

УДК 550.42+550.89+551.21+552.3+552.112+553.212+546.212+549.691

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ ВОДОРОДА В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВАХ И ПРОБЛЕМА НУКЛЕОСИНТЕЗА В ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

В.А.Киркинский, Ю.А.Новиков

Институт минералогии и петрографии СО РАН, Новосибирск

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 96-05-66120.

Вестник ОГГГГН РАН № 2(12) 2000, т. 2

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/2-2000/empg_99/planet_3.htm#begin

© 2000 ОИФЗ РАН, ОГГГГН РАН

В последние годы получены многочисленные экспериментальные свидетельства ядерных реакций при низких энергиях, однако до сих пор не создано удовлетворительной количественной и даже качественной теории этого явления, имеющего принципиальное значение для фундаментальной науки и практического использования. Обзор наиболее убедительных экспериментальных работ и имеющихся теоретических гипотез о природе холодного ядерного синтеза (ХЯС) проведен в [1].

Нами разработана оригинальная теоретическая модель механизма ядерных реакций в кристаллических структурах металлов [1, 2]. Использован новый подход к оценке электронного экранирования, основанный на динамическом учете деформации внешних электронных оболочек металла во время встречного движения дейтронов. Существо модели можно пояснить следующим образом. Положительно заряженные ионы изотопов водорода при движении в кристаллической структуре вызывают повышение электронной плотности в своей окрестности за счет кулоновского взаимодействия с электронами внешних оболочек металла. Этот эффект особенно сильно выражен в области, разделяющей два сближающихся иона. В результате происходит возрастание экранирования заряда дейтронов (протонов), что приводит к возможности их сближения на расстояния, при которых вероятность туннельного взаимодействия становится существенной.

Проведены также расчеты скорости ХЯС для другой модели, которая исходит из того, что плотность вероятности электронов в атомах является результатом движения электронов по изменяющимся, но связным орбитам с выполнением фундаментальных законов сохранения энергии и момента импульса для системы в целом. Задавая наиболее вероятные невозмущенные начальные орбиты внешних 4d-электронов палладия, мы численно исследовали их деформацию и воздействие на сближающиеся дейтроны.

Как показали результаты компьютерного моделирования, для обеих моделей получены скорости ядерного синтеза, измеримые современными методами и по порядку величин соответствующие полученным на основе данных измерений выхода избыточного тепла.

Важно отметить, что модель 2 фактически исходит из первых принципов, а также достоверных эмпирических данных о свойствах кристаллической структуры палладия и коэффициентах диффузии изотопов водорода в ней.

Как следует из описанных выше моделей, критическими факторами для осуществления ХЯС являются:

- электронная структура металла (заполненные или почти заполненные внешние d- или f-оболочки), возможность гибридизации внешних электронных оболочек металла и водорода;
- высокое содержание дейтерия в дейтериде металла (высокая степень заполнения октаэдрических пустот и частичное заполнение тетраэдрических пустот);
- высокая подвижность дейтерия в дейтериде металла, определяемая высоким коэффициентом диффузии, большими градиентами концентрации дейтерия, фазовыми переходами, механическими, электромагнитными и ультразвуковыми воздействиями, импульсными токами и т.д.;
- реальная кристаллическая структура металла (наличие большого числа дислокаций и дефектов должно оказывать отрицательное воздействие на скорость ядерного взаимодействия);

На основе накопленного экспериментального материала и проведенного нами теоретического анализа ХЯС можно сделать следующие заключения о возможности и условиях природного нуклеосинтеза.

1. ХЯС достоверно зафиксирован в целом ряде физических и физико-химических процессов с участием дейтерия. Многие из таких процессов, но с участием природного водорода, имеют место и в естественных процессах. К их числу можно отнести: явление сорбции-десорбции водорода в металлах, окислительно-восстановительные реакции с участием водорода, фазовые переходы в водородных соединениях, ударно-волновые воздействия на соединения водорода, механическое разрушение и измельчение водородо-содержащих пород.

Учитывая реальную концентрацию дейтерия в природном водороде можно ожидать, что в этих процессах реакции $p+D \rightarrow {}^3\text{He}$ будут на 3 порядка, а реакции $D+D$ на 6-7 порядков менее интенсивны, чем в дейтериевых соединениях.

2. Продуктами ядерного синтеза являются ^3He , ^4He , тритий, свободные нейтроны, а также различные вторичные продукты взаимодействия этих продуктов реакций, обладающих высокой (порядка МэВ) энергией, с ядрами элементов вмещающей породы.
3. Продукты ХЯС могут быть обнаружены, в первую очередь, в обстановках высокой концентрации водорода и его неорганических и органических соединений, окислительно-восстановительных реакций с его участием, в процессах сорбции-десорбции и диффузии водорода в кристаллических структурах минералов (в особенности самородных металлов, например железа).
4. Причиной повышения содержания ^3He может быть не только образование его под действием космических лучей, в особенности, на начальных этапах формирования планеты, но и в результате протекания реакций ХЯС в недрах Земли.
5. Наилучшим индикатором реакций ХЯС в геологических объектах является нахождение трития в том случае, если будет доказано его естественное происхождение. Значительное повышение отношения $^3\text{He}/^4\text{He}$ является важным указанием на возможность ХЯС, однако в этом случае необходимо исключить участие процессов абляции – то есть образования ^3He в результате космических воздействий.
6. В природных процессах возможны явления трансмутации (превращений) элементов под действием изотопов водорода. Ввиду того, что эти явления имеют принципиальное значение для геохимии, они будут рассмотрены в отдельной работе.
7. Учитывая общую массу водорода в оболочках Земли и длительность геологической истории, можно предполагать, что ХЯС, сопровождающийся большим выделением энергии, вносит значительный вклад в энергетику планеты, однако масштабы этого воздействия еще предстоит выяснить.

Литература:

1. Киркинский В.А., Новиков Ю.А. Теоретическое моделирование холодного ядерного синтеза. Новосибирск, 1998, 48 стр. (Препринт)
2. Kirkinskii V.A., Novikov Y.A. Europhysics Letters (Submitted)