

- [1] Кондратович В.Д., Островский В.Н. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. В. 8. С. 395-407.
- [2] Фабрикант И.И. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. С. 1675-1684.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.
- [4] Яковлева Г.Д. Таблицы функций Эйри и их производных. М.: Наука, 1969.

Институт общей физики
АН СССР, Москва

Поступило в Редакцию
21 марта 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 23 12 декабря 1990 г.

01

© 1990

ОСОБЕННОСТИ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В РАДИАЦИОННОМ ДЕФЕКТЕ КРИСТАЛЛА ГИДРИДА

Г.В. Ф е д о р о в и ч

1. Рассматривается дефектная ячейка кристаллической решетки гидрида A_xH_y на основе элемента A с порядковым номером Z и массовым числом N (x и y определяются химической формулой гидрида), образующаяся в результате деления ядра атома A под действием теплового нейтрона. Процесс характеризуется большим сечением захвата (10^3 - $5 \cdot 10^4$ барн), если Z и N образуют одну из пар (2, 3), (3, 6), (4, 7) или (5, 10) [1]. Наибольший интерес в этом ряду представляют гидриды на основе Li и B (He не образует гидридов, Be делится спонтанно с периодом полураспада 53 суток). 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 ${}^6Li+n \rightarrow {}^4He+t$, в которой ядра He и t уносят энергию ≈ 2 МэВ и ≈ 2.7 МэВ соответственно. Поэтому ниже будет рассмотрен случай $Z=3$, $N=6$.

Если кристалл подвергнут всестороннему обжатию давлением порядка нескольких десятков Мбар, большая часть электронов, образывавших электронную систему атома A , остается в ячейке. Этот эффект обусловлен тем, что для выхода из ячейки электрон должен включиться в электронную систему одного из атомов, окружающих ячейку, а затем покинуть ее с внешней стороны границы. В этом процессе суммарная энергия атома возрастает, этот рост можно считать высотой потенциального барьера для электронов.

Высота потенциального барьера δE в зависимости от давления в кристалле гидрида лития, рассчитанная для заданного радиуса сжатого атома

χ_α	R_α	p (Мбар)	δE (эВ)
1.25	0.585	61.5	71.5
1.75	0.819	16.4	44.2
2.25	1.053	4.57	26.7
2.75	1.287	1.81	17.9
3.25	1.521	0.90	12.9
3.75	1.755	0.51	8.63

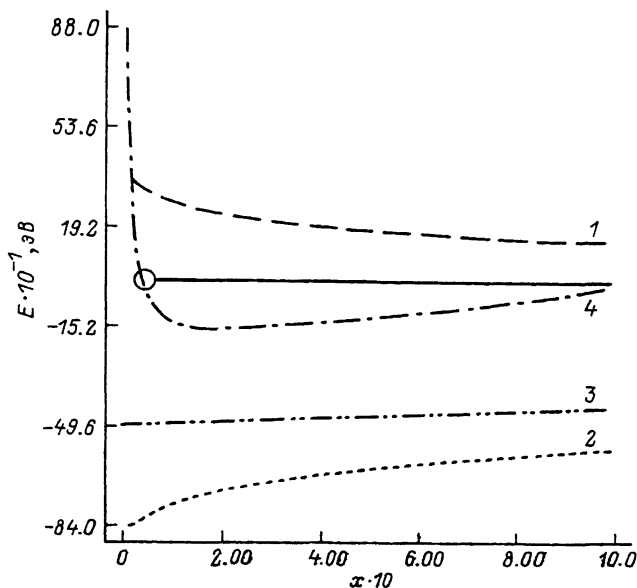
Для расчетов суммарной энергии электронной системы атомов и отрицательных ионов использовалась модель Томаса-Ферми [2, 3]. Предполагалось, что атом сжат до размера χ_α (здесь $\chi_\alpha = R_\alpha/d$ - безразмерный радиус, обезразмеривание проведено масштабом длины $d=0.47$ А, принятым в модели Томаса-Ферми), одновременно рассчитывалось давление, необходимое для такого сжатия. Результаты даны в таблице. Высоту потенциального барьера δE следует сравнивать со средней энергией электронов $16Z^{2/3}$ эВ, оставшихся после ухода из ячейки продуктов деления ядра атома А. Отсюда следует приведенная выше оценка давления, необходимого для удержания электронов в ячейке. Средняя плотность электронов в ячейке составляет $\approx 10^{25}$ см $^{-3}$.

2. Особенностью процессов в дефектной ячейке является образование единой электрон-ядерной системы, в которой перемещение ядер H внутри ячейки приводит к изменениям суммарной энергии электронной подсистемы.

При расчетах эффектов перемещения ядер H в ячейке использовалась модель ячейки в виде сферы, по внешней границе которой равномерно распределен заряд ядер ближайших атомов, окружающих ячейку. Сфера заполнена электронами, входящими в электронные системы граничных атомов и теми Z электронами, которые остались в ячейке после распада центрального ядра. Внутри ячейки в точках \vec{r}_1 и \vec{r}_2 находятся ядра H . Распределение плотности электронов n согласовано с распределением электрического потенциала φ как в модели Томаса-Ферми. Решалось уравнение для φ вида

$$\Delta\varphi = 4\pi en - 4\pi e [\delta(\vec{r} - \vec{r}_1) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_2)], \quad (1)$$

после чего подсчитывались кинетическая и потенциальная энергии электронной системы в зависимости от расстояния ядер H от центра ячейки (предполагалось $\vec{r}_1 = -\vec{r}_2$; $|\vec{r}_1| = x \cdot d$). Результаты для различных слагаемых в полной энергии электрон-ядерной системы приведены на графике рисунке. Даны зависимости кинетической (кривая 1), потенциальной (2) и полной (3) энергии элект-



Составляющие суммарной энергии электрон-ядерной системы в ячейке. Радиус ячейки принят $\chi_c = 2.0$ ($R_0 \approx 1$ А). Кружком отмечена точка поворота ядер при классическом движении с сохранением полной энергии.

тронной подсистемы, а также полной энергии E_z электрон-ядерной системы (кривая 4), включающей потенциальную энергию кулоновского взаимодействия ядер H . Видно, что электронная подсистема стремится сблизить ядра, их взаимное отталкивание становится существенным лишь на расстоянии менее 10^{-9} см. Равновесное положение ядер соответствует $\chi_0 = 0.185$.

Зависимость $E_z(r)$ позволяет определить вероятность подбарьерного туннелирования ядер. В квазиклассическом приближении эта вероятность определяется экспонентой $\exp(-w)$ с показателем [3]

$$w = (2\sqrt{2M}/\hbar) \int_0^R \sqrt{E_z(r) - E} dr, \quad (2)$$

где M — приведенная масса ядер H , E — их энергия, R — точка поворота при классическом движении. Если здесь выбрать E равной максимальной глубине потенциальной ямы (т.е. считать, что ядра туннелируют из равновесного положения), то $w = 27$. Можно предположить, что при сближении ядер H их полная энергия со-

храняется. В этом случае из графика на рисунке следует, что в (2) следует подставить $E \approx 150$ эВ. При этом точка поворота соответствует взаимному сближению ядер до $6 \cdot 10^{-10}$ см, а вероятность туннелирования определяется величиной $\omega = 17$.

3. Полученные результаты позволяют оценить характерное время T реакции синтеза ядер H в дефектной ячейке. Если n_H - плотность ядер, v - их скорость, σ - сечение реакции, то

$$T = (n_H v \sigma)^{-1}. \quad (3)$$

Значения сечений реакций $d+d$ и $d+t$ при малых энергиях определены в [4]. В принятых выше обозначениях $\sigma = C v e^{-\omega/v}$, где $C = 2 \cdot 10^{-16}$ см³/с для первой реакции и $C = 2 \cdot 10^{-14}$ см³/с для второй. Принимая $n_H = 5 \cdot 10^{24}$ см⁻³, получим оценку $T = 10^{-5}$ с в наиболее благоприятном случае (реакция $d+t$, $\omega = 17$), либо $T = 2 \cdot 10^1$ с в противоположном случае (реакция $d+d$, $\omega = 27$).

Приведенный результат свидетельствует, что в дефектной ячейке, образующейся после деления ядра Li тепловым нейтроном в сжатом давлением в десятки Мбар гидриде лития, возможен катализ ядерной реакции синтеза изотопов водорода. Более подробные результаты приведены в работе [5].

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] К и к о и н И.К. Таблицы физических величин (справочник), М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
- [2] Г а м б о ш П. Статистическая теория атома, М.: ИИЛ, 1951. 398 с.
- [3] Л а н д а у Л.Д., Л и ф ш и ц Е.М. Квантовая механика, М.: Физматгиз, 1963. 702 с.
- [4] З е л ь д о в и ч Я.Б., Г е р ш т е й н С.С. // УФН. 1960. Т. 71. № 4. С. 581.
- [5] Ф е д о р о в и ч Г.В. Физика Е-ячейки. Рук. деп. в ВИНТИ № 7710 - В 89 от 28.12.89.

Отдел теоретических проблем
АН СССР

Поступило в Редакцию
11 января 1990 г.
В окончательной редакции
29 марта 1990 г.