

01

© 1991

КЛАСТЕРНЫЙ СИНТЕЗ: ВОЗМОЖНЫЙ МЕХАНИЗМ АКТИВАЦИИ

Ц.С. В а н, В.Б. Л е о н а с,
А.А. П я р н п у у

В работе [1] сообщалось об аномально высоком выходе продуктов реакции $D-D$ -синтеза, инициировавшихся соударениями ускоренных кластеров из молекул D_2O с мишенью TiD .

Однозарядные кластеры тяжелой воды $(D_2O)_N \cdot D^+$ (далее $(D_2O)_N$), размеры которых варьировались в пределах $25 < N \leq 10^3$ ускорялись до энергий $E_{кл} \leq 300$ кэВ и бомбардировали мишень TiD . Реакции синтеза детектировались по выходу высокоэнергичных продуктов в канале с образованием трития (1 МэВ) и протона (3 МэВ); измеренный выход на 10 и более порядков величины превысил ожидавшийся на основе оценок для $D-D$ столкновений с относительными скоростями, соответствовавшими скорости разогнанного кластера. Вероятность реакции на один кластер оценивается величиной 10^{-11} – 10^{-12} для использованного в [1] диапазона энергий пучка. Измерения показали также, что при фиксированной энергии $E_{кл}$ выход продуктов является функцией размера с выраженным максимумом в области значений $N \sim 10^2$. С другой стороны, для кластеров фиксированного размера ($N = 150$) регистрируемый выход обнаруживает быстрый рост (в 20 раз при изменении энергии от 225 до 300 кэВ). Этот результат и другие более поздние измерения [2] исключают возможность объяснения аномального выхода присутствием в пучке кластеров примеси высокоэнергичных ионов D^+ , OD^+ .

Исходя из известной зависимости сечения реакции от энергии

$$\sigma(E) = (Q/E) \exp(-A/\sqrt{E}) = (Q/E) \exp(-B\sqrt{r_{D-D}}),$$

($Q = 0.55 \cdot 10^{-22}$ см²кэВ; $A = 31.28$ кэВ^{1/2}, $B = 26.06$ Å - известные константы, E - относительная энергия столкновения, r_{D-D} - расстояние наибольшего сближения дейтронов), авторы [1] качественно объяснили наблюдения на основе представлений о сопровождающем соударение ударном сжатии вещества кластера и мишени, т.е. резком повышении плотности и температуры дейтерия.

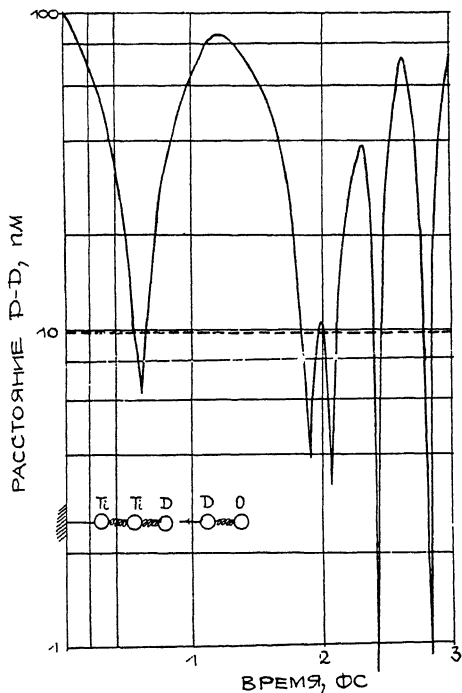
Неожиданные результаты [1] инициировали экспериментальные [3] и теоретические [4, 5] усилия, направленные на подтверждение и объяснение наблюдений. В недавней работе [12] были выполнены измерения зависимости выхода реакции от энергии и раз-

мера кластеров. Была подтверждена теоретическая зависимость выхода и получена иная зависимость от размера кластеров. Это различие обусловлено лучшей сепарацией пучка по размерам в работе [12] (относительная ширина на полувысоте распределения по массам в пучке уменьшена до 5% по сравнению с 40% в [1]).

Из-за соотношения масс эффективность энергообмена атомов O (с ними связано 80% начального запаса энергии) и атомов D , ударника и мишени будет низкой. Вытравливание энергий не успевает осуществиться до разлета, поскольку, согласно оценке, характерная длина пробега такого энергообмена ($\lambda_E \approx 20 \text{ \AA}$) сравнима с линейными размерами ($d_{кл} \approx 10-40 \text{ \AA}$) кластеров. При низкой эффективности столкновительного энергообмена основную роль в запуске реакций должны играть первые столкновения, отвечающие неравновесным условиям.

Настоящая работа посвящена выявлению и численному анализу возможного вклада наиболее эффективных траекторий, реализующихся при соударении кластера с поверхностью дейтерированной мишени.

Очевидным критерием отбора таких траекторий является обеспечение наиболее тесного сближения атомов D . В указанном смысле выделенными оказываются траектории, отвечающие столкновениям в линейной цепочке атомов ударника и мишени - в цепочке $Ti - D - D - O$. Ясно, что для отдельного ударяющего кластера благоприятная ориентация (цепочка) может с некоторой вероятностью реализоваться при параллельности вектора скорости кластера и линии связи $D - O$ молекулы D_2O . Остальные молекулы кластера не будут в этом приближении влиять на процесс столкновения в цепочке. В этом случае сближение атомов D будет определяться полным импульсом (и энергией) фрагмента $D - O$ и возникает возможность эффективной „накачки“ относительной энергии столкновения. При численном моделировании таких траекторий мы использовали оправданное приближение классической механики и пренебрегли ионизационными потерями в процессе столкновения. В расчетах межатомные парные взаимодействия описывались кулоновским отталкиванием для дейтронов и потенциалами из работ [6, 7] для других пар. На рисунке показана модель использованной цепочки и временная развертка типичной траектории относительного движения атомов D в цепочке (моделировался удар кластера с $N = 100$, $E_{кл} = 300 \text{ кэВ}$). Пунктиром показано расстояние наибольшего сближения свободных дейтронов при значении относительной скорости, соответствующей скорости налетающего кластера. Характерной особенностью траекторий является многократность столкновения с достижением минимального r_{D-D} после третьего, четвертого колебания, когда относительная энергия столкновения оказывается близкой к половине начальной кинетической энергии фрагмента $E(D - O)$. Траекторный расчет выявляет динамику перекачки энергии; в частности, аналогичная рисунку развертка скоростей атомов цепочки показывает, что в ходе первых колебаний происходит передача энергии от атома O к атомам D . Минимальное зна-



Временная развертка изменений межатомного расстояния при столкновении в цепочке $Ti - D - D - O$. Расстояния измеряются в пикометрах, время - в фемтосекундах.

чение r_{D-D} отвечает максимуму набранной относительной скорости атомов D и на порядок меньше такого для столкновения свободных атомов той же скорости.

Столкновения атомов D в цепочке только в первом приближении можно рассматривать как свободные. Из расчетов следует, что в момент достижения максимального сближения атомов D расстояния r_{D-O} , $r_{Ti-D} = 0.2-0.4 \text{ \AA}$.

т.е. близки к характерным величинам атомных радиусов. Поэтому, наряду с энергетической активацией реакций, следует ожидать включения еще одного канала активации - эффективного понижения кулоновского барьера за счет экранирования электронами, входящими в оболочки тяжелых атомов. Эта экранировка будет обеспечивать дополнительное уменьшение достигаемых r_{D-D} [8], однако в данных расчетах она не учитывалась.

В рамках моделирования кластерных соударений изучались: зависимость r_{D-D} от размера N - энергии столкновения; эффективность энергопередачи - перехода энергии отдельной молекулы в относительную энергию столкновения атомов D ; изотопные эффекты замены атомов D в кластере и мишени на атомы H ; эффект тяжелых атомов (Ti , O) в матрицах мишени и кластера другими атомами (C , S и др.); зависимость r_{D-D} от прицельного расстояния и угла наклона линий связи.

Результаты проведенных расчетов показали: для столкновения в линейной цепочке резко повышается эффективность энергопередачи, и за счет этого (даже без учета экранировки) может быть получен выигрыш в значении туннельной экспоненты ($\exp(-\sqrt{V}r_{D-D})$). Так, для системы $Ti - D - D - O$ при $E_{кл} = 300 \text{ кэВ}$ выигрыш составляет 10-30 порядков величины в случае N , изменяющегося от 25 до 10^3 . Полученный выигрыш относительной энергии для столкновений в цепочке близок к m_o/m_D . Таким образом, для этой кон-

фигурации действительно имеется эффект „накачки“, т.е. передачи до половины полной кинетической энергии фрагмента $D-O$ в относительную энергию столкновения $D-D$. Отметим, что близкая проблема перераспределения энергии за счет многократных столкновений при рассеянии на поверхности рассматривалась в [9].

Замена атомов D на H в кластере или мишени приводит к уменьшению выхода реакции (для $E_{\text{кл}} = 300$ кэВ, $N = 10^2$) на четыре-шесть порядков соответственно для системы $Ti-D-D-O$. Это согласуется с результатами [1]. Аналогичные результаты получены и для мишени из дейтерополиэтилена.

Моделирование энергетической зависимости выхода для фиксированного размера ($N = 150$) [1] кластера приводит к росту выхода в 100 раз при экспериментальном значении 20. Это согласие вполне приемлемо, если учитывать разброс по размерам кластеров в бомбардирующем пучке [1]. Зависимость выхода от размера кластера воспроизвести в распадах не удается, однако это можно объяснить плохой массовой селекцией кластеров в эксперименте и таким образом ненадежностью экспериментальной зависимости от размера.

Расчеты обнаружили высокую чувствительность эффекта накачки к вариациям прицельного расстояния и относительного наклона линий связи. Сечения столкновений (πb^2), обеспечивающих нужный эффект накачки, близки к значениям, экспериментально найденным для соответствующих энергий в работе [10].

Результаты динамических расчетов показывают возможность реализации траекторий, обеспечивающих высокую вероятность прохождения кулоновского барьера реакции синтеза. Однако для объяснения наблюдений необходимо оценить статистический эффект подобных траекторий, т.е. необходимо оценить вероятность реализации столкновительных конфигураций типа цепочки. В значительной степени вероятность будет определяться геометрической структурой кластера и мишени, т.е. характером пространственного распределения линий связи $Ti-D$ в мишени и $D-O$ в кластере.

Некоторые указания на характер распределения молекулярных осей в кластере воды могут быть получены из [11], где отмечена преимущественность ориентации молекул с фрагментами $O-H$ вдоль радиуса сферического кластера и атомами H , „смотрящими“ наружу.

В заключении отметим, что в настоящей работе показано, что для соударений кластеров $(D_2O)_N$ столкновительные конфигурации типа линейных цепочек обеспечивают значительное увеличение вероятности реакции синтеза. На этой основе можно объяснить аномально большой выход продуктов реакции $D-D$ синтеза, инициируемого бомбардировкой дейтерированных мишеней ускоренными кластерами тяжелой воды. Однако механизм активации за счет использования эффекта накачки в специфических столкновительных конфигурациях исключает объявляющуюся в [1] возможную перспективу энергетического выхода кластерного синтеза.

- [1] Beuhler R.J., Friedlander G., Friedman L. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 1262.
- [2] Beuhler R.J., Chu J.J., Friedlander G., Friedman L., Kunzman W. // J. Phys. Chem. 1990. V. 94. P. 6001.
- [3] Fallavier M., Kemmler J., Kirsh R., Poizat J.C., Remilieux J., Thomas J.P. // Phys. Rev. Lett. 1990. V 65. P. 621.
- [4] Echenique P.M., Manson J.R., Ritchie R.H. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 1413.
- [5] Carraro C., Chen B.Q., Schramm S., Koonin S.E. // Phys. Rev. A. 1990. V. 42. P. 1379.
- [6] Dygo A., Turos A. // NIM B. 1987. V. 18. P. 115.
- [7] Nikulin V.A., Gaydaenko V.I. // Chem. Phys. Lett. 1970. V. 7. P. 280.
- [8] Arista N.R., Gras-Marti A., Barragiola R.A. // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. P. 6873.
- [9] Битенский А.А., Парилис Э.С. // ЖЭТФ. 1988. Т. 48. С. 661.
- [10] Arnold W.R., Phillips J.A., Sawaer G.A., Stovall E.J., Tuck J.L. // Phys. Rev. 1954. V. 93. P.483.
- [11] Barnett R.N., Landman U., Cleveland C.L., Jortner J. // J. Chem. Phys. 1988. V. 88. P. 4429.
- [12] Bae J.K., Lorents D.C., Young S.E. Preprint (submitted to Phys. Rev. Lett., Febr. 1991).

Институт прикладной физики
и вычислительной математики,
Пекин

Поступило в Редакцию
22 июля 1991 г.

Институт проблем механики
АН СССР

Вычислительный центр
АН СССР