

01

© 1991 г.

КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В *E*-ЯЧЕЙКЕ

Г. В. Федорович

Рассматривается возможность ускорения реакции синтеза изотопов водорода за счет уменьшения ширины кулоновского барьера при экранировании потенциала свободными электронами. Этот эффект оказывается эффективным в *E*-ячейке — радиационном дефекте, образованном тепловым нейтроном в кристаллической ячейке гидридов некоторых легких элементов. Определен диапазон давлений, при которых сохраняются оптимальные условия кулоновского взаимодействия ядер *H* в *E*-ячейке. Обнаружено, что ядрам *H* энергетически выгодно сближение до расстояний  $\lesssim 0.1$  А. Определена вероятность подбарьерного туннелирования ядер в условиях, характерных для *E*-ячейки. Оценка времени реакции синтеза даст  $\approx 10^{-2} - 10^{+1}$  с.

1. Известно, что для ускорения реакции синтеза изотопов водорода необходимо увеличить вероятность туннелирования сквозь кулоновский барьер одноименно заряженных ядер. При термоядерном синтезе это достигается за счет уменьшения высоты барьера по отношению к энергии сталкивающихся частиц. Существует, вообще говоря, возможность увеличить эту вероятность, уменьшая ширину барьера за счет экранирования потенциала взаимодействия ядер. Если этот эффект описывать множителем Дебая  $\exp(-\lambda r)$ , то показатель экспоненты *W* в квазиклассическом выражении для вероятности туннелирования можно оценить интегралом (см., например, [1])

$$W = \frac{2\sqrt{M_p}}{\hbar} \int_0^R \sqrt{e^2 \frac{\exp(-\lambda r)}{r} - E} dr, \quad (1)$$

где  $M_p$  — приведенная масса сталкивающихся частиц, *E* — энергия относительного движения, *R* — точка поворота при классическом движении.

Если экранирование происходит в не слишком плотной плазме, то параметр  $\lambda$  связан с плотностью электронов *n* и их температурой *T* соотношением  $\lambda^2 = 4\pi e^2 n / T$  [2]. В случае вырожденного электронного газа это соотношение остается справедливым, если температуру заменить на энергию Ферми  $\epsilon_F$  из соотношения  $\epsilon_F = (3/2)T$  [3]. Так как величина  $\epsilon_F$  однозначно определяется плотностью электронов  $\epsilon_F = (\hbar^2 / (2m)) (3\pi^2 n)^{2/3}$  (*m* — масса электрона), то параметр экранирования  $\lambda$  вырожденным электронным газом определяется только его плотностью. Ниже будет рассмотрен этот случай.

Для того чтобы дать представление о необходимых для эффективного экранирования масштабах плотности, можно рассмотреть два предельных случая: считать  $E=0$  либо приравнять *E* имеющейся в задаче характерной энергии  $\epsilon_F$ . В каждом из этих случаев интеграл (1) будет функцией только *n*. Графики этих функций приведены на рис. 1. Непосредственно видно, что даже в наиболее благоприятном случае  $E \approx \epsilon_F$  при плотности, характерной для газа свободных электронов в металлах  $n = 10^{22}$  см<sup>-3</sup>, величина  $W = 260$ . Для существенного уменьшения до величин 10—20 (близкие величины *W* характеризуют неэкранированные столкновения при  $E = 1-10$  кэВ, т. е. в плазме с температурой 10—100 млн. К) необходима плотность электронов  $10^{26} - 10^{27}$  см<sup>-3</sup>.

В естественных условиях такие плотности характерны лишь для внутренних оболочек атомов, поэтому для реализации рассматриваемой возможности увеличения вероятности туннелирования необходимы новые физические объекты с параметрами, лежащими далеко за пределами «нормального» состояния вещества. В качестве одного из возможных «претендентов» на роль такого объекта ниже рассмотрен специфический дефект в кристаллической решетке гидридов некоторых легких элементов.

2. Рассматриваем гидрид  $A_xH_y$ , на основе элемента  $A$  с порядковым номером  $Z$  и массовым числом  $N$  ( $x$  и  $y$  определяются химической формулой гидрида). Дефектная ячейка образуется в результате деления ядра атома  $A$  под действием теплового нейтрона. Сечение захвата велико ( $10^3 - 5 \cdot 10^4$  б), если  $Z$  и  $N$  образуют одну из пар (2, 3), (3, 6), (4, 7) или (5, 10) [4]. Наибольший интерес в этом ряду представляют гидриды на основе  ${}^6\text{Li}$  и  ${}^{10}\text{B}$  ( ${}^3\text{He}$  не образует гидридов,  ${}^7\text{Be}$  делится спонтанно с периодом  $\approx 53$  сут.). Если продукты деления покидают ячейку за время, меньшее, чем время перестройки электронной системы ( $10^{-15} - 10^{-8}$  с), то подхвата электронов не происходит. Этому условию удовлетворяет реакция  ${}^6\text{Li} + n \rightarrow {}^4\text{He} + t$ , в которой ядра  $\text{He}$  и  $t$  уносят энергию  $\approx 2$  и  $\approx 2.7$  МэВ соответственно. Ниже будет рассмотрен случай  $Z=3$ ,  $N=6$ .

Осколки деления покидают ячейку за время  $\approx 10^{-17}$  с, что значительно меньше

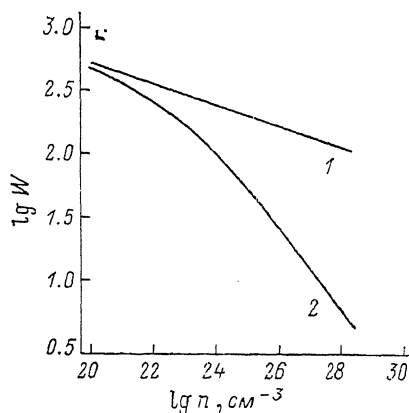


Рис. 1. Зависимость показателя экспоненты в квазиклассическом выражении для вероятности туннелирования от плотности свободных электронов. 1 — нулевая энергия ядер, 2 — построена в предположении  $E = \varepsilon_f$ .

времени перестройки электронной системы. Образующийся дефект (ниже для краткости будем называть его  $E$ -ячейкой) оказывается «переполненным» электронами, составлявшими электронную систему атома  $A$ . Плотность свободных электронов в  $E$ -ячейке характеризуется величиной  $10^{24}$   $\text{см}^{-3}$ , что по оценкам, приведенным в разделе 1, достаточно, чтобы снизить  $W$  примерно втрое по сравнению с эффектом экранирования свободными электронами в металле. Реально, однако, роль свободных электронов этим не ограничивается. Если  $E$ -ячейка существует достаточно долго, то в ней образуется единая электрон-ядерная система, в которой оказывается энергетически выгодным сближение ядер  $H$  до расстояний менее  $10^{-9}$  см, что в свою очередь ведет к дальнейшему снижению  $W$  до значений, представляющих практический интерес.

Определим точнее, что ниже понимается под  $E$ -ячейкой. Будем для конкретности рассматривать исходную кубическую гранецентрированную кристаллическую структуру типа решетки поваренной соли (такая структура характерна для гидрида лития [5]). Разместим центр  $E$ -ячейки в месте расположения разделившегося ядра и соединим прямыми ядра атомов металла, ближайших к центру  $E$ -ячейки. В пространстве эти линии образуют ребра правильного октаэдра (рис. 2), который будем считать границей  $E$ -ячейки. Внутрь  $E$ -ячейки попадают шесть атомов  $H$  со своими электронными системами и те  $Z$  электронов, которые до распада ядра составляли электронную систему центрального атома. К системе  $E$ -ячейки следует также отнести часть электронов, принадлежащих граничным атомам. Здесь целесообразно воспользоваться соображениями Эвальда—Эвьена [6], которые приводят к выводу, что в ячейку от граничных атомов попадает  $4 \cdot Z$  электронов. Таким образом, суммарное число электронов в  $E$ -ячейке  $N_e = 5 \cdot Z + 6$ , в ней могут перемещаться 6 ядер  $H$ .

3. Строгий квантово-механический расчет такой системы вряд ли возможен, но именно большое количество электронов делает целесообразным применение статистических методов, а так как размеры  $E$ -ячейки больше длины волны электронов, то можно использовать квазиклассический вариант этих методов — модель Томаса—Ферми (ТФ) [1].

С целью упрощения расчетов на настоящем этапе целесообразно перейти и к сферической модели  $E$ -ячейки, заменив граничный октаэдр сферой равного объема. Радиус сферы  $R_c$  непосредственно связан с постоянной кристаллической решетки  $a$  соотношением  $R_c = a/\pi^{1/3}$ . Часть  $4eZ$  заряда ядер, находящихся на границе  $E$ -ячейки, будем считать равномерно распределенной по поверхности сферической границы. Заряд  $N_e$  электронов непрерывно распределен в объеме сферы согласованно с распределением электрического потенциала.

Сформулируем основные соотношения, которые будут использоваться в дальнейшем для расчета взаимодействия частиц в  $E$ -ячейке.

1. Связь плотности электронов  $n$  в точке  $r$  с максимально возможным импульсом электронов  $p$  в той же точке

$$n = (p/\hbar)^3/3\pi^2. \quad (2)$$

2. Зависимость максимального импульса  $p$  от потенциала  $\varphi$  электрического поля

$$p^2/2m - e^2 p/\pi\hbar - e\varphi = \text{const}. \quad (3)$$

Здесь первый и последний члены в левой части представляют классические кинетическую и потенциальную энергии электронов. Постоянство разности  $p^2/2m - e\varphi$  есть требование равенства во всех точках химического потенциала электронной системы. В (3) в эту разность введена поправка  $e^2 p/\pi\hbar$ , отражающая роль обменных эффектов [7].

3. Электростатическое уравнение Пуассона для потенциала  $\varphi$

$$\Delta\varphi = 4\pi en - 4\pi \sum_i e_i \delta(r - r_i). \quad (4)$$

В (4) сумма берется по всем ядрам с положительными зарядами  $e_i$ , расположенными в точках  $r_i$ .

Используя произвол в выборе уровня отсчета потенциала, запишем const в правой части (3) в виде  $-me^4/2\pi^2\hbar^2$ , при этом зависимость  $p$  от  $\varphi$ , следующая из (3), примет вид

$$p = me^2/\pi\hbar + \sqrt{2me\varphi}. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (2) и затем в (4), получим уравнение, определяющее  $\varphi$  по заданной величине и расположению положительных зарядов,

$$\Delta\varphi = \frac{4e}{3\pi\hbar^3} \left( \frac{me^2}{\pi\hbar} + \sqrt{2me\varphi} \right)^3 - 4\pi \sum_i e_i \delta(r - r_i). \quad (6)$$

Для определения  $\varphi$  к уравнению (6) необходимо добавить граничные условия на  $\varphi$  при  $r=R_c$ . В практически интересном случае, когда ядра  $H$  находятся вблизи центра  $E$ -ячейки, можно полагать, что в периферийных областях распределение  $\varphi$  мало отличается от сферически-симметричного, при этом граничное условие на  $\varphi$  должно соответствовать выходу из системы со сферически-симметричным распределением заряда суммарной величины  $-5eZ$ , т. е. для  $\varphi$  получим условие

$$\left( \frac{\partial\varphi}{\partial r} \right)_{r=R_c} = -\frac{5eZ}{R_c^2}. \quad (7)$$

Переход к безразмерным переменным производится так же, как и в модели ТФ, однако здесь нецелесообразно включать  $Z$  в безразмеривающие параметры. В частности, масштабом длины является величина

$$d = \left( \frac{3\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{2me^2} = 4.68 \cdot 10^{-9} \text{ см} = 0.468 \text{ \AA}. \quad (8)$$

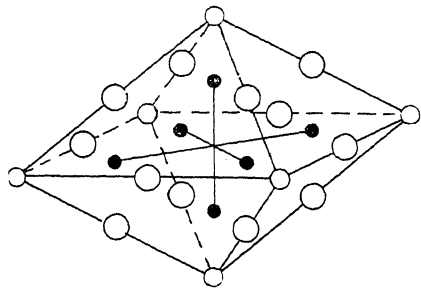


Рис. 2. Пространственная структура  $E$ -ячейки.

Белые круги — атомы металла, черные — изотопы водорода.

Составляющие энергии и давления определялись обычными соотношениями модели ТФ [7].

4. Рассмотрим вопрос о сохранении избыточных электронов в  $E$ -ячейке. Выходу препятствует потенциальный барьер, природа которого обусловлена тем, что в процессе выхода электрон должен включиться в электронную систему одного из атомов металла на границе ячейки, а затем покинуть ее с внешней стороны границы. При этом суммарная энергия электронной системы атома возрастает, этот рост можно определить, используя модель ТФ для одного атома, и принять результат за оценку высоты потенциального барьера.

Т а б л и ц а 1

$x_a$	$R_a, \text{Å}$	$Z=3$		$Z=5$	
		$P, \text{Мбар}$	$\partial E, \text{эВ}$	$P, \text{Мбар}$	$\partial E, \text{эВ}$
1.00	0.47	189.2	113.0	437.7	144.0
2.00	0.94	8.18	33.7	14.2	39.5
3.00	1.40	1.25	15.1	1.62	16.8
4.00	1.87	0.40	6.8	0.25	8.5

В расчетах принималось, что атом (а после присоединения электрона отрицательный ион) ограничен сферой радиуса  $R_a$ , несколько меньшей, чем радиус свободного атома. Определялось приращение суммарной энергии электронов при превращении атома в отрицательный ион в зависимости от величины  $R_a$ , а затем подсчитывалось давление, необходимое для сжатия атома до размера  $R_a$ . Результаты для лития ( $Z=3$ ) и бора ( $Z=5$ ) приведены в табл. 1. Видно, что при  $R_a=1.9 \text{Å}$  (эта величина близка к размеру свободного атома [4]) величина  $P=0.35-0.4 \text{Мбар}$ , необходимая, согласно табл. 1, для такого «сжатия», является расчетной ошибкой. Для свободного атома приращение энергии составляет 8—9 эВ. При оценке эффективности удержания электронов следует иметь в виду, что после деления ядра электроны имеют суммарную энергию, равную энергии полной ионизации атома  $16Z^{2/3}$  эВ, т. е. на каждый электрон приходится энергия  $16Z^{2/3}$  эВ. Следовательно, барьер высотой  $dE=8-9$  эВ не способен удержать электроны в  $E$ -ячейке. Высота барьера  $dE$ , однако, растет с ростом давления. При давлении в несколько десятков Мбар, когда размеры атомов становятся меньше  $1 \text{Å}$ , высота барьера  $dE$  составляет 60—70 эВ, что близко к требуемой величине.

Следует отметить, что из-за невысокой точности расчетов давления в принятой модели результаты, приведенные в табл. 1, дают скорее тенденцию, но не строгие требования на давления. Если, например, сопоставить их с данными, приведенными в [8], то можно убедиться, что размер  $R_{a3} \leq 1 \text{Å}$  достигается для легких элементов уже при  $P \approx 1 \text{Мбар}$ . По-видимому, это относится и к высоте потенциального барьера. Во всяком случае можно полагать, что при достаточно высоких давлениях в кристалле (порядка единиц и десятков Мбар) можно добиться стабильного удержания большей части электронов в  $E$ -ячейке.

5. Основной особенностью явлений в  $E$ -ячейке является изменение суммарной энергии всех электронов (как оставшихся от центрального атома, так и составляющих электронные системы водородных атомов и атомов на границе  $E$ -ячейки) при перемещениях ядер водорода. Результирующий эффект можно описать как образование квазимолекулы, состоящей из шести ядер  $H$  и  $5Z+6$  электронов. Такая квазимолекула обладает большим количеством потенциально возможных конфигураций, отличающихся расположением ядер  $H$ . Среди других наибольший интерес представляют те, при которых вблизи центра  $E$ -ячейки находятся два ядра  $H$ , а остальные образуют внутреннюю оболочку. Для такой конфигурации следует определить равновесное расположение четырех ядер: составляющих оболочку и отдельно двух ближайших к центру. Ниже эти две задачи рассмотрены последовательно, при решении первой предполагается, что два центральных ядра  $H$  находятся точно в центре, а во второй — закрепление оболочки в ее равновесном положении.

На первом этапе заряд четырех ядер считается равномерно распределенным по поверхности сферы радиусом  $r_s$ , что позволяет существенно упростить математическую сторону задачи, внося в нее сферическую симметрию. Заменяя в граничной задаче (6)–(7) функцию  $\varphi$  на  $en(x)/xd$ , для  $u$  получим уравнение

$$u_{xx} = x(b + \sqrt{u|x}) - 4\delta(x - x_s); x_s \quad (9)$$

и граничные условия

$$u(x=0) = 2, \quad (xu_x - u)_{x=x_c} = 5 \cdot Z. \quad (10)$$

Задача решалась численно, после определения  $u$  подсчитывались полные энергии электронной системы и оболочки (так как последняя сдерживается только электрическими силами, то для расчета ее полной энергии использовалась теорема вириала) как функции ее радиуса  $r_s$ . В качестве параметров брались значения  $Z$  и радиуса  $E$ -ячейки. Пример полученных здесь результатов приведен на рис. 3. Даны зависимости энергии электронной системы (штрихпунк-

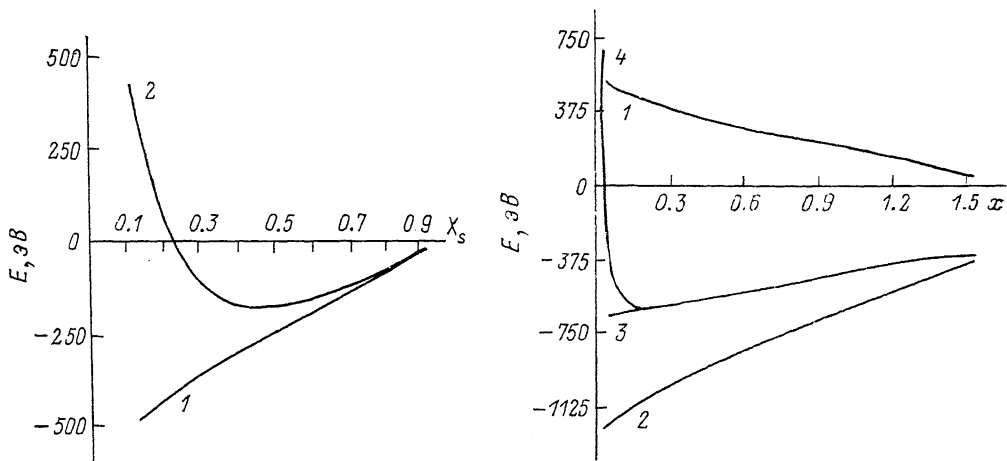


Рис. 3. Зависимость энергии электронной подсистемы (1) и полной энергии электрон-ядерной системы (2)  $E$ -ячейки от безразмерного радиуса  $x_s$  внутренней  $H$ -оболочки.

Рис. 4. Вариации энергии электрон-ядерной системы  $E$ -ячейки в зависимости от расстояния  $x$  двух ядер  $H$  до центра.

1—4 — зависимости кинетической, потенциальной и полной составляющих энергии электронной подсистемы и полной энергии электрон-ядерной системы. Радиус внутренней  $H$ -оболочки принят  $x_s = 0.37$ .

тир) и полной энергии (сплошная линия) электрон-ядерной системы  $E$ -ячейки от  $x_s$  для параметров  $x_c = 1.5$  и  $Z = 2$ . Видно, что изменения энергии характеризуются величинами в сотни эВ; при  $x_s = x_m = 0.48$  суммарная энергия системы минимальна. Эту величину можно считать равновесным радиусом внутренней  $H$ -оболочки в  $E$ -ячейке с двумя ядрами  $H$  в центре. Отметим, что в образующейся потенциальной яме оболочка может совершать колебания, сжимаясь до минимального радиуса  $x_s = 0.18$  (при этом  $r_s = 0.1$  А). При других значениях параметров  $x_c$  и  $Z$  величина  $x_m$  меняется от 0.6 (при  $x_c = 2, Z = 2$ ) до 0.25 (при  $x_c = 1, Z = 5$ ).

На втором этапе определялась зависимость энергии электрон-ядерной системы  $E$ -ячейки от расстояния  $r$  каждого ядра  $H$  до центра. Ядра предполагались расположенными симметрично.

Пример результатов расчета зависимости различных составляющих энергии электрон-ядерной системы  $E$ -ячейки от расстояния ядер  $H$  до центра приведен на рис. 4 (выбрано  $x_c = 1.5, Z = 2, x_s = 0.36$ ). Здесь кривая 1 представляет зависимость полной энергии электронной системы, а кривая 2 — суммарной энергии электрон-ядерной системы. Видно, что на расстоянии  $x_0 = 0.22$  (при этом

$r_0=0.1 \text{ \AA}$ ) суммарная энергия минимальна. Это равновесное положение центральных ядер  $H$  может быть еще ближе друг к другу, если  $H$ -оболочка сжимается до своего минимального радиуса  $x_s=0.18$ . При этом (рис. 5) равновесное положение ядер  $H$  соответствует расстоянию  $x_0=0.16$  ( $r_0=0.07 \text{ \AA}$ ).

6. Определение зависимости суммарной энергии  $E_c$  электрон-ядерной системы от расстояния  $r$  между ядрами  $H$  позволяет вычислить вероятность туннелирования ядер до их слияния. В квазиклассическом приближении эта вероятность определяется интегралом типа (1) с заменой  $e^2 \exp(-\lambda r)/r$  на  $E_c(r)$ . При вычислении интеграла энергию  $E$  следует отсчитывать от дна ямы. Для описанных выше случаев ( $x_c=1.5$ ,  $Z=2$ ,  $x_s=0.37$  и  $\{0.18\}$ ) при  $E=0$  соответствующие величины  $W$  составляют 49 и 42. Реально, однако, можно предположить, что величина  $E$  характеризуется значениями, сопоставимыми с энергией, выделяющейся при сжатии  $H$ -оболочки, т. е.  $E=100-200 \text{ эВ}$ . При таких значениях  $E$  величина  $W$  уменьшается до 20-30.

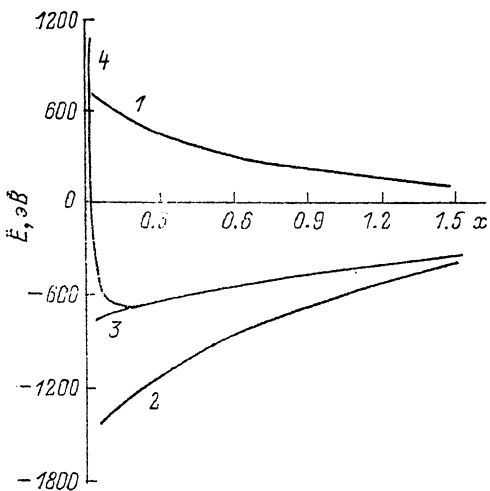


Рис. 5. То же, что и на рис. 4, но для радиуса  $x_s=0.18$ .

В качестве примера в табл. 2 приведены зависимости  $W$  от энергии ядер. Там же даны значения минимального расстояния  $x_0$ , до которого ядра могут сблизиться при классическом движении, обладая указанной энергией. Видно, что уже при энергии 150 эВ ядра могут подойти на расстояние  $r_0 \approx 0.04 \text{ \AA}$  и вероятность туннелирования определяется величиной  $W=28$ .

Полученные результаты позволяют оценить характерное время  $T$  реакции синтеза ядер  $H$  в дефектной ячейке. Если  $n_H$  — плотность ядер (6 ядер в ячейке радиусом  $\approx 0.7 \text{ \AA}$  дают  $n_H=4 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$ ),  $v$  — их скорость,  $\sigma$  — сечение реакции, то

$$T = (n_H v \sigma)^{-1}. \quad (11)$$

Значения сечений реакций  $d+d$  и  $d+t$  при малых энергиях определены в [9]. В принятых выше обозначениях  $\sigma = C W e^{-W}/v$ , где  $C=2 \cdot 10^{-16}$  для первой реакции и  $2 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2/\text{с}$  для второй. Подставляя числовые значения параметров в (11), получим оценку  $T=10^{-2}$  с в наиболее благоприятном случае (реакция  $d+t$ ,  $W=17$ ) либо  $T=2 \cdot 10^4$  с в противоположном случае (реакция  $d+d$ ,  $W=27$ ).

Таблица 2

$E, \text{ эВ}$	$x_0$	$W$
0.000	0.156	42.31
57.94	0.074	33.11
143.1	0.050	27.55
266.0	0.035	23.13
403.1	0.026	20.11

## Выводы

Дефект кристаллической решетки гидрида лития (на основе изотопа  ${}^6\text{Li}$ ), образованный при захвате теплового нейтрона ядром  $\text{Li}$ , представляет собой  $E$ -ячейку — новый физический объект, обладающий уникальным свойством катализировать ядерный синтез изотопов водорода.  $E$ -ячейка стабильна при высоких (порядка десятков Мбар) давлениях в кристалле.

## Список литературы

- [1] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1977. 702 с.
- [2] *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
- [3] *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 790 с.
- [4] *Таблицы физических величин (справочник) / Под ред. И. К. Кикоина.* М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
- [5] *Антонова М. М.* Свойства гидридов металлов (справочник). Киев: Наукова думка, 1975. 127 с.
- [6] *Блейкмор Дж.* Физика твердого тела. М.: Мир, 1988. 608 с.
- [7] *Гамбош П.* Статистическая теория атома М.: ИЛ, 1951. 398 с.
- [8] *Физическая энциклопедия. Т. 1.* М.: Сов. энциклопедия, 1988. С. 548—553.
- [9] *Зельдович Я. Б., Герштейн С. С.* // УФН. 1960. Т. 71. С. 581—630.

Отдел теоретических проблем АН СССР  
Москва

Поступило в Редакцию  
19 февраля 1990 г.  
В окончательной редакции  
23 августа 1990 г.

---