氘-氘两体紧束缚态模型* ▮

张兆群
(北京应用物理与计算数学研究所　北京　100088)
张中良
(中国科学院化学研究所　北京　100080)

摘　要　提出了氘-氘紧束缚态模型. 对两个氘原子核组成的体系, 采用库仑势垒与核力方势阱组合的相互作用势, 求解定态薛定谔方程, 得到了两体紧束缚态的波函数和可能的能量本征值(核的库仑能数量级), 并说明了这种紧束缚态的存在条件.

关 键 词　两体　紧束缚　结合能
分 类 号　TL6

1　引言

1989 年, 英美科学家关于常温下"核聚变"的结果[1]公布之后, 科学界为之震动并引起一场大的争论. 经过 9 年的努力, 目前世界上已有许多研究机构不同程度地观测到了超热和核嬗变等现象, 同一实验结果可以在另外某些实验小组得到不同程度地重复, 这种共识促使许多国家的科学家为寻求人类干净、简易廉价的能源锲而不舍并形成国际竞争. 第七届国际冷聚变会议于 1998 年 4 月 19～24 日在加拿大温哥华举行, 有美、日、意、俄、中、法、德、澳、英等 22 个国家的 221 位代表参加, 会议收集论文 138 篇, 中国学者的有 14 篇. 现状表明, 与"冷聚变"一词并不完全"名符其实"的一些现象已是一个难以否定的客观存在: 电解、放电, 甚至静置都可观测到涉及钯、氘、氢等材料的异常现象. 反应的产物, 有的是氚, 有的是中子, 或者是多种原子核; 有的是 X 射线, 或者是超热, 实验结果的重复性不断增加. 但是, 产生这些现象的机制仍然不明, 已经提出了许多种理论模型, 例如电极吸附氘的晶格理论[2]、氘原子中的核-电子两体紧电子轨道理论[3]、异常电子俘获理论[4]、异常遂道效应理论[5]、Barut 的核-电子-核三体紧束缚态理论和反物质理论等. 然而, 即使在"冷聚变"同行研究者之间, 争议也很大, 尚无一种公认的、创新的理论能比较合理地解释和预言某些实验结果, 这与实验本身还处在探索阶段有关. 目前, "冷聚变"实验产物的产额及功率很低, 实验中的化学或物理反应似乎不存在象核裂变、热核聚变中的那种"链式"放大或集体效应, 属于单个低概率事件. 只有在实验和理论取得了某种突破性进展之后才能涉及开发应用. "冷聚变"研究经历了"过热"、"冷却"阶段后, 进入了"冷静"、稳步发展的阶段(也可能有因商业价值拟转入"地下"). 能源的需求、对科学的兴趣, 使"冷聚变"引起人们继续的关注和争议是自然的和必要的事情. 本文提出一种可能的解释"冷聚变"现象的理论模型. 我们认为, "冷聚变"的一些现象系由化学作用所促成, 应研究化学与原子核两者的关联. 理论研究的方法是把库仑势和核力势组合起来求解薛定谔方程.

2　氘-氘体系薛定谔方程的解

对两个氘原子核组成的体系, 两体有心力场的波函数为

▮　收稿日期: 1997 - 11 - 20, 修改稿: 1998 - 11 - 15.
*　国家自然科学基金(项目号 19455001-B)资助.

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)\ ,$$

其中 $u(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-U(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}u(r)=0\ , \tag{1}$$

相互作用势，我们采用库仑势垒和核力方势阱的组合：

$$U(r)=\begin{cases}\dfrac{e^2}{r}\ , & r>r_0\\ -U_0\ , & r<r_0\end{cases}$$

其中，r_0 为核力力程，U_0 为阱深，折合质量 $\mu=m_p$，m_p 为质子的质量.

在库仑区($r>r_0$)，方程(1)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-\frac{e^2}{r}]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}u(r)=0\ . \tag{2}$$

类似于对氢原子问题的求解方法[6]，对负能态，$E<0$，令

$$\rho=\alpha r,\quad \alpha=\sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}}>0,$$

$$\beta=\frac{e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{\mu}{2|E|}}>0\ , \tag{3}$$

方程(2)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{-\beta}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}u(r)=0\ . \tag{4}$$

当 $\rho\to\infty$时，为保证波函数有限，渐近解取 $\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}$；当 $\rho\to 0$ 时，渐近解为 ρ^{l+1}和 ρ^{-l}. 于是，可将 $u(\rho)$分为两类：

$$u(\rho)=\rho^{-l}\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}\sum_{\nu=0}^{\infty}b_\nu\rho^\nu, \tag{5}$$

$$u(\rho)=\rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}\sum_{\nu=0}^{\infty}b_\nu\rho^\nu\ . \tag{6}$$

将(5)式代入方程(4)后，得到递推公式

$$b_{\nu+1}=\frac{\nu-l+\beta}{(\nu-l+1)(\nu-1)-l(l+1)}b_\nu\ . \tag{7}$$

为保证波函数有限，级数只能取有限项，设最高项为 $\nu=n_r$，$n_r=0$，1，2，…，将 $\nu=n_r$ 代入(7)式，由 $b_{n_r+1}=0$ 和 $b_{n_r}\neq 0$，得 $\beta=l-n_r$. 除了 $l=0$ 之外，只要 $l>n_r$，就有 $\beta>0$，这符合(3)式的要求($\beta>0$). 可是将(6)式代入方程(4)，会得到

$$\beta=-(n_r+l+1)<0$$

的结果，这与(3)式的要求($\beta>0$)矛盾，因此必须抛弃. 在氢原子问题的求解中，为了避免在 $r=0$ 处波函数发散，抛弃了类似于(5)式的解，保留类似于(6)式的解；我们的取舍与氢原子问题的取舍恰好相反. 由于存在核力区，虽然库仑区的波函数含有 r^{-l}项，但因 $r>r_0$，只要 l 不是异常大，波函数仍然有限，并不发散. 因为 l 与 n_r 都是整数，所以

$$\beta=l-n_r=n,\quad n=1,2,3\cdots \tag{8}$$

于是，在库仑区，由(3)式和(8)式就得到了可能的能量本征值

$$E=E_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2n^2},\qquad n=1,2,3,\cdots \tag{9}$$

对一个确定的能级 E_n，角量子数

$$l=n+n_r=n,n+1,n+2,\cdots,$$

径向量子数

$$n_r=l-n\ .$$

与氢原子不同，不存在 $l=0$ 的态，并且 l 不比 n 小. 波函数 $u(r)$则是

$$u_{n,l}(r)=\frac{1}{(\alpha_nr)^l}\mathrm{e}^{-\alpha_nr/2}\sum_{\nu=0}^{l-n}b_\nu(\alpha_nr)^\nu\ ,\quad r>r_0 \tag{10}$$

其中，$\alpha_n=\sqrt{\dfrac{8\mu|E_n|}{\hbar^2}}$. 库仑区求出的 E_n 态还必须受到核力区($r<r_0$)参数[r_0, U_0]的制约和筛选.

在核力区($r<r_0$)，方程(1)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left\{k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}u(r)=0\ , \tag{11}$$

其中，$k=\sqrt{\dfrac{2\mu(U_0-|E|)}{\hbar^2}}>0$. 在 $u(0)=0$ 的边界条件下，方程(11)的解为球贝塞尔函数

$$u(r)=Aj_l(kr)\ ,\qquad r<r_0 \tag{12}$$

其中 A 为常数.

在 $r=r_0$ 处，波函数(10)式和(12)式的对数的导数必须连续，即

$$\frac{\mathrm{d}\{\ln[Aj_l(k_nr)]\}}{\mathrm{d}r}\Big|_{r=r_0}=\frac{\mathrm{d}\{\ln[u_{nl}(\alpha_nr)]\}}{\mathrm{d}r}\Big|_{r=r_0}\ , \tag{13}$$

此时，$k_n=\sqrt{\dfrac{2\mu(U_0-|E_n|)}{\hbar^2}}$. 方程(13)体现了核力参数 U_0 和 r_0 对能量 E_n 取值的制约和筛选，它是 E_n 态的存在条件. 对于物理上合理的 U_0(尽管不是特别清楚)和 r_0 值，不满足(13)式的那些 E_n 态不能存在.

对基态，量子数 $n=l=1$，$n_r=0$，波函数为比较简单的解析式，

$$u_{1,1}(r)=\begin{cases}\dfrac{b_0a_p}{2r}\mathrm{e}^{-r/a_p}\ , & r>r_0\\ A\left[\dfrac{\sin(k_1r)}{k_1r}-\cos(k_1r)\right], & r<r_0\end{cases} \tag{14}$$

其中 a_p 为质子的玻尔半径，

$$a_p=\frac{\hbar^2}{m_pe^2}=3\times10^{-12}\ \mathrm{cm}\ ,$$

比电子玻尔半径($a_e=5\times10^{-9}$ cm)小 1 840 倍，常数 A 和 b_0 由归一化条件决定：

$$k_1=\sqrt{\frac{2\mu(U_0-|E_1|)}{\hbar^2}}\ .$$

能量本征值 $E_1=-25$ keV 态的存在条件(13)式为

$$\frac{1}{k_1r_0}+k_1a_p=\mathrm{ctg}(k_1r_0)\ . \tag{15}$$

由于 $U_0\gg|E_1|$，方程(15)还可简化为

$$U_0\approx0.25a_p{}^2\ r_0{}^{-2}i^2\mathrm{MeV},\ i=1,2,3\cdots \tag{16}$$

例如 $r_0=2.4\times10^{-13}$ cm，$U_0\approx40$ MeV 时，(16)式可以被满足. 在核物理中[7]，方阱阱深 U_0 的值不是很确切. 光学模型中，$U_0=42$ MeV 可使中子的散射截面的理论值与实验一致；在质子散射问题中，拟合值 $U_0=26\sim53$ MeV；在质子-中子系统(氘核)研究中，用核结合能 $B=2.23$ MeV，反推方势阱 $U_0=37$ MeV. 在某些理论研究中，也用过 $U_0\sim r_0{}^{-2}$的近似关系[8]. 所以由(14)式描述的氘-氘基态可能是存在的. 由(14)式可见，e^{-r/a_p}表示两个氘原子核的间距在 a_p 尺度，并且 r^{-1}表示在 $r>r_0$ 区间，r 越小，波函数相对较大，意味着两个氘原子核之间的距离接近 r_0 的几率相对较大，比分子中两个氘原子核之间的距离(a_e 尺度)小 3 个量级，显示了一种紧束缚态，其结合能 $B=25$ keV(核的库仑能量级). 它不同于热核聚变放出 $B=23.85$ MeV 和由两个氘原子核聚合生成的原子核^{4}He，两者只是貌似而已.

3　讨论

对两个氘原子核组成的体系，我们采用

库仑势垒与核力方势阱的组合势，求解了定态薛定谔方程，得到了氘-氘两体紧束缚态的波函数和可能的能量本征值(核的库仑能量级)，并说明了这种紧束缚态的存在条件. 例如基态，结合能为 25 keV. 如果具有核的库仑能量级的核-核两体紧束缚态的解存在的话，也许意味着存在一种新的"核"(原子的中心部分)型态，它的结合能(若干 keV 量级)处于较小的化学能(若干 eV 能级)和巨大核结合能(若干 MeV 量级)之间，也许是新能源的基础.

参　考　文　献

1 Fleischmann M, Pons S. Electrochemically Induced Nuclear Fusion of Deuterrium. Electroanal Chem, 1989, 216: 301～303

2 张清福. 常温核聚变机理及实验验证的研究进展. 原子与分子物理学报, 1997, 14(2): 191～192

3 Samsonenko N, Takti D, Ndahayo F. On the Barut-Vigier Model of the Hydrogen Atom. Phys Lett, 1996, A220: 297～300

4 张中良. 在特定状态下发生核反应的可能性. 物理化学力学进展, 1997, 4: 87～93

5 李兴中. 核聚变而不带强放射性的新途径. 核聚变与等离子体物理, 1996, 16(2): 1～7

6 周世勋. 量子力学. 上海: 上海科技出版社, 1961, 66～69

7 杨福家, 王炎森, 陆福全. 原子核物理. 上海: 复旦大学出版社, 1993: 60～63

8 Flugge S. 实用量子力学(上). 北京: 人民教育出版社, 1982, 163～165; 194～196; 201～206

A Probable Theoretical Model on Deuterion-deuterion Two-body Tight Bound States

Zhang Zhaoqun

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics*, *Beijing* 100088)

Zhang Zhonglian

(*Institute of Chemistry*, *the Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100080)

Abstract Deuterion-deuterion tight bound states model about the mechanism of so-called "nuclear cold fusion" is proposed. To solve the stationary Schrodinger equation with combination potential which contains Coulomb barrier and square well potential from nuclear force for the system containing two deuterions, the wave-functions, the energy eigenvalues of the probable tight bound states and the existence condition of the tight bound states are obtained. In the case of ground state the binding energy is 25 keV. Two body tight bound states may be a new type for nuclear structure, its binding energy may be the ground of new energy source.

Key words two body tight bound binding energy

Classifying number TL6