, la quale a sua volta determina la crescita di efficienza delle reazioni nucleari. La fusione dell'elio continua finché localmente non si raggiungono le condizioni per rimuovere la degenerazione: a quel punto il nucleo si espande e controbilancia il processo. Questa particolare fase durante la quale viene prodotta una quantità enorme di energia (~  $10^{10} L_{\odot}$ ) è detta *flash dell'elio*.



FIGURA 1.2: Schema di alcune tracce evolutive per stelle di diversa massa in un diagramma H-R.

#### 1.1.5 Ramo asintotico delle giganti

Una volta esaurito l'elio centrale la stella si contrae finché non raggiunge la temperatura per instaurare la reazione triplo- $\alpha$  nella shell che circonda il core. Inizia così la fase in cui la stella percorre il ramo asintotico delle giganti (Asymptotic Giant Branch, AGB).

Le stelle con massa  $M \geq 10 \ M_{\odot}$  riescono ad attivare le reazioni di fusione del carbonio in un ambiente non degenere arrivando a sintetizzare tutti gli elementi sino al <sup>56</sup>Fe tramite reazioni esoergoniche. Queste stelle proseguono la loro evoluzione esplodendo in una supernova, la quale andrà ad arricchire il mezzo interstellare con gli elementi prodotti attraverso i lunghi cicli di reazioni nucleari.

Le stelle con masse fino a 8  $M_{\odot}$ , invece, proseguono la loro evoluzione entrando nel ramo asintotico delle giganti. L'AGB può essere distinto in due stadi: nel primo stadio, chiamato *Early* AGB, la principale fonte di energia è costituita dall'Heburning nel guscio che circonda il nucleo degenere. Consumandosi, il guscio di elio si assottiglia ed è quindi il guscio di idrogeno più esterno a diventare la principale fonte di energia. Successivamente l'interruzione della produzione di energia da parte del nucleo di elio, segna l'entrata della stella nello stadio *Thermally Pulsing* AGB. Periodicamente (ogni  $10^4 - 10^5$  anni) il guscio di elio, alimentato dalla fusione del sovrastante guscio di idrogeno, si riaccende, producendo per qualche anno grandi quantità di energia. Questi eventi, chiamati *pulse termici*, sono simili al flash dell'elio che avviene nella fase RGB. Una simile produzione di energia porta alla generazione di una zona convettiva fra i due gusci, che espandendosi raffredda il guscio di idrogeno, nel quale vengono interrotte le reazioni nucleari.

Un diagramma che racchiude le fasi di evoluzione trattate in funzione della massa è riportato in Figura 1.2.

# 1.2 Nucleosintesi

Le stelle nella loro evoluzione costituiscono delle vere e proprie "fucine" per la sintesi della maggior parte degli elementi chimici, convertendo idrogeno in elio e l'elio in elementi via via più pesanti.

L'abbondanza degli elementi che si osserva nel sistema solare riportata in Figura 1.3 mostra chiaramente che i nuclei non sono egualmente presenti in esso. Fino al <sup>56</sup>Fe gli elementi vengono prodotti principalmente tramite fusione, gli elementi più pesanti vengono prodotti per cattura neutronica e successivi decadimenti  $\beta$ . Le reazioni di cattura, a seconda delle condizioni in cui avvengono, si raggruppano sotto il nome di processi-*s* (*slow*) o processi-*r* (*rapid*) (vedi Sezione 1.2.3).

## 1.2.1 Nucleosintesi nella main sequence

La fusione dell'idrogeno regola l'evoluzione delle stelle appartenendti alla MS. Questi processi costituiscono catene di reazioni che hanno come scopo quello di trasformare quattro protoni in un nucleo di elio, due positroni e due neutrini elettronici:

$$4p \to {}^{4}\text{He} + 2e^{+} + 2\nu_{e}.$$
 (1.2.1)



FIGURA 1.3: Abbondanza isotopica relativa nel nostro sistema solare. I dati provengono da Lodders, 2021.

Questi prodotti possono essere ottenuti attraverso due diversi cicli di reazione: la catena pp ed il ciclo CNO, nei quali carbonio, azoto e ossigeno fungono da catalizzatori.



FIGURA 1.4: La catena pp. Si notano le reazioni caratteristiche e le probabilita che queste avvengano.

La catena pp è la più efficiente per temperature dell'ordine di  $10^7$  K ed è quella che predomina nel Sole, la Figura 1.4 mostra le reazioni che la costituiscono. Tutte

le diramazioni portano alla produzione di nuclei di elio.

Il ciclo CNO (Figura 1.5) è il più efficiente per la produzione di energia nelle stelle di massa superiore a 1.5  $M_{\odot}$ , può essere suddiviso in due parti: ciclo NO e ciclo CN, il primo avviene molto meno frequentemente del secondo (il rapporto è di circa 1/100). Per questo il ciclo CN prepondera nella produzione energetica, mentre il ciclo NO risulta fondamentale nella nucleosintesi.



FIGURA 1.5: Il ciclo CNO suddiviso nelle due componenti denominate CN e NO.

## 1.2.2 Nucleosintesi fino al picco del ferro

Quando si esaurisce l'idrogeno la stella subisce le trasformazioni descritte nella Sezione 1.1.4. In particolare, quando la massa del nucleo degenere di He è sufficientemente elevata, risultano possibili anche le seguenti reazioni di fusione:

• Reazione triplo- $\alpha$ : quando la temperatura raggiunge 10<sup>8</sup> K the l'elio può essere trasformato in carbonio:

$${}^{4}\text{He} + {}^{4}\text{He} \leftrightarrow {}^{8}\text{Be}$$

$${}^{8}\text{Be} + {}^{4}\text{He} \rightarrow {}^{12}\text{C} + \gamma;$$
(1.2.2)

• Fusione del carbonio: dopo il completo esaurimento dell'elio, alla temperatura di  $5 - 8 \times 10^{10}$  K, iniziano le reazioni di fusione del carbonio:

$${}^{12}C + {}^{12}C \rightarrow {}^{24}Mg + \gamma$$
  

$$\rightarrow {}^{23}Na + {}^{1}H$$
  

$$\rightarrow {}^{20}Ne + {}^{4}He$$
  

$$\rightarrow {}^{23}Mg + n$$
  

$$\rightarrow {}^{16}O + 2 {}^{4}He;$$
  
(1.2.3)

1.2 Nucleosintesi 9

• Fusione dell'ossigeno: avviene a temperature leggermente superiori alle precedenti:

$${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O} \rightarrow {}^{32}\text{S} + \gamma$$

$$\rightarrow {}^{31}\text{P} + {}^{1}\text{H}$$

$$\rightarrow {}^{28}\text{Si} + {}^{4}\text{He} \qquad (1.2.4)$$

$$\rightarrow {}^{31}\text{S} + n$$

$$\rightarrow {}^{24}\text{Mg} + 2 {}^{4}\text{He};$$

• Fusione del silicio: il processo che porta alla sintesi del ferro:

$${}^{28}\text{Si} + {}^{28}\text{Si} \to {}^{56}\text{Ni} + \gamma$$

$${}^{56}\text{Ni} \to {}^{56}\text{Fe} + 2 \ e^- + 2 \ \nu_e.$$
(1.2.5)

## 1.2.3 Nucleosintesi degli elementi pesanti

Se consideriamo l'energia di legame per nucleone in funzione del numero di massa, possiamo notare un punto di massimo in corrispondenza del ferro. Ciò implica che le reazioni di fusione non possono sintetizzare elementi più pesanti del <sup>56</sup>Fe. Per questo motivo si ritiene che le reazioni responsabili della sintesi degli elementi con A > 60 siano le reazioni di cattura neutronica:

$$(Z, A - 1) + n \to (Z, A) + \gamma.$$
 (1.2.6)

Più in particolare la nucleosintesi procede con catture neutroniche seguite da decadimenti  $\beta$ . In base alle densità neutroniche in gioco (che determina il rate di cattura neutronica) vengono distinti due processi: il processo *slow* (processo-*s*) e il processo *rapid* (processo-*r*). Alla luce dell'Equazione 1.2.6 possiamo scrivere un'equazione differenziale che contiene un termine di produzione e uno di distruzione, e nel caso di nucleosintesi di un elemento radioattivo, un termine aggiuntivo legato al suo decadimento:

$$\frac{dN_A(t)}{dt} = \left[-N_n(t)N_A(t)\left\langle\sigma v\right\rangle_A + N_n(t)N_{A-1}(t)\left\langle\sigma v\right\rangle_{A-1}\right] - \lambda_A N_A(t), \quad (1.2.7)$$

dove  $N_A$  e  $N_n$  sono le abbondanze del nucleo A e dei neutroni liberi,  $\langle \sigma v \rangle_A$  è il reaction rate (vedi Sezione 2.1.3) di cattura neutronica che dipende dalla sezione d'urto  $\sigma(v)$  e dalla distribuzione delle velocità relative P(v).  $\lambda_A$  è la costante di decadimento  $\beta$  del nucleo A. Il processo di cattura neutronica avviene quando il termine tra parentesi quadre è positivo e dominante sul termine di decadimento, cioè quando la differenza tra i termini è positiva.

Possiamo definire la sezione d'urto mediata sulla distribuzione di Maxwell (*Maxwellian Average Cross Section*, MACS) come segue:

$$\sigma^{\text{Maxw}}(kT) \equiv \frac{\langle \sigma v \rangle}{v_T}, \qquad (1.2.8)$$

dove  $v_T = (2kT/\mu)^{1/2}$  è la velocità termica,  $\mu$  è la massa ridotta del sistema, T la temperatura assoluta e k la costante di Boltzmann. In questo caso la P(v) diventa la distribuzione di Maxwell delle velocità. Esplicitando l'Equazione 1.2.8, in funzione dell'energia (E), diventa:

$$\sigma^{\text{Maxw}}(kT) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (kT)^{-2} \int_0^\infty \sigma(E) E e^{-\frac{E}{kT}} dE.$$
(1.2.9)

I valori delle sezioni d'urto di reazione  $\sigma(E)$  sono tabulati nei file in formato ENDF-6 (vedi Sezione 2.3), i quali contengono valori di energia e sezioni d'urto misurati nel sistema di riferimento del laboratorio, mentre le espressioni precedentemente elencate fanno riferimento al sistema del centro di massa. Occorre quindi tenere conto di ciò nell'Equazione 1.2.9 (Pritychenko e Mughabghab, 2012):

$$\sigma^{\text{Maxw}}(kT) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{a^2}{(kT)^2} \int_0^\infty \sigma(E_n^L) E_n^L e^{-\frac{aE_n^L}{kT}} dE_n^L, \qquad (1.2.10)$$

dove a = A/(A+1) e  $E_n^L$  è l'energia dei neutroni nel sistema di riferimento del laboratorio.

A questo punto possiamo sostituire le grandezze appena definite nell'Equazione 1.2.7:

$$\frac{dN_A(t)}{dt} = v_T N_n(t) \left[ -N_A(t)\sigma_A^{\text{Maxw}} + N_{A-1}(t)\sigma_{A-1}^{\text{Maxw}} \right] - \lambda_A N_A(t).$$
(1.2.11)

Per un dato isotopo, le sezioni d'urto  $\sigma_{A-1}^{\text{Maxw}}$  e  $\sigma_A^{\text{Maxw}}$ , e la costante di decadimento  $\lambda_A$  sono fissate. Un fattore fondamentale che compete alla formazione del nucleo è il flusso neutronico  $\phi_n \propto N_n(t)v_T$ . La nucleosintesi avverrà quindi in ambienti ad elevato flusso neutronico come nella TP-AGB o nelle esplosioni di supernova.

La differenza tra le scale di tempi della reazione  $(n, \gamma)$  e del decadimento- $\beta$  è ciò che determina la distinzione tra i processi *s* e *r*. Possiamo avere tre tipologie di decadimento- $\beta$ :



FIGURA 1.6: Rappresentazione schematica dei processi s e r a confronto in una porzione della carta dei nuclidi. Il processo s (arancione) si svolge attorno alla valle di stabilità beta, mentre il processo r (blu) esplora una porzione di nuclei altamente instabili.

- $\beta^-$ : un neutrone decade in una coppia elettrone protone ed un antineutrino elettronico. Questo è il più importante decadimento per la nucleosintesi degli elementi pesanti;
- $\beta^+$ : un protone decade in una coppia neutrone positrone ed un neutrino elettronico;
- cattura e<sup>-</sup>: un protone ed un elettrone producono un neutrone e l'emissione di un neutrino elettronico. È un processo importante per il collasso delle stelle massive e nell'esplosione di supernova.

Nel processo-s la cattura neutronica avviene con una scala temporale maggiore rispetto al corrispondente decadimento- $\beta$  e quindi il cammino del processo-s lungo la carta dei nuclidi evolverà attorno alla valle di stabilità (vedi Figura 1.6).

Al contario, nel processo-r la cattura neutronica avviene con una scala temporale minore rispetto al corrispondente decadimento- $\beta$  ed il cammino sulla carta dei nuclidi si discosterà dalla valle di stabilità: si produrranno quindi nuclei altamente instabili (vedi ancora Figura 1.6). La dinamica di questi due processi di nucleosintesi è in gradi di spiegare i picchi di abbondanza in corrispondenza dei numeri magici di neutroni 50, 82, 126 (vedi Figura 1.3), in accordo con il modello nucleare a shell.

## 1.2.4 Il processo-s

I nuclei che si originano dalle catture neutroniche del processo-*s*, se instabili, decadono ancora prima di poter compiere un'ulteriore cattura neutronica. Questo rispecchia il fatto che il termine di decadimento nell'Equazione 1.2.11 risulta dominante nel caso di nuclei instabili. Al contario se il nucleo prodotto è stabile, o comunque con vita media molto maggiore della scala di tempo della reazione di cattura neutronica, il termine di decadimento è completamente trascurabile rispetto agli altri. Considerando l'Equazione 1.2.11, notiamo che per i nuclei stabili la condizione di equilibrio è raggiunta quando

$$\sigma_{A-1}^{\text{Maxw}} N_{A-1} = \sigma_A^{\text{Maxw}} N_A. \tag{1.2.12}$$

Tali nuclei prendono il nome di elementi s-only e sono riportati in Tabella 1.1.

_	Elementi <i>s</i> -only													
Ζ	Isotopo	Isotopo												
32	$^{70}\mathrm{Ge}$	50	$^{116}\mathrm{Sn}$	62	$^{150}\mathrm{Sm}$									
34	$^{76}\mathrm{Se}$	52	$^{122}\mathrm{Te}$	64	$^{154}\mathrm{Gd}$									
36	$^{80}\mathrm{Kr}$	52	$^{123}\mathrm{Te}$	66	$^{160}\mathrm{Dy}$									
36	$^{82}\mathrm{Kr}$	52	$^{124}\mathrm{Te}$	70	$^{170}\mathrm{Yb}$									
38	$^{86}\mathrm{Sr}$	54	$^{128}\mathrm{Xe}$	71	$^{176}\mathrm{Lu}$									
38	$^{87}\mathrm{Sr}$	54	$^{130}\mathrm{Xe}$	72	$^{176}\mathrm{Hf}$									
42	$^{96}\mathrm{Mo}$	56	$^{134}\text{Ba}$	76	$^{186}\mathrm{Os}$									
44	$^{100}\mathrm{Ru}$	56	$^{136}\mathrm{Ba}$	78	$^{192}\mathrm{Pt}$									
46	$^{104}\mathrm{Pd}$	60	$^{142}\mathrm{Nd}$	80	$^{198}\mathrm{Hg}$									
48	$^{110}\mathrm{Cd}$	62	$^{148}\mathrm{Sm}$	82	$^{204}\mathrm{Pb}$									

TABELLA 1.1: Lista degli elementi s-only (Prantzos, 2020).

Le abbondanze osservate in natura per i nuclei *s*-only indicano che esiste una chiara correlazione tra abbondanza e MACS. I prodotti  $\sigma_A^{\text{Maxw}}N_A$  in funzione del numero di massa sono riportati in Figura 1.7. Le MACS sono calcolate seguendo l'Equazione 1.2.8 integrando le sezioni d'urto di cattura ricavate dalle principali librerie in formato ENDF-6: ENDF-B-VIII.0, JEFF-3.3, JENDL-5 e TENDL-2021. Un esempio di andamento della MACS, a kT = 30 keV in funzione del numero di massa A, è stato riportato in Figura 1.8.



FIGURA 1.7: I prodotti  $N_A \sigma_A^{Maxw}(kT = 30 \text{ keV})$  per gli elementi s-only ricavati al variare delle librerie e sovrapposti i dati dell'esperimento n\_TOF. Sono ben visibili le zone di equilibrio previste in Equazione 1.2.12.



FIGURA 1.8: La MACS a kT = 30 keV per le reazioni (n,  $\gamma$ ). Notiamo come i minimi della sezione d'urto corrispondano ai numeri magici neutronici N=50, 82 e 126.

# 2 Sezioni d'urto, misure e valutazioni

Le reazioni nucleari indotte da neutroni e la misura sperimentale della sezione d'urto di tali reazioni sono di fondamentale importanza non solo per la comprensione dei processi di nucleosintesi ma anche per numerose applicazioni tecnologiche, come ad esempio i moderni reattori nucleari. Per questi motivi a partire dal 2000 si è dato inizio alla realizzazione di una nuova *facility* al CERN di Ginevra, denominata n\_TOF (acronimo di *neutron Time Of Flight*). Grazie alle innovative caratteristiche della *facility*, la collaborazione internazionale ha prodotto fino ad oggi numerosi dati nucleari su oltre 100 isotopi, alcuni dei quali radioattivi. Alcune sezioni d'urto sono state misurate per la prima volta, per altre è stato esteso l'intervallo di energia e per tutte il livello di accuratezza e precisione ha superato i dati presenti in letteratura.

In questo capitolo parleremo più nello specifico delle sezioni d'urto indotte da neutroni con un'attenzione verso l'astrofisica nucleare (Sezione 2.1). Successivamente introdurremo le tecniche sperimentali utilizzate per la misura delle sezioni d'urto e verrà descritta la facility n<sub>-</sub>TOF (Sezione 2.2). Infine, parleremo di dove vengono registrati i dati misurati sperimentalmente e, in particolare, il formato (ENDF-6) adottato per la scrittura (Sezione 2.3).

# 2.1 Sezione d'urto indotta da neutroni

## 2.1.1 Nucleo composto

Nelle reazioni nucleari tra nuclei e neutroni di bassa energia il neutrone viene catturato e va a formare un sistema composto dai due partecipanti in cui l'energia del neutrone incidente viene distribuita a tutti i nucleoni presenti. In questa maniera si forma un nucleo composto  $\binom{A}{Z}X^*$ :

$${}^{A-1}_Z X + n \to {}^A_Z X^* \to Y + b \tag{2.1.1}$$

che, trovandosi in uno stato eccitato, decade in un certo canale:

- Canale elastico (n, n): viene emesso un neutrone con energia uguale a quello incidente;
- Canale anelastico (n, n'): viene emesso un neutrone con energia uguale o minore rispetto a quello incidente;
- Canale di cattura  $(n, \gamma)$ : emissione di una cascata  $\gamma$ , rappresentato schematicamente in Figura 2.1;
- Canale di fissione (n, f): il nucleo iniziale decade in nuclei di atomi a numero atomico inferiore con l'emissione di energia.



FIGURA 2.1: Rappresentazione schematica di una cattura neutronica: il nucleo (Z, A - 1) cattura un neutrone formando l'isotopo più pesante (Z, A). Il nucleo composto così formato si trova in uno stato eccitato e decade allo stato fondamentale tramite l'emissione di una cascata elettromagnetica (raggi gamma).

Le sezioni d'urto dei vari canali di reazione forniscono informazioni sulla probabilità che tali reazioni avvengano. La sezione d'urto totale è data dalla somma delle varie sezioni d'urto parziali. Esaminando la Figura 2.2, la quale contiene le misure di sezioni d'urto sperimentali per alcuni canali di reazione, si possono individuare dei picchi, detti risonanze, corrispondenti agli autostati dell'energia del nucelo composto. Possiamo inoltre distinguere chiaramente due regioni in funzione dell'energia:

 La regione delle risonanze risolte (RRR) è a basse energie (da 0 eV a diversi keV) ed è caratterizzata da una struttura di risonanze. Le risonanze sono ben separate e la distanza tra loro è grande paragonata alla loro larghezza (Γ) e alla risoluzione degli strumenti;



FIGURA 2.2: Sezioni d'urto parziali e totale per l'istopo <sup>92</sup>Zr. Dati provenienti dalla libreria TENDL-2021.

La regione delle risonanze non risolte (URR) si trova, invece, ad energie più alte (a partire da 10<sup>3</sup>-10<sup>4</sup> eV) e si presenta come una sovrapposizione di risonanze. Le risonanze hanno una larghezza naturale (Γ) paragonabile, come ordine di grandezza, alla distanza che c'è tra loro per cui la risoluzione sperimentale non permette di evidenziarle singolarmente.

Il modello del nucleo composto lavora molto bene per basse energie del proiettile ( $\sim 10 - 20 \text{ MeV}$ ), dove il neutrone incidente ha poche probabilità di fuggire dal nucleo.

#### 2.1.2 La formula di Breit-Wigner

Le risonanze osservabili in Figura 2.2 possono essere descritte singolarmente attraverso la formula di Breit-Wigner, la quale esprime la sezione d'urto in funzione dell'energia di una risonanza  $(E_R)$  e delle larghezze iniziale  $(\Gamma_n)$ , finale  $(\Gamma_{\gamma})$  e totale  $(\Gamma)$ :

$$\sigma_{\gamma}(E) = \pi \lambda^2 g \frac{\Gamma_n \Gamma_{\gamma}}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}$$
(2.1.2)

dove  $\lambda = \hbar/\sqrt{2\mu E}$  è la lunghezza d'onda del neutrone e g è il fattore statistico di spin dato da:

$$g = \frac{2J+1}{(2s+1)(2I+1)} = \frac{2J+1}{2(2I+1)},$$
(2.1.3)

2.1 Sezione d'urto indotta da neutroni 17



FIGURA 2.3: La sezione d'urto della reazione  ${}^{92}Zr$   $(n, \gamma)$   ${}^{93}Zr$  in una risonanza isolata ricostruita a partire dalla formula di Breit-Wigner.

con J lo spin della risonanza, I lo spin del nucleo bersaglio e s lo spin del neutrone. La larghezza totale  $\Gamma$  è espressa dalla somma delle larghezze dei canali aperti (elastico, cattura e fissione):

$$\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma + \Gamma_f, \qquad (2.1.4)$$

quindi, l'Equazione 2.1.2, può essere riscritta nella sua forma completa:

$$\sigma_{\gamma}(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} \left(\frac{1}{EE_R}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{2J+1}{2(2I+1)} \frac{\Gamma_n \Gamma_{\gamma}}{4(E-E_R)^2 + (\Gamma_n + \Gamma_{\gamma} + \Gamma_f)^2}, \qquad (2.1.5)$$

dove sono esplicitate tutte le quantità d'interesse per la nostra analisi.

La Figura 2.2 mostra come le sezioni d'urto misurate sperimentalmente presentano numerosissime risonanze e per descriverle completamente è necessario generalizzare l'equazione di Breit-Wigner, esprimendola come somma sul numero totale di risonanze dei singoli picchi descritti dall'Equazione 2.1.2:

$$\sigma_{\gamma}(E) = \sum_{r} \sigma_{\gamma r}(E) = \frac{2\pi\hbar^{2}}{\mu} \sum_{r} \left(\frac{1}{EE_{Rr}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{g_{r}\Gamma_{nr}\Gamma_{\gamma r}}{4(E - E_{Rr})^{2} + (\Gamma_{r})^{2}}.$$
 (2.1.6)

## 2.1.3 Reaction rate astrofisico

Consideriamo una rezione generica:  $0+1 \rightarrow 2+3$  dove il proiettile (0) ed il bersaglio (1) sono delle particelle dotate di massa (nel caso di reazioni indotte da neutroni 0 è il neutrone e 1 rappresenta il nucleo bersaglio). Definiamo  $r_{01} \equiv N_R/(Vt)$  il reaction rate della reazione nucleare, cioè il numero di reazioni  $(N_R)$  per unità di volume (V) e di tempo (t). Indicando con  $N_0$  e  $N_1$  in numero di particelle interagenti del proiettile e del bersaglio, rispettivamente, abbiamo:

$$r_{01} = \left(\sigma(v)N_0\right)\left(\frac{N_1}{VAt}\right) = \frac{N_0}{V}\frac{N_1}{V}v\sigma(v) = n_0n_1v\sigma(v).$$
(2.1.7)

Le velocità relative tra il bersaglio ed il proiettile non sono costanti ma seguono una data distribuzione P(v). Riscrivendo il rection rate nel caso di una distribuzione di velocità:

$$r_{01} = n_0 n_1 \int_0^\infty v P(v) \sigma(v) dv \equiv n_0 n_1 \langle \sigma v \rangle , \qquad (2.1.8)$$

nella pratica questa quantità si può riscrivere come:  $N_A \langle \sigma v \rangle$  con  $N_A$  il numero di Avogadro.

In un plasma stellare l'energia cinetica a disposizione dei nuclei è dovuta all'agitazione termica, perciò in condizioni di equilibrio termodinamico la distribuzione P(v) assumerà la forma di una distribuzione delle velocità di Maxwell:

$$P(v)dv = \left(\frac{\mu}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\mu v^2}{2kT}} 4\pi v^2 dv.$$
(2.1.9)

È facile vedere che la stessa distribuzione per l'energia  $(E = \mu v^2/2)$  si scrive come:

$$P(E)dE = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(kT)^{3/2}} \sqrt{E} e^{-\frac{E}{kT}} dE.$$
 (2.1.10)

Per le reazioni di cattura neutronica d'interesse atrofisico il reaction rate (Equazione 2.1.8) è esprimibile in funzione della MACS (Equazione 1.2.8):

$$r_{01} = N_A \langle \sigma v \rangle = N_A v_T \sigma^{\text{Maxw}}.$$
 (2.1.11)

Volendo esprimere il reaction rate in unità  $[\text{cm}^3/\text{mole s}]$  è necessario: introdurre a fattore  $10^{-24}$ , esprimere  $v_T$  in [cm/s] e la temperatura kT in MeV:

$$r_{01} = 10^{-24} N_A \sigma^{\text{Maxw}}(kT) v_T.$$
(2.1.12)

## 2.1.4 Stellar Enhancement Factor (SEF)

Finora abbiamo considerato reazioni con nuclei bersaglio nel loro stato fondamentale, tuttavia i nuclei in un ambiente stellare si trovano anche nei loro stati eccitati a causa dell'elevata temperatura. Per un plasma non degenere in equilibrio termodinamico il rapporto tra i nuclei nel  $\mu$ -esimo stato eccitato ed il numero totale di nuclei della *i*-esima specie è dato dalla statistica di Boltzmann:

$$p_{i\mu} = \frac{N_{i\mu}}{N_i} = \frac{(2J_{i\mu} + 1)e^{-E_{i\mu}/kT}}{\sum_{\mu} (2J_{i\mu} + 1)e^{-E_{i\mu}/kT}} = \frac{(2J_{i\mu} + 1)e^{-E_{i\mu}/kT}}{Z_i},$$
 (2.1.13)

dove  $J_{i\mu}$  è lo spin,  $E_{i\mu}$  l'energia di eccitazione e  $Z_i$  la funzione di partizione.



FIGURA 2.4: Valori del SEF in funzione della temperatura. Ogni linea corrisponde ad un preciso elemento. I dati provengono dal database KADoNiS (Dillmann, 2009).

Il reaction rate che coinvolge nuclei nello stato eccitato  $N_A \langle \sigma v \rangle^*$  si ottiene sommando su tutte le possibili transizioni il reaction rate al stato fondamentale (Equazione 2.1.12):

$$N_A \langle \sigma v \rangle^* = \sum_{\mu} P_{0\mu} \sum_{\nu} N_A \langle \sigma v \rangle_{\mu \to \nu} = \frac{\sum_{\mu} (2J_{0\mu} + 1)e^{-E_{0\mu}/kT} \sum_{\nu} N_A \langle \sigma v \rangle_{\mu \to \nu}}{Z_0},$$
(2.1.14)

per il reaction rate abbiamo considerato un singolo proiettile (i = 0),  $\mu \in \nu$  sono le etichette di due stati eccitati. D'altra parte il reaction rate del laboratorio si può scrivere come:

$$N_A \langle \sigma v \rangle = \sum_{\nu} N_A \langle \sigma v \rangle_{\text{g.s.} \to \nu} \,. \tag{2.1.15}$$

In molti casi le MACS che coinvolgono nuclei eccitati non possono essere misurate in laboratorio e devono essere calcolate a partire da modelli teorici. È molto utile

quindi ricavare il rapporto tra il reaction rate eccitato e quello del laboratorio, il quale prende il nome di *Stellar Enhancement Factor* (SEF) (Rauscher, 2011):

$$\text{SEF} \equiv \frac{N_A \langle \sigma v \rangle^*}{N_A \langle \sigma v \rangle} = \frac{\sum_{\mu} (2J_{0\mu} + 1)e^{-E_{0\mu}/kT} \sum_{\nu} N_A \langle \sigma v \rangle_{\mu \to \nu}}{Z_0 \sum_{\nu} N_A \langle \sigma v \rangle_{\text{g.s.} \to \nu}}$$
(2.1.16)

In Figura 2.4 sono graficati gli andamenti del SEF per alcuni nuclei in funzione della temperatura. Possiamo notare come all'aumentare di kT i valori del SEF si allontanano da 1, questo significa che il loro effetto sul reaction rate è tanto maggiore quanto più la temperatura della stella è alta.

# 2.2 La facility e le misure ad $n_{-}TOF$

# 2.2.1 La facility n\_TOF



FIGURA 2.5: Schema della facility  $n_{-}TOF$ .

Una delle caratteristiche della facility di n\_TOF (Figura 2.5) è la produzione di neutroni con il metodo della spallazione utilizzando un fascio iniziale di protoni ad alta energia (~ 20 GeV), proveniente dal protosincrotrone (PS) del CERN, incidente su un bersaglio di piombo. Ogni protone è in grado di generare nel target 300 neutroni e il PS può generare pacchetti di intensità fino a  $7 \times 10^{12}$  protoni per impulso con risoluzione temporale di 7 ns: si arrivano così ad avere circa  $2 \times 10^{15}$ neutroni per impulso. La facility n\_TOF è in grado di produrre un flusso di neutroni istantaneo estremamente elevato, ideale per misure di reazioni indotte da neutroni ad alta precisione, e in particolare quando il campione da studiare è un isotopo radioattivo. Il flusso del fascio di neutroni viene continuamente monitorato e la sua determinazione risulta fondamentale per la misura dello yield di cattura dal quale si ricava la sezione d'urto, come verrà descritto in seguito. Le caratteristiche del fascio di neutroni permettono di portare a termine misure di sezioni d'urto di vari processi nucleari: cattura, reazioni (n, particelle cariche), fissione (Guerrero, 2013).

## 2.2.2 La tecnica di attivazione

La tecnica di attivazione è un approccio sperimentale che consiste di due fasi: l'irraggiamento del bersaglio e la successiva rivelazione dei nuclei prodotti. Grazie a questa tecnica si basa sulla produzione di uno spettro energetico neutronico molto simile alla distribuzione di Maxwell (Equazione 2.1.10), ad un energia tipica di kT = 25 keV, sfruttando la reazione <sup>7</sup>Li(p, n)<sup>7</sup>Be. Si tratta di un metodo accurato, selettivo e sensibile per misurare le sezioni d'urto di cattura neutronica che può essere applicata solo quando la reazione di cattura ha come prodotti isotopi radioattivi con una vita media compresa tra pochi secondi a più di un anno.

L'apparato sperimentale usato per la tecnica di attivazione è mostrato in Figura 2.6a. Durante l'irraggiamento i campioni si trovano molto vicino al bersaglio e sono inseriti tra due lamine d'oro, che vengono utilizzate per la determinazione del flusso di neutroni tramite la sezione d'urto standard del <sup>197</sup>Au. Un monitor a distanza ~ 1 m rivela i neutroni mentre il bersaglio si degrada durante l'attivazione. Dopo l'irraggiamento i campioni attivati vengono conteggiati con rivelatori gamma ad alta risoluzione energetica per ottenere misure precise delle MACS fondamentali per descrivere i percorsi di reazione che avvengono nel processo-s (Kappeler, 1989).

In Figura 2.6b è simulato uno spettro neutronico tipico dovuto all'attivazione: è stata scelta un'energia  $E_p$  di 30 keV superiore all'energia di soglia per la reazione <sup>7</sup>Li(p, n). Tale spettro è stato poi fittato con una distribuzione di Maxwell a 25 keV per mostrare la netta somiglianza tra i due.



FIGURA 2.6: (A) Tipico apparato sperimentale per la tecnica di attivazione. I neutroni sono prodotti attraverso la reazione <sup>7</sup>Li(p, n). I neutroni emessi sono mandati al campione che si trova tra due fogli d'oro. (B) Tipico spettro neutronico dovuto all'attivazione simulato grazie a PINO (Reifarth, 2009) fittato con la distribuzione di Maxwell a kT = 25 keV.

## 2.2.3 La tecnica del tempo di volo

La tecnica del *Time Of Flight* (TOF) (Reifarth, 2018) permette di compiere misure di sezioni d'urto in funzione dell'energia del neutrone. Determinando il TOF (t) dei neutroni (prodotti quasi istantaneamente al tempo  $t_0$  dalle reazioni di spallazione) nel percorso (lungo L) che li porta dalla loro produzione al campione da studiare, possiamo determinare l'energia cinetica:

$$E_n = m_n c^2 (\gamma - 1), \qquad (2.2.1)$$

la quale può essere semplificata nella sua forma classica quando ci si restringe allo studio della nucleosintesi, nella quale le scale di velocità in gioco sono abbastanza

2.2 La facility e le misure ad 
$$n_{-}TOF$$
 23

lontane dalla velocità della luce:

$$E_n = \frac{m_n}{2} \left(\frac{L}{t}\right)^2. \tag{2.2.2}$$

Per le misure di sezioni d'urto si rivelano, con opportuni sistemi, i prodotti della



FIGURA 2.7: Rappresentazione schematica dello spettro di tempo di volo.

reazione n + bersaglio quali particelle  $\alpha$ , raggi  $\gamma$  di cattura, frammenti di fissione o neutroni diffusi ad un tempo  $t_n$  considerato il tempo di arrivo per determinare il tempo di volo del neutrone:

$$t = t_n - t_0. (2.2.3)$$

Il meccanismo di spallazione genera non solo il fascio di neutroni ma anche dei raggi  $\gamma$  altamente energetici che viaggiano lungo la linea di fascio producendo il cosiddetto  $\gamma$ -flash (Figura 2.7) nei rivelatori. Poiché i raggi  $\gamma$  viaggiano alla velocità della luce arrivano ai rilevatori prima dei neutroni ed è possibile utilizzare il  $\gamma$ -flash per valutare l'istante  $t_0$ :

$$t_0 = t_\gamma - \frac{L}{c}.\tag{2.2.4}$$

## 2.2.4 Misure di cattura

In un esperimento di cattura la quantità di interesse fisico è il numero di neutroni che interagisce con il campione sotto analisi e genera un segnale nel rivelatore. Per i nuclei non fissionabili e per energie inferiori alla soglia di diffusione anelastica, lo yield di cattura  $Y_c$  e di scattering  $Y_n$  possono essere espressi in funzione della sezione d'urto totale ( $\sigma_{tot}$ ), di scattering ( $\sigma_n$ ) e di cattura ( $\sigma_{\gamma}$ ):

$$Y_c(E) = (1 - e^{-n\sigma_{tot}})\frac{\sigma_{\gamma}}{\sigma_{tot}} + Y_M, \qquad (2.2.5)$$

$$Y_n(E) = (1 - e^{-n\sigma_{tot}})\frac{\sigma_n}{\sigma_{tot}} - Y_M, \qquad (2.2.6)$$

dove n è il numero di nuclei per unità di area e  $Y_M$  tiene conto del contributo



FIGURA 2.8: Schema degli eventi di diffusione multipla che contribuiscono allo yield di cattura.

degli eventi di cattura dovuti a neutroni che in precedenza hanno subito più di uno scattering (Figura 2.8): dai rivelatori la reazione è rivelata con un  $\gamma$ , quindi viene registrato un fenomeno di cattura, quindi nella prima equazione  $Y_M$  è sommato perchè si aggiunge ai fenomeni di cattura che avvengono nel campione mentre nella seconda equazione è sottratto perchè sono eventi che appartengono al canale elastico ma non sono rivelati come tali. Il termite tra parentesi tonde, invece, è dovuto all'auto assorbimento dei neutroni nel campione. Il valore teorico del yield totale osservato Y è la somma pesata dei contributi parziali:

$$Y = \varepsilon_c Y_c + \varepsilon_n Y_n, \qquad (2.2.7)$$

dove  $\varepsilon_c$  rappresenta la probabilità che un evento di cattura venga rivelato e  $\varepsilon_n$  è la probabilità che un neutrone, dopo essere stato diffuso all'interno del campione, raggiunga il rivelatore ed induca una reazione di cattura nello stesso, generando un segnale.

Lo yield di cattura, nella forma più generale, non dipende soltanto dalla sezione d'urto di cattura ma anche da quella totale e di scattering elastico, ma per bersagli sottili tali che  $n\sigma_{tot} \ll 1$ ,  $Y_c$  diventa:

$$Y_c(E) \approx n\sigma_\gamma,$$
 (2.2.8)

ottenendo così la proporzionalità tra lo yield e la sezione d'urto di cattura. Per bersagli spessi, invece, non è possibile applicare l'approssimazione precedente e lo yield di cattura si può esprimere:

$$Y_c = Y_0 + Y_1 + Y_{\geq 2}, \tag{2.2.9}$$

dove  $Y_0$  è lo yield primario  $Y_0 = (1 - e^{-n\sigma_{tot}})\frac{\sigma_{\gamma}}{\sigma_{tot}}$ ,  $Y_1$  è il contributo legato ad eventi di cattura a seguito di uno scattering elastico e  $Y_{\geq 2}$  quello legato a eventi di cattura avvenuti dopo due o più scattering elastici. Dai conteggi  $C_c$  dei raggi  $\gamma$  misurati si può ottenere lo yield sperimentale:

$$Y_{exp}(t) = \frac{C_c}{\Omega A \phi_n(t)},$$
(2.2.10)

dove  $\phi_n(t)$  è il flusso di neutroni incidenti, A è l'area effettiva del campione intercettata dal fascio di neutroni e  $\Omega$  è l'angolo solido sotteso dal sistema di rivelazione. Lo yield sperimentale così ottenuto deve essere messo a confronto con il valore teorico espresso dall'Equazione 2.2.7.

# 2.3 Librerie di dati nucleari valutati

Molti dei dati di sezioni d'urto di reazioni nucleari di cui abbiamo parlato precedentemente sono raccolti e combinati in librerie valutate che adottano il formato ENDF-6 (Trkov e Brown, 2018). Questo formato, deciso dal *Cross Section Evaluation Working Group* (CSEWG), ha reso possiblile la creazione delle librerie ENDF che contengono una vastissima quantità di dati: sezioni d'urto, spettri neutronici, distribuzioni angolari e molti altri, con particolare attenzione alle reazioni indotte da neutroni.

Hanno contribuito alle librerie in formato ENDF-6 vari gruppi provenienti da varie nazioni nel mondo: ENDF/B in USA, JEFF in Europa, JENDL in Giappone, ROSFOND e BROND in Russia, CENDL in Cina, TENDL, ecc.

## 2.3.1 Contenuto di una valutazione ENDF

Una libreria di dati valutati è identificata da un set di parametri che seguono una gerarchia. Questi parametri sono utili per selezionare, tra una grandissima quantità, i dati d'interesse.

- Libreria: Una collezione di valutazioni (parametrizzata da NLIB) pubblicata da uno specifico gruppo (*e.g.*, NLIB 0 = ENDF/B).
- Versione: Parametrizzata da NVER, uno degli update periodici che subisce una libreria (*e.g.*, NVER = 8 per ENDF/B-VIII).
- Release: Viene pubblicata per correggere eventiali errori o correzioni. Parametrizzata da LREL (*e.g.*, ENDF/B-VIII.0 LREL = 0).



FIGURA 2.9: La struttura interna di una libreria in formato ENDF-6.

- Sublibrary: Parametrizzata da NSUB, insieme di valutazioni per un tipo di particella (*e.g.*, NSUB = 10 per i neutroni incidenti).
- Materiale: Rappresenta il tipo di materiale bersaglio, l'identificativo è indicato con MAT, l'assegnazione è fatta su base sistematica ed è composto generalmente da quattro caratteri: i primi due corrispondono al numero Z dell'elemento mentre gli altri due sono assegnati a seconda dell'isotopo.
- File: Parametrizzato da MF, suddivisione dei dati corrispondenti al materiale secondo la categoria di appartenenza (e.g., MF = 3 contiene i dati delle sezioni d'urto).
- Sezione: Suddivisione del file in sezioni, identificate attraverso MT (e.g., MT = 102 contiene i dati delle sezioni d'urto di cattura neutronica).

Uno schema della struttura interna di un file in formato ENDF è rappresentato in Figura 2.9.

# 2.3.2 Formato dei dati

I dati ENDF erano originariamente memorizzati nel formato delle schede perforate IBM 80 colonne e ancora oggi mantengono il formato di linee da 80 caratteri organizzate come mostra la Figura 2.10:

• I caratteri 1-66 sono riservati per i dati della grandezza fisica d'interesse: ogni numero è contentuto in massimo 11 caratteri (per la sezione d'urto di cattura

X1	X2	ХЗ	X4	X5	X6														
_																			
1		•	••		66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
content						MAT MF					F		MT				NT		
HL							TE	XT	reco	ords	3								

FIGURA 2.10: Struttura di una linea di un file ENDF.

ogni riga contiene 3 coppie di numeri ed ogni coppia contiene il valore di energia e sezione d'urto, un esempio è riportato in Figura 2.11);

- I caratteri 67-70 contengono il parametro MAT, relativo al materiale;
- I caratteri 71 e 72 contengono il parametro MF, relativo al numero del file;
- I caratteri 73-75 contengono il parametro MT, relativo al numero del tipo di dato;
- I caratteri 76-80 contengono il parametro NS, una sequenza di dati opzionale che in genere contiene il numero di riga relativo al file.

4.009200+4	9.111553+1	0	0	0	04031	3102	1
6.734330+6	6.734330+6	0	0	1	784031	3102	2
78	2				4031	3102	3
1.000000-5	0.00000+0	1.200010+5	0.00000+0	1.200010+5	1.501935-24031	3102	4
2.000000+5	1.282770-2	3.00000+5	1.204320-2	4.00000+5	1.163810-24031	3102	5
5.00000+5	1.149510-2	6.00000+5	1.156470-2	7.00000+5	1.181160-24031	3102	6
8.00000+5	1.221640-2	9.00000+5	1.276010-2	1.00000+6	8.124241-34031	3102	7
1.20000+6	5.966130-3	1.400000+6	5.932030-3	1.600000+6	4.935020-34031	3102	8
1.800000+6	4.753330-3	2.00000+6	4.508280-3	2.20000+6	4.292510-34031	3102	9
2.400000+6	3.923380-3	2.60000+6	3.154660-3	2.80000+6	2.882770-34031	3102	10

FIGURA 2.11: Un esempio di un file in formato ENDF-6 corrispondente alla cattura  ${}^{92}Zr(n,\gamma){}^{93}Zr$  (MAT=4031, MF=3 e MT=102). Possiamo notare evidenziati in blu i primi 66 caratteri contententi energia e sezione d'urto ed evidenziati in arancione i parametri: MAT, MF, MT e NS rispettivamente.

Tutti i numeri floating point hanno limite 11 caratteri. Per ottenere la massima precisione possibile i dati sono memorizzati nel formato "E11.0" FORTRAN77, il quale, essendo *E-less* aggiunge una cifra di precisione rispetto allo standard. I formati utilizzati per i float sono dunque:  $\pm n.nnnnnn, \pm n.nnnnn\pm e = \pm n.nnnn\pm e$ .

In Figura 2.11 vediamo un file esemplificativo delle prime dieci righe corrispondenti al  $^{92}$ Zr preso dalla libreria TENDL-2021.

# 2.3.3 Utilizzo dei codici PREPRO

Una volta che i dati valutati sono stati organizzati nel formato ENDF-6 le informazioni non sono subito disponibili all'uso ma devono essere processate dai codici FORTRAN PREPRO (Cullen, 2021), disponibili al link IAEA-NDS. A questo scopo sono risultati essenziali tre degli eseguibili a disposizione:

- linear: al fine di convertire i dati contenuti nei file MF = 3, 23 e 27 in una nuova griglia di energia/sezione d'urto nella quale le leggi di interpolazione sono sempre lineari. L'eseguibile richiede come input il file LINEAR.INP (vedi Figura 2.12), nel quale è richiesto che venga espresso il percorso del file ENDF-6 da processare;
- recent: utilizza la formula di Breit-Wigner (Equazione 2.1.6), alla quale vengono forniti i parametri contenuti nel file MF = 2 e MT = 151, per ricostruire le risonanze tipiche delle sezioni d'urto: totale, di scattering elastico, di cattura e di fissione. Per funzionare è richiesto che nel file di input (RECENT.INP) sia specificato il percorso del file LINEAR.OUT, in questo modo i due eseguibili vengono posti in cascata (vedi Figura 2.14);
- sigma1: realizzato allo scopo di simulare l'allargamento Doppler alla temperatura di T = 300 K delle risonanze presenti nelle sezioni d'urto. Analogamente agli altri due eseguibili, riceve in ingresso il contenuto del file RECENT.OUT e restituisce il file processato SIGMA1.OUT.

```
0 1.0000E-30
                            0
0
n-Zr092.tendl
(LINEAR.OUT)
    0 0 0 99999999
                    (BLANK CARD TERMINATES MAT REQUEST RANGES)
 0.0000E-00 1.0000E-03
                    (BLANK CARD TERMINATES FILE 3 ERROR LAW)
 0.0000E-00 1.0000E-05
 1.0000E+00 1.0000E-05
 2.0000E+00 1.0000E-04
 2.0000E+07 1.0000E-04
                    (BLANK CARD TERMINATES FILE 3 ERROR LAW)
za092235
LINEAR.OUT
```

FIGURA 2.12: Il file di input per l'eseguibile linear: LINEAR.INP. Evidenziato in blu vediamo il percorso del file ENDF-6 richiesto in ingresso.

40092.0000	91.1155300	0	0	1		04031	2151	1
40092.0000	1.00000000	0	0	1		04031	2151	2
1.00000E-5	120001.000	1	2	0		14031	2151	3
0.0	.720000000	0	0	2		04031	2151	4
91.1155200	0.0	0	0	90		154031	2151	5
-3210.00000	.500000000	102.886500	102.775500	.111000000	0.0	4031	2151	6
2689.40000	.50000000	25.3150000	25.200000	.115000000	0.0	4031	2151	7
$E_R$	J	Γ	$\Gamma_n$	$\Gamma_{\gamma}$	$\Gamma_f$			

FIGURA 2.13: Il file contenente i parametri per ricostruire le risonanze attraverso la formula di Breit-Wigner. In evidenza abbiamo i valori utilizzati per ricostruire la risonanza in Figura 2.3: l'energia della risonanza  $(E_R)$ , lo spin (J), le larghezze parziali dei canali di reazione elastico  $(\Gamma_n)$ , di cattura  $(\Gamma_{\gamma})$ , di fissione  $(\Gamma_f)$  e quella totale  $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_{\gamma} + \Gamma_f$ .



FIGURA 2.14: Flusso di dati in ingresso e uscita dagli eseguibili linear e recent.

# 3 Procedura automatizzata e risultati

In questo capitolo verrà esposto il lavoro svolto per poter predisporre una procedura automatizzata in grado di processare in successione tutte le principali librerie ENDF, ottenendo da questo calcolo i reaction rate, utili ai modelli di evoluzione stellare per ottenere risultati circa le abbondanze degli elementi prodotti nelle stelle nella loro fase AGB attraverso il processo-s. Inoltre, è stato possibile eseguire un confronto tra le sezioni d'urto e le MACS ottenute dalle librerie e i dati preliminari di n\_TOF di alcuni isotopi del molibdeno.

# 3.1 Processamento automatizzato di librerie in formato ENDF

I moderni modelli di evoluzione stellare ci forniscono l'andamento delle abbondanze degli elementi chimici prodotti nelle stelle durante la fase AGB, con il processo-*r*. I reaction rate astrofisici in funzione della temperatura delle reazioni nucleari indotte da neutroni risultano essere l'osservabile sperimentale di input fondamentale di tali modelli. In questa tesi è stato utilizzato il codice FUNS (FUII Network Stellar evolution code) (Cristallo, 2011), il quale include un network completo di oltre 500 isotopi (da <sup>1</sup>H a <sup>209</sup>Bi) e oltre 1000 reazioni nucleari accoppiate a sistemi di equazioni differenziali idrostatiche che descrivono la struttura fisica della stella.

Le informazioni necessarie a FUNS per eseguire i modelli vengono attualmente inserite iterativamente a partire da un file di ingresso prodotto e la procedura risulta essere scomoda oltreché anche di difficile manutenzione e tracciabilità delle modifiche. Per questi motivi, è risultato utile definire una procedura che automatizzasse l'inserimento delle informazioni e che rendesse chiara la provenienza dei dati sperimentali (Figura 3.1).



FIGURA 3.1: Schematizzazione del problema affrontato in questo lavoro di tesi: la necessità di definire una procedura automatizzata che lega i dati sperimentali ricavabili dalle librerie in formato ENDF con FUNS.

Nel seguito descriveremo come abbiamo affrontato questo problema e le direttive che abbiamo adottato per lo sviluppo di codice affidabile e attento alle performance. A tale scopo sono stati utilizzati: un'immagine Docker per creare un ambiente ideale allo sviluppo, una pipeline di Continuous Integration e, per la verifica della qualità dei risultati, si sono rivelati utili gli unit test.

## 3.1.1 Riproducibilità

La condivisione di codice è ormai diventata una pratica comune ed è resa possibile da piattaforme come GitHub e GitLab. A tale scopo è stata creata una repository nella Community Edition di GitLab dell'INFN (baltig): https://baltig.infn. it/slanzi/macs.git dove, tra le altre cose, è possibile risalire a tutte le modifiche apportate al codice nel tempo. D'altra parte sta prendendo sempre più piede la condivisione di container, cioè di ambienti di sviluppo minimali e puliti per la compilazione di codice di qualsiasi tipo. I vantaggi di lavorare in questi container sono innumerevoli e, nel caso della ricerca scientifica, risultano di fondamentale utilità al fine della riproducibilità dei risultati.

Docker è una tecnologia che permette un semplice utilizzo dei container. Per poter creare un container Docker è necessario scrivere un Dockerfile (Figura 3.2), contenente le regole per il build dell'immagine. Per capire meglio il funzionamento dei processi che portano alla creazione del container è possibile fare un'analogia, come mostra la Figura 3.3, dove la compilazione di un file . cpp è accostata al build di



FIGURA 3.2: Il Dockerfile per creare l'ambiente di sviluppo utilizzato in questo lavoro di tesi.

un Dockerfile. Da una parte il risultato è il processo (l'esecuzione del programma), dall'altra è l'apertura del container con le regole scritte nel Dockerfile.



FIGURA 3.3: La creazione di un container a partire da un Dockerfile a confronto con la compilazione di un programma scritto in C++.

# 3.1.2 La struttura del codice

Per poter scrivere un programma che rispondesse alle richieste di essere generico (cioè che potesse processare dati provenienti da ogni tipo di isotopo contenuto in una libreria), affidabile (cioè in grado di produrre risultati consistenti con quelli ottenuti in precedenza) e allo stesso tempo attento alle performance, è stato scelto come linguaggio il C++ 20. Sebbene le operazioni da svolgere non fossero oltremodo complesse, è risultato fondamentale concentrarsi sull'efficienza in quanto, queste stesse operazioni, andavano ripetute per più di 3000 isotopi nel caso delle librerie più ricche di dati (come ad esempio TENDL-2021).

Durante il lavoro di scrittura del codice è stato scelto di adottare la cosiddetta programmazione modulare, secondo la quale ogni eseguibile deve compiere bene un solo compito. Per questo motivo sono stati scritti diversi programmi, ognuno con un solo scopo, legati in cascata da alcuni script **bash**. Partendo dal codice sorgente è stato scelto CMake per creare gli eseguibili. CMake è un software che con poche istruzioni è in grado di generare il **Makefile**, per utilizzarlo è sufficiente scrivere le istruzioni in un file di testo: CMakeLists.txt. Un'altra funzionalità di questo software è quella di poter fare il cosiddetto fetch delle dipendenze esterne, cioè di scaricare da una repository git le librerie necessarie da includere non appartenenti alla STL di C++. Nel nostro progetto sono state incluse: lyra per il parsing degli argomenti indicati sulla linea di comando, **fmt** utile a formattare il testo da mandare su standard output, **sciplot** una libreria per graficare risultati e **doctest** per poter scrivere gli unit test. In Figura 3.4 vediamo lo schema del build degli eseguibili con le relative dipendenze dalle librerie esterne.



FIGURA 3.4: Schema delle dipendenze da librerie esterne e gli eseguibili creati attarverso CMake.

Descriviamo brevemente i compiti di ogni eseguibile che abbiamo ottenuto:

• twocol: realizzato per ricevere in input il percorso di un file in formato ENDF-6 (come ad esempio SIGMA1.OUT) e mandare su standard output una sezione del file in un nuovo formato a due colonne, molto più semplice da gestire. Richiede siano specificati i valori di MF e MT. Ad esempio:

```
$ twocol --endf-file-path SIGMA1.OUT --mf 3 --mt 102
```

stamperà i valori della sezione d'urto di cattura;

• get\_sef.sh: è uno script che restituisce i valori del SEF (Equazione 2.1.16) in funzione della temperatura per un dato isotopo (del quale vanno specificati il simbolo ed il numero di massa). Ad esempio:

```
$ export SYMBOL=Zr
$ export ATOMIC_MASS=92
$ get_sef.sh
```

restituirà i valori del SEF per l'elemento <sup>92</sup>Zr;

- macs: abilitando l'opzione di considerare i SEF, questo eseguibile riceverà i valori della sezione d'urto  $\sigma(E)$  da twocol e ne calcolerà la MACS (Equazione 1.2.10) in funzione della temperatura ed il reaction rate astrofisico (Equazione 2.1.12) moltiplicandolo per il SEF. Su standard output verranno mandati i valori di MACS e di reaction rate formattati in una singola riga come richiesto dal codice FUNS. Ad esempio:
  - \$ macs --symbol Zr --atomic-mass 92 \
     --tc-path Zr92-twocol.txt --enable-sef true \
     --sef-path Zr92-sef.txt --temp-step 0.1 \
     --init-temp 7 --final-temp 10

restituirà i valori della macs e la linea dei reaction rate per <sup>92</sup>Zr;

- macs.t: realizzato per eseguire gli unit test, cioè, controlli mirati per testare le singole unità di un software (ad esempio una funzione o il metodo di una classe);
- draw: riceve come input i percorsi dei file di dati della  $\sigma(E)$  e della MACS e ne grafica il contenuto.

Il compito di concatenare tutti gli eseguibili è dello script one\_element.sh, Figura 3.5 per un singolo elemento.



FIGURA 3.5: Pipeline implementata dall'eseguibile one\_element.sh.



FIGURA 3.6: Organizzazione dei file di output in cartelle e sottocartelle.

Una volta definita la procedura da eseguire per uno è possibile applicarla sistematicamente ad ogni elemento di una libreria. A questo scopo è stato creato uno script (launch\_macs.sh) che, ad ogni iterazione, scarica il file ENDF-6 corrispondente ad un elemento, lo processa grazie a one\_element.sh e quando ha terminato lo elimina in modo da non occupare spazio inutilmente. I file e i plot prodotti vengono poi reindirizzati e organizzati in cartelle (vedi Figura 3.6):

- Una cartella elements al cui interno abbiamo gli elementi della libreria ognuno con i propri file di sezioni d'urto, MACS e SEF;
- Una cartella log contenete gli standard output dei programmi PREPRO e i risultati degli unit test;

• Una cartella con le tabelle contenenti i logaritmi dei reaction rates in funzione della temperatura (una riga per ogni elemento) formattata come richiesto dal codice FUNS. Un esempio è riportato in Figura 3.7.

Nel momento in cui viene lanciato al programma possono essere specificate alcune variabili (le quali hanno settati dei valori di default). Ad esempio:

scaricherà e processerà solo l'elemento  $^{92}{\rm Zr}$  della libreria TENDL-2021. Mentre, con il comando:

scaricherà e processerà tutti gli elementi della libreria TENDL-2021.

Per ottenere maggiori informazioni su quali variabili esterne è possibile specificare al lancio del programma:

```
$ launch_macs.sh --help
```

stamperà tutti i possibili comandi.

			Reazione		ID	Rang	ge Tem	perature	31 valori di reaction rate							
samu	M092	(N	. G	)Mo93	samu	7.0	10.0	0.10	6.5610	6.6813	6.7867					
samu	Mo93	( N	. G	)Mo94	samu	7.0	10.0	0.10	7.7395	7.7252	7.7088					
samu	Mo94	( N	. G	)Mo95	samu	7.0	10.0	0.10	6.9274	7.0213	7.0899					
samu	Mo95	( N	. G	)Mo96	samu	7.0	10.0	0.10	7.7933	7.7937	7.7943					
samu	Mo96	( N	. G	)Mo97	samu	7.0	10.0	0.10	7.1315	7.1081	7.1094					
samu	Mo97	( N	. G	)Mo98	samu	7.0	10.0	0.10	7.7974	7.8000	7.8015					
samu	Mo98	( N	. G	)Mo99	samu	7.0	10.0	0.10	7.4347	7.3996	7.3678					
samu	Mo99	( N	. G	)Mo100	samu	7.0	10.0	0.10	7.8058	7.8047	7.8062					
samu	Mo100	) ( N	. G	)Mo101	samu	7.0	10.0	0.10	7.3192	7.3136	7.3025					

FIGURA 3.7: Formato tipico di una tabella ottenuta in output dal codice.

## 3.1.3 Utilizzo della Continuous Integration

Attraverso la *Continuous Integration* (CI) di baltig è possibile *buildare*, testare e lanciare programmi direttamente sulla piattaforma ogni volta che vengono apportate modifiche al codice. Tra i vantaggi di questa tecnologia c'è sicuramente quello di tenere traccia dei risultati prodotti e di renderli facilmente riproducibili da

```
Immagine di partenza
(image: ${CI_REGISTRY_IMAGE})
stages:
  - docker-build
  - test
docker-build:
  stage: docker-build
  image: docker:latest
  services:
    - name: docker:dind
  script:
    - cd docker && docker build -t ${CI_REGISTRY_IMAGE} .
    - docker login -u {CI_{REGISTRY_USER} \setminus
                    -p ${CI_REGISTRY_PASSWORD} ${CI_REGISTRY}
    - docker push ${CI_REGISTRY_IMAGE} && cd -
           Push dell'immagine in quella di partenza
  only:
    changes:
      - docker/Dockerfile
test:
  stage: test
  script:
                                    Build con cmake
    - cmake -S . -B build -DCMAKE_BUILD_TYPE=Release && cmake --build build
    - export MACS_ROOT=$(pwd)
    - export ENDF_LIBRARY=${CI_ENDF_LIBRARY:-ENDF-B-VIII.0}
    - export PREPRO_PATH=/PREPRO
    - chmod +x scripts/*.sh
    - scripts/launch_macs.sh --download-elements "${CI_ELEMENT}" \
                               --endf-library "${ENDF_LIBRARY}"
    artifacts:
    paths:
      - ${CI_ENDF_LIBRARY}
  Risultati scaricabili come artifacts
```

FIGURA 3.8: Istruzioni contenute nel file .gitlab-ci.yml per creare la pipeline di CI.

qualunque utente. Per farlo è necessario scrivere le istruzioni in un file dal nome .gitlab-ci.yml (Figura 3.8), il quale consente una divisione in più parti dei processi che portano all'esecuzione del codice. Nel nostro caso abbiamo due stage:

 docker-build: Partendo dal Dockerfile (Figura 3.2) viene fatto il build dell'immagine Docker e successivamente viene fatto il push nell'immagine in quella di default: "\${CI\_REGISTRY\_IMAGE}". Questa procedura avviene solo quando vengono apportate modifiche al Dockerfile; • test: qui viene compilato il sorgente tramite cmake, vengono costruiti gli eseguibili e viene eseguita la procedura attraverso launch\_macs.sh, alla quale possono essere passate variabili esterne. I risultati vengono successivamente esportati come artifacts (una cartella zippata) e sono subito disponibili al download.

# 3.2 Risultati

# 3.2.1 Analisi <sup>94, 95, 96</sup>Mo: confronto con i dati preliminari di $n_{-}TOF$

Negli ultimi 20 anni la facility n\_TOF ha fornito dati rilevanti per lo studio dei processi di cattura neutronica che prendono parte al processo-s. Finora sono stati studiati alcuni degli elementi s-only (riportati in Tabella 1.1): <sup>70</sup>Ge, <sup>154</sup>Gd, <sup>186</sup>Os e <sup>206</sup>Pb. Inoltre, in questo momento, sono in fase di studio gli isotopi <sup>94, 95, 96</sup>Mo dei quali è stato possibile ottenere dei dati preliminari da confrontare con quelli delle principali librerie.

L'analisi svolta sulle sezioni d'urto ha mostrato che gli andamenti dei dati prelimiari di n\_TOF sono in accordo con quelli delle principali librerie ENDF. È possibile però notare delle differenze nella regione delle risonanze risolte, evidenziate attraverso i rapporti tra le sezioni d'urto (vedi Figure 3.9, 3.10 e 3.11). Più nello specifico, risulta evidente che nella reazione che coinvolge il <sup>95</sup>Mo è presente un gruppo di risonanze che non erano ancora state risolte nei dati delle librerie, questo è grazie ad una maggiore risoluzione energetica della facility n\_TOF.

Utilizzando il nostro codice è stato inoltre possibile calcolare le MACS in funzione della temperatura, confrontandole anche qui, rapportando tra loro i diversi valori ottenuti. Con i dati a disposizione è stato stimato il valore della MACS a 30 keV per il <sup>96</sup>Mo in modo da poterlo aggiungere al grafico dei rapporti  $\sigma_A^{\text{Maxw}} N_A$  riportato in Figura 1.7. Il valore della MACS calcolato è perfettamente in accordo con quelli delle altre librerie.



FIGURA 3.9: Sezione d'urto e MACS della reazione  ${}^{94}Mo(n,\gamma) {}^{95}Mo$  con i rispettivi rapporti per visualizzare le differenze.



FIGURA 3.10: Sezione d'urto e MACS della reazione  ${}^{95}Mo~(n,\gamma)$   ${}^{96}Mo~con~i$  rispettivi rapporti per visualizzare le differenze.

**3.2** *Risultati* 41



FIGURA 3.11: Sezione d'urto e MACS della reazione  ${}^{96}Mo~(n,\gamma)$   ${}^{97}Mo~con~i$ rispettivi rapporti per visualizzare al meglio le differenze.

# 3.2.2 Risultati dei modelli astrofisici

Le stelle nella loro fase AGB costituiscono l'ambiente ideale per il processo-s. Tramite questo processo viene creata circa la metà degli isotopi degli elementi più pesanti del ferro attraverso reazioni di cattura neutronica seguite da decadimenti  $\beta$ . I reaction rate di tali reazioni, organizzati in tabelle (*e.g.*, Figura 3.7), ottenuti dalle principali librerie sono stati inseriti come parametri al codice FUNS dal quale abbiamo ottenuto informazioni circa le abbondanze degli elementi derivanti dal processo-s. Il calcolo delle abbondanze è stato eseguito considerando una stella nella fase AGB di massa  $M = 2M_{\odot}$  e metallicità (la frazione in massa di elementi di materia diversi da H o He) Z = 0.01.



FIGURA 3.12: Abbondanze finali degli elementi sulla superficie stellare  $[El/Fe] \equiv \log(N(El)/N(Fe)) - \log(N(El)/N(Fe))_{\odot}$ , in funzione del numero di protoni Z.

In Figura 3.12 vediamo la composizione superficiale finale della stella presa come modello ricavate a partire da differenti librerie confrontate con valori di riferimento. La libreria che più si trova in accordo con i valori riferimento è TENDL-2021, quella più recente, le altre due librerie (JEFF-3.3 e ENDF-B-VIII.0) seppur in totale accordo tra loro sottostimano significativamente le abbondanze degli elementi pesanti con 60 < Z < 80.

Le stesse abbondanze sono state confrontate con quelle presenti nei grani presolari SiC (Palmerini, 2021), materia solida interstellare contenuta nei meteoriti, che hanno avuto origine prima del Sole da stelle ormai scomparse. Le firme isotopiche che si trovano all'interno dei grani presolari risultano essere un metodo precisissimo per verificare i modelli di nucleosintesi. Nel nostro caso gli isotopi considerati sono Sr, Ba, Ni, Mo e Zr. La Figura 3.13 mostra come le abbonanze isotopiche ricavate dalle librerie sono in buon accordo con variazioni  $\delta$  (per mille) delle abbondanze isotopiche contenute nei grani presolari.



FIGURA 3.13: Confronto tra le abbondanze ottenute da FUNS al variare della libreria con le abbondanze registrate nei grani presolari SiC. Sono rappresentate le variazioni  $\delta$  (per mille) dei rapporti tra le abbondanze isotopiche relative.

# Conclusioni

Lo sviluppo di un programma che automatizzi la lettura e il processamento in successione di tutte le librerie ENDF disponibili ha reso facilmente accessibili i dati contenuti nei file. Con questi dati a disposizione è stato possibile eseguire confronti con le misure di sezioni d'urto  $\sigma_{\gamma}(E)$  preliminari di n<sub>-</sub>TOF degli isotopi del molibdeno le quali, rispetto a quelle delle principali librerie, hanno una risoluzione energetica maggiore.

I reaction rate astrofisici che tengono conto degli stati eccitati dei nuclei sono stati l'input per simulazioni di modelli stellari, che hanno dato come risultato l'andamento delle abbondanze degli elementi chimici prodotti attraverso il processo-s. Queste abbondanze, per alcuni isotopi, sono risultate essere significativamente diverse da quelle di riferimento, mettendo in luce la necessità di nuove misure sperimentali di sezioni d'urto più precise, che verranno compiute nei prossimi anni dalla facility n\_TOF.

In un prossimo futuro, quando nuove versioni delle valutazioni verranno pubblicate, sarà possibile utilizzare il nostro programma, senza apportare alcuna modifica, per analizzarle e fare nuovi confronti.

# Bibliografia

- Cristallo, Sergio *et al.* (2011). "Evolution, Nucleosynthesis, and Yields of low-mass Asymptotic Giant Branch stars at different metallicities. II. The FRUITY database". In: *ApJS* 197.17, p. 21. DOI: 10.1088/0067-0049/197/2/17.
- Cullen, D.E. (2021). PREPRO 2021: ENDF/B Pre-processing Codes.
- Dillmann, I. et al. (2009). KADoNiS v0.3 the third update of the Karlsruhe Astrophysical Database of Nucleosynthesis in Stars. Fast Neutrons : Scientific Workshop on Neutron Measurements, Theory & Applications, Geel, B, April 28-30, 2009.
- Guerrero, C. *et al.* (2013). "Performance of the neutron time-of-flight facility n\_TOF at CERN". In: *The European Physical Journal A* 49, p. 27. DOI: 10.1140/epja/i2013-13027-6.
- Kappeler, F. et al. (1989). "s-process nucleosynthesis-nuclear physics and the classical model". In: Reports on Progress in Physics 52.8, pp. 945–1013. DOI: 10. 1088/0034-4885/52/8/002.
- Lodders, Katharina (2021). "Relative Atomic Solar System Abundances, Mass Fractions, and Atomic Masses of the Elements and Their Isotopes, Composition of the Solar Photosphere, and Compositions of the Major Chondritic Meteorite Groups". In: Space Science Reviews 217.3, p. 44. DOI: 10.1007/s11214-021-00825-8.
- Palmerini, Sara et al. (ott. 2021). "Presolar Grain Isotopic Ratios as Constraints to Nuclear and Stellar Parameters of Asymptotic Giant Branch Star Nucleosynthesis". In: The Astrophysical Journal 921.1, p. 7. DOI: 10.3847/1538-4357/ac1786.
- Prantzos, N. et al. (2020). "Chemical evolution with rotating massive star yields II. A new assessment of the solar s- and r-process components". In: mnras 491.2, pp. 1832–1850. DOI: 10.1093/mnras/stz3154.

- Pritychenko, B. e S.F. Mughabghab (2012). "Neutron Thermal Cross Sections, Westcott Factors, Resonance Integrals, Maxwellian Averaged Cross Sections and Astrophysical Reaction Rates Calculated from the ENDF/B-VII.1, JEFF-3.1.2, JENDL-4.0, ROSFOND-2010, CENDL-3.1 and EAF-2010 Evaluated Data Libraries". In: Nuclear Data Sheets 113.12, pp. 3120–3144. DOI: 10.1016/j.nds. 2012.11.007.
- Rauscher, T. et al. (2011). "Opportunities to constrain astrophysical reaction rates for the s-process via determination of the ground-state cross-sections". In: The Astrophysical Journal 738.2, p. 143. DOI: 10.1088/0004-637x/738/2/143.
- Reifarth, R. et al. (2009). "PINO—a tool for simulating neutron spectra resulting from the 7Li(p,n) reaction". In: Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 608.1, pp. 139–143. DOI: 10.1016/j.nima.2009.06.046.
- (2018). "Neutron-induced cross sections". In: The European Physical Journal Plus 133.10. DOI: 10.1140/epjp/i2018-12295-3.
- Trkov, Andre e David A. Brown (2018). "ENDF-6 Formats Manual: Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files". In: DOI: 10.2172/ 1425114.

# Ringraziamenti

A conclusione di questo elaborato desidero ringraziare: il mio relatore Francesco Giacomini per i preziosi consigli, la disponibilità e la passione che è riuscito a trasmettermi; il mio correlatore Cristian Massimi per aver trovato sempre il tempo di ascoltarmi e di correggermi, con il quale ho avuto il piacere di condividere i momenti che hanno portato ai risultati contenuti in questa tesi; altre persone che hanno reso possibile questo lavoro, in particolare Alberto Mengoni (ENEA), Sergio Cristallo (INAF) e Diego Vescovi (GSSI).

Ringrazio la mia fidanzata Sofia per essermi vicina quotidianamente e per avermi dato preziosi consigli nella scrittura di questa tesi.

Grazie a mia madre, mio padre e i miei nonni per aver creduto in me e per aiutarmi concretamente ogni giorno.

Infine grazie ai miei amici e ai miei compagni di università per i momenti divertenti passati assieme.

Grazie infinite a tutti voi.