

Б.Є. ГРИНЮК, І.В. СИМЕНОГ

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

## РОЛЬ ТЕМПЕРАТУРИ У ПРОЦЕСІ ТУНЕЛЮВАННЯ ПРИ ХОЛОДНОМУ СИНТЕЗІ

УДК 539

*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-реакції.*

*Ключові слова:* холодний синтез, тунелювання крізь екранований кулонівський бар'єр, температурна залежність 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 К до точки плавлення кристала (для конкретності, ми вибираємо 2000 К). 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:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V_{\text{nucl}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{r_D}\right) + W(r_1, r_2), \quad (1)$$

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

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

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 порядку  $\sim 1$  еВ і радіусом близько  $4 \cdot 10^{-8}$  см, матимемо  $K \sim 10^{15}$  еВ  $\cdot$  см $^{-2}$ . Що стосується ядерної взаємодії між двома частинками  $V_{\text{nucl}}$ , то ми лише використовуємо її короткосяжний характер (із радіусом взаємодії, як відомо, порядку  $\sim 10^{-13}$  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  $\mu_e^-$ -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  $\mu$ -каталізу, обмежуючись  $r_D$  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

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

де  $r \equiv |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ , зведена маса  $\mu \equiv m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ , а  $\kappa \equiv \frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} K$ . 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

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

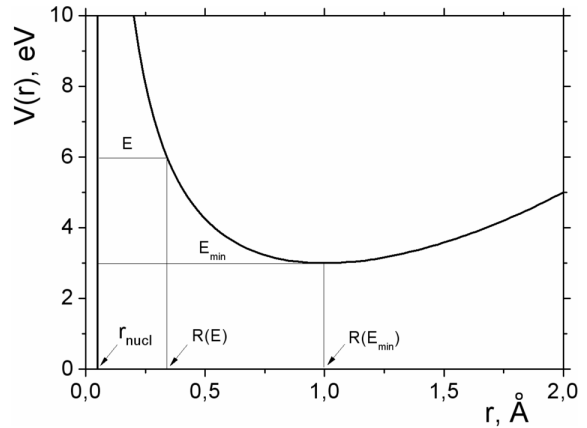


Рис. 1. Схематичний вигляд потенціалу  $V(r)$

У подальшому ми розглядаємо процес тунелювання крізь центральну відштовхувальну частину потенціалу

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

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

$$\tilde{h} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right) + \frac{1}{2} \kappa r^2, \quad (6)$$

де ядерний потенціал опущено. Якщо використати безрозмірні величини – координату  $x = r/r_D$  і енергію  $\mathcal{E} = \frac{\mu r_D^2}{\hbar^2} E$ , 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:

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

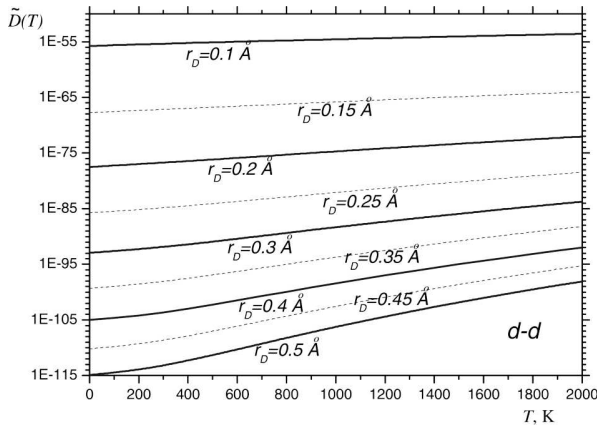


Рис. 2. Температурна залежність  $\tilde{D}(T)$  для  $dd$ -тунелювання при різних радіусах екранування

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  $\sim \exp(- (E - E_0) / kT)$ , підвищення коефіцієнта прозорості бар'єра виявляється значно більшим, що приводить до загального зростання ймовірності тунелювання. Ми можемо ввести ефективний коефіцієнт прозорості бар'єра  $\tilde{D}(T)$  як середнє статистичне

$$\tilde{D}(T) = \frac{\sum_n D(E_n) \exp(-\frac{E_n - E_0}{kT})}{\sum_n \exp(-\frac{E_n - E_0}{kT})}, \quad (8)$$

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  $\mu$  ядер:

$$\tilde{D}(T) \rightarrow \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} D(E) \exp(-\frac{E - E_{\min}}{kT}) \lambda(E) dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \exp(-\frac{E - E_{\min}}{kT}) \lambda(E) dE}, \quad (9)$$

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

$$\tilde{D}(T) \sim \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} D(E) \exp(-\frac{E - E_{\min}}{kT}) dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \exp(-\frac{E - E_{\min}}{kT}) dE}, \quad (10)$$

який легко розрахувати чисельно.

Зручно відобразити температурні залежності для  $\tilde{D}(T)$  у логарифмічному масштабі. На рис. 2 показано такі залежності у випадку реакції  $dd$ -синтезу для різних радіусів екранування при фіксованому  $\kappa = 10^{-17} \text{ MeV} \cdot \text{фм}^{-2}$  і  $r_{\text{nucl}} = 2 \text{ фм}$ . Загальна картина виглядає так, що тунелювання (а значить і синтез) суттєво залежить від температури: принаймні на декілька порядків величини змінюється  $\tilde{D}(T)$  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  $\tilde{D}$  залежність від  $\mu$  дуже подібна: чим менша зведена маса, тим більшим є  $\tilde{D}$ . Цей факт відображений на рис. 3, де показана залежність  $\tilde{D}$  від зведеної маси. Для конкретності ми вибрали  $r_D = 0.5 \text{ \AA}$ , і намалювали криві для трьох температур:  $T = 0 \text{ K}$ ,  $T = 1000 \text{ K}$  і  $T = 2000 \text{ K}$ . Внизу рисунка вказані конкретні значення  $\mu$  для різних пар ізотопів гідрогену.

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

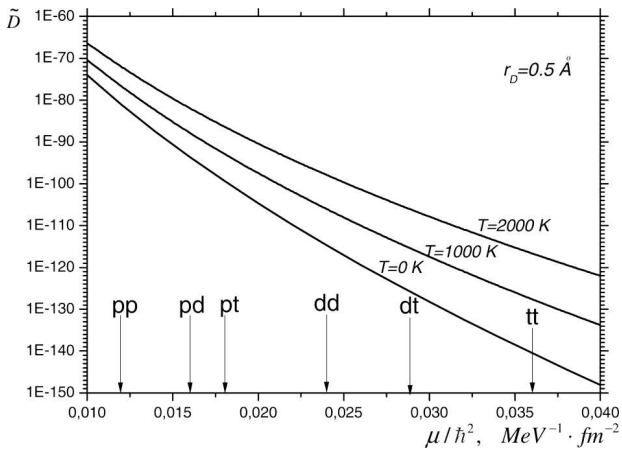


Рис. 3. Залежність  $\tilde{D}$  від зведеної маси  $\mu$

(рис. 2). Подібні температурні залежності  $\tilde{D}(T)$  для  $pd$ -,  $pt$ - і  $dt$ -тунелювання підтверджують загальний висновок щодо залежності  $\tilde{D}$  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  $\tilde{D}$  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  $\nu$  в нашому випадку становлять порядку  $10^{13} \text{ c}^{-1}$ . У квазікласичному наближенні ця частота відповідає по порядку величини кількості зіткнень двох ізотів 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,  $N_0 \cdot \nu \cdot \tilde{D}$ , було б дуже малим через малість  $\tilde{D}$  (навіть для  $r_D \sim 0.1 \text{ \AA}$ , див. рис. 2, 4–7). Але для  $pp$ -тунелювання ця мала ймовірність все ж, як видно, найбільша.

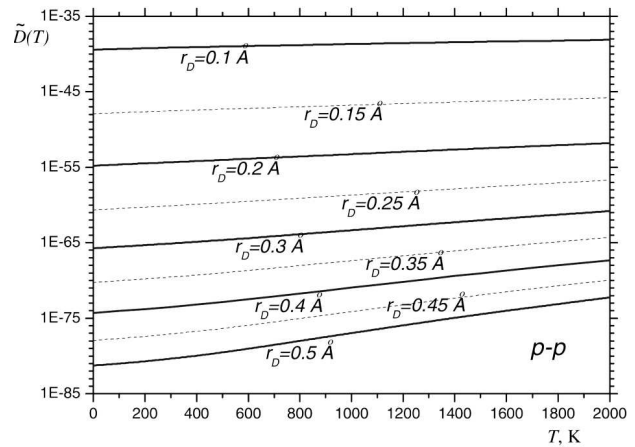


Рис. 4. Температурна залежність  $\tilde{D}(T)$  для  $pp$ -тунелювання

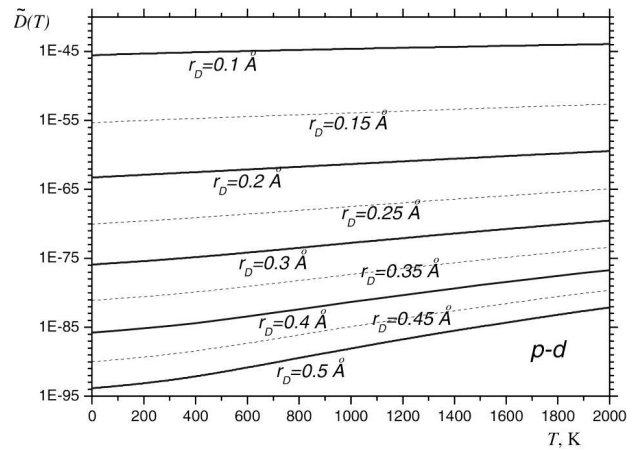


Рис. 5. Температурна залежність  $\tilde{D}(T)$  у випадку  $pd$ -тунелювання

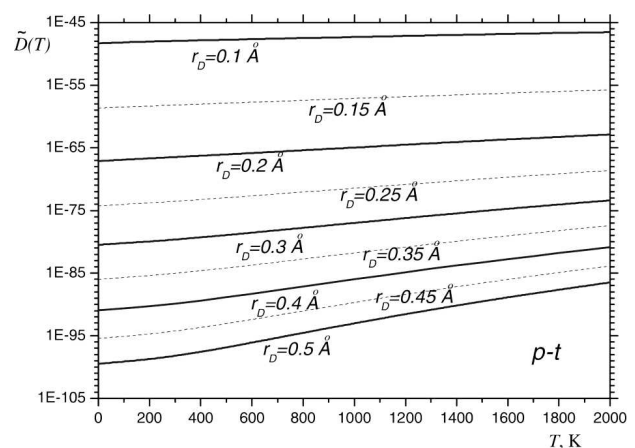


Рис. 6. Залежність ефективного коефіцієнта прозорості  $\tilde{D}$  від температури для  $pt$ -тунелювання

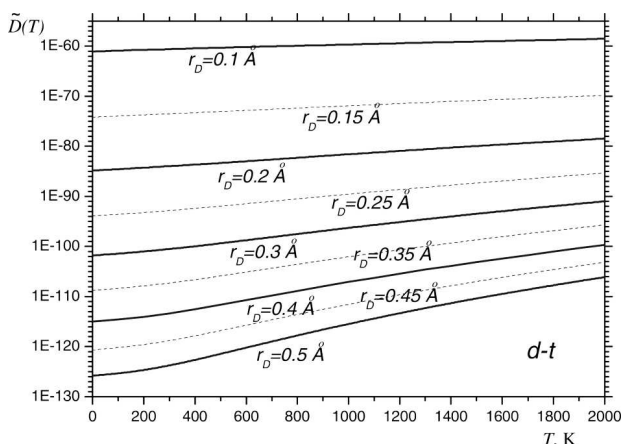


Рис. 7.  $\tilde{D}(T)$  для  $dt$ -тунелювання

Отже, найбільш ймовірною реакцією у зразку з дефектами, насиченими ізотопами гідрогену, є  $pp$ -реакція, яка дає в результаті  $p + p \rightarrow d + e^+ + \nu_e + 0,42 \text{ MeV}$ . Наступна за нею анігіляція позитрона у середовищі з електронами дає додаткову енергію  $2m_e c^2 \cong 1,02 \text{ MeV}$  у формі  $\gamma$ -квантів. Важливо, що отриманий у вищезазначеній реакції дейтрон має енергію  $\leq 0,08 \text{ MeV}$  (або  $\sim 10^9 \text{ K}$ ), 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  $\gamma$ -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  $0,42 + 1,02 = 1,44 \text{ MeV}$  на кожну реакцію), так і у ролі джерела швидких дейтронів. Ми тут не зупиняємося на значно менш ймовірній реакції  $p + p + e^- \rightarrow d + \nu_e + 1,44 \text{ MeV}$ , 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  $\sim 10^3 \text{ K}$  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  $r_D$ ), 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. С.Р. 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. В.Е. 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. А.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. А.Yu. Dzyublik. Influence of electronic environment on  $\alpha$  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

*V.E. Grinyuk, I.V. Simenog*

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

Резюме

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.