

VINCENZO MOLINARI

COMPLEMENTI
DI
NEUTRONICA

P A R T E I

ELEMENTI DI MECCANICA STATISTICA
DEI PROCESSI DI TRASPORTO

COMPLEMENTI DI NEUTRONICA

PARTE I. ELEMENTI DI MECCANICA STATISTICA DEI PROCESSI DI TRASPORTO

RIASSUNTO

Il trasporto e la termalizzazione dei neutroni costituiscono una branca della Meccanica Statistica dei sistemi non in equilibrio termodinamico. Nella I e II parte vengono riassunti gli elementi fondamentali della Meccanica Statistica del non equilibrio.

Dopo aver introdotto le grandezze fondamentali per la descrizione statistica di un sistema dinamico, viene qui ricavata l'equazione di Liouville e da questa, attraverso un metodo "regressivo", la Gerarchia di equazioni di BBGKY.

INDICE

Capitolo I - Definizione di grandezze fondamentali. Funzioni di distribuzione e proprietà medie

1. Introduzione	1
2. Spazio delle fasi e densità di probabilità	2
3. Correlazione fra particelle	7
4. Funzione di distribuzione per una particella	7
5. Funzione di distribuzione doppia	9
6. Valori medi	11

Capitolo II - Equazione di Liouville

. Introduzione	I4
2. Teorema di Liouville	I4
3. L'equazione di Liouville	I7

Capitolo III - Gerarchia di equazioni di "BEGKY"

. Introduzione	2I
2. Prima e seconda equazione della gerarchia	2I

PREFAZIONE

Dal 1945 in poi lo studio delle interazioni dei neutroni con la materia e la loro propagazione in mezzi eterogenei ha avuto un enorme sviluppo legato al crescente interesse che hanno avuto ed hanno i Reattori Nucleari. La necessità di conoscere sempre più dettagliatamente, sia in fase di progetto, sia per questioni connesse con la sicurezza dei Reattori, la distribuzione in spazio, energia e tempo dei neutroni all'interno dei Reattori stessi ha richiesto l'impiego di tecniche sempre più raffinate nello studio dei fenomeni di trasporto e termalizzazione dei neutroni. La chiara comprensione di questi fenomeni è alla base di ogni effettivo miglioramento dei calcoli e della tecnologia dei Reattori. Questa esigenza, motivata da ragioni di sicurezza oltre che economiche, trova oggi un valido sostegno nell'avvento di calcolatori elettronici sempre più potenti e flessibili che, tuttavia, possono essere completamente e razionalmente sfruttati solo quando vi è una approfondita e dettagliata conoscenza dei processi fisici e degli sviluppi analitici che sono alla base dei calcoli per la progettazione dei Reattori.

Il trasporto dei neutroni in mezzi moderanti o moltiplicanti può essere considerato una branca della meccanica statistica dei sistemi non in equilibrio termodinamico. La meccanica statistica del non equilibrio studia, in generale, l'evoluzione dinamica dei sistemi formati da molte particelle. Ma i differenti tipi di interazione fra le particelle costituenti i sistemi e le diverse densità e temperature che possono verificarsi creano situazioni fisiche così diverse da costituire, anche in vista delle diverse applicazioni, differenti discipline che vengono studiate in contesti diversi e spesso senza nessuna connessione. Così nelle singole discipline si usano equazioni particolari che però non sono

II

altro che le forme ridotte, per differenti ipotesi semplificatrici, di una unica equazione. La meccanica statistica dei sistemi non in equilibrio costituisce quindi la base teorica su cui si appoggia non solo la Fisica del Reattore, ma molte altre branche della Fisica e dell'Ingegneria come, per esempio la Fisica dei Plasmi o la Fluidodinamica. Sembra auspicabile una maggior interdisciplinarietà degli specialisti che, raggruppati nelle diverse attività facenti capo a determinate applicazioni, tendono ad ignorarsi a vicenda con grave perdita di tempo ed energia.

Lo scopo di questo rapporto, suddiviso in varie parti, è duplice: riassumere gli elementi fondamentali di meccanica statistica che danno un più consistente fondamento alla teoria del trasporto dei neutroni e possono costituire una valida base per l'introduzione ad altre discipline, come la Fisica dei Plasmi; trattare alcuni argomenti di Fisica del Reattore, come la tecnica delle sorgenti pulsate, che, pur essendo oggi di notevole importanza, non trovano usualmente una sistematica trattazione.

CAPITOLO I

DEFINIZIONE DI GRANDEZZE FONDAMENTALI - FUNZIONI DI DISTRIBUZIONE E PROPRIETA' MEDIE

I. INTRODUZIONE

Il comportamento dinamico di un sistema costituito da un numero molto elevato di particelle, come per esempio le molecole di un gas o i neutroni in un reattore nucleare, viene studiato nell'ambito della meccanica statistica. Infatti ogni regolarità nello spazio fisico o nello spazio delle velocità viene rapidamente annullato dall'effetto degli urti e del trasporto delle proprietà molecolari; uno stato di caos prevale sulle regolarità iniziali così che è possibile applicare ad esso il calcolo delle probabilità e le tecniche della meccanica statistica. La meccanica statistica può essere suddivisa in due branche; la prima concernente i sistemi in equilibrio, l'altra i sistemi che non sono in equilibrio. In questo ultimo caso avvengono certi processi irreversibili chiamati comunemente "processi di trasporto" che sono fenomeni tipici dei sistemi non in equilibrio. Le equazioni che descrivono l'evoluzione dinamica di questi processi sono comunemente chiamate equazioni del trasporto. La meccanica statistica del non equilibrio è stata introdotta il secolo scorso nell'ambito della teoria cinetica dei gas. Questa teoria stabilisce la connessione fra le leggi della meccanica e i processi irreversibili. Le prime definizioni quantitative di irreversibilità si trovano nella formulazione della seconda legge della termodinamica, dove l'introduzione del concetto di entropia permette la classificazione degli eventi naturali in processi reversibili, in cui l'entropia rimane costante, e processi irreversibili in cui l'entropia cresce col tempo. Tuttavia questa classificazione è puramente fenomenologica ed il legame fra irreversibilità e leggi della meccanica è descritto nell'ambito della teoria cinetica dei gas che cerca di spiegare i fenomeni osservati macroscopicamente in relazione alle forze di interazione fra le molecole.

Le ricerche in questo campo hanno segnato un notevole successo il secolo scorso (1872) col famoso teorema H di Boltzmann. La sua importanza fondamentale sorge dal fatto che la quantità H, definita in termini della funzione di distribuzione della velocità molecolare, si comporta esattamente come l'entropia termodinamica. Recentemente gli studi dei processi di trasporto hanno subito un notevole incremento. I motivi sono molteplici e vanno da problemi di trasporto a temperature molto basse come in elio liquido o in superconduttori, a temperature intermedie (500-1000 K°) nella diffusione dei neutroni nell'interno di reattori nucleari, a temperature elevatissime nei plasmi completamente ionizzati per lo studio della fusione nucleare. In questi primi capitoli verranno riportati gli elementi fondamentali della meccanica statistica dei processi di trasporto.

2. SPAZIO DELLE FASI E DENSITA' DI PROBABILITA'

Una massa macroscopica di materia è costituita da un enorme numero di componenti; atomi e molecole. Questi componenti costituiscono quello che chiameremo un "sistema dinamico". Consideriamo un sistema dinamico costituito da N particelle interagenti fra loro. Per semplicità supponiamo che le particelle siano tutte uguali e che ciascuna di esse abbia ℓ gradi di libertà. Per caratterizzare e descrivere il comportamento del sistema distinguiamo tre tipi di variabili e precisamente:

- a) quantità riguardanti le molecole stesse come la massa e la carica elettrica;
- b) parametri esterni che determinano le condizioni al contorno e le forze esterne;
- c) variabili che descrivono il moto delle particelle come la posizione, la velocità e l'energia.

Queste ultime prendono il nome di "variabili dinamiche" e un particolare insieme di queste variabili all'istante t definisce lo stato dinamico del sistema (o fase del sistema) al tempo t .

Supponiamo che lo stato del sistema sia completamente determinato dalla posizione \vec{r} e dalla velocità \vec{v} di ciascuna particella; ignoriamo cioè le possibili eccitazioni di gradi interni di libertà e prendiamo $l=3$. Numeriamo le particelle da 1 a N e indichiamo con \vec{r}_i e \vec{v}_i , con $i=1,2,\dots,N$, la posizione e la velocità della i -esima particella. Per conoscere la posizione e la velocità di ciascuna particella del sistema, cioè per definire completamente lo stato del sistema, dobbiamo conoscere $2 \cdot 3N = 6N$ numeri. Dobbiamo infatti conoscere le componenti dei $2N$ vettori

$$\begin{aligned} \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N \\ \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \dots, \vec{v}_N \end{aligned}$$

Questi $6N$ numeri possono essere rappresentati da un punto in uno spazio a $6N$ dimensioni. Così l'intero sistema ad un certo istante di tempo è rappresentato da un singolo punto di questo spazio a $6N$ dimensioni. Un tale spazio è chiamato spazio delle fasi o spazio Γ (spesso questo termine è riservato allo spazio dei vettori \vec{q}_i e \vec{p}_i , con \vec{q}_i coordinate generalizzate e \vec{p}_i momenti coniugati a \vec{q}_i). Poiché le particelle sono identiche, lo stato del sistema è invariante rispetto alle permutazioni delle particelle (se cioè cambiamo la numerazione delle particelle). Tuttavia ad ogni permutazione corrisponde un nuovo punto nello spazio Γ . Perciò ad un definito stato del sistema possono corrispondere $N!$ punti nello spazio. Con lo scorrere del tempo il punto rappresentativo del sistema si muove nello spazio Γ descrivendo una traiettoria. Il moto di questo punto è governato dalla legge del moto

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i + \sum_{j=1, j \neq i}^N \vec{F}_{ij} \quad (1)$$

dove \vec{F}_i è la somma delle forze esterne che agiscono sulla particella i e \vec{F}_{ij} è la forza esercitata dalla particella j sulla particella i . Se a un dato istante conosciamo la posizione e la velocità di tutte le particelle del sistema e le forze che agiscono su ciascuna di esse,

possiamo, in linea di principio, determinare il moto susseguente di tutte le particelle e quindi ricavare la traiettoria del punto rappresentante il sistema nello spazio Γ . Tuttavia la conoscenza esatta dello stato del sistema è impossibile sia per ragioni pratiche (grandi valori di N), sia per ragioni fondamentali (indeterminazioni quantistiche). Inoltre anche se riuscissimo a risolvere, con l'aiuto di un calcolatore elettronico perfetto, il sistema delle $6N$ equazioni differenziali, equazione (1), le soluzioni non avrebbero in pratica nessun senso. Infatti dovremmo conoscere anche le $6N$ condizioni iniziali per rendere le soluzioni delle (1) utilizzabili per predire qualsiasi processo fisico. In realtà è ben oltre le umane possibilità misurare simultaneamente le posizioni e i momenti di tutte le particelle del sistema (N compreso fra $\sim 10^{21}$ e $\sim 10^{23}$), o preparare il sistema in modo tale che queste variabili abbiano dei valori prestabiliti. In pratica invece il sistema è caratterizzato da alcuni parametri macroscopici suscettibili di osservazione diretta. Gli studi teorici in questo campo sono perciò rivolti alla definizione e al calcolo di questi parametri partendo da equazioni fondamentali. Per far questo si ricorre ai metodi e ai concetti della meccanica statistica. Così invece di considerare un solo sistema consideriamo un gran numero di sistemi uguali (stesse molecole e stesso numero) che differiscono solo per il microstato che essi hanno in un certo istante; essi non possono essere distinti macroscopicamente quando hanno la stessa energia. Questi "insiemi" ("ensemble" di Gibbs) di sistemi saranno rappresentati da una "nube" di punti nello spazio delle fasi Γ ; supponiamo inoltre che questi insiemi siano in numero così elevato che si possa parlare di densità di questa nube. La meccanica statistica studia la probabilità di trovare un sistema di questi insiemi, scelto a caso, in una particolare regione dello spazio Γ .

Introduciamo la funzione densità di probabilità

$$D_N(r_1, r_2, \dots, r_{3N}, v_1, v_2, \dots, v_{3N}, t) \quad (2)$$

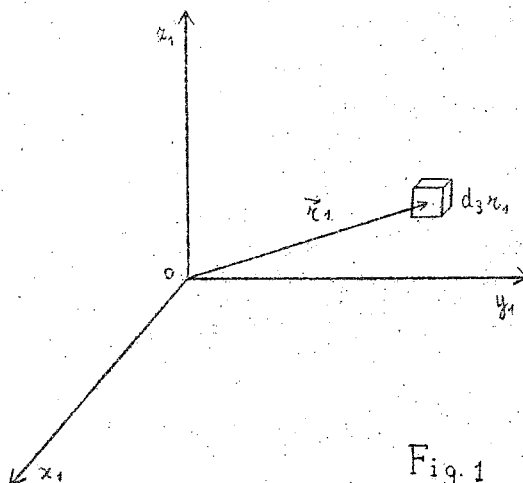
Per definizione si ha che

$$D_N d_N \Omega \quad (3)$$

dove

$$d_N \Omega = dr_1 dr_2 \dots dr_N dv_1 dv_2 \dots dv_N \quad (4)$$

è un elemento di volume a $6N$ dimensioni dello spazio Γ , è la probabilità che lo stato del sistema all'istante considerato sia rappresentato da un punto che si trova all'interno dell'elemento di volume $d_N \Omega$. In altre parole la (3) rappresenta la probabilità che la particella 1 si trovi entro un piccolo elemento di volume dello spazio ordinario $d_3 r_1 = dr_1 dr_2 dr_3 = dx_1 dy_1 dz_1$



e possenga un vettore velocità il cui estremo si trovi entro l'elemento dello spazio delle velocità $d_3 v_1 = dv_{1x} dv_{1y} dv_{1z}$ e contemporaneamente la particella 2 si trovi all'interno del volume $d_3 r_2$ dello spazio ordinario con l'estremo del vettore velo-

cità entro il volumetto $d_3 v_2$ dello spazio delle velocità e così via per tutte le altre particelle fino all'ennesima.

La funzione D_N deve soddisfare alla relazione

$$\int D_N d_N \Omega = 1 \quad (5)$$

dove l'integrazione rispetto alle variabili r deve essere estesa al volume occupato dal sistema e quella rispetto alle v a tutto lo spazio delle velocità. L'equazione (5) esprime il fatto che la probabilità totale di trovare il sistema in uno stato qualsiasi deve essere uguale a uno.

Le equazioni del moto sono espresse in maniera generale ricorrendo alle coordinate generalizzate ed ai momenti ad esse coniugati canonicamente. Il loro uso ci porta dallo schema della "meccanica vettoriale" a quello della "meccanica analitica". Indichiamo con $D_N(\vec{q}_i, \vec{p}_i, t)$ la funzione densità di probabilità nello spazio Γ quando usiamo \vec{q} e \vec{p} come coppie di variabili coniugate canonicamente. Per definizione

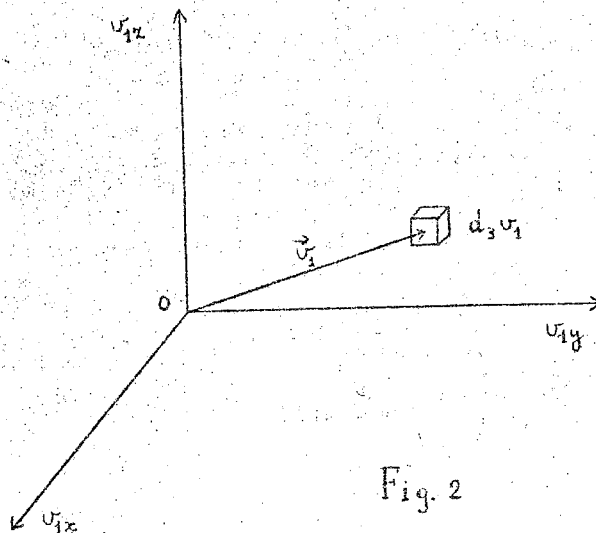


Fig. 2

$$D_N d q_1 d q_2 \dots d q_{3N} d p_1 d p_2 \dots d p_{3N} \quad (6)$$

è la probabilità che il punto rappresentativo del sistema sia in un elemento infinitesimo dello spazio Γ . Deve chiaramente valere la relazione

$$D_N d r_1 d r_2 \dots d r_{3N} d v_1 d v_2 \dots d v_{3N} = D_N d q_1 d q_2 \dots d q_{3N} d p_1 \dots d p_{3N}, \quad (7)$$

da cui si ha che, se prendiamo come coppia di variabili coniugate canonicamente \vec{r} e $m\vec{v}$,

$$D_N(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) = m^{3N} D_N(\vec{r}_i, m\vec{v}_i, t) \quad (8)$$

Oltre che allo spazio delle fasi Γ introduciamo lo spazio delle fasi M . Esso è lo spazio a 2ℓ (nel nostro caso $2\ell=6$) dimensioni in cui è determinato lo stato dinamico di una particella dalle sue tre coordinate spaziali e dalle sue tre componenti della velocità. Il sistema di N particelle è quindi rappresentato nello spazio M da N punti di coordinate \vec{r}_i e \vec{v}_i con $i=1, 2, \dots, N$.

3. CORRELAZIONE FRA PARTICELLE

Diremo che non vi è correlazione fra le particelle quando la funzione D_N è il prodotto di N funzioni ciascuna relativa ad una singola particella; cioè:

$$D_N = D_0(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) D_0(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \dots D_0(\vec{r}_N, \vec{v}_N, t) \quad (9)$$

Tutte le funzioni individuali D_0 sono prese formalmente identiche per il fatto che abbiamo supposto le particelle indistinguibili. Avremo che l'integrale (5) diventa:

$$\left(\int D_0(\vec{r}, \vec{v}, t) d_3 r d_3 v \right)^N = 1 \quad (10)$$

Poiché la funzione D_N deve essere reale e positiva sarà, dall'integrale precedente:

$$\int D_0(\vec{r}, \vec{v}, t) d_3 r d_3 v = 1 \quad (11)$$

Diremo che vi è correlazione fra le particelle quando la funzione D_N non soddisfa all'equazione (9).

4. FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE PER UNA PARTICELLA

La funzione D_N contiene il massimo di informazioni che si possono avere del sistema. Da ciò che è stato detto nei paragrafi precedenti non è necessario avere una descrizione così completa del sistema anche perchè una tale descrizione è difficilmente utilizzabile. In pratica si ricorre ad alcune grandezze macroscopiche che, come vedremo, sono medie di questa funzione o di funzioni ottenute da questa con metodo regressivo. Cerchiamo così la probabilità che la particella 1 del sistema sia nell'interno del volumetto $d_3 r_1$ con vettore velocità il cui estremo si trovi in $d_3 v_1$, cioè che abbia una certa posizione e velocità, indipendentemente dalla posizione e velocità di tutte le altre $N-1$ particelle. Evidentemente questa probabilità sarà uguale all'integrale su tutte le coordinate spaziali e di velocità di tutte le particelle tranne la prima:

$$d_3 r_1 d_3 v_1 \int D_N d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_2 d_3 v_3 \dots d_3 v_N \quad (12)$$

L'integrazione è estesa a tutto il volume occupato dal sistema. Ripetiamo lo stesso ragionamento per la particella 2, poi per la 3 ecc.. Poiché le particelle sono indistinguibili l'integrale (12) sarà identico se cambiano gli indici. Il numero probabile di particelle, che indichiamo con $\langle dN \rangle$, che si trovano in un volume $d_3 r$ e aventi velocità il cui vettore rappresentativo ha l'estremità in $d_3 v$ è dunque uguale al prodotto del numero di particelle per la probabilità che una particella sia in $d_3 r d_3 v$. Avremo perciò:

$$\langle dN \rangle = d_3 r_1 d_3 v_1 N \int D_N d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_2 d_3 v_3 \dots d_3 v_N \quad (13)$$

Possiamo porre

$$\langle dN \rangle = f_1 d_3 r_1 d_3 v_1 \quad (14)$$

essendo la funzione $f_1 \equiv f(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)$ data da:

$$f_1 = N \int D_N d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_2 d_3 v_3 \dots d_3 v_N \quad (15)$$

La funzione f_1 si chiama funzione di distribuzione per una particella o funzione di distribuzione semplice, perché la posizione e la velocità di ogni data particella non è correlata a quella di ogni altra particella. Dalla sua definizione, si vede che f_1 è tale che:

$$f_1 d_3 r_1 d_3 v_1 \quad (16)$$

rappresenta il numero probabile di particelle che al tempo t sono contenute nell'elemento di volume $d_3 r$ intorno ad \vec{r} con velocità nell'elemento di volume dello spazio delle velocità $d_3 v$ intorno a \vec{v} . Non bisogna confondere il valore probabile $\langle dN \rangle$ con il valore reale dN di particelle contenute in $d_3 r d_3 v$. Questa identificazione diventa ragionevole solamente se il volume $d_3 r d_3 v$, per quanto fisicamente piccolo, è tuttavia sufficientemente grande in modo che $\langle dN \rangle$ sia elevato. Se si trascurano le fluttuazioni statistiche si ha al-

lora $dN = \langle dN \rangle$. Se non vi è correlazione fra le particelle del sistema, sostituendo l'equazione (9) nella (15) e ricordando la (11), otteniamo $f_1 = ND_0$. Oltre alla funzione f_1 introduciamo la funzione densità semplice, $n_1 \equiv n(\vec{r}_1, t)$, ottenuta integrando f_1 su tutto lo spazio delle velocità

$$n_1 = \int f_1 d_3 v_1 \quad (17)$$

Dalla sua definizione, equazione (17), segue che $n_1 d_3 r_1$ rappresenta il numero probabile di particelle contenute nell'elemento di volume infinitesimo $d_3 r_1$ ed aventi qualsiasi velocità.

5. FUNZIONE DI DISTRIBUZIONE DOPPIA

Vogliamo ora ricavare la probabilità di trovare la particella 1 in un certo volumetto infinitesimo dello spazio \mathcal{M} , $d_3 r_1 d_3 v_1$, mentre la particella 2 si trova nel volumetto $d_3 r_2 d_3 v_2$, indipendentemente dalla posizione e dalla velocità di tutte le altre $N-2$ particelle. Evidentemente questa probabilità sarà uguale all'integrale sulle coordinate spaziali e sulle componenti delle velocità di tutte le particelle tranne le particelle 1 e 2; cioè sarà uguale a

$$d_3 r_1 d_3 r_2 d_3 v_1 d_3 v_2 \int D_N d_3 r_3 d_3 r_4 \dots d_3 r_N d_3 v_3 d_3 v_4 \dots d_3 v_N \quad (18)$$

Ripetiamo questo ragionamento per tutte le coppie di particelle. Poiché le particelle e quindi le coppie sono indistinguibili, l'espressione (18) non cambia se permutiamo gli indici e il numero probabile di coppie di particelle tali che due di esse siano in due prefissati volumi infinitesimi dello spazio \mathcal{M} è

$$d_3 r_1 d_3 r_2 d_3 v_1 d_3 v_2 N(N-1) \int D_N d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_3 \dots d_3 v_N, \quad (19)$$

cioè uguale al prodotto della probabilità che una coppia soddisfi alle condizioni richieste per il numero di coppie possibili, $N(N-1)$. Introduciamo la funzione di distribuzione doppia, $f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2, t) \equiv f_{12}$, definita dall'espressione

$$f_{12} = N(N-1) \int D_N d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_3 \dots d_3 v_N \quad (20)$$

Moltiplicata per $d_3 r_1 d_3 r_2 d_3 v_1 d_3 v_2$ essa rappresenta il numero probabile di coppie di particelle tali che una particella della coppia sia in $d_3 r_1 d_3 v_1$ e l'altra in $d_3 r_2 d_3 v_2$ indipendentemente dalla posizione e velocità di tutte le altre particelle. La funzione

$$n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv n_{12} = \int f_{12} d_3 v_1 d_3 v_2 \quad (21)$$

ottenuta per integrazione di f_{12} su tutto lo spazio delle velocità prende il nome di densità doppia e il suo significato fisico è evidente. Abbiamo anche

$$f_1 = \frac{1}{N-1} \int f_{12} d_3 r_2 d_3 v_2 \quad ; \quad n_1 = \frac{1}{N-1} \int n_{12} d_3 r_2 \quad (22)$$

Se fra le particelle del sistema non vi è correlazione, sostituendo la funzione densità di probabilità, data dall'equazione (9), nella (20) e ricordando la (11), otteniamo

$$f_{12} = N(N-1) D_0(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) D_0(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \quad (23)$$

da cui

$$f_{12} = \frac{N-1}{N} f_1 f_2 \quad (24)$$

Dato che N è molto grande abbiamo quindi che

$$f_{12} \approx f_1 f_2 \quad ; \quad n_{12} \approx n_1 n_2 \quad (25)$$

In generale, perciò, a causa delle forze di interazione fra le particelle che generano le correlazioni, $f_{12} \neq f_1 f_2$ e $n_{12} \neq n_1 n_2$. Lo studio degli effetti delle correlazioni ai fini di ottenere le funzioni f_{12} e n_{12} , è di notevole interesse sia nel campo delle ricerche di base, come per esempio nella fisica dello stato liquido e dei plasmi, sia in quello più applicativo. Basta infatti pensare alla grande importanza che rivestono oggi le ricerche sulla fisica dei plasmi per scopi di interesse pratico, come per esempio la fusione nucleare o la conversione diretta del calore in elettricità dove è richiesta una conoscenza det-

tagliata del comportamento del plasma, per comprendere l'importanza di questi studi. Come esempio degli effetti delle correlazioni sulla funzione n_{12} , in Fig. 3 è riportato il rapporto $n_{12}/n_1 n_2$ in funzione della distanza r_{12} fra le molecole di un liquido. La tendenza ad un certo ordine a breve distanza è manifestata chiaramente dalle oscillazioni della curva. Al crescere di r_{12} le oscillazioni diminuiscono dato che le correlazioni si attenuano con l'aumentare della distanza fra le molecole fino ad annullarsi completa-

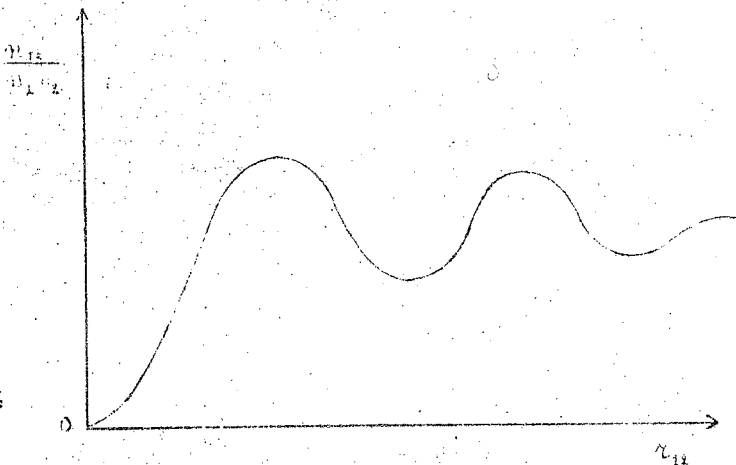


Fig. 3

mente a grande distanza. Per $r_{12} = 0$ la curva si annulla dato che a distanze molto brevi le forze intermolecolari diventano violentemente repulsive. Concludiamo il paragrafo notando che le definizioni date possono essere facilmente generalizzate per definire le funzioni di distribuzione multipla di qualsiasi ordine. Così per esempio la funzione di distribuzione $f_{12 \dots s}$ si ottiene mediante integrazione della funzione D_N rispetto alle coordinate e alle componenti della velocità di $N - s$ particelle:

$$f_{12 \dots s} = N(N-1)(N-2) \dots (N-s+1) \int D_N d_3 r_{s+1} \dots d_3 r_N d_3 v_{s+1} \dots d_3 v_N \quad (26)$$

6. VALORI MEDI

La funzione di distribuzione f_1 è di fondamentale importanza per lo studio delle proprietà di trasporto anche se spesso essa fornisce una descrizione del sistema più dettagliata di quanto sia necessario. Infatti dagli esperimenti otteniamo solo i valori di certe quantità medie, come la densità o la velocità e perciò in molti problemi siamo

interessati solamente a queste grandezze medie. L'importanza delle funzioni di distribuzione deriva dal fatto che esse ci permettono, in linea di principio, di calcolare queste grandezze macroscopiche osservabili direttamente. Definiamo queste quantità medie.

Sia $A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N, t)$ una funzione delle variabili dinamiche (che chiameremo anche una proprietà molecolare), per esempio l'Hamiltoniana, che caratterizza globalmente lo stato del sistema e supponiamo di essere interessati al valore medio che tale funzione ha al tempo t . Possiamo calcolare tale valore medio, che indichiamo con

$\langle A_N(t) \rangle$, dalla formula

$$\langle A_N(t) \rangle = \int A D_N d_3 r_1 d_3 v_1 \dots d_3 r_N d_3 v_N \quad (27)$$

La maggior parte delle grandezze macroscopiche funzioni delle variabili dinamiche in cui siamo interessati si presentano come somma di termini ciascuno dei quali dipende dallo stato di una sola o di due particelle. In questo caso, l'integrale dell'equazione (27) è espresso come la somma di integrali in ciascuno dei quali compare solo la funzione f_1 , o f_2 . Così per esempio se la grandezza macroscopica considerata A è data dalla somma di N termini ciascuno dei quali dipende dallo stato di una sola particella, come l'energia cinetica totale delle particelle del sistema, si ha

$$A = \sum_{i=1}^N A(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) = \sum_{i=1}^N A_i \quad (28)$$

Se sostituiamo l'equazione (28) nella (27) e ricordiamo la (15) otteniamo, per l'indistinguibilità delle particelle,

$$\langle A_N(t) \rangle = \int \sum_{i=1}^N A_i D_N d_3 r_1 d_3 v_1 \dots d_3 r_N d_3 v_N = \quad (29)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int A_i f_i d_3 r_i d_3 v_i = \int A(\vec{r}, \vec{v}, t) f(\vec{r}, \vec{v}, t) d_3 r d_3 v = N \langle A(t) \rangle$$

dove $\langle A(t) \rangle$ è il valore medio della grandezza considerata posseduta da ogni singola particella del sistema. Oltre ai valori medi funzione solo di t , definiamo anche i valori medi delle grandezze macroscopiche

in un elemento infinitesimo d_3r dello spazio fisico, $\langle A(\vec{r}, t) \rangle$:

$$\langle A(\vec{r}, t) \rangle = \frac{1}{N} \int A(\vec{r}, \vec{v}, t) f(\vec{r}, \vec{v}, t) d_3v \quad (30)$$

Perciò per il calcolo delle grandezze del tipo dell'equazione (28) non è necessario conoscere la funzione D_N , ma solamente la funzione f_1 . Come esempio di grandezza macroscopica che si presenta come somma di termini ciascuno dei quali dipende dallo stato di due particelle, calcoliamo l'energia potenziale totale di un sistema dinamico, φ . Se indichiamo con $\varphi_{ij} \equiv \varphi(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ l'energia potenziale d'interazione fra le particelle i e j , avremo

$$\varphi = \sum_{i < j=1}^N \varphi_{ij} \quad (31)$$

dove la somma è estesa a tutte le coppie di particelle. Sostituiamo ora l'equazione (31) nella (27); otteniamo

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle &= \int \sum_{i < j=1}^N \varphi_{ij} D_N d_3r_1 d_3r_2 \dots d_3r_N d_3v_1 \dots d_3v_N = \\ &= \frac{1}{2} \int \varphi_{12} f_{12} d_3r_1 d_3r_2 d_3v_1 d_3v_2 \quad (32) \end{aligned}$$

che mostra come la funzione di distribuzione doppia permetta di calcolare il valore medio di una grandezza del tipo di equazione (31).

Il fattore $1/2$ tiene conto del fatto che φ_{ij} è simmetrica rispetto agli indici i e j e ogni coppia deve essere contata una sola volta.

EQUAZIONE DI LIOUVILLE

I. INTRODUZIONE

Il problema generale della meccanica statistica del non-equilibrio è quello di trovare delle leggi appropriate per predire l'evoluzione nel tempo dello stato di un sistema dalla conoscenza dello stato iniziale e delle forze, sia esterne che interne, che agiscono sulle particelle del sistema. Abbiamo usato il termine "appropriate" perché, anche se lo stato dinamico di un sistema di N particelle identiche può essere descritto, come abbiamo visto nel capitolo precedente, dalla funzione densità di probabilità nello spazio delle fasi Γ , $\mathcal{D}_N(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N, t)$, non è assolutamente necessario conoscere dettagliatamente il cambiamento di \mathcal{D}_N . È sufficiente ricavare ai fini pratici l'equazione d'evoluzione per la funzione di distribuzione f_1 . Spesso anche seguire i cambiamenti di f_1 in tutti i suoi dettagli costituisce un compito superiore alle nostre possibilità. Tuttavia, per ottenere da una teoria coerente e sistematica le equazioni d'evoluzione per la funzione f_1 o le equazioni macroscopiche, è importante ricavare l'equazione per lo sviluppo nel tempo della funzione \mathcal{D}_N che costituisca la base su cui poter costruire tutta la meccanica statistica per i processi irreversibili. Come vedremo questa equazione è l'equazione di Liouville.

2. TEOREMA DI LIOUVILLE

Lo stato dinamico di un sistema di N particelle è descritto completamente da un punto nello spazio delle fasi. Poiché la storia passata e futura di un sistema è determinata dal suo stato presente, un punto in questo spazio determina univocamente una traiettoria. Il moto del punto rappresentativo è governato dalle equazioni canoniche di Hamilton date da

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{e} \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (1)$$

essendo $H(q_i, p_i)$, con $i = 1, 2, \dots, 3N$, l'Hamiltoniano del sistema. Supponiamo che ad un certo istante t il punto rappresentativo del sistema sia entro un elemento di volume infinitesimo $d_N \Omega$ dello spazio delle fasi.

Consideriamo ora non un solo sistema dinamico, ma un "insieme" di sistemi identici che differiscono solo per lo stato microscopico e tali da essere contenuti in $d_N \Omega$ al tempo t . Supponiamo anche di poter marcare in qualche modo le traiettorie che i punti rappresentativi dell'insieme considerato descrivono col passare del tempo. Ricordiamo che traiettorie di differenti sistemi non possono intersecarsi; se lo facessero, un sistema meccanico (ricordiamo che i sistemi dell'insieme sono identici) potrebbe muoversi in modo diverso sotto le stesse condizioni iniziali; ciò è chiaramente impossibile. Al tempo $t' = t + \delta t$ i punti rappresentativi di questo insieme occuperanno un certo volume dello spazio delle fasi che indichiamo con $d_N \Omega'$. In altre parole in $d_N \Omega'$ sono contenuti al tempo $t' = t + \delta t$ i punti rappresentativi dell'insieme che al tempo t sono in $d_N \Omega$. Il teorema di Liouville, che ora dimostreremo, stabilisce che

$$d_N \Omega = d_N \Omega' \quad (2)$$

Indichiamo con q_i e p_i e con q'_i e p'_i una coppia di variabili scalari coniugate prese al tempo t e t' rispettivamente. Trascurando infinitesimi di ordine superiore al primo abbiamo

$$q'_i = q_i + \frac{dq_i}{dt} \delta t = q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta t$$
$$p'_i = p_i + \frac{dp_i}{dt} \delta t = p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta t \quad (3)$$

Le equazioni (3) costituiscono una trasformazione che lega le q'_i e p'_i alle q_i e p_i . Se indichiamo con J il determinante Jacobiano di questa trasformazione sappiamo che fra gli elementi infinitesimi

$$d_N \Omega' \equiv dq'_1 dq'_2 \dots dq'_{3N} dp'_1 \dots dp'_{3N} \text{ e } d_N \Omega \equiv dq_1 dq_2 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N}$$

deve valere la relazione

$$d_N \Omega' = |J| d_N \Omega \quad (4)$$

il determinante Jacobiano, J , della trasformazione considerata è

$$J = \begin{vmatrix} 1 + \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial q_1} \delta t & & & \\ & \frac{\partial^2 H}{\partial p_2 \partial q_2} \delta t & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{\partial^2 H}{\partial p_{3N} \partial q_{3N}} \delta t \end{vmatrix}$$

come si evince facilmente dalle equazioni (3). Solo il prodotto degli elementi della diagonale principale può fornire dei termini del determinante che sono di ordine inferiore al secondo rispetto a δt , dato che tutti gli altri elementi sono proporzionali a δt . Abbiamo quindi

$$J = 1 + \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} \right) \delta t + O(\delta t^2) = 1 + O(\delta t^2) \quad (6)$$

che sostituito nella (4) dimostra la (2) a meno di termini di secondo ordine in δt . Il teorema di Liouville, che è di fondamentale importanza in meccanica statistica, stabilisce perciò che i punti rappresentativi di un insieme di sistemi identici si muovono nello spa-

zio Γ come un fluido incompressibile.

3. L'EQUAZIONE DI LIOUVILLE

Se tutti i punti rappresentativi dell'insieme dei sistemi che al tempo t sono in $d_N \Omega$ si trovano in $d_N \Omega'$ al tempo $t' = t + \delta t$, la probabilità che lo stato di un sistema sia in $d_N \Omega$ al tempo t è uguale a quella di trovare lo stato in $d_N \Omega'$ al tempo t' . Quindi deve valere la relazione

$$\int_{d_N \Omega'} D_N(q, p, t + \delta t) d_N \Omega' = \int_{d_N \Omega} D_N(q, p, t) d_N \Omega \quad (7)$$

che per il teorema di Liouville comporta

$$D_N(q, p, t + \delta t) = D_N(q, p, t) \quad (8)$$

Questo significa che D_N è costante se seguiamo il moto dei punti rappresentativi nello spazio Γ (la (8) è un altro modo di esprimere il teorema di Liouville). In forma alternativa la (8) si può scrivere come

$$\frac{dD_N}{dt} = 0 \quad (9)$$

o più esplicitamente

$$\frac{dD_N}{dt} + \sum_{i=1}^N \left[\frac{dq_i}{dt} \frac{\partial D_N}{\partial q_i} + \frac{dp_i}{dt} \frac{\partial D_N}{\partial p_i} \right] = 0 \quad (10)$$

che per mezzo delle equazioni canoniche del moto diviene

$$\frac{d^2 \mathcal{D}_N}{dt^2} = \sum_{i=1}^{3N} \left[\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{D}_N}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{D}_N}{\partial q_i} \right] = [H, \mathcal{D}_N] \quad (11)$$

dove $[H, \mathcal{D}_N]$ sono le parentesi di Poisson di H e \mathcal{D}_N .
L'equazione (11) è l'equazione di evoluzione per la funzione \mathcal{D}_N e prende il nome di equazione di Liouville. È importante sottolineare il fatto che la (11) non dice nulla di più delle equazioni del moto. Infatti, anche se \mathcal{D}_N è una funzione densità di probabilità, non vi è nulla di probabilistico nel modo di muoversi dei punti rappresentativi del sistema nello spazio Γ . Il moto è determinato dalle equazioni del moto delle quali la (11) è una diretta conseguenza.

L'equazione (11) non è vera se δp_i e δq_i sono incrementi arbitrari di p e q , ma solo se δp_i e δq_i sono quegli incrementi che derivano dalle equazioni del moto nell'intervallo di tempo δt .

Scriviamo ora l'equazione (11) per il caso particolare che si ha quando le q_i sono le coordinate Cartesiane delle particelle e le p_i sono i momenti corrispondenti. L'Hamiltoniano del sistema è

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \phi(\vec{r}_i) \right] + \sum_{(i,j)=1}^N \psi_{ij} \quad (12)$$

se assumiamo che tutte le forze siano indipendenti dalla velocità e derivino da un potenziale. Nella (I2) $\vec{p}_i = m\vec{v}_i$, Φ è l'energia potenziale delle forze esterne che include anche il potenziale delle pareti e $\varphi_{ij} \equiv \varphi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ è l'energia potenziale di interazione fra le particelle i e j . Dalla (I2) si ha

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \vec{v}_i \quad (13)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\partial \varphi_{ij}}{\partial \vec{r}_i} = -\vec{F}_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_{ij} \quad (14)$$

se indichiamo con $\vec{F}_i + \sum \vec{F}_{ij}$ la forza totale che agisce sulla particella i . Se sostituiamo la (I3) e la (I4) nella (11) dopo aver raggruppato a tre a tre i termini relativi ad una medesima particella otteniamo

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mathcal{L}_N(\vec{r}_i, m\vec{v}_i, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\vec{v}_i}{v_i} \frac{\partial \mathcal{L}_N(\vec{r}_i, m\vec{v}_i, t)}{\partial \vec{r}_i} + \\ & + \sum_{i=1}^N \left(\vec{F}_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_{ij} \right) \cdot \frac{\partial \mathcal{L}_N(\vec{r}_i, m\vec{v}_i, t)}{\partial m\vec{v}_i} = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

Ricordando che $D_N(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) = m^{3N} \mathcal{D}_N(\vec{r}_1, m\vec{v}_1, t)$, è sufficiente moltiplicare la (15) per m^{3N} per ottenere l'equazione di Liouville relativa alla funzione D_N . Si ha

$$\frac{\partial D_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{i=1}^N \frac{\vec{F}_i + \sum_{(j=1, \dots, N) \neq i}^N \vec{F}_{ij}}{m} \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{v}_i} = 0 \quad (16)$$

Risolvere l'equazione (16) per D_N è completamente equivalente a risolvere le equazioni del moto per N particelle e quindi, se N è molto grande, uno studio diretto della funzione D_N è impossibile. E' perciò necessario formulare dei metodi che derivino dalla (16), ma che rappresentino lo stato di un sistema in maniera più semplice, in modo da poter essere utilizzati per la soluzione dei problemi di interesse pratico.

CAPITOLO III

GERARCHIA DI EQUAZIONI DI "BEGKY"

I. INTRODUZIONE

Lo sviluppo che esamineremo in questo capitolo e che prende il nome di teoria di "BEGKY", non è certamente l'unico fra le varie teorie della meccanica statistica per lo studio di sistemi che non sono all'equilibrio, ma è quello più sistematico e più fruttifero di risultati. L'idea che sta alla base di questo sviluppo è che le quantità macroscopiche di interesse pratico non dipendono dalla completa densità di probabilità, $D_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N, t)$, nello spazio delle fasi Γ , ma solo dalla probabilità che una singola particella sia in un certo elemento dello spazio delle fasi, indipendentemente dalla posizione delle altre particelle. Abbiamo già visto, infatti, come le grandezze macroscopiche che caratterizzano un sistema dipendano solo dalla funzione di distribuzione semplice, $f_1, 0$, al più, dalla funzione di distribuzione doppia. Perciò il problema che ci si propone di risolvere è quello di ricavare dall'equazione di Liouville, che è una equazione per la funzione D_N , una equazione di evoluzione per la f_1 o la f_2 .

Come vedremo, mediante integrazione dell'equazione di Liouville, è possibile ottenere una gerarchia di equazioni per le f_1, f_2, f_3, \dots che, essendo stata ottenuta indipendentemente da Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood e Yvon fra il 1939 e il 1946, prende il nome di gerarchia di "BEGKY".

2. PRIMA E SECONDA EQUAZIONE DELLA GERARCHIA

Partiamo dall'equazione di Liouville che abbiamo ottenuto nel capitolo precedente

$$\frac{\partial D_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{r}_i} - \sum_{i=1}^N \frac{\vec{F}_i}{m} \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{v}_i} = 0 \quad (1)$$

e che si riferisce a un sistema di N particelle identiche. Moltiplichiamo la (I) per $N d_3 r_1 d_3 r_2 \dots d_3 r_N d_3 v_1 d_3 v_2 \dots d_3 v_N$ e integriamo rispetto alle $(N-1)$ variabili $\vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \dots, \vec{v}_N$. Per il primo termine della (I) otteniamo, ricordando la definizione di f_1 ,

$$\int N \frac{\partial D_N}{\partial t} d_3 r_1 d_3 r_2 \dots d_3 r_N d_3 v_1 d_3 v_2 \dots d_3 v_N = \quad (2)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} N \int D_N d_3 r_1 d_3 r_2 \dots d_3 r_N d_3 v_1 d_3 v_2 \dots d_3 v_N = \frac{\partial}{\partial t} f_1$$

Esaminiamo ora il secondo termine che, per convenienza, scriviamo separando il termine che si riferisce alla particella 1:

$$\vec{v}_1 \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{r}_1} + \sum_{i=2}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{r}_i} \quad (3)$$

Se eseguiamo le operazioni precedentemente indicate su ciascun termine della (3) otteniamo

$$\vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \sum_{i=2}^N N \int \vec{v}_i \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{r}_i} d_3 r_1 d_3 r_2 \dots d_3 r_N d_3 v_1 \dots d_3 v_N \quad (4)$$

Dimostriamo che solo il primo termine è diverso da zero. Dato che le particelle sono indistinguibili e quindi la D_N è una funzione simmetrica di \vec{r}_i, \vec{v}_i ($i=1, 2, \dots, N$), gli $N-1$ termini con $i \neq 1$ che compaiono nella (4) sono tutti uguali e la loro somma, ricordando la definizione di f_{11} , diviene

$$N(N-1) \int \vec{v}_2 \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{r}_2} d_3 r_1 d_3 r_2 \dots d_3 r_N d_3 v_1 \dots d_3 v_N = \quad (5)$$

$$= \int \vec{v}_2 \cdot \frac{\partial f_{11}}{\partial \vec{r}_2} d_3 r_1 d_3 v_1 = \int \vec{v}_2 \cdot \left[\int_V \frac{\partial f_{11}}{\partial \vec{r}_2} d_3 r_1 \right] d_3 v_2$$

Ma l'integrale entro parentesi quadre è uguale a zero se facciamo l'ipotesi ragionevole che f_{12} sia nulla quando la particella 2 è sul limite del volume V che contiene il sistema; quindi nella equazione (4) rimane solo il primo termine.

Consideriamo ora il termine della equazione (1) che dipende dalla forza esterna \vec{F} che, separando il termine relativo alla particella 1 ed eseguendo la moltiplicazione per N e la successiva integrazione, diviene, per la indistinguibilità delle particelle,

$$\frac{\vec{F}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} + \sum_{i=2}^N \frac{N}{m} \int \vec{F}_i \cdot \frac{\partial D_{ij}}{\partial \vec{v}_i} d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_2 \dots d_3 v_N = \quad (6)$$

$$= \frac{\vec{F}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} + \frac{N(N-1)}{m} \int \vec{F}_2 \cdot \frac{\partial D_{2N}}{\partial \vec{v}_2} d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_2 \dots d_3 v_N$$

Mostriamo che l'integrale che compare nella parte destra della (6) è nullo se la forza che agisce sulle particelle è indipendente dalla velocità. Abbiamo infatti

$$\frac{N(N-1)}{m} \int \vec{F}_2 \cdot \frac{\partial D_{2N}}{\partial \vec{v}_2} d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 v_2 \dots d_3 v_N =$$

$$= \frac{1}{m} \int \vec{F}_2 \cdot \left[\int \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_2} d_3 v_2 \right] d_3 r_2 = 0 \quad (7)$$

L'integrale entro parentesi quadre è nullo dato che nessuna particella ha velocità infinita e quindi f_{11} è uguale a zero quando \vec{v}_1 tende a $\pm \infty$.

Per il termine dell'equazione (1) dovuto alla forza interna, consideriamo prima gli $N-1$ termini relativi a $l=1$.

Otteniamo per questi termini

$$\begin{aligned} & \sum_{j=2}^N \frac{N}{m} \int \vec{F}_{1j} \cdot \frac{\partial D_1}{\partial \vec{v}_1} d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 \vec{v}_2 d_3 \vec{v}_3 \dots d_3 \vec{v}_N = \\ & = \frac{N(N-1)}{m} \int \vec{F}_{12} \cdot \frac{\partial D_N}{\partial \vec{v}_1} d_3 r_2 d_3 r_3 \dots d_3 r_N d_3 \vec{v}_2 d_3 \vec{v}_3 \dots d_3 \vec{v}_N = \\ & = \frac{1}{m} \int \vec{F}_{12} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} d_3 r_2 d_3 \vec{v}_2 \end{aligned} \quad (8)$$

Per quanto riguarda i termini con $l \neq 1$ si può verificare facilmente, con un procedimento analogo a quello precedente, che essi sono tutti nulli.

Se ora sommiamo le espressioni ricevute per i vari termini della (1) otteniamo l'equazione:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{x}_1} + \frac{\vec{F}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} + \int \frac{\vec{F}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} d_3 r_2 d_3 \vec{v}_2 = 0 \quad (9)$$

Vediamo quindi che mediante l'operazione di moltiplicazione per N e successiva integrazione rispetto alle $\mathcal{C}(N-1)$ variabili $\vec{r}_1, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_3, \dots, \vec{v}_N$ possiamo ricavare dalla (1) una equazione di evoluzione per la funzione di distribuzione semplice f_1 , dove però compare anche la funzione incognita f_{12} . Con un procedimento analogo al precedente possiamo anche ottenere l'equazione d'evoluzione per la funzione di distribuzione doppia, f_{12} . Se infatti moltiplichiamo la (1) per $N(N-1)$ e integriamo rispetto alle $\mathcal{C}(N-2)$ variabili $r_3, r_4, \dots, r_N, v_3, v_4, \dots, v_N$, otteniamo l'equazione

$$\frac{\partial f_{12}}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_1} + \vec{v}_2 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_2} + \frac{\vec{F}_1 + \vec{F}_2}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} + \frac{\vec{F}_2 + \vec{F}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_2} + \int \frac{\vec{F}_{13}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_1} d_3 r_3 d_3 v_3 + \int \frac{\vec{F}_{23}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_2} d_3 r_3 d_3 v_3 = 0 \quad (10)$$

che è appunto l'equazione d'evoluzione per la f_{12} . Tuttavia la (9) e la (10) formano un sistema indeterminato poiché nell'equazione (10) compare anche la funzione incognita f_{123} . Inoltre si può facilmente dimostrare che la funzione d'evoluzione per la $f_{12 \dots s}$, ottenuta dalla (1) mediante moltiplicazione per $N!/(N-s)!$ e successiva integrazione di ordine di molteplicità $\mathcal{C}(N-s)$, contiene anche la funzione incognita $f_{12 \dots s+1}$. Con questo metodo, detto metodo "regressivo", è quindi possibile ottenere le equazioni di evoluzione per le $f_{12 \dots s}$ che, però, costituiscono una gerarchia di equazioni in quanto per risolvere l'equazione per $f_{12 \dots s}$ è necessario conoscere $f_{12 \dots s+1}$. Per trovare f_1 bisogna risolvere tutte le N equazioni della gerarchia. Questo equivale a risolvere l'equazione di Liouville e perciò, ai fini di ottenere una teoria cinetica direttamente ricavabile dalle equazio-

ni della dinamica, può sembrare inutile lo sviluppo di BBGKY qui riportato. Tuttavia in questo modo, come esamineremo nel capitolo seguente, è possibile mettere in luce ed esaminare in modo sistematico quali sono le ipotesi semplificative che sono alla base delle varie equazioni per f_1 . Inoltre è possibile utilizzare il sistema delle prime s equazioni ottenute dalla teoria di BBGKY facendo una ipotesi semplificatrice di natura fisica sulla funzione $f_{1,2,\dots,s+1}$. Così, per esempio, facendo una opportuna ipotesi per la $f_{1,3}$ si può troncare la gerarchia dopo le prime due equazioni che costituiscono, in questo modo, un sistema autoconsistente. La soluzione di questo sistema fornisce delle informazioni molto più raffinate di quelle ricavabili dalle equazioni della teoria cinetica. Bisogna però sottolineare che risultati pratici, usando le prime due equazioni della gerarchia, sono stati ottenuti solo per situazioni estremamente semplificate.

Esaminiamo ora il significato fisico dei vari termini dell'equazione (9). Se moltiplichiamo ciascun termine della (9) per $d_3 r d_3 v dt$, il primo termine rappresenta la variazione della funzione f_1 in $d_3 r d_3 v$ durante l'intervallo di tempo dt . Il secondo termine tiene conto della variazione di f_1 in $d_3 r d_3 v$ durante dt per effetto della diffusione. Infatti nell'intervallo di tempo dt le particelle che inizialmente sono contenute in $d_3 r$ (vedi Fig. 1) e che hanno una velocità \vec{v} in $d_3 v$ percorrono lo spazio $v dt$ e una parte di esse può uscire da $d_3 r$. Contemporaneamente altre particelle con velocità in $d_3 v$ entrano, durante dt , in $d_3 r$. La differenza tra quelle che entrano e quelle che escono provoca una variazione di f_1 in $d_3 r$ e $d_3 v$. Ma, se per i particolari valori di \vec{v}, \vec{r} e t considerati $\frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1}$ è nullo, il numero di particelle che entrano è uguale a quello delle particelle che escono e quindi la diffusione non porta nessuna variazione ad f_1 nell'elemento $d_3 r d_3 v$ e al tempo t considerati, anche se la velocità \vec{v} è diversa da zero. Il terzo termine rappresenta la variazione di f_1 per effetto della forza esterna \vec{F}_1 che imprime un'accelerazione, data

da \vec{F}_1/m , alle particelle. Le particelle, che inizialmente hanno una velocità \vec{v} in d_3v , nell'intervallo di tempo dt subiscono una variazione di velocità e una parte di esse può uscire da d_3v (vedi Fig.2).

Contemporaneamente altre particelle possono entrare in d_3v per effetto della forza esterna. Se tuttavia, per i particolari valori di \vec{v}, \vec{r} e t considerati, $\frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}}$ è uguale a zero la forza \vec{F}_1 non influenza la funzione f_1 nell'elemento d_3rd_3v al tempo t . L'ultimo termine esprime la variazione di f_1 per effetto degli urti delle particelle fra loro. Infatti gli urti possono fare entrare o uscire da d_3v delle particelle e quindi possono farne variare il numero nell'intervallo dt . Ovviamente la somma di questi quattro termini deve essere uguale a zero.

P A R T E I I ^

ELEMENTI DI MECCANICA STATISTICA;

EQUAZIONI DEL TRASPORTO

COMPLEMENTI DI NEUTRONICA

PARTE II. ELEMENTI DI MECCANICA STATISTICA; EQUAZIONI DEL TRASPORTO

RIASSUNTO

Dalla prima equazione della Gerarchia di BBCKY vengono ricavate, attraverso differenti ipotesi semplificatrici, le equazioni di Boltzmann senza collisioni, l'equazione di Vlasov e l'equazione di Boltzmann.

Viene quindi dimostrato il teorema H sia per mezzi omogenei in assenza di forze esterne, che per sistemi contenuti in recipienti a pareti perfettamente riflettenti e in presenza di forze esterne. Per questi due casi vengono riportate le funzioni di distribuzione all'equilibrio termodinamico.

INDICE

Capitolo I - Equazione di Vlasov

1. Introduzione	1
2. Equazione di Boltzmann senza collisioni	
3. Equazione di Vlasov	2

Capitolo II - Collisioni elastiche fra due particelle

1. Introduzione	6
2. Dinamica degli urti binari e leggi di conservazione.	6
3. Descrizione dell'urto nel sistema di riferimento del centro di massa	9
4. Angolo di diffusione nel sistema C.M.	15
5. Sezione d'urto differenziale e parametro d'urto . .	17
6. Funzioni potenziali	21
7. Sezione d'urto di diffusione per il modello "sfere rigide"	24

Capitolo III - L'equazione di Boltzmann; derivazione classica

1. Introduzione	26
2. Determinazione di $\Gamma(-)$	29
3. Determinazione di $\Gamma(+)$	31
4. Integrale di collisione di Boltzmann	35

Capitolo IV - Teorema H e distribuzione Maxwelliana

1. Teorema H: stato omogeneo	37
--	----

2. Proprietà molecolari conservate dopo gli urti	40
3. Soluzione di equilibrio dell'equazione di Boltzmann; distribuzione Maxwelliana	42
4. Lo stato stazionario in presenza di forze esterne; il "fattore di Boltzmann"	49

EQUAZIONE DI VLASOV

1. INTRODUZIONE

Nei capitoli precedenti abbiamo visto come la teoria di "BBGKY" ci abbia permesso di ricavare un sistema di equazioni funzionali le cui incognite sono le funzioni di distribuzione $f_1, f_{12}, f_{123}, \dots$

La prima di queste equazioni,

$$\mathcal{L}f_1 = - \int \frac{\vec{F}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} d_3 r_2 d_3 v_2, \quad (1)$$

dove l'operatore \mathcal{L} è

$$\mathcal{L} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}}, \quad (2)$$

contiene le due incognite f_1 e f_{12} . Se vogliamo ottenere una equazione per la sola funzione f_1 (le equazioni per la funzione di distribuzione semplice f_1 sono comunemente chiamate "equazioni cinetiche") dalla (1), evitando di risolvere tutte le altre equazioni della gerarchia di BBGKY, dobbiamo cercare di esprimere f_{12} in termini di f_1 .

Come vedremo questo può essere fatto in diversi modi introducendo alcune ipotesi semplificative connesse con particolari situazioni fisiche.

Si possono così ottenere delle equazioni cinetiche, delle quali le più note sono: l'equazione di Boltzmann senza collisioni; l'equazione di Vlasov; l'equazione di Boltzmann; l'equazione di Fokker-Planck.

2. EQUAZIONE DI BOLTZMANN SENZA COLLISIONI

Consideriamo un sistema dinamico di densità molto bassa. La densità di un sistema è considerata bassa quando il rapporto fra la durata media di un urto e il tempo medio che intercorre fra due collisioni è molto minore di 1. Per il caso considerato possiamo fare l'ipotesi che l'effetto degli urti sulla distribuzione, in spazio, tempo e velocità, delle particelle del sistema possa essere completamente trascurato.

Poniamo quindi uguale a zero il secondo membro dell'equazione (1) che diviene

$$\mathcal{L}f = 0 \quad (3)$$

L'equazione (3) prende il nome di equazione di Boltzmann senza collisioni e la sua validità è tanto migliore quanto più il gas è rarefatto. L'equazione (3), che formalmente è identica all'equazione di Liouville per una sola particella, è usata soprattutto in astrofisica per studiare l'evoluzione di un gas di particelle cariche in un campo elettromagnetico esterno.

Il grado di informazione che si può ottenere dalla soluzione della (3) è uguale a quello che fornisce lo studio delle orbite separate. Tuttavia, l'equazione (3) permette di trattare statisticamente un gran numero di orbite per differenti condizioni iniziali.

3. EQUAZIONE DI VLASOV

L'approssimazione drastica che abbiamo fatto nel paragrafo precedente ha come conseguenza quella di fornire risultati spesso solo indicativi.

Infatti, anche quando il sistema è poco denso l'effetto degli urti può essere rilevante e in qualche modo bisogna tenerne conto nell'equazione.

L'equazione di Vlasov, che ora ricaveremo, porta in conto l'effetto delle collisioni sotto l'ipotesi approssimativa che non vi siano correlazioni fra le particelle. Poniamo quindi $f_{12} = f_1 f_2$ nel secondo membro dell'equazione (1) che diviene

$$\mathcal{D} f_1 = - \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} \cdot \int \frac{\vec{F}_{12}}{m} f_2 d_3 r_2 d_3 v_2 \quad (4)$$

Se la forza \vec{F}_{12} è indipendente dalla velocità possiamo eseguire l'integrazione rispetto a \vec{v}_2 e la (4) diviene

$$\mathcal{D} f_1 = - \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} \cdot \int \frac{\vec{F}_{12}}{m} n_2 d_2 r_2 = - \frac{\vec{F}'_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} \quad (5)$$

dove abbiamo posto $\vec{F}'_1 = \int \vec{F}_{12} n_2 d_2 r_2$. La forza \vec{F}'_1 si chiama "campo di carica spaziale" e rappresenta il valore probabile della forza che agisce, ad un certo istante, sulla particella 1 quando non vi sono correlazioni fra le particelle.

L'ipotesi di assenza di correlazioni non è, in generale, giustificata; tuttavia in un sistema abbastanza denso con forze di interazione a lungo raggio (per esempio in un plasma dove le forze sono di tipo Coulombiano), ogni particella è influenzata da un gran numero di interazioni simultanee tanto che la correlazione con un'altra particella è parzialmente cancellata.

In altri termini, quando le forze sono a lungo raggio le particelle non urtano fra di loro individualmente, ma collettivamente e ogni particella si trova costantemente sottoposta ad un campo macroscopico generato dalla distribuzione spaziale delle particelle cariche. Inoltre per le interazioni fra particelle sufficientemente separate (separate da una distanza superiore alla lunghezza di Debye) l'effetto delle correlazioni può essere trascurato. Solo quando le particelle che interagiscono sono a breve distanza (distanza inferiore alla lunghezza di Debye) le correlazioni diventano importanti.

Comunemente la (5) si scrive nel modo seguente

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F} + \vec{F}'}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0 \quad (6)$$

ed è in questa forma che prende il nome di equazione di Vlasov. Essa è formalmente uguale all'equazione di Boltzmann senza collisioni dove, però, compare, oltre alla forza esterna \vec{F} , anche la forza \vec{F}' che porta in conto l'effetto degli urti. Per le ipotesi fatte, nel calcolo di \vec{F}' sono considerati con buona approssimazione gli urti lontani, mentre quelli vicini entrano nel calcolo solo grossolanamente.

Potremmo pensare che quando un gas ionizzato è neutro, cioè quando la densità delle cariche positive è uguale a quella delle cariche negative, la forza di natura elettrostatica \vec{F}' sia uguale a zero.

In realtà, sia i moti collettivi ordinati, come le oscillazioni elettrostatiche longitudinali, sia le fluttuazioni statistiche possono generare un campo di carica spaziale anche in un plasma neutro.

Concludiamo questo paragrafo mostrando come l'equazione di Vlasov possa essere usata, unitamente all'equazioni di Maxwell, per descrivere certi fenomeni ondulatori in un gas ionizzato.

Supponiamo che il nostro sistema di particelle cariche non sia sottoposto ad alcun campo esterno (sia cioè $\vec{F}=0$) e che \vec{F}' sia il campo di carica spaziale dovuto solamente ai modi longitudinali di propagazione. Per semplicità di calcolo, facciamo anche l'ipotesi che il

nostro sistema sia costituito solo da elettroni, dei quali indichiamo con $-e$ la carica, e da ioni positivi ionizzati una sola volta di carica $+e$. Per questo sistema la densità di carica, η , è

$$\eta = e(n_+ - n_-) \quad , \quad (7)$$

se indichiamo con n_- e n_+ la densità degli elettroni e degli ioni; inoltre il campo elettrico $\vec{E}' = \vec{F}'/e$ può essere espresso, per le ipotesi fatte, come il gradiente di un potenziale scalare, ϕ , che è determinato dall'equazione di Poisson

$$\text{div } \vec{E}' = -\nabla^2 \phi = \frac{\eta}{\epsilon_0} \quad , \quad (8)$$

avendo indicato con ϵ_0 la costante dielettrica del vuoto. Consideriamo solo il moto degli elettroni e facciamo l'ipotesi che gli ioni costituiscano un fondo di carica neutralizzante. Questa ipotesi è giustificata dalla grande differenza di massa esistente fra gli elettroni e gli ioni. Supponiamo ora che la funzione di distribuzione degli elettroni, f_- , sia data da

$$f_- = f_0 + \phi_- \quad (9)$$

dove f_0 è la distribuzione stazionaria e ϕ_- è una piccola perturbazione funzione del tempo. Se sostituiamo la (9) nella (6) e trascuriamo il prodotto $(F'/m) (\partial \phi_- / \partial \vec{v})$, otteniamo l'equazione di Vlasov per gli elettroni linearizzata

$$\frac{\partial \phi_-}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial \phi_-}{\partial \vec{r}} - \frac{e}{m} \vec{E}' \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{v}} = 0 \quad (10)$$

Inoltre dall'equazione (7) si ha

$$\eta = -e \int \phi_- d_3 v \quad (11)$$

dato che

$$n_- = \int f_- d_3 v = \int f_0 d_3 v + \int \phi_- d_3 v = n_0 + \int \phi_- d_3 v \quad (12)$$

e $n_+ = n_0$. Sostituiamo ora la (11) nella (8); otteniamo

$$\operatorname{div} \vec{E}' = - \frac{e}{\epsilon_0} \int \phi_- d_3 v \quad ; \quad (13)$$

la (13) unitamente alla (10) costituisce un sistema autoconsistente per le due incognite ϕ_- e \vec{E}' . La soluzione simultanea delle equazioni (10) e (13) permette di determinare le proprietà delle oscillazioni elettrostatiche longitudinali di un gas ionizzato.

Molti sforzi sono stati compiuti in questi ultimi anni nel tentativo di risolvere l'equazione di Vlasov. Tuttavia le sole soluzioni complete e trattabili che sono state ottenute sono quelle approssimate ricavate dalla teoria delle perturbazioni mediante la quale, come abbiamo visto nell'esempio precedente, è possibile linearizzare l'equazione.

COLLISIONI ELASTICHE FRA DUE PARTICELLE

1. INTRODUZIONE

Come abbiamo visto nei paragrafi precedenti, lo stato di un sistema dinamico dipende, spesso in modo determinante, dall'interazione mutua delle particelle del sistema. Poichè le particelle (molecole, atomi, etc..) esercitano fra di loro delle forze, dovute ai campi connessi alla natura delle particelle stesse, diremo che una particella subisce un urto quando entra nel raggio di forza di un'altra particella o di altre particelle. Un urto fra due o più particelle deve quindi essere pensato come una interazione, governata dai campi che agiscono su ciascuna delle particelle, che altera il moto delle particelle interagenti. Se la durata di un urto è molto piccola in confronto al tempo medio che intercorre fra due collisioni, si può trascurare l'energia potenziale di interazione rispetto all'energia cinetica totale delle particelle e il sistema si dice perfetto. Fra i vari fenomeni di interazione o di urto quelli binari, quelli cioè in cui solo due particelle sono interessate, sono di fondamentale importanza per lo studio dell'evoluzione in spazio e in tempo di un sistema, sia perchè descrivono con sufficiente accuratezza molte situazioni fisiche, sia perchè le interazioni multiple possono essere pensate come se fossero un certo numero di collisioni binarie simultanee.

Possiamo distinguere due tipi di urti binari:

- 1) urti elastici in cui le particelle interagenti non cambiano la loro energia interna. Sono quindi sufficienti le leggi di conservazione del momento e dell'energia per determinare il moto delle particelle;
- 2) urti anelastici in cui l'energia interna di una o di ambedue le particelle cambia per effetto della collisione o viene generata una nuova particella.

In questo capitolo ci occuperemo solamente di urti binari elastici.

2. DINAMICA DEGLI URTI BINARI E LEGGI DI CONSERVAZIONE

Consideriamo l'urto fra due particelle A e B di massa m_A e m_B rispettivamente e supponiamo che il potenziale di interazione $\phi(r)$ dipenda solo dalla distanza di separazione fra A e B così che la forza che le particelle esercitano fra di loro è diretta lungo la linea che congiunge i loro centri. Vogliamo studiare il moto delle due parti-

celle soggette soltanto alla forza di interazione. Siamo interessati solamente alle velocità iniziali e finali di A e B, cioè alla velocità che le particelle hanno prima di interagire, essendo a distanza superiore a quella efficace per la forza di interazione, e alla velocità dopo che l'urto è avvenuto e le particelle si muovono indipendentemente dalla forza di interazione. Gli indici A e B distinguono le grandezze che si riferiscono alla particella A e alla particella B rispettivamente; l'apostrofo indica la velocità dopo l'urto e l'asterisco la velocità relativa al sistema di riferimento del centro di massa (C.M). Il centro di massa fra le due particelle A e B è definito come quel punto rispetto al quale la somma dei momenti delle masse delle due particelle è uguale a zero.

Così se \vec{r}_c è la posizione del centro di massa quando le particelle A e B sono a \vec{r}_A e \vec{r}_B si ha

$$m_A(\vec{r}_A - \vec{r}_c) - m_B(\vec{r}_B - \vec{r}_c) = 0 \quad (1)$$

da cui

$$\vec{r}_c = \frac{m_A \vec{r}_A + m_B \vec{r}_B}{m_A + m_B} \quad (2)$$

Deriviamo l'equazione (2) rispetto al tempo e indichiamo con \vec{v}_c la velocità del centro di massa; otteniamo

$$\vec{v}_c = \frac{m_A \vec{v}_A + m_B \vec{v}_B}{m_A + m_B} \quad (3)$$

Per la velocità del baricentro dopo l'urto si ha, con procedimento analogo al precedente,

$$\vec{v}'_c = \frac{m_A \vec{v}'_A + m_B \vec{v}'_B}{m_A + m_B} \quad (4)$$

che, dal confronto con l'equazione (3) e per la legge di conservazione della quantità di moto, stabilisce che $\vec{v}_c = \vec{v}'_c$, cioè la velocità del centro di massa è una costante.

Dimostriamo ora che la velocità relativa prima dell'urto, $\vec{g}_{BA} = \vec{v}_B - \vec{v}_A = -\vec{g}_{AB} = -(\vec{v}_A - \vec{v}_B)$, è uguale in modulo a quella dopo l'urto, $\vec{g}'_{BA} = (\vec{v}'_B - \vec{v}'_A) = -\vec{g}'_{AB} = -(\vec{v}'_A - \vec{v}'_B)$.

Introduciamo a questo scopo le velocità delle particelle nel sistema di riferimento C.M.;

$$\vec{v}_A^* = \vec{v}_A - \vec{v}_C = -\vec{g}_{BA} \frac{m_B}{m_A + m_B}, \quad (5, a)$$

$$\vec{v}_B^* = \vec{v}_B - \vec{v}_C = \vec{g}_{BA} \frac{m_A}{m_A + m_B}, \quad (5, b)$$

$$\vec{v}'_A{}^* = \vec{v}'_A - \vec{v}'_C = -\vec{g}'_{BA} \frac{m_B}{m_A + m_B}, \quad (5, c)$$

$$\vec{v}'_B{}^* = \vec{v}'_B - \vec{v}'_C = \vec{g}'_{BA} \frac{m_A}{m_A + m_B}. \quad (5, d)$$

Se ora sostituiamo nell'equazione che esprime la legge di conservazione dell'energia

$$\frac{1}{2}(m_A v_A^2 + m_B v_B^2) = \frac{1}{2}(m_A v_A'^2 + m_B v_B'^2), \quad (6)$$

le espressioni di v_A^2 , v_B^2 , $v_A'^2$ e $v_B'^2$ come si possono ottenere dalle equazioni (5), otteniamo

$$v_C^2 (m_A + m_B) + g_{BA}^2 \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} = v_C'^2 (m_A + m_B) + g_{BA}'^2 \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (7)$$

da cui

$$|\vec{g}_{BA}| = |\vec{g}'_{BA}| = g, \quad (8)$$

e quindi la velocità relativa può cambiare solo in direzione, ma non in modulo. L'effetto dinamico dell'urto è conosciuto quando è determinato il cambiamento in direzione di \vec{g}_{BA} .

Dalle equazioni (5) e dalla equazione (8) abbiamo anche

$$|\vec{v}_A^*| = |\vec{v}_A'^*| \quad ; \quad |\vec{v}_B^*| = |\vec{v}_B'^*| \quad , \quad (9)$$

cioè il modulo della velocità di una particella nel sistema C.M. non cambia durante l'urto.

Le equazioni (5) permettono anche di calcolare il cambiamento della velocità che le particelle subiscono per effetto dell'urto. Se infatti sottraiamo la (5,a) dalla (5,c) e la (5,b) dalla (5,d) otteniamo

$$\begin{aligned} \vec{v}_A' - \vec{v}_A &= \frac{m_B}{m_A + m_B} (\vec{g}_{BA} - \vec{g}_{BA}') \quad , \\ \vec{v}_B' - \vec{v}_B &= \frac{m_A}{m_A + m_B} (\vec{g}_{BA}' - \vec{g}_{BA}) \quad . \end{aligned} \quad (10)$$

3. DESCRIZIONE DELL'URTO NEL SISTEMA DI RIFERIMENTO DEL CENTRO DI MASSA

Indichiamo con \vec{F}_{AB} la forza che la particella B esercita sulla particella A e con \vec{F}_{BA} quella che la particella A esercita sulla particella B. Queste forze che, come supposto nel paragrafo precedente, sono dirette lungo la linea retta passante per i centri delle due particelle, sono uguali ed opposte in virtù del principio "di azione e reazione" della dinamica.

Se moltiplichiamo le equazioni del moto delle due particelle (i punti denotano derivazione rispetto al tempo),

$$\begin{aligned} \vec{F}_{AB} &= m_A \ddot{\vec{r}}_A \quad , \\ \vec{F}_{BA} &= -\vec{F}_{AB} = m_B \ddot{\vec{r}}_B \quad , \end{aligned} \quad (11)$$

per m_B la prima e m_A la seconda e sommiamo le due espressioni ottenute, abbiamo

$$\vec{F}_{AB} = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} (\ddot{\vec{r}}_A - \ddot{\vec{r}}_B) = m_c (\ddot{\vec{r}}_A - \ddot{\vec{r}}_B) \quad (12)$$

La massa m_c , definita dall'equazione (12), si chiama "massa ridotta" del sistema delle due particelle e $\vec{r}_{AB} = \vec{r}_A - \vec{r}_B$ distanza relativa.

Notiamo che $\frac{d}{dt} \dot{\vec{r}}_{AB} = \dot{\vec{r}}_A - \dot{\vec{r}}_B = \dot{\vec{g}}_{AB}$; l'equazione (12) può quindi essere scritta nel modo seguente

$$\vec{F}_{AB} = m_c \ddot{\vec{r}}_{AB} = m_c \frac{d\dot{\vec{g}}_{AB}}{dt} \quad (13)$$

cosicchè il moto delle due particelle è formalmente uguale al moto di una sola particella di massa m_c che si muove con velocità $\dot{\vec{g}}_{AB}$ sotto la stessa forza \vec{F}_{AB} .

Moltiplichiamo ora vettorialmente l'equazione (13) per \vec{r}_{AB} ; otteniamo

$$\vec{F}_{AB} \wedge \vec{r}_{AB} = m_c \ddot{\vec{r}}_{AB} \wedge \vec{r}_{AB} \quad (14)$$

Ma il primo membro della (14) è uguale a zero dato che la forza \vec{F}_{AB} è diretta, per l'ipotesi fatta, lungo la stessa direzione di \vec{r}_{AB} . Abbiamo quindi

$$m_c \ddot{\vec{r}}_{AB} \wedge \vec{r}_{AB} = m_c \left\{ \frac{d}{dt} \left(\dot{\vec{r}}_{AB} \wedge \frac{d\vec{r}_{AB}}{dt} \right) - \frac{d}{dt} \dot{\vec{r}}_{AB} \wedge \frac{d}{dt} \vec{r}_{AB} \right\} = 0 \quad (15)$$

L'ultimo termine in parentesi graffe della formula precedente è identicamente nullo e l'equazione (15) porge

$$\frac{d}{dt} \left(\dot{\vec{r}}_{AB} \wedge \frac{d\vec{r}_{AB}}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left(\dot{\vec{r}}_{AB} \wedge \dot{\vec{g}}_{AB} \right) = 0 \quad (16)$$

o, dopo integrazione rispetto al tempo,

$$\vec{r}_{AB} \wedge \vec{g}_{AB} = \vec{K} = \text{un vettore costante.} \quad (17)$$

L'equazione (17) stabilisce che il prodotto vettoriale di \vec{r}_{AB} per \vec{g}_{AB} è una costante e di conseguenza le particelle giacciono sempre in un piano perpendicolare a \vec{K} .

Anche il centro di massa del sistema deve giacere su questo piano dato che si deve trovare sul segmento che congiunge le due particelle. Ma, da quanto visto nel paragrafo precedente, la velocità del baricentro, \vec{v}_C , è costante e quindi le due particelle si trovano ad ogni istante su di un piano normale a \vec{K} che si muove con velocità \vec{v}_C . In altre parole gli urti binari avvengono su di un piano che si muove con velocità di traslazione uguale a quella del baricentro. Questo permette di semplificare notevolmente la rappresentazione della collisione; infatti possiamo ridurre il problema tridimensionale ad uno bidimensionale se prendiamo come punto di osservazione del moto delle due particelle il centro di massa del sistema, se cioè consideriamo l'urto nel sistema di riferimento del C.M., come mostrato in Fig. 1 dove sono rappresentate le traiettorie delle particelle nel sistema del C.M.

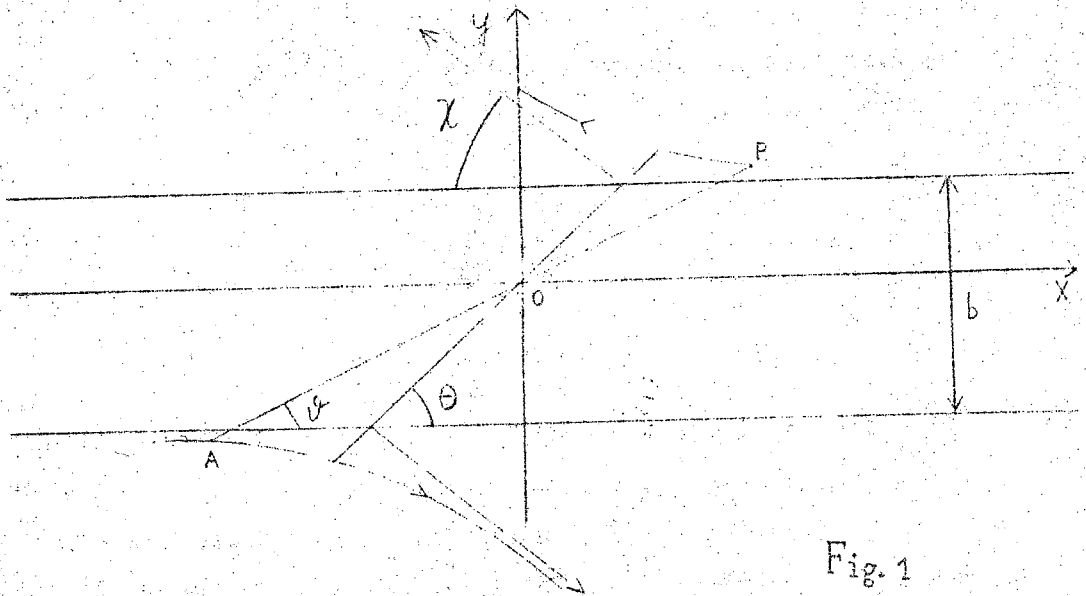


Fig. 1

In Fig. 1 b è il "parametro d'urto", definito come la minima distanza che intercorrerebbe fra i centri delle particelle se non interagissero e χ è l'angolo di diffusione nel sistema del C.M. Notiamo che, dalla definizione di centro di massa, equazione (1), si ha

$$m_A \vec{r}_A^* + m_B \vec{r}_B^* = 0 \quad , \quad (18)$$

dato che $\vec{r}_C = 0$ nel sistema del C.M., da cui

$$\vec{r}_A^* = -\frac{m_B}{m_A} \vec{r}_B^* ; \quad \vec{r}_B^* = -\frac{m_A}{m_B} \vec{r}_A^* \quad (19)$$

e quindi le due traiettorie sono, come d'altronde è ovvio, omotetiche rispetto all'origine, cioè la retta che ad ogni istante congiunge i centri delle due particelle passa sempre per l'origine. Notiamo anche che $\vec{r}_{AB}^* = \vec{r}_A^* - \vec{r}_B^* = \vec{r}_A^* - (-\frac{m_A}{m_B} \vec{r}_A^*) = \vec{r}_A^* (1 + \frac{m_A}{m_B})$ e quindi facendo uso delle (19)

$$\vec{r}_A^* = \frac{m_C}{m_A} \vec{r}_{AB}^* ; \quad \vec{r}_B^* = -\frac{m_C}{m_B} \vec{r}_{AB}^* \quad (20)$$

Calcoliamo ora l'energia cinetica totale del sistema di due particelle, T^* , nel riferimento del C.M.

Facendo riferimento alla Fig. 1 abbiamo

$$T^* = \frac{1}{2} m_A \dot{r}_A^{*2} + \frac{1}{2} m_B \dot{r}_B^{*2} \quad (21)$$

Se deriviamo le equazioni (20) e sostituiamo le derivate ottenute nella (21) otteniamo

$$T^* = \frac{1}{2} m_C \dot{r}_{AB}^* \cdot \dot{r}_{AB}^* \left(\frac{m_C}{m_A} + \frac{m_C}{m_B} \right) = \frac{1}{2} m_C \dot{r}_{AB}^* \cdot \dot{r}_{AB}^* \quad (22)$$

da cui si deduce che l'energia cinetica del sistema di due particelle è uguale all'energia cinetica di una singola particella di massa m_C la cui posizione da un centro fisso è data dalla distanza relativa r_{AB}^* . Una simile equivalenza si ottiene anche per il momento della quantità di moto, Γ , rispetto ad un punto O . Infatti si ha, ricordando le equazioni (20) e facendo riferimento alla Fig. 1,

$$\Gamma = \vec{r}_A^* m_A \dot{r}_A^* + \vec{r}_B^* m_B \dot{r}_B^* = \frac{m_C}{m_A} \vec{r}_{AB}^* \dot{r}_{AB}^* + \frac{m_C}{m_B} \vec{r}_{AB}^* \dot{r}_{AB}^* \quad (23)$$

o anche, dato che le componenti di \vec{r}_{AB} lungo l'asse delle x , delle y e delle z sono $r_{AB} \cos \theta$, $r_{AB} \sin \theta$ e zero rispettivamente,

$$\Gamma_z = \frac{m_c^2}{m_A} r_{AB}^2 \dot{\theta} + \frac{m_c^2}{m_B} r_{AB}^2 \dot{\theta} = m_c r_{AB}^2 \dot{\theta} \quad (24)$$

che è esattamente l'espressione di Γ per una particella fittizia di massa m_c che si muove sul piano xy intorno a un centro di forze fisso, come rappresentato in Fig. 2. Sfruttiamo ora l'equivalenza dinamica fra un sistema di due particelle e quello di una sola particella per studiare il problema dell'urto binario.

Facciamo pertanto riferimento alla Fig. 2 e utilizziamo le leggi di conservazione dell'energia e del momento della quantità di moto rispetto a un punto O . L'energia totale della particella, la cui traiettoria è riportata in Fig. 2, è la somma dell'energia cinetica e dell'energia potenziale di interazione fra due particelle, $\phi(r)$. L'energia cinetica data dall'equazione (22) diviene, in coordinate polari ($r_{AB} = r$),

$$T^* = \frac{1}{2} m_c (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) \quad (25)$$

e per l'energia totale avremo

$$\frac{1}{2} m_c (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + \phi(r) = \frac{1}{2} m_c g^2 \quad (26)$$

dove g è il modulo della velocità relativa iniziale quando cioè l'energia potenziale di interazione è nulla e l'energia totale è uguale alla energia cinetica.

È evidente quindi il significato dell'equazione (26) che esprime il principio di conservazione dell'energia totale. Quando la particella fittizia di massa m_c è molto lontana dall'origine si ha, vedi Fig. 2,

$$r \sin \theta = \frac{b}{r} \quad (27)$$

$$\dot{\theta} \frac{b r \dot{r}}{r^2} = \frac{b g}{r^2} \quad (28)$$

dove b è il parametro d'urto.

Se ora sostituiamo l'equazione (28) nella (24) abbiamo che molto tempo prima dell'inizio dell'urto il momento della quantità di moto è dato da

$$\Gamma_z = m_c b g \quad (29)$$

e, poichè Γ_z si conserva durante l'interazione, possiamo uguagliare la (24) alla (29),

$$m_c r^2 \dot{\theta} = m_c b g, \quad (30)$$

che dimostra che $\dot{\theta}$ è, ad ogni istante, uguale a bg/r^2 . Se sostituiamo, nell'equazione (26), $\dot{\theta}$ con l'espressione trovata otteniamo

$$\frac{1}{2} m_c (\dot{r}^2 + g^2 \frac{b^2}{r^2}) + \phi(r) = \frac{1}{2} m_c g^2 \quad (31)$$

Dalla (31) vediamo che il nostro problema dell'urto binario in tre dimensioni è stato ridotto al problema monodimensionale (nella (31) compare solo la variabile r) di una singola particella fittizia di massa m_c con energia totale $\frac{1}{2} m_c g^2$ che si muove in un campo di energia potenziale efficace definita da

$$\phi_{\text{eff}}(r) = \phi(r) + \frac{1}{2} m_c g^2 \frac{b^2}{r^2} \quad (32)$$

L'ultimo termine della (32) è una funzione positiva monotona decrescente di r ; esso è uguale a $\Gamma_z^2 / 2m_c r^2$ e rappresenta l'energia cinetica di rotazione del sistema. Questo termine può essere considerato come la sorgente di una forza fittizia che prende il nome di "forza centrifuga"; per questa ragione l'ultimo termine della (32) è chiamato "potenziale centrifugo".

L'equazione (32) permette anche di calcolare la minima distanza, R , che le particelle possono avere durante l'interazione (o, per l'equivalenza dinamica dimostrata, la minima distanza della particella di massa m_c dall'origine) una volta che siano fissati i parametri iniziali dell'urto. Riferendoci alla Fig. 2 vediamo che la condizione di minima

distanza è $\frac{dr}{d\theta} = 0$, o $\dot{r} = 0$, dato che $\frac{dr}{d\theta} = \frac{\dot{r}}{\dot{\theta}}$ e $\dot{\theta}$ non può essere

infinito. Se introduciamo questa condizione nella (31) otteniamo

$$1 = \frac{b^2}{R^2} + \frac{2\phi(R)}{m_c g^2} \quad (33)$$

che permette di ricavare R per ogni data funzione potenziale $\phi(r)$ e per b e g fissati. Va notato che questa distanza minima esiste sempre solo quando il potenziale d'interazione fra le particelle è repulsivo, mentre nel caso di forze attrattive una distanza minima esiste se le forze sono a variazione relativamente lenta (per esempio forze di Coulomb).

Questo si può vedere dal fatto che non sempre esiste una soluzione reale della (33). Se, per esempio, $\phi(r)$ è del tipo $-r^{-n}$ con $n \geq 2$, per certi valori di b e g non esiste una soluzione reale della (33).

4. ANGOLO DI DIFFUSIONE NEL SISTEMA C.M.

I risultati ottenuti nei paragrafi precedenti ci permettono di ricavare l'angolo di diffusione nel sistema del C.M. per una data $\phi(r)$ e in funzione di b e g . Questa quantità, che è, dal punto di vista dei calcoli statistici, la più importante che interviene nell'urto elastico, verrà indicata con la lettera greca χ . Poiché le traiettorie nel sistema del C.M. sono simmetriche rispetto alla linea di minima distanza (vedi Fig. 1 e 2) l'angolo χ è dato da

$$\chi = \pi - 2\theta \quad (34)$$

dove θ è il valore dell'azimut θ quando le particelle sono alla minima distanza. Ricaviamo quindi θ in funzione di b , g e per una data $\phi(r)$. Dalla (31) abbiamo

$$\dot{r} = \pm g \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{2\phi(r)}{m_c g^2} \right)^{1/2} \quad (35)$$

dove il segno negativo si applica al ramo della traiettoria che si riferisce alle particelle in fase di avvicinamento quello positivo al ramo che si riferisce alla fase di allontanamento.

Ma, dalla (30) $\dot{\theta} = bg/r^2$ e quindi otteniamo

$$\frac{dr}{d\theta} = \frac{\dot{r}}{\dot{\theta}} = \pm \frac{r^2}{b} \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{2\phi(r)}{m_c g^2} \right)^{1/2} \quad (36)$$

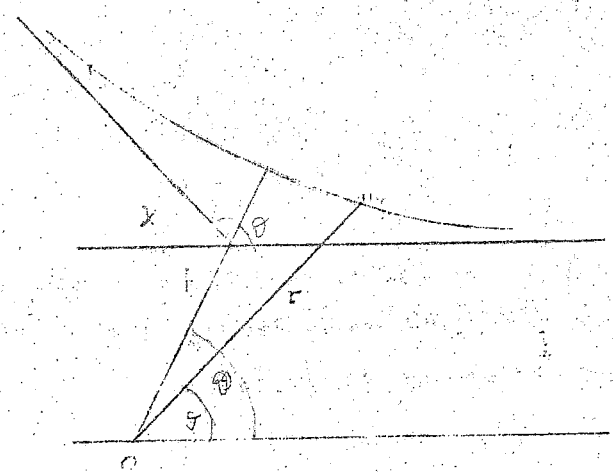
se sostituiamo l'espressione di \dot{r} data dall'equazione (35). La (36) è una equazione differenziale a variabili separabili che può essere facilmente risolta. Si ha, se consideriamo solo il segno meno, cioè il moto delle particelle in fase di avvicinamento e se ammettiamo che la equazione (33) abbia una soluzione reale,

$$\theta = \int_0^\theta d\theta = - \int_\infty^R \frac{\frac{b}{r^2} dr}{\left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{2\phi(r)}{m_c g^2} \right)^{1/2}} \quad (37)$$

Le equazioni (34) e (37) mostrano quindi che

$$\chi(b, g) = \pi - 2b \int_R^\infty \frac{dr}{r^2 \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{2\phi(r)}{m_c g^2} \right)^{1/2}} \quad (38)$$

L'equazione (38) è di particolare importanza, dato che nelle formule dei coefficienti di trasporto l'urto elastico vi entra solo tramite l'angolo di diffusione. L'integrale che compare nella (38) è stato calcolato per diversi tipi di funzioni potenziali usati per descrivere la interazione binaria; i risultati ottenuti sono stati quindi applicati al calcolo delle proprietà di trasporto.



5. SEZIONE D'URTO DIFFERENZIALE E PARAMETRO D'URTO

Come ben noto la probabilità che, sotto date condizioni, avvengano certi tipi di collisioni può, in generale, venire descritta facendo ricorso al concetto di sezione d'urto. In particolare la sezione d'urto differenziale è una misura della probabilità che, per effetto di una collisione elastica, una particella venga diffusa in una certa direzione.

In questo paragrafo vogliamo ricavare la relazione fra la sezione d'urto differenziale e il parametro d'urto. Definiamo prima la sezione d'urto differenziale. Supponiamo di bombardare delle particelle bersaglio, o centri diffusori, distribuiti uniformemente in un certo volume, con un fascio parallelo di I particelle per unità di area e per unità di tempo e ammettiamo che le sole interazioni che possono avvenire fra le particelle proiettili e bersaglio siano gli urti elastici. Indichiamo con N il numero di centri diffusori la cui proiezione su un piano perpendicolare alla direzione del fascio incidente sia contenuta in una area unitaria.

Sia $d_2\Omega$ l'elemento di angolo solido nel sistema del laboratorio centrato intorno a una direzione definita dalla colatitudine θ e dall'azimut ϕ rispetto alla direzione di bombardamento presa come asse polare. Vogliamo determinare il numero delle particelle incidenti che sono diffuse, per unità di tempo in seguito ad un urto elastico, entro l'angolo solido $d_2\Omega$. Tale numero sarà proporzionale a I , N e $d_2\Omega$, purchè il numero di particelle bersaglio sia sufficientemente piccolo in modo che nessuna particella sia schermata da un'altra, avvengano solo urti binari e nessuna particella proiettile possa urtare più di una volta. Perciò se indichiamo con $I_s(\theta, \phi)d_2\Omega$ il numero di particelle proiettile diffuse per unità di tempo entro $d_2\Omega$ avremo

$$I_s(\theta, \phi)d_2\Omega = IN\sigma(\theta, \phi)d_2\Omega = INd\sigma(\theta, \phi) \quad (39)$$

dove il fattore di proporzionalità $\sigma(\theta, \phi)$ prende il nome di "funzione di distribuzione angolare" nel sistema del laboratorio. La quantità

$$d\sigma(\theta, \phi) \equiv \sigma(\theta, \phi)d_2\Omega \quad (40)$$

è la sezione d'urto microscopica differenziale per urto elastico nel sistema del laboratorio (spesso la funzione $\sigma(\theta, \phi)$ è definita sezione d'urto differenziale). Notiamo che la distribuzione angolare delle par-

ticelle diffuse è strettamente connessa con la funzione potenziale di interazione fra le particelle incidenti e quelle diffondenti e la sezione d'urto differenziale precisa questa distribuzione angolare. Quindi il calcolo di $d\sigma(\theta, \phi)$ richiede la conoscenza di $\phi(r)$.

Indichiamo ora con $d_2\Omega_{CM}$ l'elemento di angolo solido nel sistema CM centrato intorno a una direzione fissata dalla colatitudine χ e dall'azimut ϵ avendo preso come asse polare la direzione della velocità relativa \vec{g}_{AB} (vedi Fig. 1 e 2). Esistono delle leggi di trasformazione fra $d_2\Omega$ e $d_2\Omega_{CM}$ in relazione alle particolari situazioni fisiche. Così, per esempio, se le particelle bersaglio di massa m_A sono ferme prima dell'urto nel sistema del laboratorio e se la diffusione è simmetrica rispetto all'asse del fascio, cioè se la diffusione è indipendente dall'azimut, può essere facilmente mostrato che

$$d_2\Omega_{CM} = \frac{[m_B/m_A + 2(m_B/m_A)\cos\chi + 1]^{3/2}}{1 + (m_B/m_A)\cos\chi} d_2\Omega \quad (41)$$

dove $d_2\Omega_{CM} = \sin\chi d\chi d\epsilon$ e $d_2\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ con $d\epsilon = d\phi$.

Naturalmente il numero di particelle incidenti diffuse entro l'angolo solido $d_2\Omega$ deve essere uguale a quello delle particelle diffuse entro il corrispondente angolo solido nel sistema CM;

$$I_s(\theta, \phi) d_2\Omega = I_s(\chi, \epsilon) d_2\Omega_{CM} \quad (42)$$

o anche

$$IN\sigma(\theta, \phi)d_2\Omega = IN\sigma(\chi, \epsilon)d_2\Omega_{CM} \quad (43)$$

se indichiamo con $\sigma(\chi, \epsilon)d_2\Omega_{CM} = d\sigma(\chi, \epsilon)$ la sezione d'urto differenziale nel sistema CM. Se la diffusione è indipendente dall'azimut, σ è indipendente da ϵ , l'angolo solido $d_2\Omega_{CM}$ diviene, dopo integrazione rispetto a ϵ , $d_2\Omega_{CM} = 2\pi\sin\chi d\chi$ e il numero di particelle incidenti diffuse per unità di tempo entro $d_2\Omega_{CM}$ diviso per l'intensità del fascio I e il numero di centri diffusori N è dato da

$$d\sigma(\chi) = \sigma(\chi)d_2\Omega_{CM} = \sigma(\chi)2\pi\sin\chi d\chi \quad (44)$$

Notiamo che, in generale, la $\sigma(\chi)$ è funzione della velocità relativa \vec{g}_{AB} , anche se la dipendenza da \vec{g}_{AB} non è espressa esplicitamente nelle formule precedenti. Vogliamo ora mostrare che la sezione d'urto differenziale $d\sigma(\chi)$ può essere calcolata dalla equazione (38) che esprime χ in funzione di b .

Fra le particelle incidenti consideriamo quelle che subiscono una collisione con parametro d'urto fra b e $b+db$. Il numero di tali particelle per unità di tempo e di area per ogni centro diffusore è dato da $I2\pi b db$, cioè, com'è evidente, è proporzionale all'area della corona circolare che giace sul piano solidale col centro diffusore e perpendicolare alla velocità relativa \vec{g}_{AB} ed è formata dai due cerchi concentrici di raggio b e $b+db$.

Tutte queste particelle saranno diffuse con un angolo di diffusione fra χ e $\chi+d\chi$ o entro l'angolo solido $d_2\Omega_{CM} = 2\pi \sin\chi d\chi$. Ammettiamo che esista una unica relazione fra χ e b data dall'equazione (38).

Dalla definizione di sezione d'urto differenziale abbiamo quindi

$$I d\sigma(\chi) = I \sigma(\chi) 2\pi \sin\chi d\chi = I 2\pi b db \quad (45)$$

da cui

$$\sigma(\chi) = \frac{b}{\sin\chi} \left| \frac{db}{d\chi} \right| \quad (46)$$

dove la derivata di b rispetto a χ è stata presa in valore assoluto dato che $\sigma(\chi)$ è una quantità positiva, essendo associata al numero di particelle diffuse, mentre spesso χ decresce quando b cresce. L'equazione (45) mostra anche che $d\sigma(\chi)$ è uguale all'area dell'anello precedentemente definito. Se la funzione energia potenziale, $\Phi(r)$, è conosciuta, è possibile, in linea di principio, ricavare la quantità $\frac{db}{d\chi}$ facendo uso dell'equazione (38) e quindi calcolare $\sigma(\chi)$.

La sezione d'urto totale di diffusione, $\sigma(\vec{g}_{AB})$, è ottenuta dall'integrazione su tutto l'angolo solido di $d\sigma(\vec{g}_{AB}, \chi, \epsilon)$; si ha quindi, nel caso di diffusione indipendente da ϵ ,

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sigma(\chi, \epsilon) d_2\Omega_{CM} = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\chi) \sin\chi d\chi = 2\pi \int_0^{b_{\max}} b db \quad (47)$$

dove b_{\max} è il parametro d'urto tale che per $b \geq b_{\max}$ la funzione $\phi(r)=0$. Le molecole per cui b_{\max} è finito sono chiamate molecole con "raggio di azione finito". Se $b_{\max} = \infty$ l'integrale (47) diverge e la σ diviene infinita; in questo caso l'ipotesi di soli urti binari non è più valida.

Notiamo, tuttavia, che una corretta valutazione di b_{\max} può essere fatta solo facendo ricorso alla meccanica quantistica. Concludiamo questo paragrafo con la definizione della sezione d'urto per trasferimento di quantità di moto, σ_1 . Questa grandezza è di notevole interesse dato che la descrizione macroscopica dei fenomeni di trasporto richiede la valutazione dei cambiamenti dovuti alle collisioni elastiche della quantità di moto (a cui è collegata σ_1), dell'energia e di altre grandezze.

Consideriamo prima un urto binario fra le particelle A e B e valutiamo quanto varia, nel sistema CM, la quantità di moto di una delle particelle in seguito all'urto. La quantità di moto della particella B è

$$\vec{q}_B = m_B \vec{v}_B^* = m_B \vec{g}_{BA} \frac{m_A}{m_A + m_B} = m_C \vec{g}_{BA} \quad (48)$$

e la variazione di \vec{q}_B proiettata sulla direzione iniziale nel sistema CM, cioè sulla direzione di \vec{g}_{BA} è data da (vedi Fig. 2)

$$m_C g - m_C g \cos \chi = m_C g (1 - \cos \chi) \quad (49)$$

Supponiamo ora di bombardare le particelle A con un fascio parallelo di particelle B monocinetiche e di intensità I. Ricordiamo che per intensità di un fascio parallelo intendiamo il numero di particelle che passano nell'unità di tempo attraverso un'area unitaria posta normalmente alla direzione della velocità delle particelle del fascio. Dalla definizione di sezione d'urto differenziale abbiamo che il numero di particelle B diffuse nell'unità di tempo entro l'angolo solido $d_2 \Omega_{CM}$ è dato da $I d\sigma(\chi) = I 2\pi \sigma(\chi) \sin \chi d\chi$, per ogni centro diffusore. Quindi la variazione nell'unità di tempo di \vec{q}_B lungo la direzione di \vec{g}_{BA} dovuta agli urti binari è

$$\begin{aligned} \frac{dq_B}{dt} &= I 2\pi \int_0^\pi m_C g (1 - \cos \chi) \sigma(\chi) \sin \chi d\chi = \\ &= I m_C g \sigma_1 \end{aligned} \quad (50)$$

con

$$\sigma_1 = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \chi) \sigma(\chi) \sin \chi \, d\chi \quad (51)$$

σ_1 si chiama "sezione d'urto per trasferimento di quantità di moto", o "sezione d'urto di trasporto" nel sistema CM. Notiamo che se la diffusione è isotropa nel sistema CM, il valore medio di $\cos \chi$ pesato con la $\sigma(\chi) d\Omega_{CM}$ è uguale a zero e quindi $\sigma_1 = \sigma$. Osserviamo anche che nell'ambito della Fisica del Reattore Nucleare si è soliti definire una sezione d'urto di trasporto nel sistema del laboratorio; se le particelle A hanno massa infinita e sono ferme nel sistema del laboratorio le due sezioni d'urto di trasporto coincidono.

6. FUNZIONI POTENZIALI

Nei paragrafi precedenti abbiamo introdotto la funzione energia potenziale $\Phi(r)$ e abbiamo visto come essa intervenga nel calcolo della sezione d'urto. In questo paragrafo enumereremo alcune delle $\Phi(r)$ più comunemente usate. Notiamo subito che la valutazione del potenziale di interazione fra due particelle deve essere fatta nell'ambito della meccanica quantistica; tuttavia, sebbene questo calcolo possa essere compiuto, in linea di principio, per tutte le molecole, in pratica solo per quelle più semplici sono stati eseguiti calcoli più o meno esatti. Perciò si è soliti usare leggi di interazione empiriche, o semiempiriche che descrivano, in modo più realistico possibile, una data interazione. Deve essere chiaro, però, che molto spesso il realismo fisico deve essere sacrificato di fronte alla necessità di rendere trattabile il problema dal punto di vista matematico. Come abbiamo detto in precedenza ci occuperemo soltanto dei potenziali che dipendono solo dalla distanza di separazione delle particelle interagenti.

1. Sfere rigide

In questo modello l'urto tra due particelle è considerato uguale a quello di due sfere rigide impenetrabili la somma dei cui raggi è D . Si ha quindi

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty & \text{per } r < D \\ 0 & \text{per } r > D \end{cases}, \quad (51)$$

cioè una funzione potenziale a variazione infinitamente rapida per $r=D$ (vedi Fig. 3,a).

Sebbene questo modello fornisca soltanto una rappresentazione molto grossolana del fenomeno di repulsione a breve raggio, esso è frequentemente usato nei calcoli per la sua semplicità

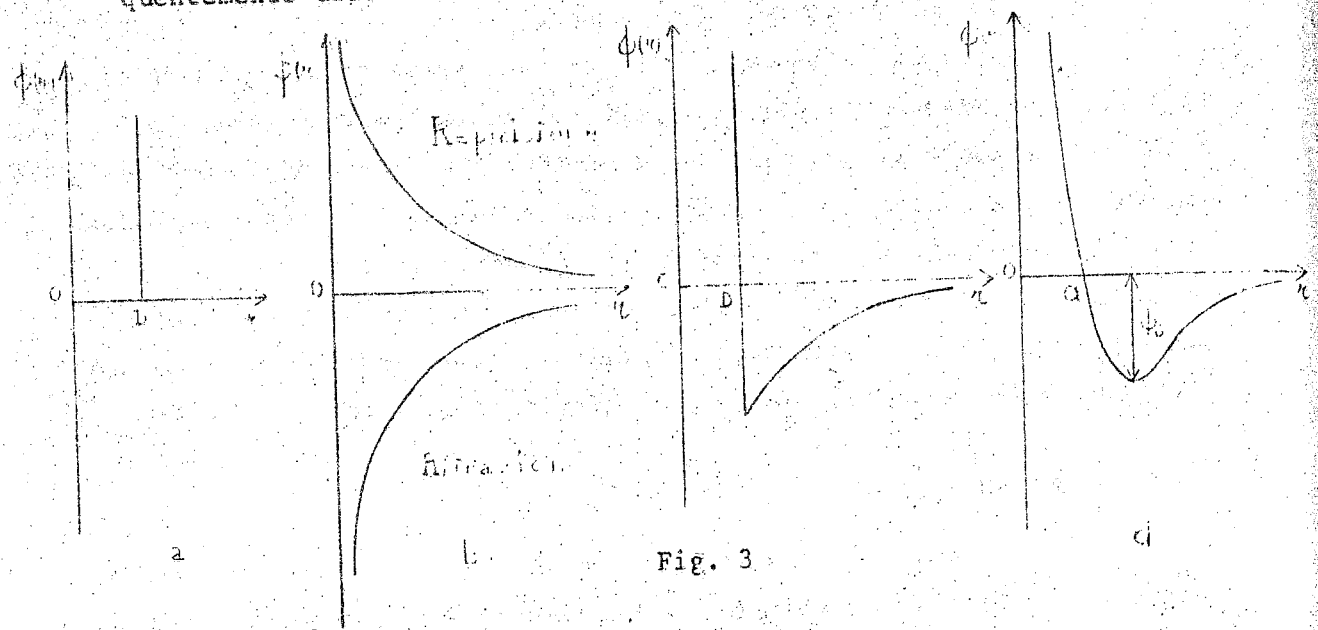


Fig. 3

2. Centri di attrazione o repulsione

La funzione potenziale per questo modello è

$$\phi(r) = \begin{cases} -\frac{a}{r^n} & \text{attrazione} \\ \frac{a}{r^n} & \text{repulsione} \end{cases} \quad (52)$$

dove a è una costante positiva e n è l'indice di attrazione o repulsione; l'andamento di $\phi(r)$ è mostrato in Fig. 3,b.

Per $n=1$ la (52) rappresenta l'interazione di Coulomb.

Spesso sono considerate, per le notevoli semplificazioni nelle espressioni matematiche a cui sono legate, delle ipotetiche molecole che si respingono con indice di repulsione $n=4$; queste molecole si chiamano molecole "Maxwelliane" e un gas composto di tali molecole è detto "gas Maxwelliano". Le interazioni fra molecole Maxwelliane rap-

presentano un modello a variazione troppo lenta rispetto al potenziale repulsivo che frequentemente si riscontra fra le molecole, mentre il modello per sfere rigide è troppo rapido.

Infatti molto spesso n è fra 9 e 15. Di particolare importanza nello studio dei gas ionizzati è il potenziale attrattivo con $n=4$. Infatti una particella carica (ione od elettrone) genera su di una molecola neutra delle cariche indotte la cui interazione di dipolo con la particella carica è descritta da un potenziale del tipo $-a/r^4$.

3. Potenziale di Sutherland

La funzione potenziale per questo modello si ottiene supponendo che le molecole siano delle sfere rigide, ma circondate da un campo che genera delle forze attrattive (vedi Fig. 3,c). Per $\phi(r)$ si ha

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & \text{per } r < D \\ -\frac{a}{r^n} & \text{per } r > D \end{cases} \quad (53)$$

Quando $n=6$, $\phi(r)$ è la funzione potenziale delle "interazioni di Van der Waals".

4. Potenziale di Lennard-Jones

Come è noto le forze fra le molecole sono repulsive quando le molecole sono a piccola distanza fra di loro, ma possono essere attrattive quando sono a distanze maggiori. Un potenziale repulsivo e attrattivo in funzione della distanza fra le molecole può essere così espresso

$$\phi(r) = \frac{a}{r^n} - \frac{b}{r^m} \quad (54)$$

dove le costanti a e b sono positive e quindi il primo termine è repulsivo e il secondo attrattivo. L'espressione di questo tipo più comunemente usata è quella di Lennard-Jones, per la quale $n=12$ e $m=6$, che è data dalla formula

$$\Phi(r) = 4\Phi_0 \left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{a}{r}\right)^6 \right] \quad (55)$$

dove Φ_0 è la massima energia di attrazione, o profondità della buca di potenziale (vedi Fig. 3,d). A grandi distanze di separazione ($r \gg a$) prevale il termine attrattivo proporzionale a r^{-6} e le molecole sono quindi attratte con una forza proporzionale a r^{-7} ; questo tipo di forza descrive accuratamente l'interazione fra i due dipoli d'induzione che si generano nelle due molecole. A piccola distanza di separazione ($r \ll a$) prevale il termine repulsivo proporzionale a r^{-12} . Va notato che la scelta $n=12$ è dovuta principalmente a motivi di carattere matematico.

Concludiamo il paragrafo sottolineando che esistono molte altre funzioni potenziali con un maggior numero di parametri arbitrari; quelle elencate sono solo un esempio delle $\Phi(r)$ più comunemente usate.

7. SEZIONE D'URTO DI DIFFUSIONE PER IL MODELLO "SFERE RIGIDE"

Come esempio dei concetti introdotti nei paragrafi precedenti calcoliamo le sezioni d'urto differenziale e totale per il modello "Sfere rigide". Consideriamo due sfere rigide (per esempio due bilie da biliardo) di raggio r_A e r_B che collidono. La Fig.3 Cap.III mostra le due sfere nel momento del contatto. Calcoliamo quindi la funzione di distribuzione angolare, $\sigma(\chi)$, facendo uso della formula (46), quando la funzione $\Phi(r)$ è quella delle sfere rigide. Ricaviamo prima $db/d\chi$ dall'equazione (38) che esprime χ in funzione di b . Poiché l'integrale che compare nella (38) è esteso fra R e ∞ , nel caso di sfere rigide, dato che $R=D=r_A+r_B$ e $\Phi(r)=0$ per $r>D$, la equazione (38) diviene

$$\chi = \pi - 2b \int_D^{\infty} \frac{dr}{r^2 \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right)^{1/2}} = \pi - 2 \operatorname{sen}^{-1} \frac{b}{D}, \quad (56)$$

da cui $b=D \cos(\chi/2)$ e

$$\left| \frac{db}{d\chi} \right| = \frac{D}{2} \operatorname{sen} \frac{\chi}{2}. \quad (57)$$

Dalla equazione (46) abbiamo quindi

$$\begin{aligned}\sigma(\chi) &= \frac{b}{\sin \chi} \left| \frac{db}{d\chi} \right| = \frac{b}{2 \sin \frac{\chi}{2} \cos \frac{\chi}{2}} \frac{D}{2} \sin \frac{\chi}{2} = \\ &= \frac{b D}{4 \cos \frac{\chi}{2}} = \frac{D^2}{4}\end{aligned}\quad (58)$$

che mostra come la funzione di distribuzione angolare e quindi la sezione d'urto differenziale, sia indipendente da χ ; l'urto è perciò isotropo nel sistema CM. Il risultato espresso dall'equazione (58) si può ottenere anche in altro modo, come ora vedremo, senza ricorrere all'equazione (38). Notiamo che in questo caso particolare $b = D \sin \theta$ (Fig. 3 Cap. III) da cui $db/d\theta = D \cos \theta$. Otteniamo quindi

$$\begin{aligned}bdb &= D^2 \sin \theta \cos \theta d\theta = \frac{1}{2} D^2 \sin 2\theta d\theta = \\ &= \frac{1}{4} D^2 \sin \chi d\chi,\end{aligned}\quad (59)$$

dato che $\chi = \pi - 2\theta$, da cui

$$\left| \frac{db}{d\chi} \right| = \frac{D^2}{4b} \sin \chi \quad (60)$$

Se sostituiamo la (60) nella (46) riotteniamo l'equazione (58). Poniamo ora nella equazione (47) l'espressione di $\sigma(\chi)$ data dalla (58); otteniamo che la sezione d'urto totale è

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \frac{1}{4} D^2 \sin \chi d\chi = \pi D^2, \quad (61)$$

cioè σ è uguale all'area del cerchio di raggio D come chiaramente deve essere se ricordiamo il significato fisico di sezione d'urto.

L'EQUAZIONE DI BOLTZMANN; DERIVAZIONE CLASSICA

1. INTRODUZIONE

L'equazione di Boltzmann è di fondamentale importanza nello studio dei problemi di trasporto di particelle. Essa è stata ricavata da Boltzmann nel 1872 per descrivere l'evoluzione in spazio tempo ed energia della funzione di distribuzione semplice, $f_1(\vec{r}, \vec{v}, t) = f(\vec{r}, \vec{v}, t)$, di un sistema di particelle, quando sono introdotte particolari ipotesi semplificative. Da allora, specialmente in questi ultimi anni, molti altri metodi sono stati formulati per derivare questa equazione sia per darle basi più realistiche sia per cercare di riallacciarla direttamente alla prima equazione della gerarchia di BBGKY. In questo paragrafo l'equazione di Boltzmann verrà ricavata nel modo classico, cioè nello stesso modo seguito da Boltzmann, mettendo in evidenza le ipotesi fisiche che sono alla base della formulazione e che determinano le limitazioni e l'area di applicabilità dell'equazione stessa.

Come abbiamo visto nel paragrafo precedente l'equazione di Vlasov è stata ottenuta sotto l'ipotesi che non vi sia correlazione fra le posizioni e le velocità delle particelle del sistema, ma che ogni particella sia sottoposta continuamente ad un campo collettivo medio di carica spaziale che tiene conto delle interazioni fra le particelle.

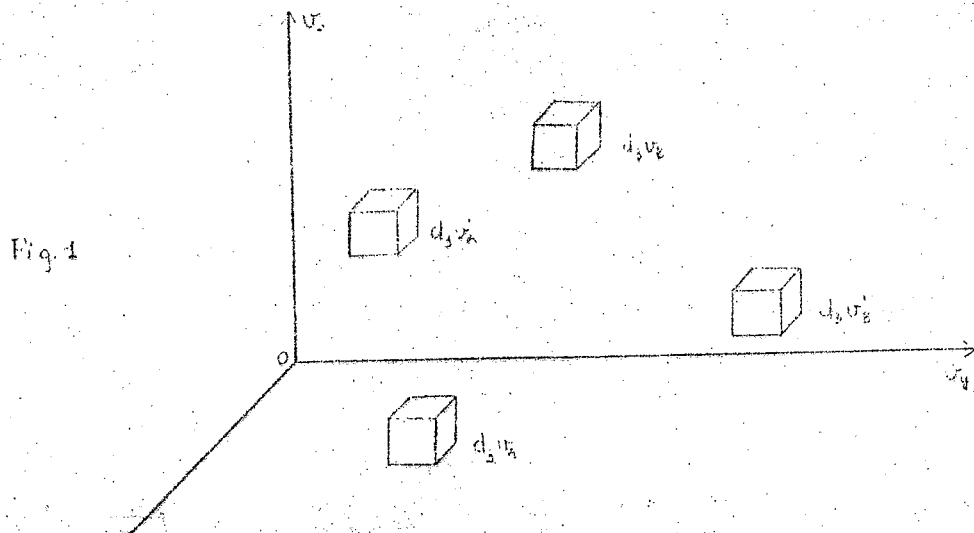
Questa ipotesi è sufficientemente valida se il sistema è relativamente denso, se le forze di interazione sono a lungo raggio e se si trascurano gli urti vicini (cioè le interazioni con parametro d'urto minore della lunghezza di Debye). Quando queste circostanze non sono verificate si può fare una ipotesi opposta a quella precedente e precisamente ammettere che i fenomeni di interazione siano descritti da urti binari improvvisi di durata praticamente nulla (come per sfere rigide) e che fra una collisione e l'altra le particelle si muovano liberamente lungo una traiettoria rettilinea, non essendo sottoposte ad alcuna forza. Questa è la prima delle due ipotesi che sono alla base della derivazione, e quindi della validità, dell'equazione di Boltzmann. L'altra ipotesi, generalmente conosciuta come ipotesi del "caos molecolare", stabilisce che non vi sia correlazione prima dell'urto fra le particelle interagenti. Il modello che assume valide queste ipotesi è quello della teoria cinetica classica di un gas neutro. La prima ipotesi limita l'applica-

bilità della teoria ai sistemi poco densi, cioè ai sistemi in cui la durata di una collisione è molto più piccola del tempo medio che intercorre fra le collisioni; infatti a densità elevate gli urti ternari, o di più alto ordine, divengono significativi e l'equazione di Boltzmann non è più applicabile. La seconda ipotesi è di natura statistica e la sua validità più difficilmente stabilita. Si può inferire intuitivamente che due particelle che stanno per urtare, se le interazioni sono di corto raggio, hanno una lunga storia precedente indipendente ed ha quindi senso pensare che non siano correlate.

Dopo l'urto, tuttavia, le velocità delle due particelle che hanno colliso sono fortemente correlate e non si può assumere valida la fattorizzazione di $f_{1,2}$. Notiamo anche che questa seconda ipotesi rende l'equazione di Boltzmann irreversibile nel tempo (la funzione di distribuzione non ripercorre il suo cammino se le velocità sono invertite).

Consideriamo un sistema dinamico costituito da molecole monoatomiche tutte uguali (gas semplice).

L'equazione di Boltzmann senza collisioni, equazione (3) , Capitolo I, permette di ricavare il numero probabile di molecole che al tempo t sono nell'elemento infinitesimo dello spazio delle fasi $\mu(d_3rd_3v)$ in funzione delle condizioni iniziali o al contorno quando le interazioni fra le molecole sono completamente assenti. Se, tuttavia, gli urti non sono trascurabili la parte sinistra dell'equazione (3) Capitolo I non sarà uguale a zero, ma sarà uguale ad un termine che rappresenta la variazione del numero di molecole in d_3rd_3v dovute alle collisioni fra le molecole. Cerchiamo una espressione esplicita di questo termine che indichiamo con $(\frac{\partial f}{\partial t})_{\text{coll}}$. Sappiamo che $f(\vec{r}, \vec{v}, t)d_3rd_3v$ è il numero probabile di molecole che al tempo t sono nell'elemento infinitesimo dello spazio delle fasi μ, d_3rd_3v . Consideriamo quattro particolari elementi infinitesimi dello spazio delle velocità d_3v_A , d_3v_B , $d_3v'_A$ e $d_3v'_B$, come mostrato in Fig. 1



e indichiamo con \vec{v}_A , \vec{v}_B , \vec{v}'_A e \vec{v}'_B le velocità delle particelle i cui estremi sono contenuti in $d_3 v_A$, $d_3 v_B$, $d_3 v'_A$ e $d_3 v'_B$ rispettivamente.

Supponiamo ora che al tempo t una particella avente velocità \vec{v}_A urti con un'altra particella avente velocità \vec{v}_B e che dopo l'urto le velocità siano \vec{v}'_A e \vec{v}'_B rispettivamente. Si ha quindi che al tempo t (ammettiamo che la durata della collisione sia trascurabilmente piccola) una particella salta da $d_3 v_A$ a $d_3 v'_A$ e contemporaneamente un'altra salta da $d_3 v_B$ a $d_3 v'_B$ o, in altre parole, che il numero di particelle in $d_3 v_A$ e $d_3 v_B$ diminuisce di una unità, mentre il numero di quelle in $d_3 v'_A$ e $d_3 v'_B$ aumenta di una unità. Per determinare $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ è necessario ricavare la netta variazione, nell'unità di tempo e di volume, del numero di particelle in un certo elemento dello spazio della velocità dovuta alle collisioni con le particelle di qualsiasi velocità. Consideriamo le particelle con velocità \vec{v}_A come particelle tipiche; cioè prendiamo come elemento tipico a cui facciamo riferimento per determinare la variazione del numero di particelle l'elemento $d_3 v_A$.

Suddividiamo, per comodità, le collisioni in due tipi e precisamente:

- 1) Collisioni di tipo (-) (o di perdita); quando una particella con velocità \vec{v}_A urta con una di velocità \vec{v}_B . Cioè quando una particella esce da $d_3 v_A$.
- 2) Collisioni di tipo (+) (o di guadagno); quando le particelle hanno rispettivamente velocità \vec{v}'_A e \vec{v}'_B dopo l'urto (con \vec{v}_B qualsiasi). Cioè quando una particella entra in $d_3 v_A$.

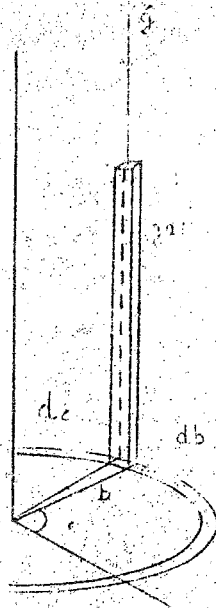
Se sappiamo determinare il numero probabile di collisioni del tipo (-) e (+) che avvengono in $d_3 r$ nell'intervallo di tempo dt e che indichiamo con $\Gamma(-) d_3 r dt$ e $\Gamma(+) d_3 r dt$, rispettivamente, siamo in grado di ricavare il termine di collisione dall'espressione

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} d_3 v_A d_3 r dt = [\Gamma(+)-\Gamma(-)] d_3 r dt \quad (1)$$

Ricaviamo separatamente le espressioni di $\Gamma(-)$ e $\Gamma(+)$.

2. DETERMINAZIONE DI Γ (-)

Consideriamo un urto del tipo (-), un urto cioè in cui una particella di velocità \vec{v}_A , che indichiamo con A, in seguito ad una collisione con una particella B di velocità \vec{v}_B esce da $d_3 v_A$. Indichiamo con $\vec{g} = \vec{v}_B - \vec{v}_A$ la velocità relativa fra le due particelle e con π il piano passante per il centro della particella A e perpendicolare a \vec{g} , come mostrato in Fig. 2.



Sul piano π , che naturalmente si muove con velocità \vec{v}_A nel sistema del laboratorio, fissiamo la superficie infinitesima di area $bdbde$ limitata dai due cerchi di raggi b e $b+db$ con centro in A e dalle due semirette uscenti da A e formanti tra loro un angolo de . Consideriamo ora il parallelepipedo retto avente area di base data da $bdbde$ e altezza uguale a gdt e costruito sulla faccia di π la cui normale è diretta in senso opposto a \vec{g} . L'ipotesi fatta nel paragrafo precedente che la durata dell'urto sia molto piccola in confronto al tempo medio che intercorre fra un urto e un altro, è equivalente ad assumere che il "raggio" delle forze di interazione fra le particelle è molto piccolo rispetto al libero cammino medio e ci permette di scegliere un valore di dt che sia grande rispetto alla durata dell'urto, ma piccolo rispetto al tempo medio fra gli urti. Sotto queste condizioni possiamo trascurare la possibilità che la particella B ne incontri una

altra, oltre alla particella A, durante l'intervallo dt ; quindi all'inizio del tempo dt il centro della particella B deve essere contenuto entro il parallelepipedo infinitesimo precedentemente considerato e il cui volume è dato da $dV = gbdbd\epsilon dt$, se deve avvenire l'urto fra le particelle A e B durante dt con parametro d'urto fra b e $b+db$ formante un angolo fra ϵ e $\epsilon+d\epsilon$ con l'asse polare. L'ipotesi precedente infatti ci autorizza anche ad assumere che la particella B uscirà dal volumetto considerato (in generale la particella B non passerà attraverso l'area $bdbd\epsilon$ poichè verrà deflessa un po' prima dall'interazione con A) ad un punto la cui distanza da π è trascurabile rispetto a gdt . In Fig. 3 viene mostrata la geometria dell'urto da un altro punto di vista nel caso di sfere rigide; il piano π è normale al foglio

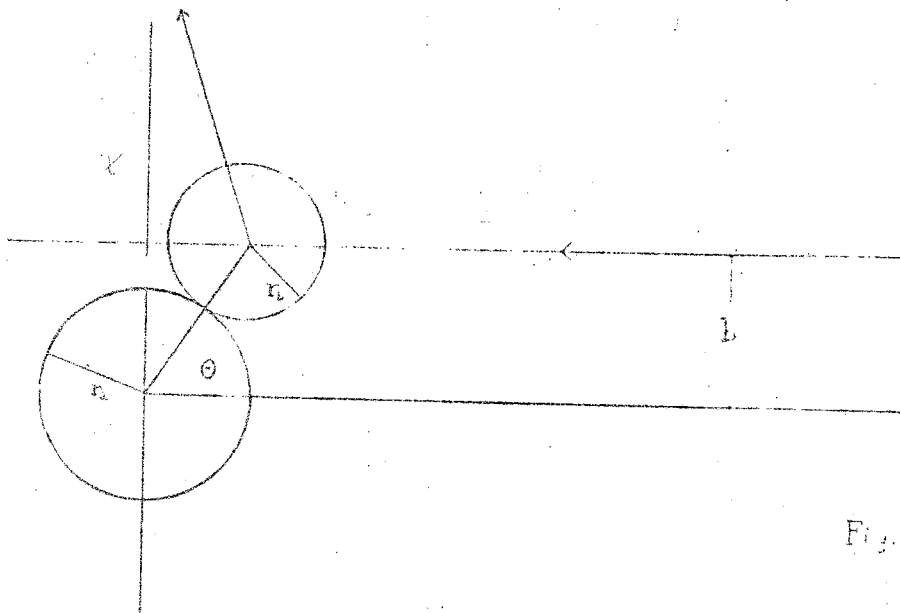


Fig. 3

Sotto le ipotesi fatte (gas poco denso; cioè libero cammino medio grande rispetto al raggio delle forze di interazione) la probabilità che una particella B sia entro il volumetto considerato è piccola e se db , $d\epsilon$ e d_3v_B , sono sufficientemente piccoli, possiamo ignorare la possibilità che vi siano due particelle B in dV . Abbiamo quindi che (per semplicità poniamo $f(\vec{v}_A) \equiv f_A$ e $f(\vec{v}_B) \equiv f_B$)

$$f_B d_3v_B dV = f_B g b db d\epsilon d_3v_B dt \quad (2)$$

rappresenta sia la probabilità che in dV vi sia una particella B, sia la probabilità che avvenga un urto fra una qualsiasi particella B e la particella A nell'intervallo di tempo dt . Possiamo ora immaginare di associare a ciascuna delle $f_A d_3v_A d_3r$ particelle con velocità in d_3v_A contenute in d_3r un volumetto dV precedentemente definito e se db e de sono sufficientemente piccoli possiamo trascurare, per le ipotesi fatte, la possibilità che i volumetti si possano sovrapporre in parte. Perciò il numero di urti che avvengono in d_3r nell'intervallo di tempo dt fra le particelle con velocità in d_3v_A e d_3v_B e parametro d'urto in $bdbde$ è

$$f_A f_B g b d b d e d_3 v_A d_3 v_B d_3 r d t \quad (3)$$

Per avere $\Gamma(-) d_3 r d t$, cioè il numero probabile di particelle che in $d_3 r$ escono dall'elemento tipico $d_3 v$ durante dt in seguito ad un urto con una particella di qualsiasi velocità \vec{v}_B e con qualsiasi parametro d'urto, dovremo integrare la (3) rispetto a $d_3 v_B$, db e de . Abbiamo quindi

$$\Gamma(-) d_3 r d t = d_3 v_A d_3 r d t \int f_A(\vec{r}, t) f_B(\vec{r}, t) g b d b d e d_3 v_B \quad (4)$$

dove gli estremi di integrazione sono $-\infty$ e $+\infty$ per ciascuna componente di \vec{v}_B , 0 e 2π per ϵ , 0 e b_{\max}^* per il parametro d'urto b che per la validità della ipotesi, deve essere piccolo.

3. DETERMINAZIONE DI $\Gamma(+)$

Supponiamo che in un urto fra una particella di velocità \vec{v}_A con una di velocità \vec{v}_B le velocità dopo l'urto siano \vec{v}'_A e \vec{v}'_B rispettivamente (urto diretto).

Consideriamo ora l'urto inverso al precedente e cioè l'urto fra due particelle di velocità \vec{v}'_A e \vec{v}'_B prima della collisione e \vec{v}_A e \vec{v}_B dopo la collisione. Dallo studio della dinamica degli urti binari, svolto nei paragrafi precedenti, abbiamo ottenuto le relazioni

$$\vec{v}'_A - \vec{v}_A = \frac{m_B}{m_A + m_B} (\vec{g} - \vec{g}') \quad (5)$$

$$\vec{v}'_B - \vec{v}_B = \frac{m_A}{m_A + m_B} (\vec{g}' - \vec{g})$$

che legano le velocità prima e dopo l'interazione, sia per l'urto diretto che per quello inverso.

Notiamo che il vettore $\vec{g} - \vec{g}'$ è, in coordinate cartesiane con l'asse z coincidente con la direzione di \vec{g} , (vedi Fig. 4)

$$\vec{g} - \vec{g}' = g[\text{sen } \chi \cos \epsilon \vec{i} + \text{sen } \chi \text{sen } \epsilon \vec{j} - (1 - \cos \chi) \vec{k}] \quad (6)$$

Le equazioni 5 e 6 permettono di ricavare \vec{v}'_A e \vec{v}'_B , se sono fissati \vec{v}_A , \vec{v}_B , χ ed ϵ , oppure \vec{v}'_A e \vec{v}'_B se sono fissati \vec{v}_A , \vec{v}_B , χ ed ϵ . Si ha quindi $\vec{v}'_A = \vec{v}'_A(\vec{v}_A, \vec{v}_B, \chi, \epsilon)$, $\vec{v}'_B = \vec{v}'_B(\vec{v}_A, \vec{v}_B, \chi, \epsilon)$, $\vec{v}_A = \vec{v}_A(\vec{v}'_A, \vec{v}'_B, \chi, \epsilon)$, $\vec{v}_B = \vec{v}_B(\vec{v}'_A, \vec{v}'_B, \chi, \epsilon)$.

Ora per il calcolo di $\Gamma(+)$ siamo interessati agli urti inversi, agli urti cioè che lasciano una delle particelle che intervengono nello urto nell'elemento tipico $d_3 v_A$. L'espressione

$$f'_A f'_B g' b d b d \epsilon d_3 v'_A d_3 v'_B d_3 r dt, \quad (7)$$

dove $f'_A \equiv f(\vec{v}'_A)$, $f'_B \equiv f(\vec{v}'_B)$, ottenuta come la (3) del paragrafo precedente, dà il numero di urti che avvengono in $d_3 r$ nell'intervallo di tempo dt fra le particelle con velocità in $d_3 v'_A$ e $d_3 v'_B$ con parametro d'urto in $b d b d \epsilon$; le velocità dopo l'urto sono determinate dalle equazioni 5 e 6 essendo fissati \vec{v}'_A , \vec{v}'_B , b ed ϵ (ricordiamo che nei paragrafi precedenti abbiamo visto che esiste una relazione ben precisa fra il parametro di urto b e l'angolo di diffusione χ , nel sistema del C.M. che dipende dalla natura delle forze intermolecolari (vedi pag. 16)). Se, d'altra parte, fissiamo \vec{v}_A , \vec{v}_B , $b(\text{o } \chi)$ ed ϵ restano fissate \vec{v}'_A e \vec{v}'_B e le funzioni f'_A e f'_B possono essere considerate come funzioni composte di \vec{v}_A , \vec{v}_B , $b(\text{o } \chi)$ ed ϵ , tramite le funzioni $\vec{v}'_A = \vec{v}'_A(\vec{v}_A, \vec{v}_B, \chi, \epsilon)$ e $\vec{v}'_B = \vec{v}'_B(\vec{v}_A, \vec{v}_B, \chi, \epsilon)$; abbiamo quindi

$$f'_A = f\left[\vec{v}'_A(\vec{v}_A, \vec{v}_B, \chi, \varepsilon)\right] = f\left[\vec{v}'_A(\vec{v}_A, \vec{v}_B, b, \varepsilon)\right] \quad (8)$$

$$f'_B = f\left[\vec{v}'_B(\vec{v}_A, \vec{v}_B, \chi, \varepsilon)\right] = f\left[\vec{v}'_B(\vec{v}_A, \vec{v}_B, b, \varepsilon)\right]$$

Se, perciò, sono fissati gli elementi db (o $d\chi$) e $d\varepsilon$ e consideriamo come variabili indipendenti dell'urto inverso \vec{v}_A e \vec{v}_B , cioè fissiamo le velocità dopo l'urto, l'espressione (7) diviene

$$f'_A f'_B g b d b d \varepsilon |J| d_3 v_A d_3 v_B d_3 r dt \quad (9)$$

dove per f'_A e f'_B intendiamo le funzioni composte di equazione (8), J è il determinante Jacobiano della trasformazione fra gli elementi $d_3 v'_A d_3 v'_B$ e $d_3 v_A d_3 v_B$ e se consideriamo funzioni potenziali a simmetria sferica per i quali vale la relazione $g' = g$.

L'espressione (9) dà quindi il numero di urti che avvengono in $d_3 r$ nell'intervallo di tempo dt con parametro d'urto in $b d b d \varepsilon$ fra le particelle del sistema con velocità \vec{v}'_A e \vec{v}'_B tali da lasciare dopo l'urto le particelle con velocità in $d_3 v_A$ e $d_3 v_B$.

Se integriamo la (9) rispetto a $d_3 v_B$, db e $d\varepsilon$ otteniamo quindi il numero probabile di particelle che in $d_3 r$ entrano nell'elemento tipico $d_3 v_A$ durante l'intervallo dt in seguito alle collisioni binarie che avvengono con qualsiasi parametro d'urto e tali da far acquistare alla particella B qualsiasi velocità. Abbiamo infatti

$$\Gamma(+)_3 d_3 r dt = d_3 v_A d_3 r dt \int f'_A(\vec{r}, t) f'_B(\vec{r}, t) g b d b d \varepsilon |J| d_3 v_B \quad (10)$$

dove gli estremi di integrazione sono uguali a quelli di equazione (4). Mostriamo ora che il determinante J è uguale a ± 1 . Gli elementi differenziali sestupli $d_3 v_A d_3 v_B$ e $d_3 v'_A d_3 v'_B$ sono legati dalla relazione

$$d_3 v'_A d_3 v'_B = |J| d_3 v_A d_3 v_B \quad (11)$$

e, per la trasformazione inversa,

$$d_{3A}^v d_{3B}^v = |J'| d_{3A}^{v'} d_{3B}^{v'} \quad (12)$$

dove J e J' sono i determinanti Jacobiani a 6 linee e a 6 colonne

$$J = \begin{array}{cc|c} \frac{\partial v'_A}{\partial v_{Ax}} & \frac{\partial v'_A}{\partial v_{Ay}} & \vdots \\ \frac{\partial v'_B}{\partial v_{Ax}} & \frac{\partial v'_B}{\partial v_{Ay}} & \vdots \\ \dots & \dots & \dots \\ & & \frac{\partial v'_B}{\partial v_{Bz}} \\ & & \frac{\partial v'_A}{\partial v_{Bz}} \end{array} ; \quad (13)$$

$$J' = \begin{array}{cc|c} \frac{\partial v_{Ax}}{\partial v'_A} & \frac{\partial v_{Ax}}{\partial v'_B} & \vdots \\ \frac{\partial v_{Ay}}{\partial v'_A} & \frac{\partial v_{Ay}}{\partial v'_B} & \vdots \\ \dots & \dots & \dots \\ & & \frac{\partial v_{Bz}}{\partial v'_B} \\ & & \frac{\partial v_{Bz}}{\partial v'_A} \end{array} \quad (14)$$

Poichè le \vec{v}'_A e \vec{v}'_B ottenute dalle equazioni (5) sono funzioni lineari di \vec{v}_A e \vec{v}_B il determinante J dipende solo dalle masse m_A e m_B .

D'altra parte, se dalle equazioni (5) ricaviamo \vec{v}_A e \vec{v}_B in funzione di \vec{v}'_A e \vec{v}'_B otteniamo delle espressioni che differiscono da quelle che danno \vec{v}'_A e \vec{v}'_B in funzione di \vec{v}_A e \vec{v}_B solamente per il fatto di avere scambiato gli apici; cioè le lettere senza apici compaiono con gli apici e viceversa quelle con gli apici compaiono senza. Si ha quindi che il determinante J' è uguale alla stessa funzione di

m_A e m_B come J e perciò $J=J'$. Ma dalle proprietà generali dei determinanti Jacobiani si ha che $JJ'=1$ e quindi deve essere $J=\pm 1$ e

$$d_3 v_A d_3 v_B = d_3 v'_A d_3 v'_B \quad (15)$$

L'equazione (15) si poteva ottenere direttamente dal teorema di Lionville dato che si assume che in un urto la posizione delle due particelle interagenti non cambia. In conclusione la (10) diviene

$$\Gamma(+)\,d_3 v_A d_3 v_B = d_3 v'_A d_3 v'_B \int f'_A(\vec{r},t) f'_B(\vec{r},t) g \, db \, db \, ds \, d_3 v_B \quad (16)$$

due fuisse?

4. INTEGRALE DI COLLISIONE DI BOLTZMANN

Dall'espressione (1) abbiamo che il termine di collisione dell'equazione di Boltzmann è dato da

$$d_3 v_A \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \Gamma(+)-\Gamma(-) \quad (17)$$

Se nella (17) sostituiamo i valori di $\Gamma(+)$ e $\Gamma(-)$ precedentemente ottenuti, equazioni (16) e (4), otteniamo

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \int (f'_A f'_B - f_A f_B) g \, db \, db \, ds \, d_3 v_B \quad (18)$$

L'espressione (18) è conosciuta come "integrale di collisione di Boltzmann". Facendo uso della (18) l'equazione integro differenziale di Boltzmann può essere scritta nel modo seguente

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \int (f'_A f'_B - f_A f_B) g \, db \, db \, ds \, d_3 v_B \quad (19)$$

dove abbiamo sostituito f_A e f'_A con f e f' dato che la velocità tipica \vec{v}_A , che fino ad ora abbiamo volutamente marcato per comodità, può essere qualsiasi. L'integrale di collisione, equazione (18), può anche essere scritto in termini della sezione d'urto differenziale microscopica, $d\sigma$, e dell'angolo di diffusione nel sistema C.M.

Facendo uso delle equazioni (46) del capitolo II si ha

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} &= \int (f'f'_B - ff_B)g \, d\omega_{3v_B} = \\
 &= \int (f'f'_B - ff_B)g S(g,\chi,\epsilon) \sin \chi \, d\chi \, d\omega_{3v_B} .
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

Se il sistema considerato non è semplice, ma è costituito da N componenti l'equazione di Boltzmann per l'iesimo componente diviene

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}_i}{m_i} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}_i} = \sum_{j=1}^N \int (f'_i f'_{jB} - f_i f_{jB}) g_{i,j} \, d\omega_{3v_{jB}}
 \tag{21}$$

dove $f_i \equiv f_i(\vec{v}_i)$ è la funzione di distribuzione dell'iesimo componente del sistema, $g_{i,j} = |\vec{v}_{jB} - \vec{v}_i|$ e l'integrale di collisione è stato suddiviso nella somma di N termini ciascuno dei quali tiene conto degli urti delle particelle dell'iesimo componente del sistema con quelle del componente j iesimo con $j=1,2,\dots,N$. Naturalmente una tale equazione può essere scritta per ciascun componente del sistema ($i=1,2,\dots,N$).

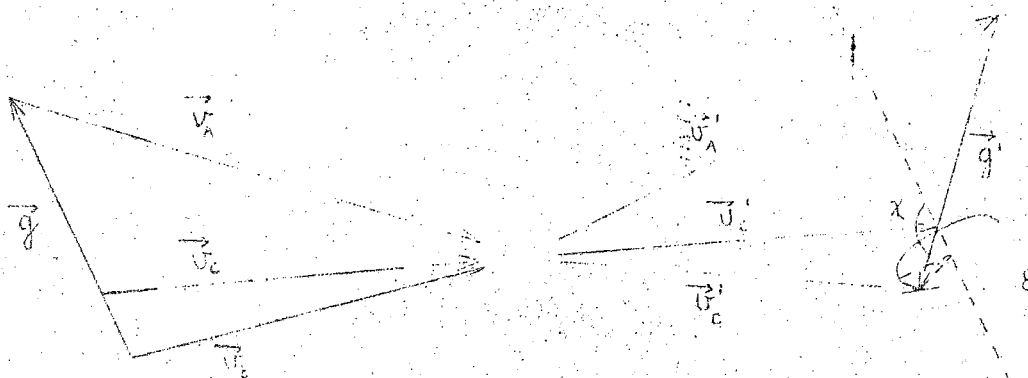


Fig. 4

TEOREMA H E DISTRIBUZIONE MAXWELLIANA

Il teorema H è stato presentato da Boltzmann nel 1872 in connessione con il problema dell'approccio all'equilibrio termodinamico di un sistema dinamico. Oggi esistono diverse versioni di questo teorema che possono essere suddivise in dinamiche o statiche. La dimostrazione che noi daremo è basata sull'equazione di Boltzmann (punto di vista dinamico).

1. TEOREMA H: STATO OMOGENEO

Consideriamo un sistema dinamico costituito da un solo tipo di particelle che supponiamo posseggano solo energia di traslazione e non siano soggette ad alcuna forza esterna. Inoltre facciamo l'ipotesi che la funzione di distribuzione f sia indipendente da \vec{r} , cioè che il sistema sia in uno stato omogeneo. Sotto queste ipotesi l'equazione di Boltzmann diviene

$$\frac{\partial f_A}{\partial t} = \int (f'_A f'_B - f_A f_B) g S(x) \sin \chi dx d\phi d\vec{v}_B = \left(\frac{\partial f_A}{\partial t} \right)_{\text{coll}}, \quad (1)$$

dove per convenienza abbiamo indicato con l'indice A le funzioni della velocità che si riferiscono agli elementi tipici $d\vec{v}_A$ e $d\vec{v}'_A$.

Condizione sufficiente affinché $\frac{\partial f_A}{\partial t} = 0$, cioè condizione sufficiente per una soluzione di equilibrio della (1) è chiaramente

$$f'_A f'_B = f_A f_B \quad (2)$$

Vogliamo dimostrare che la (2) è anche condizione necessaria affinché f sia la distribuzione di equilibrio.

Per far questo Boltzmann ha introdotto la funzione H così definita

$$H(t) = \int f \ln f d\vec{v}, \quad (3)$$

che quindi non è funzione di \vec{v} e, per le ipotesi fatte, neanche di \vec{r} , ma solo di t . Inoltre, dato che H dipende solo da $f(\vec{v}, t)$, condizione necessaria per lo stato stazionario è che $\frac{dH}{dt} = 0$; cioè se f non dipende da t necessariamente deve essere $\frac{dH}{dt} = 0$.

Se consideriamo $d\vec{v}_A$ come elemento tipico, avremo:

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \int \frac{\partial}{\partial t} (f_A \ln f_A) d\vec{v}_A = \int \left[\ln f_A \frac{\partial f_A}{\partial t} + \frac{f_A}{f_A} \frac{\partial f_A}{\partial t} \right] d\vec{v}_A = \\ &= \int (1 + \ln f_A) \frac{\partial f_A}{\partial t} d\vec{v}_A \end{aligned} \quad (4)$$

Sostituiamo l'espressione di $\frac{\partial f_A}{\partial t}$ data dalla (1) nella (4);

$$\frac{dH}{dt} = \int (1 + \ln f_A) (f'_A f'_B - f_A f_B) g S(\chi) \text{sen} \chi \, d\chi d\phi d\vec{v}_B d\vec{v}_A \quad (5)$$

Osserviamo che $\frac{dH}{dt}$ dato dalla (4) è indipendente dall'elemento tipico che consideriamo. Così se prendiamo come elemento tipico $d\vec{v}_B$ nell'integrale di (4) otteniamo

$$\frac{dH}{dt} = \int (1 + \ln f_B) (f'_B f'_A - f_B f_A) g S(\chi) \text{sen} \chi \, d\chi d\phi d\vec{v}_A d\vec{v}_B \quad (6)$$

Sommiamo la (5) con la (6) e dividiamo per 2;

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2} \int [2 + \ln(f_A f_B)] (f'_A f'_B - f_A f_B) g S(\chi) \text{sen} \chi \, d\chi d\phi d\vec{v}_A d\vec{v}_B \quad (7)$$

Possiamo ripetere i passaggi che ci hanno portato alla (7) considerando successivamente come elementi tipici $d\vec{v}'_A$ e $d\vec{v}'_B$; ricordando che $g=g'$ e $d\vec{v}_A d\vec{v}_B = d\vec{v}'_A d\vec{v}'_B$ otteniamo

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2} \int [2 + \ln(f'_A f'_B)] (f_A f_B - f'_A f'_B) g S(\chi) \text{sen} \chi \, d\chi d\phi d\vec{v}'_A d\vec{v}'_B \quad (8)$$

che è analoga alla (7), ma con gli apici scambiati.

Se sommiamo la (7) con la (8) e dividiamo per 2 otteniamo

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{4} \int \ln \frac{f_A f_B}{f'_A f'_B} (f'_A f'_B - f_A f_B) g S(\chi) \text{sen} \chi \, d\chi d\phi d\vec{v}_A d\vec{v}_B \quad (9)$$

dato che $d\vec{v}_A d\vec{v}_B = d\vec{v}'_A d\vec{v}'_B$. Notiamo ora che quando $f_A f_B > f'_A f'_B$ si ha che $\ln \frac{f_A f_B}{f'_A f'_B}$ è positivo mentre $(f'_A f'_B - f_A f_B)$ è negativo. Viceversa

quando $f_{A'B} f_B < f_{A'B}' f_B'$, $\ln \frac{f_{A'B} f_B}{f_{A'B}' f_B'}$ è negativo e $(f_{A'B}' f_B' - f_{A'B} f_B)$ è positivo

(ricordiamo che $f_{A'B} f_B = f_{A'E}' f_E'$ è condizione sufficiente per l'annullamento di $\frac{dH}{dt}$). Quindi l'integrando della (9) è sempre negativo o zero e

$$\frac{dH}{dt} \leq 0, \quad (10)$$

cioè H non può mai crescere ed è uguale a zero solo quando l'integrando è zero. Questo è conosciuto come "teorema H" di Boltzmann. Poiché H non può decrescere indefinitamente, essendo limitata inferiormente (come vedremo più avanti), deve tendere ad un limite corrispondente allo stato del sistema per cui è $\frac{dH}{dt} = 0$. Questo stato si ha solo se è verificata la (2) che è quindi condizione necessaria affinché $\frac{dH}{dt} = 0$. Ma la (2) è anche condizione sufficiente perché sia $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, e quindi lo stato del sistema verso cui tende H è lo stato stazionario. D'altra parte $\frac{dH}{dt} = 0$ è condizione necessaria per lo stato stazionario e perciò $(f_{A'B}' f_B' = f_{A'B} f_B)$ è condizione necessaria oltre che sufficiente perché sia $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$.

Possiamo quindi concludere che la soluzione dell'equazione

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \int (f_{A'B}' f_B' - f_{A'B} f_B) g S(\chi) \sin \chi d\chi d\phi d\vec{v}_B = 0 \quad (11)$$

è data dalla (2) che si può anche scrivere

$$\ln f' + \ln f_B' = \ln f + \ln f_B, \quad (12)$$

Dimostriamo ora che H è limitata inferiormente.

Dalla definizione di H eq.(3), si ha che $H = -\infty$ solo se l'integrale triplo $\int f \ln f d\vec{v}$ diverge. Notiamo che per $v \rightarrow \infty$ si ha che $f \rightarrow 0$, $\ln f \rightarrow -\infty$, $f \ln f \rightarrow 0$ e che $f \ln f$ è limitata in tutto lo spazio delle velocità.

Maggioriamo ora l'integrando di (3) nel modo seguente:

$$\int f \ln f d\vec{v} \leq \int f |\ln f| d\vec{v} \leq \int f (v^\alpha + c) d\vec{v} = \int f v^\alpha d\vec{v} + c.n \quad (13)$$

essendo $|\ln f| \leq v^\alpha + c$ con $\alpha > 0$ e $c = \text{costante}$. Se per un certo α_0 l'integrale $\int f v^{\alpha_0} d\vec{v}$ converge e se $|\ln f| \leq v^{\alpha_0}$ per grandi valori di v ,

con $\alpha \leq \alpha_0$, a maggior ragione dovrà convergere l'integrale $\int f \ln f d\vec{v}$. Ricordiamo ora che l'integrale $\int f \frac{1}{2} m v^2 d\vec{v}$ rappresenta l'energia totale di traslazione delle particelle del sistema e quindi deve essere finito. Perciò dalla (13) e da quanto visto precedentemente l'integrale (3) potrebbe divergere solo se $-\ln f$ tende ad infinito più rapidamente di v^2 . Questo implica che f tenda a zero più rapidamente di e^{-v^2} ; ma in questo caso l'integrale (3) converge certamente. Quindi la funzione H è sempre limitata.

Dalla eq. (2), ricordando che per gli urti diretti e inversi $d\vec{v}_A d\vec{v}_B = d\vec{v}'_A d\vec{v}'_B$, $|\vec{g}| = |\vec{g}'|$, $\chi = \chi'$ e $\phi = \phi'$, si ha

$$f_A f_B g S(\chi) \sin \chi d\chi d\phi d\vec{v}_A d\vec{v}_B = f'_A f'_B g' S(\chi') \sin \chi' d\chi' d\phi' d\vec{v}'_A d\vec{v}'_B. \quad (14)$$

Ricordiamo che per urti diretti intendiamo le interazioni binarie che trasferiscono le particelle interagenti A e B dagli elementi dello spazio delle velocità $d\vec{v}_A$ e $d\vec{v}_B$ agli elementi $d\vec{v}'_A$ e $d\vec{v}'_B$ rispettivamente; per urti inversi quelli che trasferiscono le particelle A e B da $d\vec{v}'_A$ e $d\vec{v}'_B$ a $d\vec{v}_A$ e $d\vec{v}_B$. La (14) esprime il fatto che all'equilibrio il numero di urti diretti è, nell'unità di tempo, uguale al numero di urti inversi. Abbiamo perciò che, se la funzione di distribuzione è quella dello stato stazionario di equilibrio, non solo il totale degli urti non produce effetti essendo $(\frac{\partial f}{\partial t})_{\text{coll}} = 0$, ma, dall'eq. (14) l'effetto di ogni tipo di urto è esattamente bilanciato dall'effetto del processo inverso. L'equilibrio espresso dalla (14) è un esempio di "bilancio dettagliato" che ora è adottato come principio generale della meccanica statistica.

2. PROPRIETÀ MOLECOLARI CONSERVATE DOPO GLI URTI

Se una funzione Φ della velocità delle particelle, che rappresenta quindi una proprietà molecolare, è associata ad ogni particella e se la somma dei valori di Φ (che può essere uno scalare, un vettore o un tensore) per le due particelle A e B che collidono elasticamente è uguale alla somma dei valori di $\Phi = \Phi'$ dopo l'urto, cioè se

$$\Phi_A + \Phi_B = \Phi'_A + \Phi'_B, \quad (15)$$

la funzione Φ è detta essere di somma invariante.

Tali funzioni, come vedremo, sono di fondamentale importanza. Sono proprietà molecolari di somma invariante lo scalare energia totale e il vettore quantità di moto.

Infatti si ha:

$$\frac{1}{2} m_A v_A^2 + \frac{1}{2} m_B v_B^2 = \frac{1}{2} m_A v_A'^2 + \frac{1}{2} m_B v_B'^2 \quad (16)$$

e

$$m_A \vec{v}_A + m_B \vec{v}_B = m_A \vec{v}_A' + m_B \vec{v}_B' \quad (17)$$

Anche una costante numerica ($\Phi = \text{cost}$) è una proprietà di somma invariante; in particolare $\Phi = 1$, per la quale la (15) rappresenta la conservazione del numero di particelle nell'urto elastico.

Inoltre ogni combinazione lineare di proprietà di somma invariante è ancora, come può essere facilmente dimostrato, una proprietà di somma invariante. Notiamo che le (16) e (17) costituiscono 4 relazioni scalari che legano le 6 quantità $v_{Ax}', v_{Ay}', v_{Az}', v_{Bx}', v_{By}', v_{Bz}'$ con le velocità prima dell'urto \vec{v}_A e \vec{v}_B . La soluzione di queste quattro equazioni in sei incognite lascia due incognite indeterminate. Tuttavia, per specificare l'urto, occorre anche fissare i due parametri geometrici χ e ϕ (o il parametro d'urto b e l'azimut ϕ). Quindi per molecole la cui energia è solamente di translazione, se sono fissati χ e ϕ , le quattro equazioni (16) e (17) determinano completamente la velocità dopo l'urto in termini della velocità prima dell'urto, ed ogni altra proprietà di somma invariante deve essere una combinazione lineare delle funzioni

$$\phi_1 = 1 ; \phi_2 = m\vec{v} ; \phi_3 = \frac{1}{2} m v^2 \quad (18)$$

3. SOLUZIONE DI EQUILIBRIO DELL'EQUAZIONE DI BOLTZMANN; DISTRIBUZIONE MAXWELLIANA.

L'equazione (12)

$$\ln f'_A + \ln f'_B = \ln f_A + \ln f_B \quad (12)$$

mostra che $\ln f$ è una proprietà di somma invariante; quindi, come abbiamo visto nel paragrafo precedente, deve essere una combinazione lineare di $\phi_1, \vec{\phi}_2$ e ϕ_3 . Avremo così che

$$\ln f = \alpha_1 \phi_1 + \vec{\alpha}_2 \cdot \vec{\phi}_2 - \alpha_3 \phi_3 \quad (19)$$

dove, essendo f uno scalare, α_1 e α_3 sono scalari mentre $\vec{\alpha}_2$ è un vettore e il segno meno è preso per convenienza. Poiché lo stato del sistema è stazionario e omogeneo le α non devono dipendere da \vec{r} e da t . Con l'introduzione di una nuova costante α_0 , la (19) può essere scritta nel modo seguente

$$\begin{aligned} \ln f &= \alpha_1 + m(\alpha_{2x} v_x + \alpha_{2y} v_y + \alpha_{2z} v_z) - \frac{1}{2} m \alpha_3 (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \\ &= \ln \alpha_0 - \alpha_3 \frac{1}{2} m \left[\left(v_x - \frac{\alpha_{2x}}{\alpha_3} \right)^2 + \left(v_y - \frac{\alpha_{2y}}{\alpha_3} \right)^2 + \left(v_z - \frac{\alpha_{2z}}{\alpha_3} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (20)$$

Poniamo

$$\frac{\alpha_{2x}}{\alpha_3} = \beta_x; \quad \frac{\alpha_{2y}}{\alpha_3} = \beta_y; \quad \frac{\alpha_{2z}}{\alpha_3} = \beta_z; \quad (21)$$

avremo

$$\ln f = \ln \alpha_0 - \alpha_3 \frac{1}{2} m \left[(v_x - \beta_x)^2 + (v_y - \beta_y)^2 + (v_z - \beta_z)^2 \right], \quad (22)$$

da cui

$$f = \alpha_0 e^{-\alpha_3 \frac{1}{2m} [(v_x - \beta_x)^2 + (v_y - \beta_y)^2 + (v_z - \beta_z)^2]} \quad (23)$$

La funzione data dalla (23) è la funzione di distribuzione dello stato stazionario ed è chiamata distribuzione Maxwelliana essendo stata ottenuta per la prima volta da Maxwell. Essa contiene cinque costanti, $\alpha_0, \alpha_3, \beta_x, \beta_y, \beta_z$, che possono essere determinate in termini della velocità media $\langle \vec{v} \rangle \equiv \vec{v}_0$, della temperatura T e della densità n . Alle costanti arbitrarie della (23) può cioè essere data una interpretazione fisica come ora vedremo.

Se poniamo $c_x = v_x - \beta_x$, $c_y = v_y - \beta_y$ e $c_z = v_z - \beta_z$ la (23) diviene

$$f = \alpha_0 e^{-\alpha_3 \frac{1}{2m} (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} = \alpha_0 e^{-\alpha_3 \frac{1}{2m} c^2}, \quad (24)$$

dove $c = |\vec{c}|$ con $\vec{c} = c_x \vec{i} + c_y \vec{j} + c_z \vec{k}$.

Introduciamo la (24) nell'integrale che definisce la densità n ; abbiamo, dato che $d\vec{v} = d\vec{c}$,

$$n = \int f d\vec{v} = \alpha_0 \int e^{-\alpha_3 \frac{1}{2m} c^2} d\vec{c} \quad (25)$$

Per calcolare l'integrale triplo della (25) esprimiamo \vec{c} in coordinate polari ($d\vec{c} = c^2 \sin\theta d\theta d\phi dc$); otteniamo

$$n = \int_0^\infty c^2 e^{-\alpha_3 \frac{1}{2m} c^2} dc \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \alpha_0 \left(\frac{2\pi}{m\alpha_3} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (26)$$

da cui

$$\alpha_0 = n \left(\frac{2\pi}{m\alpha_3} \right)^{-\frac{3}{2}} \quad (27)$$

Calcoliamo ora il valor medio della componente lungo l'asse delle x del vettore \vec{c} , usando la funzione di distribuzione di equilibrio (24); abbiamo

$$\langle c_x \rangle = \frac{\alpha}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} c_x e^{-\alpha \frac{1}{2} m c_x^2} dc_x \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha \frac{1}{2} m c_y^2} dc_y \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha \frac{1}{2} m c_z^2} dc_z = 0 \quad (28)$$

poichè la prima funzione integranda è dispari e l'integrale è fra $-\infty$ e $+\infty$. In modo analogo possiamo mostrare che anche $\langle c_y \rangle = \langle c_z \rangle = 0$. Dalla definizione di \vec{c} abbiamo quindi

$$\begin{aligned} \langle c_x \rangle &= \langle v_x - \beta_x \rangle = \langle v_x \rangle - \beta_x = 0 \\ \langle c_y \rangle &= \langle v_y - \beta_y \rangle = \langle v_y \rangle - \beta_y = 0 \\ \langle c_z \rangle &= \langle v_z - \beta_z \rangle = \langle v_z \rangle - \beta_z = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

cioè

$$\beta_x = \langle v_x \rangle ; \quad \beta_y = \langle v_y \rangle ; \quad \beta_z = \langle v_z \rangle \quad (30)$$

e

$$\begin{aligned} c_x &= v_x - \beta_x = v_x - \langle v_x \rangle \\ c_y &= v_y - \beta_y = v_y - \langle v_y \rangle \\ c_z &= v_z - \beta_z = v_z - \langle v_z \rangle \end{aligned} \quad (31)$$

c_x , c_y e c_z , come definiti dalle (31), sono le componenti del vettore $\vec{c} = \vec{v} - \langle \vec{v} \rangle$ che prende il nome di "velocità peculiare" o velocità rispetto alla velocità media. Poichè $\langle \vec{v} \rangle$ è, in generale, funzione di \vec{r} e t anche \vec{c} è funzione di \vec{r} e t . Notiamo anche che $\langle \vec{c} \rangle = 0$, dato che

$$\langle \vec{c} \rangle = \langle (\vec{v} - \langle \vec{v} \rangle) \rangle = \langle \vec{v} \rangle - \langle \vec{v} \rangle = 0 \quad (32)$$

Per determinare completamente le cinque costanti della (23) abbiamo bisogno di un'altra relazione oltre alle quattro date dalle (27) e (30). Per far questo introduciamo il concetto di temperatura T del sistema dal punto di vista della teoria cinetica.

Dalla definizione di funzione di distribuzione semplice, f , sappiamo che l'energia cinetica media di traslazione delle molecole del sistema nello elemento di volume $d\vec{r}$ è

$$d\vec{r} \int \frac{1}{2} m v^2 f d\vec{v} = d\vec{r} n \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle \quad (33)$$

che in termini di velocità peculiare, eq. (31), diviene

$$\begin{aligned} d\vec{r} n \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle &= d\vec{r} n \frac{1}{2} m \langle \vec{v} \cdot \vec{v} \rangle = \\ &= d\vec{r} n \frac{1}{2} m \langle (\vec{c} + \langle \vec{v} \rangle) \cdot (\vec{c} + \langle \vec{v} \rangle) \rangle = d\vec{r} n \frac{1}{2} m [\langle c^2 \rangle + 2 \langle \vec{c} \cdot \langle \vec{v} \rangle \rangle + \langle (\langle \vec{v} \rangle)^2 \rangle] = \\ &= d\vec{r} \frac{1}{2} \rho \langle c^2 \rangle + d\vec{r} \frac{1}{2} \rho v_0^2 \end{aligned} \quad (34)$$

dove $\rho = nm$ è la massa del sistema nell'unità di volume e $\vec{v}_0 \equiv \langle \vec{v} \rangle$. Il secondo termine nell'ultima espressione della (34) rappresenta la energia cinetica del moto visibile o di massa del sistema, mentre il primo termine è l'energia cinetica del moto "peculiare".

Questa energia invisibile è definita come "energia termica" del sistema; l'energia termica per unità di volume è quindi data dalla espressione $\frac{1}{2} \rho \langle c^2 \rangle$. Nell'ambito della teoria cinetica la temperatura T del sistema è definita in termini della velocità peculiare dalla relazione

$$\frac{3}{2} KT = \frac{1}{2} m \langle c^2 \rangle \quad (35)$$

dove $K = 1,38 \cdot 10^{-16}$ ergs/°K = $8,616 \cdot 10^{-5}$ ev/°K è una costante conosciuta come "costante di Boltzmann". La definizione di temperatura data dalla

(35) è applicabile sia ai sistemi in equilibrio sia ai sistemi che non lo sono. La (35), perciò, introduce un concetto di temperatura più generale di quello della termodinamica o della meccanica statistica, dove sono considerati solamente stati di equilibrio. È importante osservare che la definizione di temperatura data dalla (35) è consistente con quella della termodinamica quando il sistema è in equilibrio.

Ricaviamo ora $\langle c^2 \rangle$ per la funzione di distribuzione di equilibrio (24) che, ricordando la (27), diviene

$$\begin{aligned} \langle c^2 \rangle &= \frac{1}{n} \int c^2 f d\vec{v} = \frac{1}{n} \int c^2 \alpha_0 e^{-\alpha_3 \frac{1}{2} mc^2} d\vec{c} = \\ &= \left(\frac{m \alpha_3}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int c^2 e^{-\alpha_3 \frac{1}{2} mc^2} d\vec{c} = \frac{3}{m \alpha_3} ; \end{aligned} \quad (36)$$

da cui si ha, ricordando la (35),

$$\alpha_3 = \frac{1}{KT} \quad (37)$$

$$\alpha_0 = n \left(\frac{m}{2\pi KT} \right)^{\frac{3}{2}} .$$

Abbiamo così dato un significato fisico alle cinque costanti α_0 , β e α_3 e la (23) diviene

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi KT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mc^2}{2KT}} , \quad (38)$$

che è la forma usuale della funzione di distribuzione Maxwelliana. Vediamo così che, per un sistema omogeneo di cui conosciamo la densità n , la temperatura T e la velocità media \vec{v}_0 , la funzione di distribuzione Maxwelliana, eq. (38), è la sola possibile distribuzione di equilibrio e, in assenza di forze esterne, ogni distribuzione differente si evolve nel tempo tendendo ad essa. In coordinate cartesiane la funzione (38) moltiplicata per $d\vec{v}$ diviene

$$f d\vec{v} = n \left(\frac{m}{2\pi KT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2KT} (v_x - v_{0x})^2} dv_x e^{-\frac{m}{2KT} (v_y - v_{0y})^2} dv_y e^{-\frac{m}{2KT} (v_z - v_{0z})^2} dv_z . \quad (39)$$

La (39) rappresenta il numero probabile di particelle ~~che all'equi~~librio, nell'unità di volume, hanno le componenti della velocità v_x , v_y e v_z fra v_x e $v_x + dv_x$, v_y e $v_y + dv_y$ e v_z e $v_z + dv_z$. Vediamo perciò che ciascuna componente della velocità è distribuita, per la Maxwelliana, intorno al suo valore medio indipendentemente dai valori delle altre componenti della velocità. Se moltiplichiamo la (38) per $d\vec{c}$ otteniamo

$$f d\vec{c} = f c^2 \sin\theta d\theta d\phi dc, \quad (40)$$

che è il numero probabile di particelle che, nell'unità di volume, hanno velocità peculiare in $d\vec{c}$. Integriamo ora la (40) rispetto a θ e ϕ ; otteniamo

$$f dc = n \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{KT}\right)^{\frac{3}{2}} c^2 e^{-\frac{mc^2}{2KT}} dc, \quad (41)$$

che dà il numero probabile di particelle che, nell'unità di volume, hanno all'equilibrio una velocità peculiare il cui modulo è in dc . Indichiamo con c_p il valore più probabile del modulo della velocità peculiare definito come il modulo della velocità corrispondente al massimo della (41); se deriviamo la (41) rispetto a c e uguagliamo a zero la derivata trovata otteniamo

$$c_p = \left(\frac{2KT}{m}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (42)$$

Il valore medio del modulo della velocità peculiare è

$$\langle c \rangle = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{KT}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} c^3 e^{-\frac{mc^2}{2KT}} dc = \left(\frac{8KT}{\pi m}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (43)$$

mentre $\langle c^2 \rangle$ è, ricordando la definizione di temperatura, eq. (35),

$$\langle c^2 \rangle = \frac{3KT}{m}. \quad (44)$$

Notiamo che $\sqrt{\langle c^2 \rangle} \neq \langle c \rangle$; infatti si ha

$$\sqrt{\langle c^2 \rangle} = \left(\frac{3KT}{m}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{3\pi}{8}\right)^{\frac{1}{2}} \langle c \rangle = 1,086 \langle c \rangle \quad (45)$$

Abbiamo anche (vedi Fig. 1)

$$\langle c \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} c_p = 1,128 c_p \quad (46)$$

$$\langle c^2 \rangle = \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} c_p^2 = 1,224 c_p^2$$

Osserviamo che, per molti casi di interesse pratico, $\langle c \rangle$ è molto maggiore di v_0 ; infatti per i gas ordinari in condizioni normali di temperatura e pressione, $\langle c \rangle$ è parecchie centinaia di metri al secondo quando f è data dalla (38). In altre parole l'energia termica, che è connessa con la velocità peculiare è, per un sistema all'equilibrio termodinamico, molto maggiore, in generale, dell'energia cinetica del moto di massa connessa con v_0^2 (eq.(34)). Così, per esempio, per l'idrogeno in condizioni normali di temperatura e pressione, se $v_0 = 10$ cm/sec, si ha $\frac{\langle c^2 \rangle}{v_0^2} \approx 3 \cdot 10^8$.

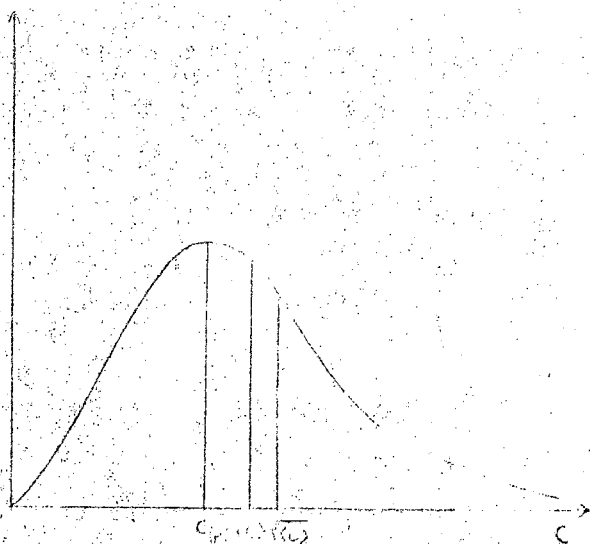


Fig. 1

Concludiamo osservando che

$$\frac{1}{2} m c_p^2 = KT, \quad (47)$$

cioè KT è l'energia cinetica corrispondente alla velocità più probabile quando la funzione di distribuzione del sistema è data dalla (38).

3.

4. LO STATO STAZIONARIO IN PRESENZA DI FORZE ESTERNE; IL "FATTORE DI BOLTZMANN".

Nei paragrafi precedenti abbiamo ricavato la funzione di distribuzione per lo stato di equilibrio quando non vi sono forze esterne e il gradiente di f è nullo.

Determiniamo ora, generalizzando il teorema H, la funzione di distribuzione per lo stato stazionario quando il sistema è soggetto ad una forza esterna \vec{F} . Vedremo che è possibile ottenere uno stato stazionario solo se \vec{F} è il gradiente di un potenziale. Per semplicità consideriamo il caso $\vec{v}_0 = 0$. L'equazione di Boltzmann è

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \int (f' f'_B - f f_B) g S(\chi) \sin \chi d\chi d\phi d\vec{v}_B = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (48)$$

dove la forza esterna \vec{F} è indipendente dalla velocità. Dalla definizione della funzione H, eq. (3), abbiamo

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{v} = \int (1 + \ln f) \left[\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} - \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \right] d\vec{v} = \quad (49)$$

$$= \int \left[(1 + \ln f) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} - \vec{v} \cdot \frac{\partial (f \ln f)}{\partial \vec{r}} - \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial (f \ln f)}{\partial \vec{v}} \right] d\vec{v}.$$

Notiamo che $\int \frac{\partial (f \ln f)}{\partial \vec{v}} d\vec{v} = 0$. Infatti si ha

$$\int \frac{\partial (f \ln f)}{\partial \vec{v}} d\vec{v} = \int \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial (f \ln f)}{\partial v_x} dv_x dv_y dv_z + \int \int \frac{\partial (f \ln f)}{\partial v_y} dv_x dv_y dv_z + \int \int \frac{\partial (f \ln f)}{\partial v_z} dv_x dv_y dv_z \right] \quad (50)$$

ma, dato che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial(flnf)}{\partial y_\alpha} dv_\alpha = \quad (\alpha=x,y,z) \quad (51)$$

$$= flnf \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

poichè $flnf$ deve tendere a zero quando \vec{v} od ogni sua componente tende a $\pm\infty$, l'integrale di eq.(50) deve essere nullo.

Consideriamo ora la funzione $H_0(t)$ definita da

$$H_0 = \int H d\vec{r} = \int flnf d\vec{v} d\vec{r}, \quad (52)$$

dove l'integrazione su \vec{r} è estesa a tutto il volume occupato dal sistema.

Dalle (49) e (51) abbiamo

$$\frac{dH_0}{dt} = \int \left[(1+lnf) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} - \vec{v} \cdot \frac{\partial(flnf)}{\partial \vec{r}} \right] d\vec{v} d\vec{r} = \quad (53)$$

$$= \int (1+lnf) (f' f'_B - f f_B) gS(\chi) \sin\chi d\chi d\phi d\vec{v}_B d\vec{v} d\vec{r} - \int \vec{v} \cdot \frac{\partial(flnf)}{\partial \vec{r}} d\vec{v} d\vec{r}$$

Facendo uso del teorema di Green^(*) l'ultimo integrale di eq.(53) diviene

(*) Fra le numerose formule di trasformazione di integrali due fra le più importanti sono conosciute come "teoremi di Green". Quella usata per ottenere la (54) è la seguente:

$$\int_V \frac{\partial\phi}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial \vec{r}} d\tau = \int_S \phi \frac{\partial\psi}{\partial \vec{r}} \cdot d\vec{s} - \int_V \phi \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \left(\frac{\partial\psi}{\partial \vec{r}} \right) d\tau,$$

dove $d\tau$ è l'elemento di volume e $d\vec{s}$ quello di superficie. Nel nostro caso particolare

$$\vec{v} = \frac{\partial\psi}{\partial \vec{r}}$$

e quindi la divergenza di \vec{v} è nulla essendo \vec{v} ed \vec{r} variabili indipendenti.

$$\int \vec{v} \cdot \frac{\partial(f \ln f)}{\partial \vec{r}} d\vec{v} d\vec{r} = \int f \ln f v_n d\vec{v} ds = \int n \langle v_n \ln f \rangle ds, \quad (54)$$

dove v_n è la componente di \vec{v} lungo la normale, rivolta verso l'esterno, all'elemento ds della superficie del recipiente che contiene il sistema. Se la densità del sistema tende a zero in tutte le direzioni, o se le pareti del contenitore sono perfettamente riflettenti, avremo che

$$\int n \langle v_n \ln f \rangle ds = 0. \quad (55)$$

Infatti nel primo caso si ha $n(\vec{r}_s) = 0$, per ogni \vec{r}_s appartenente al contorno del sistema, e quindi vale la (55); nel secondo caso, se prendiamo, senza perdere in generalità, la normale a ds parallela all'asse delle x , avremo su ds $f(-v_x, v_y, v_z) = f(v_x, v_y, v_z)$, dato che il numero di particelle che urtano le pareti del contenitore è uguale a quello delle particelle che sono riflesse. Segue da ciò che $\langle v_x \ln f \rangle = 0$ e quindi la (55).

L'ultimo integrale della parte destra della (53) è perciò nullo e

$$\frac{dH_0}{dt} = \int (1 + \ln f) (f' f'_B - f f_B) g S(\chi) \sin \chi d\chi d\phi d\vec{v}_B d\vec{v} d\vec{r}. \quad (56)$$

La derivata di H_0 rispetto al tempo, eq.(56), è del tutto analoga a quella di H , eq.(5), e quindi, seguendo un procedimento uguale a quello del paragrafo 1, avremo che

$$\frac{dH_0}{dt} \leq 0, \quad (57)$$

da cui, quando il sistema ha raggiunto lo stato stazionario, cioè quando $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ e $\frac{dH_0}{dt} = 0$, $\ln f$ deve essere di somma invariante. La distribuzione di equilibrio è, anche in questo caso, la distribuzione Maxwelliana

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}, \quad (58)$$

($\vec{c} = \vec{v}$ essendo per ipotesi $\vec{v}_0 = 0$) dove però le quantità n e T possono

ora essere funzioni di \vec{r} . Per ricavare la dipendenza di n e T da \vec{r} sostituiamo la (58) nell'equazione di Boltzmann stazionaria con $(\frac{\partial f}{\partial t})_{\text{coll}} = 0$ e dividiamo per f ; cioè sostituiamo la (58) nell'equazione

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial(\ln f)}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial(\ln f)}{\partial \vec{v}} = 0 \quad (59)$$

Otteniamo

$$\begin{aligned} \vec{v} \cdot \frac{\partial \ln \left(\frac{n}{T^{3/2}} \right)}{\partial \vec{r}} + \vec{v} \cdot \frac{mv^2}{2KT^2} \cdot \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} - \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{m\vec{v}}{KT} = \\ = \vec{v} \cdot \left[\frac{\partial \ln \left(\frac{n}{T^{3/2}} \right)}{\partial \vec{r}} + \frac{mv^2}{2KT} \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} - \frac{\vec{F}}{KT} \right] = 0 \end{aligned} \quad (60)$$

dato che il logaritmo della Maxwelliana, eq.(58), può essere scritto nel modo seguente

$$\ln f = \ln \left(\frac{n}{T^{3/2}} \right) - \frac{mv^2}{2KT^2} + \text{cost} \quad (61)$$

e $\frac{\partial v^2}{\partial \vec{v}} = 2\vec{v}$. Notiamo che il primo e l'ultimo termine contenuti nelle parentesi quadre dell'eq.(60) sono indipendenti da \vec{v} e quindi, dovendo la (60) essere nulla per qualsiasi valore di \vec{v} , dovrà essere

$$\frac{\partial T}{\partial \vec{r}} = 0 \quad (62)$$

cioè la temperatura del sistema allo stato stazionario deve essere costante anche se vi sono forze esterne che tendono ad accelerare le particelle e perciò a distorcere la funzione di distribuzione. Dalle (60) e (62) abbiamo poi che

$$\frac{\partial \ln n}{\partial \vec{r}} - \frac{\vec{F}}{KT} = 0 \quad (63)$$

da cui possiamo concludere che lo stato stazionario è possibile solo se la forza \vec{F} è uguale al gradiente di $KT \ln n$; cioè \vec{F} deve possedere un potenziale ψ e la densità n all'equilibrio deve essere distribuita in funzione di \vec{r} in modo da soddisfare alla relazione

$$\psi = -KT \ln n + \text{cost} \quad (64)$$

Dalla (64) si ha che la densità n è, all'equilibrio, una funzione di \vec{r} data, in termini di ψ , dalla

$$n = n_0 e^{-\frac{\psi}{KT}}, \quad (65)$$

che esprime il fatto che nei punti ove il potenziale ψ è più grande la densità è più bassa. Nella (65) n_0 è la densità nei punti dove $\psi=0$. L'espressione completa della funzione di distribuzione di equilibrio per un sistema soggetto ad una forza esterna conservativa di potenziale ψ è, dalle (58) e (65),

$$f = n_0 \left(\frac{m}{2\pi KT} \right)^{3/2} e^{-\frac{2\psi + mv^2}{2KT}} \quad (66)$$

P A R T E I V ^

EQUAZIONE DEL TRASPORTO PER NEUTRONI TERMICI;

SEZIONI D'URTO EFFICACI

INDICE

Capitolo I - Considerazioni generali sulla termalizzazione dei neutroni

. Introduzione	
2. Agitazione termica degli atomi del moderatore. . .	2
3. Il legame chimico e l'interazione fra le onde. . .	3

Capitolo II - Sezioni d'urto efficaci

. Introduzione	7
2. Termine di perdita; sezioni d'urto efficaci. . . .	10
3. Termine di guadagno.	

Capitolo III - Equazione di Boltzmann per neutroni termici e calcolo di $\sum_{v_{th}}(v)$ e $\sum_{v_{th}}(v' \rightarrow v)$ per un gas monoatomico

. Equazione di Boltzmann	14
2. Calcolo di $\sum_{v_{th}}(v)$ e $\sum_{v_{th}}(v' \rightarrow v)$ per il caso di un gas monoatomico e per $\sigma_s(g)$ costante	17
3. Bilancio dettagliato	23

CAPITOLO I

CONSIDERAZIONI GENERALI SULLA TERMALIZZAZIONE DEI NEUTRONI

I. INTRODUZIONE

Il processo di rallentamento dei neutroni di fissione, o di qualsiasi altra sorgente, al di sotto di circa un elettronvolt prende il nome di termalizzazione dei neutroni. Il motivo per cui l'ultimo stadio del rallentamento, da 1 ev a zero, viene considerato a parte è dovuto al fatto che alle energie termiche dei neutroni, cioè alle energie confrontabili con quelle di agitazione termica dei nuclei del moderatore, tre fenomeni, che durante il precedente stadio di rallentamento potevano essere trascurati, vengono ad assumere un ruolo determinante nei problemi di interazione fra i neutroni e gli atomi del mezzo diffondente. Questi fenomeni sono:

- a) l'agitazione termica degli atomi del moderatore
- b) le forze di legame chimico che tengono uniti gli atomi in molecole o cristalli
- c) l'interferenza fra le onde diffuse dai vari atomi dello stesso cristallo o molecola.

Ricordiamo che l'energia corrispondente alla velocità più probabile dei neutroni che hanno una distribuzione Maxwelliana alla temperatura $T = 300^\circ\text{K}$ è di $kT = 0,025$ ev, mentre la lunghezza d'onda di de Broglie, λ , è, per questi neutroni, dell'ordine di $h/(2mkT)^{1/2} \approx 1,8 \cdot 10^{-8}$ cm. (h = costante di Planck e k = costante di Boltzmann). Se notiamo che le energie intorno a 0,025 ev sono confrontabili con le energie di vibrazione e rotazione degli atomi nelle molecole e nei cristalli e che le distanze interatomiche sono dell'ordine di 10^{-8} cm, possiamo capire facilmente perchè i tre fenomeni citati sono essenziali nello studio dell'interazione dei neutroni con energia minore di 1 ev.

L'equazione del trasporto per neutroni termici tiene conto di questi

tre effetti attraverso le sezioni d'urto che in essa compaiono. Queste sezioni d'urto sono funzioni complicate dell'energia proprio come conseguenza dei fenomeni sopra menzionati. Esse dipendono dalla temperatura e dallo stato di aggregazione del materiale moderante; inoltre, in alcuni casi, le sezioni d'urto variano al variare dell'orientazione del materiale diffondente rispetto alla direzione del neutrone incidente.

Nei paragrafi che seguono esamineremo brevemente ciascuno dei tre fenomeni in relazione agli effetti che essi hanno sulle espressioni e sul calcolo delle sezioni d'urto da usarsi nell'equazione del trasporto. Come vedremo, il ruolo giocato da ciascuno di essi dipende dalle particolari situazioni fisiche e chimiche. Va notato che in generale questi tre effetti influenzano contemporaneamente le sezioni d'urto così che è spesso difficile distinguere l'importanza di un singolo fenomeno.

Notiamo ancora che è molto importante, soprattutto nei reattori eterogenei con forti gradienti di temperatura dove lo spettro dei neutroni termici può differire molto dalla distribuzione Maxwelliana ed il suo calcolo richiede quindi un modello di interazione neutrone-nucleo sufficientemente realistico, poter calcolare in modo appropriato le sezioni d'urto termiche, dato che i valori sperimentali delle sezioni d'urto sono noti solo per alcuni particolari valori delle energie.

2. AGITAZIONE TERMICA DEGLI ATOMI DEL MODERATORE

Consideriamo un gas alla temperatura T costituito da molecole monoatomiche. Quando l'energia dei neutroni che diffondono in questo gas è confrontabile con quella di agitazione termica degli atomi del gas, i neutroni possono perdere o guadagnare energia in seguito ad un urto con un atomo. Questo possibile guadagno di energia, che può essere trascurato quando l'energia del neutrone è molto superiore a quella termica, è un effetto caratteristico dei neutroni termici. Inoltre, come vedremo nel capitolo seguente, anche la sezione d'urto di diffusione dei

neutroni termici in funzione della velocità del neutrone incidente dipende marcatamente dal fatto che gli atomi del gas non sono fermi.

Si è soliti descrivere questa variazione della sezione d'urto di diffusione per un gas monoatomico dovuta all'agitazione termica come un puro effetto Doppler.

Notiamo che la distribuzione in energia degli atomi di un mezzo allo stato solido, liquido o gassoso dipende in generale non solo dalla temperatura, ma anche dal legame chimico esistente fra gli atomi e le molecole. Se vogliamo quindi calcolare le sezioni d'urto per i neutroni termici tenendo conto in modo adeguato del moto dei nuclei del moderatore, dobbiamo considerare anche la struttura del moderatore, dobbiamo cioè ricordare che gli atomi nel mezzo solido liquido o gassoso hanno anche, in generale, gradi di libertà di vibrazione e rotazione.

Spesso, per evitare le notevoli complicazioni legate agli effetti del legame chimico, si usa per il calcolo delle sezioni d'urto il modello di gas monoatomico. Se si sceglie una opportuna massa fittizia per gli atomi del moderatore descritto come un gas monoatomico, le sezioni d'urto termiche possono venir rappresentate con sufficiente accuratezza per l'uso in molti problemi di fisica o ingegneria del reattore.

Il modello gas monoatomico è tanto migliore quanto più la temperatura è elevata.

3. IL LEGAME CHIMICO E L'INTERFERENZA FRA LE ONDE

Per effetto delle forze di legame chimico un atomo di un mezzo diffusivo non è libero ma legato in molecole o cristalli con gli altri atomi del mezzo. Un atomo legato in una molecola ha degli stati energetici discreti associati sia con le vibrazioni degli atomi nella molecola sia con le rotazioni della intera molecola. Queste energie di vibrazione e rotazione sono, come abbiamo già visto, confrontabili con quelle dei neutroni termici così che quando un neutrone di bassa energia interagisce con un atomo legato può perdere o guadagnare energia come conseguenza della variazione degli stati quantici di vibrazione

o rotazione della molecola. Quando questo avviene si parla di urto anelastico, mentre l'urto verrà detto elastico quando i livelli energetici di vibrazione e rotazione non vengono alterati dall'interazione con il neutrone. Corrispondentemente si può definire una sezione d'urto elastica ed una sezione d'urto anelastica. Il calcolo di queste sezioni d'urto è molto complicato e dipende dallo stato di aggregazione del materiale nel reattore nucleare. Il legame chimico, oltre che dare origine agli urti anelastici, influenza il processo di termalizzazione e diffusione dei neutroni termici anche per il fatto che le sezioni d'urto per un atomo legato ad una molecola o ad un cristallo sono in generale più grandi di quelle per l'atomo libero. Si può capire facilmente come la sezione d'urto differenziale per un atomo libero sia diversa da quella dello stesso atomo legato in una molecola dalle seguenti considerazioni. Ricordiamo che la sezione d'urto differenziale dei neutroni termici per un atomo fermo e libero è, come già abbiamo visto, isotropa nel sistema del CM. Quando questo atomo è legato in una molecola, in un urto elastico con un neutrone termico, la diffusione è ancora isotropa nel sistema del CM, ma è l'intera molecola che interviene nell'urto. Quindi, in questo ultimo caso, il legame fra la diffusione nel sistema del Laboratorio con quella nel sistema del CM non dipende solamente dalle masse del neutrone e dell'atomo considerato, ma anche dalla massa dell'intera molecola. Così, se la massa della molecola è molto grande rispetto a quella del neutrone e dell'atomo, il sistema del CM coincide con il sistema del Laboratorio e l'urto diviene, in questo caso, isotropo nel sistema del Laboratorio.

Introduciamo ora la sezione d'urto elastica per un atomo legato ad una molecola che indichiamo con σ_b . Fra σ_b e la sezione d'urto elastica per l'atomo libero, σ_f , esiste una relazione, ricavata da Fermi nel 1936 e che generalmente si indica come effetto della massa ridotta, che, quando la massa della molecola è infinita, diviene

$$\sigma_b = \sigma_f \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \quad (I)$$

dove A è il numero di massa del nucleo considerato. Dalla (1) si vede come il rapporto σ_b / σ_f aumenta al diminuire di A così da raggiungere il massimo per l'idrogeno. In questo caso la (1) diviene $\sigma_b = 4 \sigma_f$ e poichè per l'idrogeno $\sigma_f \approx 20$ barns, $\sigma_b \approx 80$ barns in accordo con i dati sperimentali.

Un altro fenomeno importante al fine del calcolo delle sezioni d'urto per neutroni termici è quello dell'interferenza delle onde neutroniche diffuse dai vari nuclei costituenti una molecola o un cristallo, dato che, quando E è minore di circa 1 ev, la lunghezza d'onda dei neutroni

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{2,86 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{E(\text{ev})}} \text{ cm} \quad (2)$$

è confrontabile con le distanze interatomiche dei nuclei del cristallo.

Infatti un'onda monocromatica incidente su di un sistema di centri diffusori genera un'onda diffusa la cui intensità è data dal quadrato dell'ampiezza totale dell'onda. Poichè questa può essere espressa come la somma delle ampiezze delle singole onde diffuse dai vari centri diffusori, l'intensità totale sarà, in generale, diversa dalla somma delle intensità delle singole onde a causa dei termini di interferenza.

Questi termini di interferenza dipendono dalla struttura del sistema diffondente e dalla lunghezza d'onda dell'onda incidente. Gli effetti di interferenza sono descritti come una diffusione coerente a cui corrisponde una sezione d'urto di diffusione coerente, σ_{co} , definita come la sezione d'urto per la diffusione che produce onde che possono interferire. La sezione d'urto di diffusione incoerente, σ_{inc} , corrisponde invece alle onde diffuse che non possono dare origine a fenomeni di interferenza. La suddivisione della sezione d'urto in parte coerente e incoerente, anche se non necessaria, è utile sia per l'interpretazione e la discussione dei risultati sperimentali sia per il calcolo delle sezioni d'urto. Infatti in alcuni casi, come per esempio per l'idrogeno a causa della forte dipendenza dallo spin delle forze neutrone-protone,

σ_{co} può essere trascurata rispetto alla σ_{ine} , mentre in altri casi, come per il berillio, il carbonio e l'ossigeno, la diffusione è quasi interamente coerente. Concludiamo notando che altre sorgenti di incoerenza, oltre a quelle dovute allo spin dei nuclei, sono l'incoerenza isotopica e l'incoerenza dovuta all'agitazione termica dei nuclei.

CAPITOLO II

SEZIONI D'URTO EFFICACI

I. INTRODUZIONE

Consideriamo un sistema costituito da due componenti e siano $f(\vec{v})$, $F(\vec{V})$ e \vec{v}, \vec{V} le funzioni di distribuzione e le velocità delle particelle delle due specie del sistema. Il termine di collisione dell'equazione di Boltzmann per la funzione di distribuzione f è

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int (f'_B - ff_B) g_f S_f(g_f, \chi, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi d_3 v_B +$$

$$+ \int (f'F' - fF) g S(g, \chi, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi d_3 V \quad (1)$$

dove $g_f = |\vec{v}_B - \vec{v}|$ e $g = |\vec{V} - \vec{v}|$ sono i moduli delle velocità relative delle particelle interagenti, $S_f(g_f, \chi, \varphi)$ e $S(g, \chi, \varphi)$ le funzioni di distribuzione angolare (sezioni d'urto differenziali) nel sistema di riferimento del centro di massa (C.M.) per urto elastico. Spesso uno dei costituenti il sistema ha una densità molto minore di quella dell'altro, tanto da poter trascurare gli urti delle particelle poco dense fra di loro e da poter assumere che la funzione di distribuzione delle particelle più dense non è "influenzata" dalla presenza delle altre particelle. In questo caso diremo che il sistema è costituito da particelle "field" (quelle più dense) e da particelle "test", e il termine di collisione dell'equazione di Boltzmann delle particelle test può essere linearizzato. Così se $\int f d\vec{v} \ll \int F d\vec{V}$ e la sezione d'urto totale $\sigma_f = \int S_f(g_f, \chi, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi$ è dello stesso ordine di grandezza della sezione d'urto $\sigma = \int S(g, \chi, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi$ la (1) è ben approssimata dalla espressione

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int (f'F' - fF) g S(g, X, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi d_s V \quad (2)$$

Nei reattori nucleari la densità dei neutroni ($\approx 10^{10}$ per cm^3) è molto minore di quella degli altri costituenti, moderatore, combustibile, refrigerante ecc. ($\approx 10^{23}$ per cm^3) e i neutroni possono essere considerati particelle test del sistema. Il termine di collisione dell'equazione di Boltzmann per la funzione di distribuzione dei neutroni è perciò dato con buona approssimazione dalla (2), se per semplicità consideriamo un sistema di due soli componenti, neutroni e atomi del moderatore o del combustibile; nella (2) la funzione F delle particelle field può essere considerata una funzione nota. Tuttavia è opportuno notare che in molti casi l'ipotesi che i neutroni non alterano la F è più restrittiva di quella che permette di trascurare gli urti neutrone-neutrone. Infatti in un reattore nucleare il calore prodotto dalle fissioni è spesso tale da influenzare in maniera non trascurabile la F che viene quindi a dipendere dalla funzione di distribuzione dei neutroni. Nel caso di un reattore operante a potenza stazionaria, la dipendenza di F da f può essere ottenuta attraverso l'equazione di trasferimento del calore; questa equazione accoppiata a quella di Boltzmann, dove F dipende dalla distribuzione della temperatura, rende il problema autoconsistente. Normalmente per i reattori statici questo accoppiamento non gioca un ruolo essenziale e i problemi statici possono essere risolti in modo soddisfacente anche ricorrendo alla sola equazione di Boltzmann linearizzata. La situazione è completamente diversa nei problemi connessi con la dinamica dei reattori di potenza elevata per i quali deve assolutamente essere portata in conto la dipendenza di F da f se si vogliono ottenere risultati realistici. In questo caso, anche utilizzando i grossi calcolatori elettronici oggi disponibili, devono essere introdotte pesanti semplificazioni nello studio del trasporto dei neutroni. E' necessario ora fare alcune considerazioni. Sappiamo che quando un neutrone intera-

gisce con un nucleo possono aver luogo diversi tipi di reazioni: diffusione elastica o anelastica, assorbimento, fissione nucleare, ecc., mentre nella (2), da come è stata ottenuta, $S(g, \chi, \varphi) d(\cos \chi) d\varphi$ è la sezione d'urto per urto elastico; cioè la (2) è il termine di collisione dell'equazione di Boltzmann se si assume che le interazioni fra le particelle siano di tipo elastico solamente. Tuttavia possiamo ricavare facilmente il termine di collisione tenendo conto anche dell'assorbimento dei neutroni oltre che della diffusione elastica. Infatti, se assumiamo che la sezione d'urto totale $\sigma(g)$, funzione del modulo della velocità relativa \vec{g} , sia data da

$$\sigma(g) = \sigma_s(g) + \sigma_a(g) = \int S(g, \chi, \varphi) d(\cos \chi) d\varphi + \sigma_a(g) \quad (3)$$

dove con σ_s abbiamo indicato la sezione d'urto di diffusione elastica e con σ_a quella di assorbimento che tiene conto della cattura radiativa, della fissione nucleare, delle reazioni (n, α) ecc., e ripetiamo il procedimento che ci ha portato a scrivere la (1) e la (2), otteniamo

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} d_3 v d_3 r dt &= \left\{ \int f' F' g S(g, \chi, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi d_3 v - \int f F g \sigma(g) d_3 v \right\} d_3 v d_3 r dt = \\ &= \left\{ \int (f' F' - f F) g S(g, \chi, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi d_3 v - \int f F g \sigma_a(g) d_3 v \right\} d_3 v d_3 r dt \end{aligned} \quad (4)$$

che esprime la variazione, nell'intervallo di tempo dt , del numero dei neutroni in $d\vec{r}$ e $d\vec{v}$ dovuta sia agli urti elastici che all'assorbimento con gli atomi del moderatore; i neutroni veloci prodotti dalle fissioni sono considerati separatamente come parte del termine di sorgente.

Nei paragrafi che seguono considereremo il termine di perdita e quello di guadagno separatamente per definire le sezioni d'urto "efficaci".

2. TERMINE DI PERDITA; SEZIONI D'URTO EFFICACI

Il numero di neutroni che nell'intervallo di tempo dt e nell'elemento di volume $d\vec{r}$ escono per urto da $d\vec{v}$ è, nei limiti di validità dell'integrale di collisione di Boltzmann e per un sistema isotropo,

$$d_3 v d_3 r dt \int F g \sigma(g) d_3 V \quad (5)$$

dove $\sigma(g)$ è la sezione d'urto totale, equazione (3). Definiamo sezione d'urto macroscopica "efficace" la quantità

$$\sum_{eff} (v) = \frac{1}{v} \int F g \sigma(g) d_3 V \quad (6)$$

La (5) diviene quindi

$$v \int \sum_{eff} (v) d_3 v d_3 r dt = v \int N \sigma_{eff}(v) d_3 v d_3 r dt \quad (7)$$

dove $\sigma_{eff}(v)$ è la sezione d'urto microscopica "efficace" ed $N(\vec{r}, t)$ è la densità degli atomi del moderatore. $\sum_{eff}(v)$ è tale, perciò, che moltiplicata per $v\vec{v}(\vec{v})d\vec{v}$ dà il numero totale di urti per unità di volume e di tempo che i neutroni con velocità \vec{v} in $d\vec{v}$ compiono se si tiene conto dell'agitazione termica dei nuclei del moderatore, cioè se si tiene conto dell'effetto Doppler. \sum_{eff} rappresenta quindi la sezione d'urto macroscopica totale osservata sperimentalmente (nel sistema del laboratorio) con esperimenti di trasmissione. Dato che consideriamo un mezzo isotropo, cioè un sistema costituito da sottosistemi (molecole o cristalli) orientati a caso, la probabilità di urtare non dipende dalla direzione del moto dei neutroni, ma solo dal modulo di \vec{v} . Usando la (6) possiamo definire anche un libero cammino medio "efficace" per i neutroni di velocità \vec{v} , $l_{eff}(v)$, che tiene conto degli effetti di agitazione termica, espresso dalla relazione $l_{eff}(v) = 1/\sum_{eff}(v)$. Dalla (3) abbiamo che $\sum_{eff}(v) = \sum_{s,eff}(v) + \sum_{a,eff}(v)$ con

$$\sum_{s,eff}(v) = \frac{1}{v} \int F g \sigma_s(g) d_3 V \quad ; \quad \sum_{a,eff}(v) = \frac{1}{v} \int F g \sigma_a(g) d_3 V \quad (8)$$

Il termine di perdita dell'equazione di Boltzmann è quindi

$$v f \sum_{a, eff} (v) + v f \sum_{s, eff} (v) \quad (9)$$

Notiamo che se la sezione d'urto di assorbimento è proporzionale all'inverso della velocità nel sistema di riferimento solidale con il nucleo urtato, cioè se $\sigma_a(g) = \gamma/g$ con $\gamma = \text{costante}$, come si verifica per i moderatori più usati, anche la sezione d'urto di assorbimento efficace è proporzionale all'inverso della velocità nel sistema del laboratorio, risultando essere del tipo $1/v$; infatti si ha

$$v \sum_{a, eff} (v) = \int F g \frac{\gamma}{g} d_3 v = \gamma \int F d_3 v = \gamma N \quad (10)$$

per qualsiasi forma della funzione di distribuzione $F(V)$. Per la $\sum_{s, eff} (v)$ non esiste una espressione semplice e di ampia validità come la (10), anche nel caso di sezione d'urto microscopica costante [$\sigma_s(g) = \text{cost.}$], ma occorre sempre specificare la funzione di distribuzione F del moderatore come vedremo nei prossimi paragrafi. Come abbiamo notato, le $\sum_{s, eff}$ dipendono dalla posizione, ma nelle (8) e nel seguito non indichiamo esplicitamente questa dipendenza. Osserviamo che le $\sum_{s, eff}$ possono dipendere da \vec{r} sia perchè il sistema è eterogeneo, sia perchè la temperatura è funzione della posizione.

3. TERMINE DI GUADAGNO

Il numero di neutroni che in $d\vec{r}$ nell'intervallo di tempo dt acquistano la velocità \vec{v} in $d\vec{v}$ in seguito ad un urto elastico con un atomo del moderatore è

$$d_3 v d_3 r dt \int \int F' g S(g, \chi, \varphi) \sin \chi dx d\varphi d_3 V \quad (11)$$

Introduciamo la densità di probabilità $P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V})$; moltiplicata per $d\vec{v}d\vec{V}$ essa esprime la probabilità che in un urto elastico fra un neutrone e un atomo di velocità \vec{v}' e \vec{V}' rispettivamente, il neutrone abbia dopo l'urto una velocità \vec{v} in $d\vec{v}$ e l'atomo una velocità \vec{V} in $d\vec{V}$.

Dovrà quindi essere verificata la condizione

$$\int P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_3 v' d_3 V' = 1 \quad (12)$$

Avremo anche che

$$f' F' g \sigma_s(g) P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_3 v' d_3 V' d_3 v d_3 V d_3 r dt \quad (13)$$

rappresenta il numero di neutroni che in $d\vec{r}$ nell'intervallo di tempo dt acquistano la velocità \vec{v} in $d\vec{v}$ in seguito ad un urto con un nucleo del mezzo diffondente essendo \vec{v}' e \vec{V}' le velocità delle particelle interagenti e \vec{V} la velocità del nucleo dopo l'urto. Se integriamo la (13) rispetto a \vec{v}' e \vec{V}' dalla relazione

$$\begin{aligned} d_3 r d_3 v dt d_3 v' f' \int F' g \sigma_s(g) P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_3 V' d_3 V = \\ = d_3 r d_3 v dt d_3 v' f' v' \sum_{e_{ij}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) \end{aligned} \quad (14)$$

possiamo definire la sezione d'urto macroscopica efficace per trasferimento di velocità, $\sum_{e_{ij}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) = N \sigma_{e_{ij}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$, che rappresenta la sezione d'urto differenziale realmente osservata nel sistema del laboratorio. Se integriamo la (14) rispetto a \vec{v}' abbiamo, ricordando il significato della (11) e di $\sum_{e_{ij}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$,

$$d_3 r d_3 v dt \int f' v' \sum_{e_{ij}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) d_3 v' = d_3 r d_3 v dt \int f' F' g \sigma_s(g, \chi, \varphi) \sin \chi d\chi d\varphi d_3 V \quad (15)$$

Cioè, introducendo la sezione d'urto efficace $\sum_{e_{ij}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$, la parte di guadagno del termine di collisione dell'equazione di Boltzmann è data da

$$\int f' v' \sum_{e_{ij}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) d_3 v' \quad (15')$$

È importante osservare che, se ricordiamo la (14), la (12) e la (8), vale, come è intuitivo, la relazione

$$\begin{aligned}
 v' \int \sum_{\text{eff}} (\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) d_s v'' &= \int F' g G_s(g) P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_s V' d_s V d_s v'' = \\
 &= \int F' g G_s(g) d_s V' = v' \sum_{\text{eff}} (v')
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Dalle definizioni di sezioni d'urto efficaci, equazioni (6) e (14), vediamo che il calcolo di $\sum_{\text{eff}}(v)$ e $\sum_{\text{eff}}(\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$ dipende dalla funzione di distribuzione degli atomi del moderatore che normalmente, ai fini dei calcoli di fisica dei reattori, sono considerati costituire un sistema allo stato di equilibrio. Si possono quindi calcolare le sezioni d'urto efficaci in ogni punto in termini della temperatura del moderatore supposta funzione nota della posizione.

CAPITOLO III

EQUAZIONE DI BOLTZMANN PER NEUTRONI TERMICI E CALCOLO DI $\Sigma_{seff}(v)$
E $\Sigma_{eff}(v' \rightarrow v)$ PER UN GAS MONOATOMICO

I. EQUAZIONE DI BOLTZMANN

Nei limiti di validità delle ipotesi fatte e dai risultati ottenuti nei paragrafi precedenti, l'equazione di Boltzmann per i neutroni termici è

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + v \Sigma_{seff}(v) + v \Sigma_{aeff}(v) \right] f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \int f' v' \Sigma_{eff}(\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) d_3 v' + S(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (17)$$

dove la sorgente $S(\vec{r}, \vec{v}, t)$ può essere una sorgente radioattiva, o la sorgente neutronica di un acceleratore, costante o variabile nel tempo, e può tenere conto dei neutroni veloci generati dalle fissioni. In questo ultimo caso la sorgente è un termine omogeneo dell'equazione; questo è importante quando sono considerati problemi agli autovalori associati con la criticità. Da come sono stati ottenuti, i coefficienti e il "Kernel di scattering" $\Sigma(\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$, pur riferendosi solamente agli urti elastici, tengono conto dell'effetto Doppler dovuto all'agitazione termica degli atomi del moderatore e hanno una definizione, equazioni (8) e (14), ricavata direttamente dell'equazione di Boltzmann della teoria cinetica dei gas. Se la velocità dei neutroni, \vec{v} , è molto maggiore di quella degli atomi del moderatore, \vec{V} , cioè se siamo interessati a problemi di rallentamento ad energie maggiori di circa 1 ev, la \vec{V} può essere trascurata rispetto a \vec{v} , la velocità relativa $\vec{g} \approx \vec{v}$ e le sezioni d'urto efficaci coincidono con le sezioni d'urto usate nello studio del rallentamento e diffusione dei neutroni veloci. Possiamo generalizzare la (17) assumendo che le Σ_{seff} , Σ_{aeff} e $\Sigma_{eff}(\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$ tengono conto di tutti i possibili tipi di interazione dei neutroni termici con la materia; esse dipendono allora sia dalla struttura ato-

mica che dal comportamento dinamico degli atomi del sistema diffondente. La conoscenza di queste sezioni d'urto è di fondamentale importanza per la soluzione dei problemi di termalizzazione connessi con la fisica dei reattori nucleari. Tuttavia il calcolo di queste grandezze è estremamente complicato data la complessità della dinamica del moto degli atomi che inoltre, per molte sostanze (soprattutto allo stato liquido), non è conosciuta dettagliatamente. E' opportuno osservare che, anche nei casi in cui la dinamica dei moti atomici è completamente conosciuta in tutti i suoi particolari, sarebbe estremamente difficile incorporare tutte le informazioni nei codici per calcolatori elettronici usati per la soluzione numerica di problemi di termalizzazione di interesse nella progettazione neutronica dei reattori. Si rende quindi necessario formulare dei modelli per i moti atomici che siano sufficientemente semplici per i calcoli numerici, ma che tengano conto, con ragionevole accuratezza, degli aspetti della dinamica del moto degli atomi del sistema più caratteristici e importanti ai fini del calcolo delle sezioni d'urto. E' perciò importante avere i valori sperimentali della sezione d'urto differenziale per trasferimento d'energia, almeno per alcune energie, onde verificare, dal confronto, la validità del modello usato e delle approssimazioni numeriche spesso necessarie. In assenza di una completa conoscenza sperimentale delle sezioni d'urto, dovranno essere usate quelle ottenute teoricamente, ma verificate per quei valori delle velocità per cui la $\sigma(\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$ è nota sperimentalmente. La validità del modello può essere verificata anche dal confronto con esperimenti che determinano certi parametri macroscopici o il flusso neutronico in funzione dell'energia e della posizione; in questo caso bisogna essere sicuri che i calcoli per ottenere i parametri misurati o il flusso non introducano errori non tollerabili dovuti ad approssimazioni numeriche o all'uso di equazioni approssimate. Sono perciò molto utili, in questo caso, calcoli di tipo Monte Carlo.

Se il sistema è costituito da N specie di nuclidi e se indichiamo con N_i e $\sigma_s^i(v)$, $\sigma_a^i(v)$, $\sigma^i(\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$ rispettivamente il numero dei nuclei

per unità di volume e le sezioni d'urto microscopiche dell'iesimo nuclide ($i=1, 2, \dots, \mathcal{N}$), le sezioni d'urto che compaiono nella (17) (tralasciamo di scrivere l'indice eff) sono date da

$$\sum_s(\nu) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} N_i \sigma_s^i(\nu); \quad \sum_a(\nu) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} N_i \sigma_a^i(\nu); \quad \sum(\vec{\nu}' \rightarrow \vec{\nu}) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} N_i \sigma^i(\vec{\nu}' \rightarrow \vec{\nu}). \quad (18)$$

Nell'ambito della fisica del reattore nucleare si è soliti usare come variabili indipendenti l'energia E e il versore $\vec{\Omega}$ che determina la direzione del moto dei neutroni, piuttosto che il vettore velocità \vec{v} . Ricordando che $d\vec{v} = v^2 dv d\vec{\Omega} = \frac{v}{m} dE d\vec{\Omega}$ con $d\vec{\Omega} = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$ e $\vartheta =$ angolo polare, $\varphi =$ azimut, $m =$ massa dei neutroni, si ha

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{m}{v} f(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t); \quad \sum(\vec{\nu}' \rightarrow \vec{\nu}) = \frac{1}{v^2} \sum(\vec{\nu}' \rightarrow \vec{\nu}; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega});$$

$$\frac{v}{m} \sum(\vec{\nu}' \rightarrow \vec{\nu}) = \sum(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \quad (19)$$

come si può verificare facilmente dato che devono valere le relazioni:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) d_3\vec{v} = f(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dE d_2\vec{\Omega} \quad (20)$$

$$\sum(\vec{\nu}' \rightarrow \vec{\nu}) d_3\vec{v} = \sum(\nu' \rightarrow \nu; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) dv d_2\vec{\Omega} = \sum(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) dE d_2\vec{\Omega}$$

Se introduciamo il flusso angolare $\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = v f(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \frac{v^2}{m} f(\vec{r}, \vec{v}, t)$, la (17) diviene

$$\left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \sum_s(\nu) + \sum_a(\nu) \right] \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) =$$

$$= \int \sum(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) dE' d_2\vec{\Omega}' + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (21)$$

Una notevole semplificazione si ha se si può porre

$$\sum(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \sum(E' \rightarrow E; \mu_0) \quad (22)$$

oppure

$$v^2 \sum(\vec{\nu}' \rightarrow \vec{\nu}) = \frac{1}{2\pi} \sum(\nu' \rightarrow \nu; \mu_0) \quad (23)$$

dove $M_c = \cos \vartheta_c = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$ è il coseno dell'angolo ϑ_c fra i due versori $\vec{\Omega}$ e $\vec{\Omega}'$. La (22), o la (23), è valida se la diffusione del neutrone dopo l'urto non dipende né dalla direzione del neutrone prima dell'urto, né dall'azimut φ del versore $\vec{\Omega}$ rispetto all'asse polare diretto secondo $\vec{\Omega}'$. Questo si verifica esattamente in un gas, in un liquido o in un solido amorfo ed è anche una buona approssimazione per un solido policristallino. Nel caso di un cristallo singolo o per ogni materiale composto di cristalli fortemente anisotropi, questa approssimazione non è buona.

Spesso nei problemi di termalizzazione è sufficiente conoscere la sezione d'urto per trasferimento d'energia $\Sigma(E' \rightarrow E)$. Definiamo quindi

$$\Sigma(E' \rightarrow E) = \int \Sigma(E' \rightarrow E; \mu_0) d\mu_0 \quad (24)$$

oppure

$$\Sigma(v' \rightarrow v) = \int \Sigma(v' \rightarrow v; \mu_0) d\mu_0 \quad (25)$$

Nel caso che il flusso ϕ sia indipendente da \vec{r} ed $\vec{\Omega}$ l'equazione del trasporto diviene, avendo indicato con φ il flusso scalare

$$\varphi(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\Omega$$

$$\left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \Sigma_s(v) + \Sigma_a(v) \right] \varphi(E, t) = \int \Sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E', t) dE' + S(E, t) \quad (26)$$

2. CALCOLO DI $\Sigma_{s,eff}(v)$ e $\Sigma_{eff}(v' \rightarrow v)$ PER IL CASO DI UN GAS MONOATOMICO E PER $\sigma_s(g)$ COSTANTE

Supponiamo che il moderatore possa essere assimilato ad un gas monoatomico ideale all'equilibrio termodinamico con temperatura T_0 . La funzione di distribuzione F è quindi uguale alla distribuzione Maxwell-

liana, $M(V)$,

$$\frac{1}{N} F(V) = M(V) = \left(\frac{M}{2\pi KT_c} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{MV^2}{2KT_c}} 4\pi V^2 \quad (27)$$

dove $M=Am$ è la massa degli atomi del gas ed m la massa dei neutroni.

Supponiamo inoltre che, per le energie termiche, $\sigma_s(g)$ sia costante uguale a σ_0 . Sotto queste condizioni la sezione d'urto efficace di diffusione diviene

$$\begin{aligned} \sum_{s \neq H} \sigma_s(v) &= \frac{N\sigma_0}{v} \int g V^2 \left(\frac{M}{2\pi KT_c} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{MV^2}{2KT_c}} dV d\Omega = \\ &= \frac{N\sigma_0}{\beta^2} \left[\left(\beta^2 + \frac{1}{2} \right) \text{Erf}(\beta) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \beta e^{-\beta^2} \right] \end{aligned} \quad (28)$$

dove $\beta^2 = Amv^2 / 2KT$ e $\text{Erf}(x)$ è la funzione errore

$$\text{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du \quad (29)$$

Notiamo che per grandi valori dell'energia dei neutroni la (28) diviene $\sum_{s \neq H} \sigma_s \approx N\sigma_0$ (ricordiamo che $\lim_{x \rightarrow \infty} \text{Erf}(x) = 1$). Infatti per le energie dei neutroni molto maggiori di KT il moto di agitazione termica degli atomi del gas non influenza la sezione d'urto. Quando l'energia cinetica dei neutroni, E , è piccola si ha $\sum_{s \neq H} \sigma_s(v) \propto \frac{N\sigma_0}{v}$; cioè $v \sum_{s \neq H} \sigma_s(v) = \text{costante}$. Infatti se v è piccolo può essere trascurato rispetto a V , e $v \sum_{s \neq H} \sigma_s(v)$ dà il numero di urti che gli atomi del moderatore fanno nell'unità di tempo contro i neutroni considerati fermi. Notiamo anche che la sezione d'urto di diffusione efficace data dall'equazione (28) dipende dalla temperatura T_c del moderatore.

Per T_c tendente a zero $\sum_{s \neq H} \sigma_s$ tende a $N\sigma_0$; infatti per $T_c = 0$ gli atomi del gas monoatomico sono fermi. Il fattore che moltiplica $N\sigma_0$ nella (28) tiene conto dell'agitazione termica degli atomi del gas e si chiama fattore dovuto all'effetto Doppler.

Anche se i moderatori più importanti non sono gas monoatomici, il risultato ottenuto, espresso dalla equazione (28), è di notevole

interesse perché mostra, almeno qualitativamente, l'andamento delle sezioni d'urto di diffusione per le energie inferiori ad 1 ev e può servire di confronto per sezioni d'urto ottenute con modelli più realistici, ma anche più complessi.

Integriamo ora la (13) rispetto a V ; abbiamo

$$d_3 r d_3 v' d_3 V' d_3 v dt f' F' \sigma_s(q) g \int P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_3 V = \quad (30)$$

$$= d_3 r d_3 v' d_3 V' d_3 v dt f' F' g \sigma_s(q) P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v})$$

che dà il numero dei neutroni che in $d_3 r$ nell'intervallo di tempo dt acquistano la velocità \vec{v} in $d_3 v$ in seguito ad un urto con un nucleo essendo \vec{v}' e \vec{V}' le velocità prima dell'urto e quando il nucleo urtato viene lasciato con qualsiasi velocità. Il significato della densità di probabilità $P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v})$ è evidente dalla definizione che si ricava dalla (30). Se sono verificate le condizioni di validità delle (22), si ha $v^2 P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}) = \frac{1}{2\pi} P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v, \mu_c)$ dove α è l'angolo fra i due vettori \vec{v}' e \vec{V}' ; $\mu_c = \cos \vartheta_c$ è il coseno dell'angolo fra \vec{v}' e \vec{v} . Cioè la densità di probabilità che, in un urto fra un neutrone e un nucleo di velocità \vec{v}' e \vec{V}' rispettivamente, il neutrone acquisti la velocità \vec{v} dipende solo dai moduli di \vec{v}' , \vec{V}' e \vec{v} e dai coseni degli angoli α e ϑ_c . Avremo

$$v' \sum_{\pm} (v' \rightarrow v) = \int F' g \sigma_s(q) P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v, \mu_c) d_3 V' d \mu_c = \quad (31)$$

$$= \int F' g \sigma_s(q) P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v) d_3 V'$$

avendo definito $P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v) = \int P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v, \mu_c) d \mu_c$.

Se nella (17) sostituiamo $\sum (\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$ con la (14) otteniamo

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + v \sum_{\pm} (v) \right] f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \int f' F' g \sigma_s(q) P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_3 V' d_3 v' \quad (32)$$

Moltiplichiamo ambo i membri della (32) per $d\vec{v} = v^2 dv d\vec{\Omega}$; abbiamo

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + v \sum_{e_{\pm}}(\nu) \right] f(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) dv d_1 \Omega =$$

$$= dv d_1 \Omega \int f(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) F' g \sigma_s(g) v'^2 P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_3 v' d_3 V' d_3 v' d_2 \Omega'$$
(33)

dato che $v^2 f(\vec{v}) = f(v, \vec{\Omega})$. Se integriamo la (33) rispetto a $d\vec{v}$ otteniamo, ricordando la (30),

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + v \sum_{e_{\pm}}(\nu) \right] f(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) =$$

$$= \int f(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) F' g \sigma_s(g) \frac{1}{2\pi} P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v, \mu_0) d_3 V' d_3 v' d_2 \Omega'$$

avendo posto, nell'ipotesi di validità della (22), $\frac{1}{2\pi} P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v, \mu_0) = v^2 P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v})$. Se f non dipende da $\vec{\Omega}$ e da \vec{r} integrando rispetto ad $\vec{\Omega}$ si ha, dalla (31),

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + v \sum_{e_{\pm}}(\nu) \right] f(v, t) = \int f(v', t) F' g \sigma_s(g) P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v) d_3 V' d_3 v' =$$

$$= \int f(v', t) v' \sum_{e_{\pm}}(v' \rightarrow v) dv'$$

Consideriamo ora il caso che il moderatore sia un gas monoatomico ideale all'equilibrio termodinamico alla temperatura T_0 . Inserendo la (27) nella (31) e per $\sigma(g) = \sigma_0$ costante, si ha

$$v' \sum_{e_{\pm}}(v' \rightarrow v) = N \sigma_0 \int g \left(\frac{M}{2\pi K T_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{M V'^2}{2 K T_0}} V'^2 2\pi P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v) d \cos \alpha d V' \quad (34)$$

Se la diffusione è isotropa nel sistema del centro di massa si ottiene facilmente

$$P(v', V', \cos \alpha \rightarrow v) = \begin{cases} \frac{2v'}{v_{max}^2 - v_{min}^2} & \text{per } v_{min} \leq v \leq v_{max} \\ 0 & \text{per } \begin{cases} v < v_{min} \\ v > v_{max} \end{cases} \end{cases} \quad (35)$$

dove v_{\max} e v_{\min} sono i moduli della più grande e della più piccola velocità che può avere il neutrone dopo l'urto. Per dimostrare la

(34) ricordiamo che

\vec{v}_c = velocità del centro di massa

\vec{v}^* = velocità del neutrone nel sistema CM

$$v^* = v'^* = g \frac{M}{m+M} \quad a)$$

$$\vec{g} = \vec{v}' - \vec{v}^* \quad b) \quad (36)$$

$$g^2 = v'^2 + v^{*2} - 2v'v^* \cos \alpha \quad c)$$

$$v^2 = v_c^2 + v^{*2} + 2v_c v^* \cos \beta \quad d)$$

dove β è l'angolo fra i vettori \vec{v}_c e \vec{v}^* .

Notiamo che β è diverso dall'angolo χ di diffusione del neutrone nel sistema CM. Come si può vedere dalla (36,d), per dati valori di \vec{v}' e \vec{v}^* , cioè fissati v', v^* e $\cos \alpha$, la v può variare solo fra un v_{\max} e un v_{\min} dati dalle espressioni

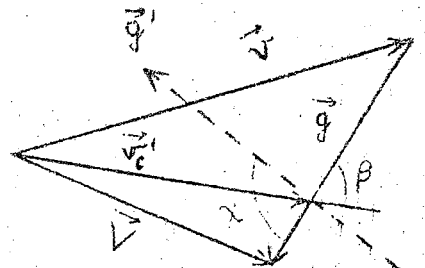
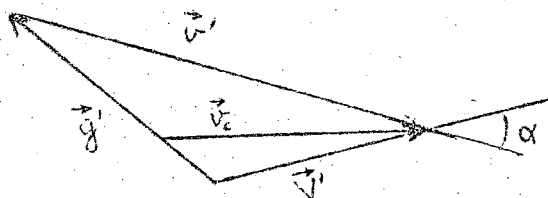
$$v_{\max} = v_c + v^{*2} = v_c + \frac{M}{m+M} g \quad a) \quad (37)$$

$$v_{\min} = v_c - v^{*2} = v_c - \frac{M}{m+M} g \quad b)$$

Il rapporto fra l'energia finale e quella iniziale nel sistema del laboratorio è lineare in $\cos \beta$; si ha infatti

$$\frac{E}{E'} = \frac{v^2}{v'^2} = \frac{v_c^2 + v^{*2} + 2v_c v^* \cos \beta}{v'^2} \quad (38)$$

Se la diffusione è isotropa nel sistema CM, qualunque superficie infinitesima sulla sfera avente centro coincidente con il CM può essere attraversata dai neutroni diffusi dall'urto con uguale probabilità.



Tutti i $\cos\beta$ sono in questo caso ugualmente probabili e la probabilità che il neutrone sia diffuso nell'angolo solido $2\pi d\cos\beta$ è quindi $d\cos\beta$. Dalla (38) la probabilità che l'energia finale del neutrone sia fra E ed $E + dE$ è perciò costante se $E_{\min} \leq E \leq E_{\max}$, mentre è uguale a zero se $E < E_{\min}$ oppure $E > E_{\max}$. Naturalmente questo non è più vero se l'urto non è isotropo nel sistema del CM.

Per quanto riguarda l'ipotesi di diffusione isotropa nel sistema del CM, ricordiamo che per i neutroni lenti solo le onde S sono diffuse apprezzabilmente dai nuclei. Dato che per le onde S la diffusione elastica è isotropa nel sistema del CM, l'ipotesi fatta è molto valida.

Introduciamo l'espressione di $P(v', V', \cos\alpha \rightarrow v)$ data dalla (35) nella (34). Si ottiene, dopo integrazione, se si pone $\eta = \frac{A+1}{2\sqrt{A}}$ e

$$\rho = \frac{A-1}{2\sqrt{A}}$$

$$\sum_{v \neq v'} (v' \rightarrow v) = \eta^2 \frac{N G_0 v}{v'^2} \left\{ E_{\text{erf}} \left[\left(\frac{m}{2KT_0} \right)^{\frac{1}{2}} (\eta v - \rho v') \right] \pm E_{\text{erf}} \left[\left(\frac{m}{2KT_0} \right)^{\frac{1}{2}} (\eta v + \rho v') \right] + \right.$$

$$\left. + \exp \left[\frac{m}{2KT_0} (v'^2 - v^2) \right] \left(E_{\text{erf}} \left[\left(\frac{m}{2KT_0} \right)^{\frac{1}{2}} (\eta v' - \rho v) \right] \mp E_{\text{erf}} \left[\left(\frac{m}{2KT_0} \right)^{\frac{1}{2}} (\eta v' + \rho v) \right] \right) \right\} \quad (39)$$

Il segno superiore deve essere usato per $v' > v$, mentre quello inferiore per $v' < v$. Poichè $\sum_{v \neq v'} (v' \rightarrow v) dv = \sum_{E \neq E'} (E' \rightarrow E) dE$ avremo

$$\sum_{E \neq E'} (E' \rightarrow E) = \eta^2 \frac{N G_0}{2 E'} \left\{ \exp \left(\frac{E'}{KT_0} - \frac{E}{KT_0} \right) \left[E_{\text{erf}} \left(\eta \sqrt{\frac{E'}{KT_0}} - \rho \sqrt{\frac{E}{KT_0}} \right) \mp E_{\text{erf}} \left(\eta \sqrt{\frac{E'}{KT_0}} + \rho \sqrt{\frac{E}{KT_0}} \right) \right] + \right.$$

$$\left. + E_{\text{erf}} \left(\eta \sqrt{\frac{E}{KT_0}} - \rho \sqrt{\frac{E'}{KT_0}} \right) \mp E_{\text{erf}} \left(\eta \sqrt{\frac{E}{KT_0}} + \rho \sqrt{\frac{E'}{KT_0}} \right) \right\} \quad (40)$$

dove il segno superiore deve essere usato se $E' < E$ e quello inferiore

re se $E' > E$. Nel caso di un gas di protoni le (39) e (40) assumono una forma particolarmente semplice. Si ha infatti $\eta = 1$, $\xi = 0$ e

$$\sum_{\epsilon_H} (E' \rightarrow E) = \frac{N G_0}{E'} \exp \frac{E' - E}{KT_c} \operatorname{Erf} \left(\sqrt{\frac{E'}{KT}} \right), \quad \text{per } E' < E$$

$$\sum_{\epsilon_H} (E' \rightarrow E) = \frac{N G_0}{E'} \operatorname{Erf} \left(\sqrt{\frac{E}{KT_0}} \right) \quad \text{per } E' > E \quad (41)$$

Notiamo per ultimo che la (28) e la (39) o (40), valide per un gas monoatomico, vengono spesso usate con una massa degli atomi del moderatore diversa dalla massa vera (più grande di quella vera). Questa massa viene scelta opportunamente per tener conto degli effetti del legame chimico.

3. BILANCIO DETTAGLIATO

Come abbiamo visto nella seconda parte, all'equilibrio termodinamico deve essere verificata l'uguaglianza

$$f' F' g(g, \chi) d_1 d_2 d_3 v' d_3 V' = f F g S(g, \chi) d_1 d_2 d_3 v d_3 V \quad (42)$$

dove f e F sono le distribuzioni Maxwelliane dei neutroni e degli atomi del moderatore alla stessa temperatura T_c . La (42), con l'introduzione della densità di probabilità $P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V})$, e ricordando la (13), diviene

$$f' F' g \tilde{G}(g) P(\vec{v}', \vec{V}' \rightarrow \vec{v}, \vec{V}) d_3 v' d_3 v d_3 V' d_3 V = f F g \tilde{G}(g) P(\vec{v}, \vec{V} \rightarrow \vec{v}', \vec{V}') d_3 v d_3 v' d_3 V d_3 V' \quad (43)$$

Integrando ambo i membri della (43) rispetto a $d_3 v d_3 v'$ e ricordando la definizione di $\sum (\vec{v}' \rightarrow \vec{v})$, equazione (14), si ha

$$v' M(v') \sum (\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) = v M(v) \sum (\vec{v} \rightarrow \vec{v}') \quad (44)$$

dove $M(v)$ è la distribuzione Maxwelliana per i neutroni. Se moltiplichiamo la (44) per $d_3 v d_3 v'$ e ricordiamo che $M(v) d_3 v = M(E) dE d_2 \Omega$; $d_3 v' = \frac{V}{m} dE d_2 \Omega$;

$\frac{1}{n} \sum (\vec{v}' \rightarrow \vec{v}) = \sum (E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$, otteniamo

$$M_{\phi}(E') \sum (E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = M_{\phi}(E) \sum (E \rightarrow E'; -\vec{\Omega} \rightarrow -\vec{\Omega}') \quad (45)$$

dove $M_{\phi}(E) = E/(KT)^2 \exp(-E/KT)$ è il flusso Maxwelliano.

Se vale l'equazione (22), la (45) diviene

$$M_{\phi}(E') \sum (E' \rightarrow E; \mu) = M_{\phi}(E) \sum (E \rightarrow E'; \mu). \quad (46)$$

Se integriamo la (46) rispetto a μ , otteniamo

$$M_{\phi}(E') \sum (E' \rightarrow E) = M_{\phi}(E) \sum (E \rightarrow E') \quad (47)$$

Le relazioni espresse dalle (44), (45), (46) e (47) devono essere soddisfatte da qualsiasi "Kernel di scattering" e sono perciò indipendenti dalla struttura e dalla dinamica del sistema diffondente; esse rappresentano un aspetto del principio del bilancio dettagliato. Il principio del bilancio dettagliato è di notevole importanza pratica sia nell'ambito delle misure delle sezioni d'urto, sia come criterio di validità dei Kernels calcolati o misurati; è anche di grande ausilio nella preparazione dei parametri nucleari termici.