

05

© 1991

ОБРАЗОВАНИЕ КОМПАКТНОЙ МОЛЕКУЛЫ D_2 В МЕЖДОУЗЛИИ – ВОЗМОЖНОЕ ОБЪЯСНЕНИЕ ХОЛОДНОГО ЯДЕРНОГО СИНТЕЗА

Б.Я. М о й ж е с

1. Тщательная экспериментальная проверка подтвердила [1], что холодный ядерный синтез в гидридах, насыщенных дейтерием, действительно наблюдается, хотя скорость синтеза очень мала. Условия возникновения холодного синтеза трудно воспроизводимы и до сих пор не вполне ясны. Имеются [1] два типа гипотез для объяснения механизма холодного синтеза. В одних рассматривается возможность ускорения ядер до больших энергий, например, при растрескивании кристаллов. В других исследуется возможность статистического сближения ядер D до малых расстояний вследствие экранирования кулоновского отталкивания электронами. Последнему механизму посвящена и настоящая заметка.

Как известно, в молекуле H_2 равновесное расстояние между ядрами равно 0.7416 \AA , кулоновское отталкивание между ядрами при этом составляет $\sim 20 \text{ эВ}$, т.е. $2 \cdot 10^5 \text{ К}$. Однако это отталкивание компенсируется уменьшением энергии электронной подсистемы вследствие того, что электроны находятся в кулоновском поле не одного, а двух протонов, так что в целом энергия системы не только не увеличивается, но даже уменьшается, на $\sim 4.5 \text{ эВ}$ по сравнению в 2 атомами водорода. Но на расстоянии 0.74 \AA вероятность туннелирования дейтронов через кулоновский потенциальный барьер получается настолько малой, что даже высокая концентрация молекул в жидком или твердом состоянии дейтерия ($\sim 1 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$) по сравнению с концентрацией ионов D^+ в горячей термоядерной плазме ($\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$) не спасает положения.¹

Что касается твердых гидридов [2], то в них концентрация водорода, как известно, может быть в несколько раз больше, чем в жидком или твердом водороде. Однако расстояние между ближайшими ядрами при этом все же существенно больше, чем в молекуле D_2 . Между тем эксперимент показывает, что холодный синтез происходит именно в гидридах, насыщенных дейтерием.

В связи с этим встают два вопроса.

¹ Напомним, что выход реакции $D + D$ пропорционален квадрату концентрации.

1) Возможно ли образование стабильной молекулы D_2 в гидридах металлов?

2) Какое расстояние между ядрами D будет в такой молекуле?

2. В гидридах металлов [2] водород обычно занимает [3] или октаэдрические пустоты (PdH), или тетраэдрические (TiH_2), или и те и другие одновременно (LaH_3). При этом водород может быть в виде протонов H^+ или гидрид-ионов H^- (LaH_3). Априори имеется возможность и образования молекулы H_2 в междуузлии, хотя в термодинамически равновесном состоянии такие структуры не обнаружены [2, 3].

Попробуем оценить расстояние между ядрами в молекуле D_2 , находящейся в междуузлии. Предположим, например, что в октаэдрическом междуузлии металлического Pd оказалось два ядра D . Если при этом все соседние междуузлия заполнены D , то такая междузельная молекула D_2 может быть стабильной. Вследствие большой энергии перекрывания электронных оболочек молекулы D_2 и соседних атомов Pd следует ожидать, что междузельная молекула D_2 будет сильно сжатой по сравнению с обычной молекулой D_2 . Электронная оболочка такой сжатой молекулы должна напоминать электронную оболочку атома гелия. Это означает, что радиус волновой функции электронов будет уменьшен по сравнению с радиусом волновой функции электрона в атоме водорода приблизительно в 1.69 раза [4], т.е. равен $\sim 0.3 \text{ \AA}$. Видно, что электронная оболочка сжатой молекулы D_2 может разместиться в октаэдрическом междуузлии радиуса $(\sqrt{2} - 1)r_{\text{кош}}$, т.е. 0.57 \AA для Pd .

Оценим равновесное расстояние между ядрами ($2x_0$) полагая, что x_0 значительно меньше радиуса волновой функции электронов $\psi(r)$, которая сохраняется примерно такой же, как у атома He. Если считать, что волновая функция деформируется слабо, то при равновесии кулоновское отталкивание между ядрами на расстоянии $2x_0$ должно равняться притяжению одного ядра к центру волновой функции электронов. Тогда внутри сферы x_0 отрицательный заряд электронов должен равняться $1/4 q_0$ (q_0 - заряд электрона), т.е.

$$2 \int_0^{x_0} \psi^2(r) \cdot 4\pi r^2 dr = 1/4. \quad (1)$$

Подставляя в (1) $\psi(r) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha r}$, находим, что $2\alpha x_0 \approx 1.22$.

При $\alpha = 1.69/r_B$ (r_B - боровский радиус) получаем, что $2x_0 = 0.38 \text{ \AA}$. Это расстояние почти в 2 раза меньше, чем равновесное расстояние в свободной молекуле H_2 .¹

¹ Отметим, что если из (1) определить межядерное расстояние в свободной молекуле H_2 (т.е. при $\alpha = 1/r_B$), то получается $2x_0 = 0.65 \text{ \AA}$ по сравнению с 0.74 \AA . Ясно, что в случае сжатой молекулы H_2 оценка межядерного расстояния по формуле (1) должна быть точнее.

Из расчетов молекулы H_2 при разных расстояниях между ядрами [4] получается, что при сжатии свободной молекулы H_2 до меядерного состояния $0,38 \text{ \AA}$ ее энергия увеличивается приблизительно на 10 эВ . Это значение примерно соответствует значению напряжения в опытах по электролизу [1] и существенно меньше, чем катодное падение напряжения в газовом разряде [5]. Таким образом, попадание двух ядер в одно междузлия металлического палладия, предварительно насыщенного дейтерием, энергетически вполне возможно.

3. Вероятность ядерной реакции на одну молекулу D_2 за 1 с равна [1]

$$\Lambda = \Lambda_0 e^{-\alpha} \quad (2)$$

В приближении ВКБ для кулоновского потенциала имеем [1]

$$\alpha = 44,4 E_{\text{Кул}}^{-1/2}, \quad (3)$$

где $E_{\text{Кул}}$ — кулоновская энергия в КэВ двух ядер в молекуле D_2 при равновесии. В свободной молекуле D_2 ($E_{\text{Кул}} = 0,02 \text{ КэВ}$, $\alpha = 0,74 \text{ \AA}$) расчетное значение $\Lambda = 3 \cdot 10^{-64} \text{ с}^{-1}$ [1]. В сжатой молекуле ($E_{\text{Кул}} = 0,04 \text{ КэВ}$, $\alpha = 0,38 \text{ \AA}$), согласно (3), имеем оценку $\Lambda = 3 \cdot 10^{-24} \text{ с}^{-1}$. Это значение Λ как раз совпадает с так называемым „уровнем Джонса“ [1], наблюдаемом в некоторых экспериментах.

В заключение отметим, что несмотря на приближенный характер всех оценок, гипотеза о возможности объяснения холодного синтеза образованием сжатых молекул D_2 в междузлиях или на каких-то дефектах в кристалле заслуживает более детальной экспериментальной и теоретической проверки.

Автор благодарен М.В. Красиньковой за помощь и поддержку.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Царёв В.А. // УФН. 1990. Т. 160. № 11. С. 1-53.
- [2] Водород в металлах. М.: Мир, 1981. Т. 1. 475 с.; Т. 2. 430 с.
- [3] Уэллс А. Структурная неорганическая химия. М.: Мир, 1987. Т. 2. 694 с.
- [4] Слэттер Дж. Электронная структура молекул. М.: Мир, 1965. 588 с.
- [5] Карабут А.В., Кучеров Я.Р., Савватимова И.Б. // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. № 12. С. 53-57.

Физико-технический
институт им. А.Ф. Иоффе
АН СССР,
Ленинград

Поступило в Редакцию
23 апреля 1991 г.