В. И. Высоцкий, Р. Н. Кузьмин, О возможности оптимизации реакции управляемого синтеза в кристаллах, *ЖТФ*, 1983, том 53, выпуск 9, 1861–1863

[14] *И. М. Цидильковский.* Зонная структура полупроводников. «Наука», М. (1978).
[15] *С. Дэвисон, Дж. Левин.* Поверхностные (таммовские) состояния. «Мир», М. (1973).
[16] *M. A. Mekhtiev.* Sol. St. Commun., 28, 299 (1978).

Институт физики АН БССР
Минск

Поступило в Редакцию
5 ноября 1982 г.

УДК 539.172.14

О ВОЗМОЖНОСТИ ОПТИМИЗАЦИИ РЕАКЦИИ УПРАВЛЯЕМОГО СИНТЕЗА В КРИСТАЛЛАХ

В. И. Высоцкий, Р. Н. Кузьмин

В [1] был предложен метод реализации энергетически выгодной реакции управляемого синтеза в кристаллической мишени, использующий резкое повышение сечения реакции $\sigma_n \to \sigma_n^* \gg \sigma_n$ с одновременным относительным уменьшением сечения потерь $\sigma_e \to \sigma_e^* > \sigma_e$ при надбарьерном движении пучка ускоренных частиц. При этом степень повышения эффективности реакции определяется в первую очередь отношением $k = (\sigma_n^*/\sigma_e^*)/(\sigma_n/\sigma_e)$.

Там же на основе квазиклассического описания было показано, что в случае осевого надбарьерного движения $k \approx 100$ и становится выгодной реакция синтеза при относительной концентрации тяжелого изотопа D (или T) в водородсодержащих плоскостях или осях кристалла на уровне $\eta \geqslant P_0/P_1 k \approx 0.3 \div 0.03$. Параметр $P_1/P_0 \approx 0.04 \div 0.4$ определяет отношение объемных плотностей выделяемой и поглощаемой энергии в изотопной мишени [1]. Используемые ниже обозначения соответствуют принятым в [1].

1. Кроме оптимизации η за счет увеличения $\sigma_n^* \gg \sigma_n$, рассмотренной в [1], возможно дополнительное значительное уменьшение пороговой концентрации η при управляемом абсолютном уменьшении σ_e^* до значений $\sigma_e^* \ll \sigma_e$ за счет уменьшения на время взаимодействия (реакции) плотности атомных электронов в области расположения ядер, где с подавляющей вероятностью будут находиться надбарьерные частицы. Такая кратковременная перестройка электронной оболочки водородсодержащих плоскостей возможна за счет возбуждения электронного перехода в атоме из s- в p-состояние. Использование резонансного лазерного π-импульса приводит к полной инверсии этого перехода. Оценим величину такого эффекта.

При возбуждении электронного перехода $\Psi_{100} \to \Psi_{210}$ усредненные по кристаллической плоскости линейная плотность p-электрона $f_p(x)$ и потенциал плоскости $V_p(x)$ в области $x,\ u \ll R$ (u — амплитуда тепловых колебаний) равны

$$f_p(x) \approx (u^2 + x^2)/16R^3, \quad V_p(x) \approx V(0)\left[1 - 3x^2/\sqrt{8\pi}Ru\right].$$

При непосредственно надбарьерном движении область локализации частицы $|\Delta x| \lessapprox u$, для которой сечение $\sigma_n^* \approx \sigma_n a/\sqrt{2\pi}\,u$ остается тем же, соответствует условию

$$|\Delta x| \equiv \left\{\left|E_0 - p_z^2/2m - V(0)\right| \sqrt{8\pi}\,uR/3V(0)\right\}^{1/2} \lessapprox u.$$

Отсюда, используя соотношение $E_0 - p_z^2/2m \approx E_0\theta^2$, находим допустимый интервал углов $\Delta\theta \approx 3u\theta/\sqrt{8\pi}R = \theta/10 \geqslant 10^{-3}$.

На основе определения σ_e^* [1] находим $\sigma_e^* \approx \sigma_e a u^2/16R^3$, что для оценочных параметров [1] соответствует $\sigma_e^* \approx 3\cdot10^{-3}\,\sigma_e$ и $k \approx 3\cdot10^3$. Аналогично для осевого надбарьерного движения в направлении, соответствующем пространственному минимуму функции $|\Psi_{210}|^2$, определяемому направлением и поляризацией луча лазера, находим $k > 10^4$.

Такое значительное дополнительное абсолютное подавление канала поглощения с одновременным неизменным усилением канала синтеза позволяет осуществлять энергетически выгодную реакцию при облучении ускоренными ядрами трития необогащенной мишени с естественным содержанием дейтерия $\eta \approx 1.5\cdot10^{-4}$ в водородсодержащих плоскостях.

2. Следующим важным вопросом оптимизации реакции является учет влияния всегда имеющего место деканалирования на эффективность синтеза. Уравнение баланса, учитыва-

ющее возможность деканалирования частиц за счет упругого рассеяния с сечением σ_d, имеет вид

$$Jn_0\Delta z E_1 [\sigma_n^* (1-\Delta w_d) + \sigma_n \Delta w_d] > Jn_0 \Delta z (\delta E/\Delta E) E_0 [\sigma_e^* (1-\Delta w_d) + \sigma_e \Delta w_d].$$

Слагаемые, учитывающие изменение сечения реакции $\sigma_n^* \to \sigma_n$ и потерь $\sigma_e^* \to \sigma_e$ для деканалированных частиц и пропорциональные вероятности упругого рассеяния с деканалированием $\Delta\omega_d \approx \sigma_d n_0 \Delta z$, могут существенно изменить ситуацию при $\Delta w_d \to 1$. Для среды толщиной $\Delta z \geqslant \Delta z_d = 1/\sigma_d n_0$, число деканалированных частиц становится очень большим, и задача сводится к взаимодействию ускоренного пучка с изотропной мишенью, где выигрыш всегда отсутствует. В противоположном случае $\Delta z \ll \Delta z_d$ основные результаты, полученные ранее, остаются справедливыми.

Для задачи о движении тяжелых заряженных частиц сечение σ_d определяет суммарную вероятность двух разных процессов: а) однократного рассеяния на большой угол

$$\sigma_d (\theta_d \geqslant \Delta\theta_d) \approx \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \int\limits_{\Delta\theta_d(\varphi)}^{\pi} \frac{d\sigma_d}{d\theta} \sin\theta d\theta,$$

б) многократного рассеяния на малые углы с результирующей дисперсией

$$\langle\theta_d^2\rangle = n_0 \Delta z \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \int\limits_0^{\Delta\theta_d(\varphi)} \theta^2 \frac{d\sigma_d}{d\theta} \sin\theta d\theta \geqslant (\Delta\theta_d)^2.$$

Здесь

$$\Delta\theta_d(\varphi) = \Delta\theta/|\cos\varphi|, \quad -\frac{\pi}{2} \leqslant \varphi \leqslant \frac{\pi}{2}; \quad \Delta\theta_d(\varphi) = 2\theta/|\cos\varphi|, \quad \frac{\pi}{2} \leqslant \varphi \leqslant \frac{3\pi}{2}.$$

Если выбрать плоскость кристалла совпадающей с yoz, то последние условия соответствуют тому, что допустимое диффузионное изменение углов рассеяния, приводящее к их увеличению (т. е. в интервале $\pi/2 \leqslant \varphi \leqslant \pi/2$) есть $\Delta\theta$, а рассеяние в противоположную сторону (т. е. к плоскости при $\pi/2 \leqslant \varphi \leqslant 3\pi/2$) допускает изменение угла скольжения, не нарушающее режим ориентационного движения, на 2θ. В последнем случае рассеянная частица из-за диффузии неизбежно перейдет к надбарьерному движению и будет участвовать в синтезе.

В борновском приближении дифференциальное сечение упругого деканалирования для водородоподобного атома в s-состоянии равно [2]

$$\frac{d\sigma_d}{d\Omega} = (2em/\hbar^2 K^2)^2 \left| \int\limits_0^\infty [\sin Kr/Kr] [\rho_n(r) - \rho_e(r)] 4\pi r^2 dr \right|^2,$$

$$K = (2p/\hbar) \sin\theta/2, \quad \rho_e(r) \equiv e|\Psi_{100}|^2 = (e/\pi R^3) \exp(-2r/R).$$

Как следует из непосредственного анализа, рассеяние на электронном облаке, распределенном с плотностью $\rho_e(r)$, ограничено интервалом углов с $\theta_e^{\max} \approx \hbar/pR \approx 10^{-4} \ll \Delta\theta_d$ и в случае «а» может не учитываться. Для учета рассеяния на ядрах напомним, что каждый атом в кристалле находится в осцилляторной потенциальной яме, образованной его соседями. При низкой температуре атом конденсирован в нижних, чисто квантовых состояниях Ψ_{n0} колебательного спектра. В основном состоянии, что соответствует наименьшей области локализации ядер (с точки зрения деканалирования, наихудшей ситуации), плотность распределения ядерного заряда и квантовомеханической вероятности равна

$$\rho_n(r) \equiv e|\Psi_{n0}|^2, \quad |\Psi_{n0}|^2 = (2\pi u_0^2)^{-3/2} \exp(-r^2/2u_0^2), \quad u_0 = \sqrt{3}\,u.$$

Используя полученные соотношения для $p_n(r)$ и $\rho_e(r)$, находим

$$\frac{d\sigma_d}{d\Omega} = (e^4/16E_0^2) [\exp(-3K^2u^2) - (1 - K^2R^2/4)^{-2}]^2 \operatorname{cosec}^4\theta/2,$$

что принципиально отличается от обычно используемого выражения для $d\sigma_d/d\Omega$, основанного на аппроксимации $\rho_n(r) = e\delta(r)$, и совпадает с ним только при $u=0$. Следовательно, упругое рассеяние на «размазанном» ядерном заряде в основном ограничено угловым интервалом с $\theta_n^{\max} \approx \hbar/\sqrt{3}pu \approx 6\cdot10^{-4} < \Delta\theta_d$. Численный анализ показывает, что длина деканалирования за счет однократного рассеяния соответствует 10—20 мкм. Таким образом, основную роль при деканалировании играет многократное малоугловое рассеяние. Решение уравнения для $\langle\theta_d^2\rangle$ дает $\Delta z_d \approx E_0^2 (\Delta\theta_d)/4\pi_0 e^4 \approx 3$ мкм. Учитывая возможный обратный захват в канал при торможении и других эффектах, в качестве приемлемой оценки Δz_d для реакции T+D можно принять величину $\Delta z_d \approx 5$ мкм. В этом случае использование кристаллов с $\Delta z \approx 1 \div 2$ мкм позволяет не учитывать деканалирование.

При рассмотренном выше лазерном возбуждении атома рассеяние происходит на электронном облаке с плотностью заряда

$$\rho_e(r) \equiv e\,|\Psi_{210}|^2 = (er^2/96\pi R^5)\exp(-r/R).$$

Возрастание среднего радиуса электронного распределения до значения $\langle r\rangle = 3R$ приводит к существенному уменьшению угловой ширины диффракционного максимума, уменьшению $\langle\theta_d^2\rangle$ и увеличению Δz_d. Такая модель позволяет пренебречь деканалированием для мишеней с $\Delta z \approx 3 \div 8$ мкм.

Дополнительное увеличение Δz_d достигается в других типах реакций, характеризуемых большей оптимальной энергией E_0.

3. Поскольку создание кристаллических мишеней из одной водородной компоненты невозможно, то для оценки реальности метода необходимо определить влияние соседних плоскостей и осей матрицы, не содержащих водорода. Так как высота потенциальных барьеров атомов матрицы $V_м$ всегда гораздо выше, чем высота барьера $V(0)$ у водородсодержащих плоскостей, то непосредственно надбарьерное движение налетающей частицы вблизи атомов водорода одновременно должно соответствовать каналированному (отталкивательному) движению в поле атомов матрицы. Так как $V_м \gg V(0)$, то движение в поле матрицы соответствует низколежащим уровням, так что частица все время будет находиться в области очень малой электронной плотности матрицы, причем измененное сечение поглощения на ней равно (R_0 — радиус Томаса—Ферми атомов матрицы) $\sigma^*_{ем} \leqslant \sigma_{ем}\exp(-2a/R_0)$. Формально наличие матрицы приводит к замене $\sigma^*_e \to \sigma^*_e + \sigma^*_{ем}$. При $R_0 \approx 2\cdot 10^{-9}$ см имеем $\sigma^*_{ем} \leqslant 10^{-4}\sigma_{ем}$, $\sigma^*_n/\sigma^*_{ем} > 10^4\,\sigma_n/\sigma_{ем}$, что позволяет пренебречь влиянием поглощения на матрице.

Особенности ориентационного движения, являющегося одновременно каналированным по отношению к матрице и надбарьерным по отношению к плоскостям синтеза, приводят к еще одной возможности подавления рассеяния. Поскольку при таком рассеянии на водороде частица по-прежнему может занимать только разрешенные дискретные уровни каналированного движения в поле матрицы, то сам процесс упругого рассеяния происходит в несколько этапов, на первом из которых частица переходит из надбарьерного на вышерасположенный уровень. Поскольку рассеяние на этом вышележащем уровне на много слабее, чем на надбарьерном, то процесс рассеяния приводит к почти полному переходу на этот уровень и только после этого к рассеянию с переходами на остальные еще вышележащие уровни. Так как расстояние $\Delta\omega$ между анализируемыми уровнями лежит в ИК диапазоне, то наложение резонансного π-импульса приводит к восстановлению состояния пучка, т. е. его эффективному охлаждению. Многократное повторение такого обращения резко увеличивает эффективную длину деканалирования $\Delta z_d^* \gg \Delta z_d$. Отметим, что необходимость совмещения одновременно каналированного и надбарьерного движения накладывает очевидные ограничения на температуру и параметры мишени.

Отметим также, что возможна оптимизация задачи при многократном пропускании пучка через тонкую мишень (или мишени) с промежуточной монохроматизацией частиц по поперечной скорости.

Литература

[1] *В. И. Высоцкий, Р. Н. Кузьмин.* Письма ЖТФ, 7, 981 (1981).
[2] *Д. И. Блохинцев.* Основы квантовой механики. «Высшая школа», М. (1963).
[3] *М. А. Кумахов, Г. Ширмер.* Атомные столкновения в кристаллах. Атомиздат, М. (1980).

Киевский
государственный университет
им. Т. Г. Шевченко

Поступило в Редакцию
14 июля 1982 г.
В окончательной редакции
8 апреля 1983 г.