Candidato: Alfredo Brugioni Relatore: Eleonora Guarini

Titolo: Calcolo della sezione d'urto neutronica di idrogeni liquidi

I liquidi criogenici come gli 'idrogeni' (H<sub>2</sub> e D<sub>2</sub>) hanno suscitato da sempre un grande interesse, sia perché il loro comportamento quantistico è tutt'oggi una sfida per la descrizione, teorica e basata su simulazioni, delle loro proprietà dinamiche, sia perché sono i più importanti moderatori per la produzione di neutroni freddi. Di conseguenza, nella ricerca e in campi più applicativi, come lo sviluppo di nuove sorgenti di neutroni, un'accurata conoscenza della sezione d'urto doppio differenziale (Double Differential Cross Section, DDCS) di questi fluidi ha assunto crescente importanza. Da un punto di vista puramente scientifico, questo lavoro mostra come i nuovi metodi di calcolo della DDCS, basati su simulazioni quantistiche, permettano di risolvere alcune delle discrepanze e inconsistenze fisiche storicamente presenti nella letteratura del settore, col grande vantaggio di non essere costretti ad abbandonare l'uso di principi primi per trovare un accordo con i dati sperimentali. A tal scopo, in questo lavoro di tesi vengono mostrati i risultati ottenuti mediante l'utilizzo di un programma di calcolo per la componente dinamica di singola particella della DDCS, in seguito alla simulazione quantistica della funzione di autocorrelazione della velocità (Velocity Autocorrelation Function, VACF) delle particelle per i due fluidi quantici H<sub>2</sub> e D<sub>2</sub>. Il confronto con i dati sperimentali viene fatto prevalentemente a livello di quantità integrate, cioè di sezione d'urto totale (Total Cross Section, TCS) perché la disponibilità di misure neutroniche di DDCS è non solo ridotta, ma quelle disponibili sono spesso inaccurate e in unità arbitarie. Un risultato significativo è l'ottimo accordo ottenuto con i dati sperimentali per H<sub>2</sub> nella regione di energie incidenti termiche.

Particolare attenzione è poi stata riservata al range di basse energie (< 20 meV). Infatti, a basse energie, la dinamica distinct (intermolecolare) risulta non trascurabile rispetto alla dinamica self (intramolecolare) che invece caratterizza, nella maggior parte delle condizioni cinematiche, lo spettro di DDCS di  $H_2$ . Dai risultati di questa tesi emerge la necessità di apposite misure su  $H_2$  nella regione subtermica. Diversamente, il caso del  $D_2$  fornisce più che soddisfacenti risultati in base al metodo proposto per la valutazione della parte self, e all'uso di semplici schematizzazioni per la parte distinct.