Б.Є. ГРИНЮК, І.В. СИМЕНОГ

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
(Київ 03143, вул. Метрологічна 14-Б; e-mail: bgrinyuk@bitp.kiev.ua)

УДК 539

РОЛЬ ТЕМПЕРАТУРИ У ПРОЦЕСІ ТУНЕЛЮВАННЯ ПРИ ХОЛОДНОМУ СИНТЕЗІ

Проведено оцінку температурної залежності коефіцієнта тунелювання крізь кулонівський бар'єр для ізотопів гідрогену при відносно низьких температурах у рамках моделі екранованого кулонівського потенціалу взаємодії між цими ізотопами, поміщеними у зовнішню осциляторну потенціальну яму. Температурні залежності для коефіцієнта тунелювання розраховано для pp-, pd-, pt-, dd- і dt-реакцій при різних радіусах екранування. Обговорюється можлива роль pp-реакцій.

Ключові слова: холодний синтез, тунелювання крізь екранований кулонівський бар'єр, температурна залежніть коефіцієнта тунелювання.

1. Вступ

Відомо, що ядерні реакції в загальному плані не залежать від температури в звичному для нас інтервалі температур. Але це не стосується ядерних реакцій синтезу, пов'язаних із процесом тунелювання крізь кулонівський бар'єр. В даній роботі ми розглядаємо просту модель двох ядер ізотопів гідрогену, поміщених у дефект кристала, і показуємо суттєву залежність коефіцієнта тунелювання, а значить і наступної ядерної реакції синтезу, від температури при відносно невеликих її значеннях.

Хоча ймовірність тунелювання крізь кулонівський бар'єр дуже мала, щоб можна було серйозно обговорювати можливість "холодного синтезу" і його практичне застосування, але дана проблема залишається актуальною [1] і є цікавою з загальної теоретичної точки зору. Зокрема, в даній роботі ми розглядаємо залежність прозорості екранованого кулонівського бар'єра від такого природного і легко змінюваного фізичного параметра, як температура, яка змінюється не в межах мільйонів градусів, а від 0 K до точки плавлення кристала (для конкретності, ми вибираємо 2000 K). Проведене дослідження в основному базується на роботі [2]. Ефект підвищення прозорості бар'єра зі зростанням температури, який обговорюється нижче, в певному сенсі досить близький по суті до ефекту зростання ймовірності тунелювання завдяки флуктуаціям [3]. Ми детально не обговорюємо в даній роботі важливу роль електронів у реакціях синтезу, у збудженні ядер [4] і навіть у реакціях розпаду [5]. Але з огляду на можливі ефекти додаткового екранування бар'єра в дефекті з високою густиною електронів, ми знаходимо температурні залежності при різних радіусах екранування (від 0,5 Å до 0,1 Å). Ми також розглядаємо різні маси (для випадків *pp*-, *pd*-, *pt*-, *dd*- і *dt*-реакцій).

2. Модель двох ізотопів гідрогену в кристалічному дефекті

Розглянемо феноменологічний гамільтоніан, який описує систему двох точкових ядер із масами m_1 і m_2 в області дефекту кристала, в такому вигляді:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\triangle_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\triangle_2 + V_{\text{nucl}}\left(|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|\right) + \\ + \frac{e^2}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|}{r_{\text{D}}}\right) + W\left(r_1, r_2\right), \qquad (1)$$

де екранування кулонівського відштовхування між ядрами враховано стандартним чином (r_{D} — радіус дебаївського екранування в області дефекту). Наявність дефекту враховано просто введенням зовнішнього сферично симетричного потенціалу W. Конкретна форма зовнішнього поля не дуже важлива для процесу тунелювання крізь екранований кулонівський потенціал. Для зручності, з огляду на подальше розділення змінних, ми використовуємо його у вигляді

$$W\left(r_1, r_2\right) = K \cdot \left(\lambda_1 r_1^2 + \lambda_2 r_2^2\right) \qquad (2)$$

© Б.Є. ГРИНЮК, І.В. СИМЕНОГ, 2020

із $\lambda_1 = m_1/(m_1+m_2)$ і $\lambda_2 = m_2/(m_1+m_2)$. Для однакових мас, очевидно, маємо $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$. Для потенціальної ями, характерної для дефекту глибиною порядка ∼1 еВ і радіусом близько $4\cdot10^{-8}$ см, матимемо $K \sim 10^{15}$ еВ$\cdot$см$^{-2}$. Що стосується ядерної взаємодії між двома частинками $V_{\rm nucl}$, то ми лише використовуємо її короткосяжний характер (із радіусом взаємодії, як відомо, порядка $\sim10^{-13}$ см).

Як заздалегідь ясно (див. рис. 1) та підтверджено числовими розрахунками [2], останній доданок в (1) не впливає суттєво на ймовірність тунелювання при кімнатних і вищих температурах, тобто конкретний вигляд цього члена не дуже важливий. Більш важливим є вплив радіуса екранування, який залежить від концентрації негативно заряджених частинок (електронів, присутніх у кристалі, або електронів, спеціально інжектованих у кристал тим чи іншим способом). Значно кращими для ефекту екранування, як відомо, є μ_e^--мезони, які дають радіуси екранування приблизно у $\frac{m_\mu}{m_e} \cong 207$ разів менші, ніж електрони. Але в даній роботі ми не обговорюємо окрему важливу проблему μ-каталізу, обмежуючись $r_{\rm D}$ порядку 0,1–0,5 Å, типовими для звичайних кристалів з електронами.

Перевага гамільтоніана у вигляді (1) з потенціальною ямою (2) полягає в тому, що координата центра мас в явному вигляді відокремлюється, і це дає задачу з однією змінною з гамільтоніаном

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle + V_{\rm nucl}(r) + \frac{e^2}{r}\exp\left(-\frac{r}{r_{\rm D}}\right) + \frac{1}{2}\kappa r^2, \quad (3)$$

де $r \equiv |\mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}|$, зведена маса $\mu \equiv m_1m_2/(m_1+m_2)$, а $\kappa \equiv \frac{2m_1m_2}{(m_1+m_2)^2}K$. Більше того, оскільки ми збираємось вивчати процес тунелювання крізь бар'єр типу екранованого кулонівського, ми можемо обмежитись **s**-станами даної задачі, оскільки додатковий відцентровий бар'єр $\sim\frac{l(l+1)}{r^2}$, характерний для станів із $l \neq 0$, приводить до того, що ймовірністю тунелювання в цих станах можна нехтувати. Для **s**-станів можна використати добре відоме позначення $u(r) \equiv r\psi(r)$ і звести задачу до одновимірної

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''(r) + \left(V_{\rm nucl}(r) + \frac{e^2}{r}\exp\left(-\frac{r}{r_{\rm D}}\right) + \frac{1}{2}\kappa r^2\right)u(r) = Eu(r). \quad (4)$$

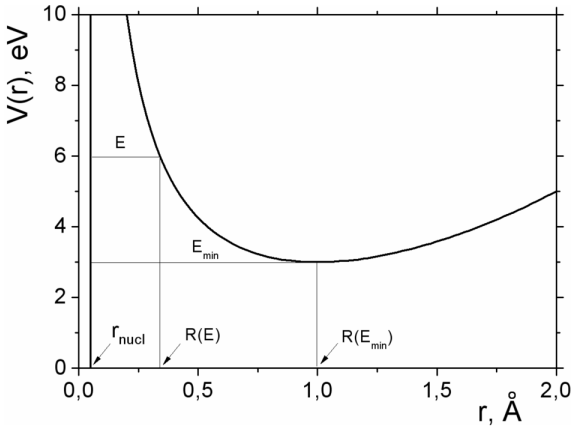

Рис. 1. Схематичний вигляд потенціалу $V(r)$

У подальшому ми розглядаємо процес тунелювання крізь центральну відштовхувальну частину потенціалу

$$V(r) = V_{\rm nucl}(r) + \frac{e^2}{r}\exp\left(-\frac{r}{r_{\rm D}}\right) + \frac{1}{2}\kappa r^2 \quad (5)$$

(див. рис. 1) в рамках добре відомого квазікласичного наближення. Ми також розглядаємо допоміжний гамільтоніан

$$\widetilde{\hat{h}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{e^2}{r}\exp\left(-\frac{r}{r_{\rm D}}\right) + \frac{1}{2}\kappa r^2, \quad (6)$$

де ядерний потенціал опущено. Якщо використати безрозмірні величини – координату $x = r/r_{\rm D}$ і енергію $\mathcal{E} = \frac{\mu r_{\rm D}^2}{\hbar^2}E$, гамільтоніан буде залежним лише від двох параметрів (інтенсивностей екранованого кулонівського потенціалу і осциляторної потенціальної ями). Це просте зауваження може бути корисним для загального аналізу задачі. Але у подальшому ми зберігаємо початковий вигляд гамільтоніана (6), в якому, як може здатися, міститься більша кількість параметрів.

3. Підвищення прозорості бар'єра за рахунок температури

Коефіцієнт прозорості для процесу тунелювання крізь потенціальний бар'єр, як відомо (див., наприклад, [6]), має вигляд:

$$D(E) \simeq \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int\limits_{r_{\rm nucl}}^{R(E)}\sqrt{2\mu\left(V(r)-E\right)}dr\right), \quad (7)$$

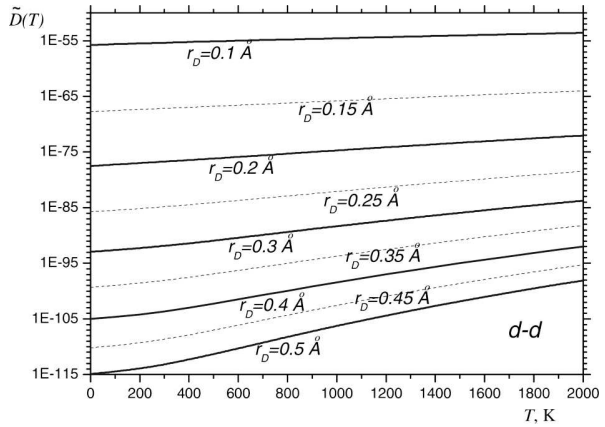

Рис. 2. Температурна залежність $\widetilde{D}\,(T)$ для dd-тунелювання при різних радіусах екранування

де інтеграл в експоненті суттєво залежить від відносної енергії E частинок, які зіштовхуються. Загальним множником порядку одиниці нехтуємо. Ефект підвищення прозорості бар'єра зі зростанням температури базується на тому, що при ненульових температурах існує ненульова ймовірність того, що частинки зіштовхуються з енергіями, більшими за енергію основного стану E_0, тобто проходять крізь бар'єр набагато легше. І хоча згадана ймовірність експоненційно спадає зі зростанням енергії завдяки фактору Больцмана $\sim\exp\left(-\left(E-E_0\right)/kT\right)$, підвищення коефіцієнта прозорості бар'єра виявляється значно більшим, що приводить до загального зростання ймовірності тунелювання. Ми можемо ввести ефективний коефіцієнт прозорості бар'єра $\widetilde{D}(T)$ як середнє статистичне

$$\widetilde{D}(T)=\frac{\sum_n D(E_n)\exp\left(-\frac{E_n-E_0}{kT}\right)}{\sum_n \exp\left(-\frac{E_n-E_0}{kT}\right)}, \tag{8}$$

де сума враховує всі стани гамільтоніана (6), яким відповідають енергії E_n. Оскільки ми звели задачу до одновимірної, виродження g_n станів рівне 1, і тому g_n не вказано явно у виразі (8).

Для спрощення подальших розрахунків ми замінюємо суми в (8) інтегралами, використовуючи той факт, що дискретні рівні системи досить близькі один до одного завдяки відносно великій зведеній масі μ ядер:

$$\widetilde{D}(T)\to\ \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} D(E)\exp\left(-\frac{E-E_{\min}}{kT}\right)\lambda\left(E\right)dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty}\exp\left(-\frac{E-E_{\min}}{kT}\right)\lambda\left(E\right)dE}, \tag{9}$$

де $E_{\min}$ – мінімальна енергія (див. рис. 1). Перехід від (8) до (9) вимагає від нас знання густини енергетичних станів $\lambda\left(E\right)$. Але в нашій моделі ця плавна функція змінюється в межах менш ніж одного порядку величини. Якщо використати теорему про середнє і винести $\lambda\left(E^*\right)$ з чисельника підінтегральної функції (9), а $\lambda\left(E^{**}\right)$ – зі знаменника, і якщо нехтувати множником $\frac{\lambda(E^*)}{\lambda(E^{**})}$ порядка $\sim 10^0$, отримаємо наближений вираз

$$\widetilde{D}(T)\sim\ \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} D(E)\exp\left(-\frac{E-E_{\min}}{kT}\right)dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty}\exp\left(-\frac{E-E_{\min}}{kT}\right)dE}, \tag{10}$$

який легко розрахувати чисельно.

Зручно відображати температурні залежності для $\widetilde{D}\,(T)$ у логарифмічному масштабі. На рис. 2 показано такі залежності у випадку реакції dd-синтезу для різних радіусів екранування при фіксованому $\kappa = 10^{-17}$ МеВ$\cdot$фм$^{-2}$ і $r_{\rm nucl} = 2$ фм. Загальна картина виглядає так, що тунелювання (а значить і синтез) суттєво залежить від температури: принаймні на декілька порядків величини змінюється $\widetilde{D}\,(T)$ при зміні температури в межах $\sim 10^2$–10^3 градусів. Отже, температурний ефект є суттєвим і повинен враховуватись в усіх оцінках і розрахунках, які стосуються проблеми "холодного" ядерного синтезу.

4. Залежність ефективного коефіцієнта прозорості від зведеної маси

Відомо, що ймовірність тунелювання залежить від маси частинки, яка проникає крізь потенціальний бар'єр. В нашому випадку двох ядер, як це видно з (7), показник експоненти пропорційний квадратному кореню від зведеної маси цих ядер. У випадку ефективного коефіцієнта прозорості $\widetilde{D}$ залежність від μ дуже подібна: чим менша зведена маса, тим більшим є $\widetilde{D}$. Цей факт відображений на рис. 3, де показана залежність $\widetilde{D}$ від зведеної маси. Для конкретності ми вибрали $r_{\rm D} = 0.5$ Å, і намалювали криві для трьох температур: $T = 0$ К, $T = 1000$ К і $T = 2000$ К. Внизу рисунка вказані конкретні значення μ для різних пар ізотопів гідрогену.

Розглянемо ситуацію для різних пар ізотопів більш детально. На рис. 4 ми наводимо температурну залежність $\widetilde{D}\,(T)$ у випадку pp-тунелювання, де видно, що коефіцієнти прозорості значно більші порівняно з випадком dd-тунелювання

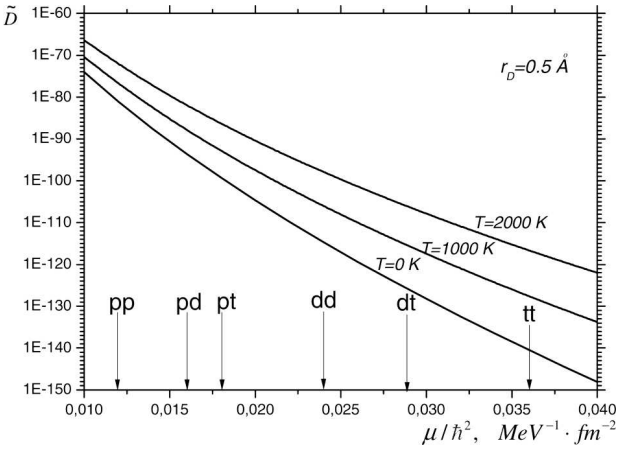

Рис. 3. Залежність $\widetilde{D}$ від зведеної маси μ

(рис. 2). Подібні температурні залежності $\widetilde{D}\,(T)$ для *pd*-, *pt*- і *dt*-тунелювання підтверджують загальний висновок щодо залежності $\widetilde{D}$ від зведеної маси, що можна побачити на рис. 5, рис. 6 і рис. 7, відповідно.

В усіх розглянутих випадках підтверджується суттєва роль температури у процесі тунелювання, яка проявляється у зростанні $\widetilde{D}$ принаймні на декілька порядків величини при зростанні температури на сотні градусів. Таким чином, ймовірність ядерних реакцій, які відбуваються в результаті тунелювання, суттєво залежить від температури, хоча й залишається дуже низькою з точки зору практичного використання.

5. Щодо можливої ролі *pp*-реакцій у "холодному" ядерному синтезі

Очевидно, що число реакцій на секунду у зразку з дефектами, які містять ізотопи гідрогену, пропорційне числу цих дефектів. Позначимо через $\nu = \sqrt{\kappa/\mu}$ осциляторну частоту потенціалу $\frac{1}{2}\kappa r^2$ із гамільтоніана (5). Типові значення ν в нашому випадку становлять порядку 10^{13} с$^{-1}$. У квазікласичному наближенні ця частота відповідає по порядку величини кількості зіткнень двох ізотопів гідрогену в дефекті на секунду. Якби в кожному грамі зразка було б навіть $N_0 \sim 10^{20}$ дефектів, кількість реакцій ядерного синтезу на секунду в кожному грамі, $N_0 \cdot \nu \cdot \widetilde{D}$, було б дуже малим через малість $\widetilde{D}$ (навіть для $r_{\rm D} \sim 0.1$ Å, див. рис. 2, 4–7). Але для *pp*-тунелювання ця мала ймовірність все ж, як видно, найбільша.

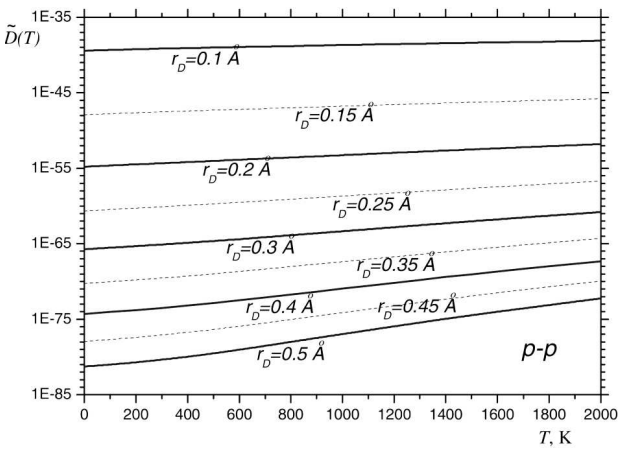

Рис. 4. Температурна залежність $\widetilde{D}\,(T)$ для *pp*-тунелювання

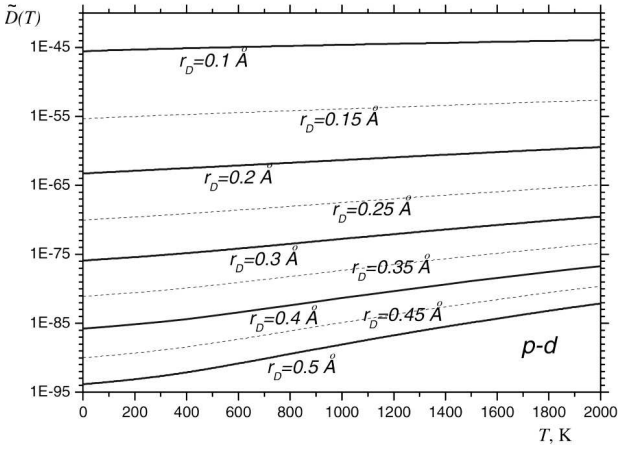

Рис. 5. Температурна залежність $\widetilde{D}\,(T)$ у випадку *pd*-тунелювання

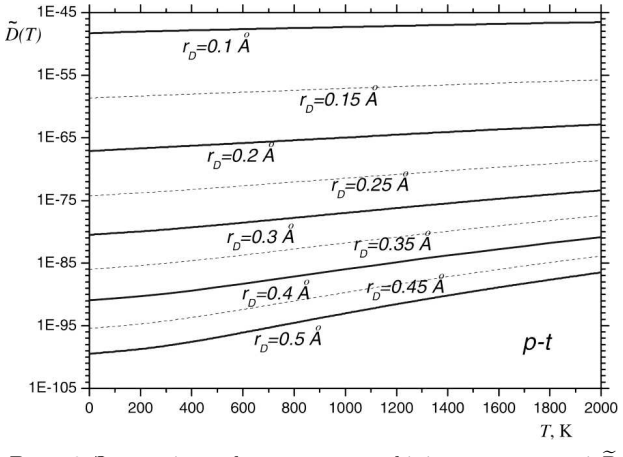

Рис. 6. Залежність ефективного коефіцієнта прозорості $\widetilde{D}$ від температури для *pt*-тунелювання

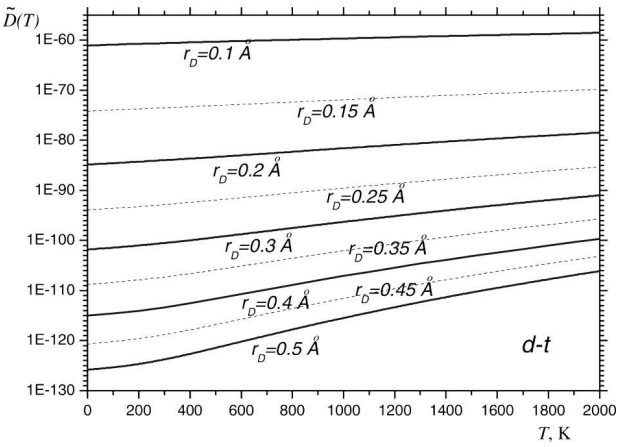

Рис. 7. $\tilde{D}\,(T)$ для dt-тунелювання

Отже, найбільш ймовірною реакцією у зразку з дефектами, насиченими ізотопами гідрогену, є pp-реакція, яка дає в результаті $p+p \to d+e^+ + \nu_e + $ $+\,0,42$ МеВ. Наступна за нею анігіляція позитрона у середовищі з електронами дає додаткову енергію $2m_ec^2 \cong 1,02$ МеВ у формі γ-квантів. Важливо, що отриманий у вищезазначеній реакції дейтрон має енергію $\leq$0,08 МеВ (або $\sim 10^9$ К), яка значно вища за температуру кристала, і це може слугувати джерелом швидких дейтронів для вторинних dp-реакцій (так само як і для dd-реакцій, якщо дейтерій присутній у кристалі разом із атомами водню). Кінетична енергія позитрона і енергія γ-квантів також може частково перетворитись на кінетичну енергію ядер ізотопів гідрогену і тим самим підвищити ймовірність вторинних реакцій. Таким чином, pp-реакції можуть бути важливими як самі по собі (генеруючи близько $0,42+1,02 = 1,44$ МеВ на кожну реакцію), так і у ролі джерела швидких дейтронів. Ми тут не зупиняємося на значно менш ймовірній реакції $p+p+e^- \to d+\nu_e+1,44$ МеВ, яка, як відомо, також відбувається за участі протонів. Лише зазначимо, що вона дає той самий енергетичний вихід і також породжує швидкі дейтрони.

6. Висновки

Підсумовуючи, ми відзначимо помітний ефект впливу температури на процес тунелювання, і цей ефект повинен неодмінно враховуватись при вивченні реакцій "холодного" синтезу за участі ізотопів гідрогену, незважаючи на те, що температура порядку $\sim 10^3$ К є невисокою за шкалою термоядерних енергій. Враховуючи роль флуктуацій у процесі тунелювання [3], можна отримати трохи більшу ймовірність для розглянутих процесів, оскільки температура впливає на флуктуації і діє в тому самому напрямку збільшення прозорості бар'єра. Зважаючи на зростання ймовірності тунелювання завдяки ефекту екранування (тобто завдяки зменшенню $r_{\rm D}$), може виявитись важливим дослідження впливу процесу насичення зразка інжектованими електронами. Враховуючи вищезазначену можливу роль найбільш ймовірних pp-реакцій (як з точки зору енергетичного внеску, так і у ролі джерела "прискорених" дейтронів, які народжуються в цих реакціях), цікаво вивчити процес тунелювання у кристалах з дефектами, які містять суміш ізотопів гідрогену, і спробувати ідентифікувати можливі pp-реакції.

Дана робота підтримана НАН України (Проект № 01172U000237).

1. C.P. Berlinguette, Yet-Ming Chiang, J. N. Munday, T. Schenkel, D.K. Fork, R. Koningstein, M.D. Trevithick. Revisiting the cold case of cold fusion. *Nature* **570** (7759), 45 (2019).
2. B.E. Grinyuk, I.V. Simenog. On the temperature role in the tunneling process at the "cold fusion". Preprint ITP-91-25E, Kyiv, 1991, 13 p.
3. М.В. Алтайский, С.Н. Артуха, Б.И. Барц, В.Г. Барьяхтар, С.С. Моисеев. Флуктуационное повышение прозрачности квантово-механических и волновых барьеров и некоторые физические следствия. *УФЖ* **35**, №2, 297 (1990).
4. A.Ya. Dzyublik, G. Gosselin, V. Mèot, and P. Morel. Role of screening in Coulomb excitation of nuclei by electrons in hot plasma. *EPL* **102**, 62001 (2013).
5. A.Yu. Dzyublik. Influence of electronic environment on α decay. *Phys. Rev. C* **90**, 054619 (2014).
6. О.С. Давидов. *Квантова механіка* (Академперіодика, 2013) [ISBN: 978-966-360-211-0].

Одержано 28.06.20

B.E. Grinyuk, I.V. Simenog

ON THE TEMPERATURE ROLE
IN THE TUNNELING PROCESS AT THE LOW-ENERGY NUCLEAR FUSION

Р е з ю м е

The temperature dependence of the coefficient of tunneling through the Coulomb barrier is estimated for nuclei of the hydrogen isotopes at comparatively low temperatures using a model of screened Coulomb interaction potential between the isotopes put inside an external oscillator potential well. The temperature dependences for the tunneling coefficient are calculated for pp-, pd-, pt-, dd-, and dt-processes at different screening radii. The probable role of pp-reactions is discussed.