

01;05;12

©1994 г.

НЕРАВНОВЕСНЫЙ ФЕРМИ-КОНДЕНСАТ АТОМОВ ДЕЙТЕРИЯ В МИКРОПОЛОСТЯХ КРИСТАЛЛОВ И ПРОБЛЕМА РЕАЛИЗАЦИИ БЕЗБАРЬЕРНОГО ХОЛОДНОГО ЯДЕРНОГО СИНТЕЗА

В.И.Высоцкий, Р.Н.Кузьмин

Киевский университет им. Т.Г.Шевченко, 252057

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова, 119899

(Поступило в Редакцию 14 октября 1993 г.)

Исследуется новый механизм реализации реакции холодного ядерного синтеза в кристаллах за счет квантово-механического "снятия" барьера межчастичного взаимодействия в ферми-конденсате частиц в пустотелых микрополостях кристаллов. С учетом особенностей пространственного знакопеременного характера парного межчастичного потенциала показано, что эффект "снятия" барьера имеет место только в микрополостях оптимального размера при флуктуационном неравновесном состоянии ферми-конденсации умеренно малого числа частиц. Показано, что для реализации обнаруженного эффекта безбарьерного синтеза обязательным является термоциклирование кристаллической матрицы для удовлетворения взаимно противоречивых требований быстрого заселения необходимого числа квантовых состояний в полости и последующей ферми-конденсации флуктуационного типа.

В работе [1] была предложена идея реализации механизма безбарьерного холодного ядерного синтеза в кристаллах, являющаяся развитием общих принципов безбарьерного ядерного взаимодействия в кристаллах, изложенных в [2,3]. Суть явления безбарьерного синтеза связана с квантовым "подавлением" всех видов локального электромагнитного взаимодействия (включая кулоновское отталкивание ядер дейтерия на малом расстоянии) в ферми-конденсате атомов дейтерия D , заполняющих все нижние квантовые состояния вплоть до уровня Ферми E_F в пустотелых микрополостях оптимального радиуса R_0 в объеме палладия или титана.

Для выяснения особенностей механизма безбарьерного взаимодействия рассмотрим поведение дейтонов d , попавших в ходе диффузии или любого другого процесса во внутрикристаллическую полость. При выходе из металла в полость дейтон захватывает свободный электрон из металла и превращается в атом дейтерия D , как это имеет место на поверхности металла при обратной диффузии в окружающую

среду. В полостях имеет место квантование состояний частицы с индивидуальными (без учета влияния других атомов) волновыми функциями $\Psi_n(\mathbf{r})$ и спектром энергии E_n .

Если оказываются обеспеченными условия, когда средняя (по пространственным и спиновым переменным) энергия взаимодействия

$$\langle V \rangle = \sum_{m \neq n}^N V_{nm}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)$$

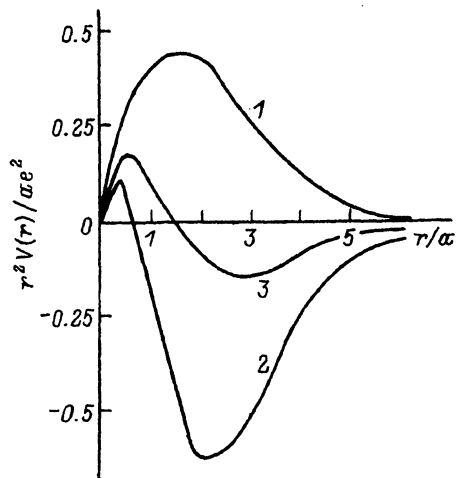
каждого из атомов со всеми остальными мала по сравнению с расстоянием до ближайшего свободного уровня ΔE и столь же малыми являются недиагональные матричные элементы этого взаимодействия, то в соответствии с теорией возмущений движение каждого из атомов является независимым и, несмотря на взаимодействие с другими атомами, характеризуется той же одночастичной волновой функцией $\Psi_n(\mathbf{r})$ из полного взаимоортогонального решения $\Psi = \|\Psi_i(\mathbf{r}_j)\|/\sqrt{N!}$, что и при отсутствии остальных $N - 1$ атомов. Этому случаю соответствует такая ситуация, когда вероятность нахождения каждой частицы в любом месте полости (в том числе и в месте расположения другой частицы) определяется не крайне слабым туннельным эффектом, задаваемым конкретным видом $V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)$, как при наличии парного межчастичного взаимодействия в отсутствие внешнего квантующего поля, а величиной $|\Psi_n(\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_m)|^2$, которая вообще не зависит от $V(\mathbf{r})$ и определяется только характером квантующего поля микрополости. Близкая ситуация реализуется в заполненной Ферми-зоне проводимости в металлах, где вид волновых функций электронов в основном задается граничными условиями на поверхности. При этом скорость (вероятность) парной реакции между ядрами d конкретных атомов дейтерия D , находящихся в состоянии $\Psi_n(\mathbf{r})$ и $\Psi_m(\mathbf{r})$, задается простым соотношением

$$\lambda_{nm} = C \int_{\Omega} |\Psi_n(\mathbf{r})|^2 |\Psi_m(\mathbf{r})|^2 d\Omega, \quad (1)$$

являющимся очевидным обобщением стандартного выражения для скорости парной реакции, но без учета внешнего воздействия, $\lambda = C |\Psi(0)|^2$. В последнем соотношении $C \approx 2 \cdot 10^{-16} \text{с}^{-1} \text{см}^{-3}$ — константа ядерного взаимодействия при dd -синтезе, $\Psi(0)$ — волновая функция одной частицы (одного ядра) в месте расположения другого, Ω — объем квантующей полости. В системе из N частиц вероятность синтеза на любом из ядер атомов дейтерия равна

$$\lambda = \sum_{m \neq n}^N \lambda_{nm} \approx (N - 1)\lambda_0, \quad \lambda_0 \approx C/\Omega.$$

Кроме того, реализация условий $V_{nn} \rightarrow 0$, $V_{nm} \rightarrow 0$, свидетельствующих о том, что одночастичные волновые функции атомов дейтерия D для пустой микрополости $\Psi_n(\mathbf{r})$ являются собственными функциями квантованного газа при наличии многих частиц, автоматически обосновывает в этом случае исходную идею об атомарном D (не молекулярном D_2) состоянии дейтерия в микрополости. При нарушении этих



Структура потенциала взаимодействия двух атомов дейтерия для параллельной ориентации спинов $V^{\uparrow\uparrow}(r)$ (1), антипараллельной ориентации $V^{\downarrow\downarrow}(r)$ (2) усредненной спиновой ориентации $\langle V^\sigma(r) \rangle_\sigma = \{V^{\uparrow\uparrow}(r) + V^{\downarrow\downarrow}(r)\}/2$ на равновероятно заселенных уровнях квантового движения в полости. Значения энергии и расстояния нормированы на e^2/a и a .

условий (например, в микрополостях неоптимального радиуса $R \neq R_0$) основным состоянием дейтерия будет молекулярное D_2 , не образующее необходимого ферми-конденсата.

Исследуем предпосылки выполнения необходимых требований.

Для атомов дейтерия, находящихся на квантованных уровнях энергии, вклад в парную энергию взаимодействия дают составляющие, учитывающие как дальнедействующее дисперсионное притяжение, так и ближнедействующее кулоновское отталкивание ядер и обменное паулевское взаимодействие, имеющее разный знак для параллельной и антипараллельной ориентации σ спинов частиц. При взаимно независимом квантовании каждой из частиц в яме вероятности обеих поляризаций при заселении уровней равны. На рисунке представлена точная структура нормированного на $a e^2 / r^2$ потенциала взаимодействия двух атомов дейтерия $V(r)$ для параллельной (1), антипараллельной (2) и усредненной (3) спиновых ориентациях σ [1,4]. В области $r \ll a$ потенциал имеет чисто кулоновскую форму $V(r) = e^2/r$. Целесообразность представления потенциала взаимодействия именно в форме комбинации $r^2 V(r)$ очевидна, так как только в такой форме $V(r)$ входит во все исследуемые матричные элементы

$$V_{nm} = \iint \Psi_n^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \Psi_m(\mathbf{r}) r^2 dr d\Phi.$$

Из рисунка следует, что в противовес устоявшемуся представлению область чисто кулоновского взаимодействия $r \ll a$ вовсе не является определяющей в межатомном (включая межъядерное) взаимодействии, все характеристики которого задаются матричными элементами. Всюду выше и далее $a = \hbar^2 / m_e e^2$.

После полного усреднения потенциала

$$\langle V \rangle = (N-1) V_{nn} \equiv (N-1) \lll V^\sigma(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) \ggg_\sigma \ggg_{\mathbf{r}_n} \ggg_{\mathbf{r}_m} \quad (2)$$

с использованием квазиклассических волновых функций находим

$$V_{nn} \approx (R_0 - R) \alpha_0; \quad \alpha_0 \approx 10^{-5} e^2 / a^2; \quad R_0 \approx 4A; \quad |R_0 - R| / R \ll 1. \quad (3)$$

Для определения условий, при которых $\langle V \rangle / \Delta E \rightarrow 0$, рассмотрим особенности заселения уровней E_n .

Атомы дейтерия являются фермионами. Для них заселение состояний определяется статической Ферми-Дирака и характеризуется энергией Ферми

$$E_F = (\hbar^2 / 2M)(6\pi^2 N / \Omega g)^{2/3}, \quad g = 2,$$

которая определяется из условия

$$N = \int_0^{E_F} \frac{dn}{dE} dE.$$

Здесь $dn/dE = M^{3/2} \sqrt{E} g \Omega / \pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}$ — плотность состояний в объеме Ω . Если $E_F \gtrsim KT$, что может быть обеспечено в равновесных условиях при достижении определенной критической плотности частиц в полости

$$\rho_0 = N_0 / \Omega, \quad N_0 = \Omega (2ME_F)^{3/2} / 3\pi^2 \hbar^3, \quad E_F = KT, \quad (4)$$

то все уровни энергии вплоть до E_F оказываются занятыми и имеет место автоматическая реализуемость требования, предъявляемого в теории возмущений к недиагональным матричным элементам энергии взаимодействия, являющейся возмущением

$$|V_{nk} / (E_n - E_k)| \ll 1. \quad (5)$$

Здесь квантовые числа конечных состояний относятся к свободным уровням E_k , состоящим на большое расстояние $(E_k - E_F)$ от низко-расположенных уровней E_n и отличающихся от их квантовых чисел n на много единиц. Оба эти обстоятельства ведут к удовлетворению условия (5).

Суммируя, отметим, что требование реализации условий безбарьерного синтеза в равновесной среде сводится к требованию предварительного достижения критической плотности частиц ρ_0 в яме оптимального радиуса R_0 .

Первое из этих требований приводит к очень большому времени ожидания (времени летаргии) синтеза t_0 , необходимому для накопления в полости критического числа частиц N_0 . Это время может быть определено исходя из соотношения

$$N_0 \approx \pi R_0^2 \eta j t_0, \quad (6)$$

в котором j — плотность диффузионного тока дейтонов в кристалле, а η — коэффициент захвата в полость.

Если исходить из стандартного (для многочастичной равновесной ферми-системы с $N \gg 1$) требования $E_F \gtrsim KT$, то при плотности диффузионного тока $j \approx 1 \text{ мкА/см}^2$, $\eta \approx 0.5$ и при $T = 300 \text{ К}$ имеем $N_0 \approx 10^3$, $t_0 \approx 10 \text{ ч}$. Только начиная с такого времени в статистически равновесном ферми-ансамбле конденсированных атомов дейтерия выполняются условия безбарьерного ядерного синтеза. После t_0 его интенсивность

имеет статистически равновесную структуру со средним интервалом между последовательными одиночными реакциями

$$\Delta t \approx 2/\pi R_0^2 \eta j. \quad (7)$$

При приведенных выше параметрах $\Delta t \approx 100$ с.

Временная зависимость такого равновесного синтеза определяется как температурной зависимостью плотности диффузионного тока $j \sim \exp(-\varepsilon/KT)$ (закон Аррениуса), где ε — энергия активации примесного атома дейтерия в элементарной ячейке матрицы, так и зависимостью критического числа частиц от температуры ($N_0 \sim T^{3/2}$) (4) при условии $E_F \approx KT$. В итоге имеем $t_0 \sim T^{3/2} \exp(\varepsilon/KT)$. Оптимальная температура, при которой минимизируется время летаргии реакции t_0 , равна $T_0 = 2\varepsilon/3K$. Например, для палладия ($\varepsilon \approx 0.256$ эВ) $T_0 = 1980$ К, а для титана ($\varepsilon \approx 0.54$ эВ) $T_0 = 4170$ К. Ясно, что обе эти температуры в экспериментах по ХЯС недостижимы. В частности, при комнатной температуре $T = 300$ К время летаргии t_0 увеличивается по сравнению со случаем T_0 в 225 раз для Pd и в $5.6 \cdot 10^6$ раз для Ti! Из такого анализа очевидно, что реально ХЯС в термодинамически равновесной среде может наблюдаться только при использовании термоциклирования — заселения состояний в потенциальной яме (в микрополости) при максимально высокой температуре T_1 с $j_{\max} \sim \exp(-\varepsilon/KT_1)$ и последующей ферми-конденсации при низкой температуре T_2 с $N_{0(\min)} \sim T_2^{3/2}$. Большинство успешных экспериментов подтверждает необходимость проведения таких циклов, что ранее было непонятно.

Отметим еще одно важное и решающее обстоятельство. Дело в том, что использование для формирования ферми-конденсата в микрополостях близкого к оптимальному $R_0 \approx 4$ А радиуса требования $E_F \gtrsim KT$, справедливого для очень больших статистически равновесных ансамблей, приводит к чрезмерно жестким оценкам. При его применении необходимая критическая плотность частиц в полости составляет очень большую величину, достигающую $\rho_0 \approx 10^{25} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300$ К и $\rho_0 \approx 10^{24} \text{ см}^{-3}$ при $T = 70$ К. При такой плотности нарушаются исходные предпосылки о газовой фазе, парном взаимодействии и независимом квантовании атомов дейтерия в полости. Сверхохлаждение матрицы до $T \lesssim 1$ К для уменьшения критической плотности $\rho_0 \sim T^{3/2}$ трудно в реализации. Ниже нами предлагается принципиально другой механизм квантово-безбарьерного синтеза с резко уменьшенным значением ρ , реализуемый даже при комнатной температуре за счет учета специфики ферми-конденсации неравновесного типа в системах с умеренно малым числом частиц $N \ll N_1$.

Напомним, что формирование ферми-конденсата в микрополости оптимального радиуса необходимо для полного заполнения достаточно большого числа нижних уровней. Критическое число этих заполненных состояний, заполняемых для выполнения условий, накладываемых на недиагональные матричные элементы энергии полного межатоминого взаимодействия, может быть не очень большим (10–20). В таком малочисленном ансамбле резко возрастает вероятность появления неравновесных состояний и становится возможной ситуация, когда даже при достаточно высокой температуре в системе флуктуационным пу-

тем формируется полностью заполненный ферми-слой, что является предпосылкой безбарьерного взаимодействия. Оценим этот эффект.

С учетом того что вероятность заполнения состояния с энергией E_i равна

$$f_i = \{1 + \exp [(E_i - \mu)/KT]\}^{-1}$$

(μ — химический потенциал), полная вероятность заполнения N_1 уровней в интервале энергий $[E_j, E_{j+N_1}]$ в ансамбле из N частиц ($N_1 \leq N$) равна

$$f = \prod_{i=j}^{j+N_1} f_i = \exp \left\{ - \sum_{i=j}^{j+N_1} \ln [\exp [(E_i - \mu)/KT] + 1] \right\}.$$

Переходя от суммирования к интегрированию с помощью плотности состояний dn/dE , окончательно находим

$$f = \exp \left\{ - \int_{E_j}^{E_{j+N_1}} \ln [\exp [(E - \mu)/KT] + 1] \frac{dn}{dE} dE \right\}. \quad (8)$$

В интересующем нас случае не очень низких температур распределение Ферми переходит в распределение Больцмана с μ в виде ^[5]

$$\mu = KT \ln \left[N(2\pi\hbar^2/MKT)^{3/2}/g\Omega \right].$$

В итоге искомая вероятность неравновесной ферми-конденсации равна

$$f = \exp \left\{ (N_1\mu/KT) - \int_{E_j}^{E_{j+N_1}} (E/KT) \frac{dn}{dE} dE \right\} =$$

$$= \left\{ N(2\pi^2\hbar^2/MKT)^{3/2}/g\Omega \right\}^{N_1} \exp \left\{ -\sqrt{2}Mg\Omega(E_{j+N_1}^{5/2} - E_j^{5/2})/\pi^2\hbar^35KT \right\}. \quad (9)$$

С учетом найденной вероятности f скорость (вероятность в единицу времени) реакции синтеза (2) в одной микрополости преобразуется к виду

$$\lambda \approx C(N_1 - 1)f/\Omega. \quad (10)$$

Сделаем численные оценки. При $E_j = 0$, $E_{j+N_1} = E_F(N_1)$, что соответствует полностью заполненной неравновесной ферми-сфере из N_1 частиц, имеем $f \approx 10^{-17}$ (при $T = 300$ К, $N_1 = 10$, $N = 60$) и $f \approx 10^{-8}$ (при $T = 70$ К, $N_1 = 10$, $N = 60$). Такое количество частиц N_1 в ферми-сфере удовлетворяет критериям теории возмущений, а итоговая плотность газа $\rho = N/\Omega \approx 10^{22}$ см⁻³, которой соответствует среднее межатомное расстояние $\langle r \rangle \approx 4$ Å, является вполне приемлемым для использования газового приближения и парных взаимодействий.

Для получения значений f скорость реакции синтеза в микрополости равна $\lambda \approx 10^{-11} \text{ с}^{-1}$ при $T = 300 \text{ К}$ и $\lambda \approx 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ при $T = 70 \text{ К}$. С учетом возможного числа $S_0 \approx 10^2 - 10^{10}$ микрополостей оптимального размера в образце (это реальные цифры, так как исследование структуры дейтерированных кристаллов в β -фазе свидетельствует об общей концентрации микрополостей в палладию в интервале диаметров от 10 до 1000 Å на уровне $S \approx 10^{15} \text{ см}^{-3}$) полная скорость реакции во всем объеме $S_0\lambda$ соответствует экспериментальным данным на уровне Джоунса и лучше [6]. В такой неравновесной модели очевидно целесообразность термоциклирования с максимально быстрым вводом в полость N частиц за счет диффузии при более высокой температуре T_1 за время $t_1 \sim \exp(\varepsilon/KT)$ и последующая ферми-конденсация части их N_1 при более низкой температуре $T_2 < T_1$ за время $t_2 \sim \lambda^{-1} \sim T_2^{3N_1/2}$.

Отметим, что все вышеотмеченные особенности реализации безбарьерного синтеза в полной мере присущи не только микросферам близкого к оптимальному R_0 радиуса R с допустимым разбросом $|R - R_0|/R \lesssim 10^{-1}$ [1], но и, например, микрощелям со среднеквадратичной оптимальной шириной $L_0 \approx 4 - 5 \text{ Å}$ [1]. Общая концентрация микротрещин при дейтерировании образца достигает $S \gtrsim 10^{12} \text{ см}^{-3}$ [6], причем в начальный момент их формирования все они "проходят" через размер L_0 .

В связи с вышеприведенным анализом становится возможным примерное прогнозирование сценария холодного ядерного синтеза в кристаллах при их дейтерировании. В течение начального этапа заселения состояний в полости (времени квантовой летаргии t_1, t_0) синтез невозможен. В зависимости от плотности тока диффузии этот этап соответствует интервалу от нескольких минут до многих часов, уменьшаясь с ростом температуры. В ходе и после начального заполнения квантовых состояний увеличивается вероятность f (9) неравновесной ферми-конденсации, причем требование увеличения f для ускорения синтеза удовлетворяется при понижении T после начального заселения $N \approx 50 - 100$ состояний. В этот период возможна реализация безбарьерного синтеза. Если в этот период не провести резкого снижения температуры $T_1 < T_2$, то скорость реакции из-за малости f будет крайне малой. При этом вследствие дальнейшего роста населенности N концентрация дейтронов $\rho = N/\Omega$ в микрополостях (микрощелях) настолько возрастает, что перестает быть законным допущение о парном характере взаимодействия и газовой фазе дейтронов. В итоге нарушаются критерии взаимно независимого квантования ($V_{nn} \approx 0, |V_{nk}|/(E_n - E_k) \ll 1$). В результате такого неоптимального процесса (невключения механизма охлаждения при достижении оптимальной концентрации $\rho \lesssim 10^{22} \text{ см}^{-3}$) в ходе дальнейшего повышения концентрации $\rho \gtrsim 2 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ в микрополостях начинает формироваться упорядоченная дейтериевая микрокристаллическая структура. Дальнейший диффузионный перенос в полость при этом, естественно, прекращается. При более высокой температуре образуется не микрокристалл, а жидкость или очень плотный газ, но во всех этих случаях синтез невозможен.

В заключение можно указать, что близкий сценарий холодного ядерного синтеза и использование структур с аналогичной исследу-

емой выше хорошо развитой внутренней поверхностью (микроканалы, микрощели, микрополости) характерны для наиболее убедительных американско-японских экспериментов на нейтринном детекторе Камиоканде по генерации нейтронов в ходе затвердевания внутренне структурированного бетона на основе тяжелой воды [7] и в экспериментах группы А.Н. Барабошкина [8] с использованием образцов из оксидных вольфрамовых бронз с микроканалами диаметром 10–15 А.

Список литературы

- [1] *Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н.* Препринт ин-та теоретической физики АН УССР. № ИТФ-90-82 р. Киев, 1991.
 - [2] *Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н.* // Письма ЖТФ. 1981. Т. 7. Вып. 16. С. 981–985.
 - [3] *Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н.* // ЖТФ. 1983. Т. 53. Вып. 9. С. 1861–1863.
 - [4] *Гиршфельдер Дж., Картисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961.
 - [5] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1964.
 - [6] *Царев В.А.* // УФН. 1990. Т. 160. № 11. С. 1–53.
 - [7] *Царев В.А.* // УФН. 1992. Т. 162. № 10. С. 63–91.
 - [8] *Калиев К.А., Барабошкин А.Н. и др.* // Тр. I Междунар. семинара “Диффузионно-кооперативные явления в системах металл-изотопы водорода”. Донецк, 1992. С. 12–13.
-