اثر جذب هیدروژن بر روی سطح پالادیوم و سزیوم تحت شرایط واکنش‌های هسته‌ای انرژی پایین (LENR)

غلامیان، فرشید* (۱)- فیروزآبادی، محمد مهدی(۲)

(۱) دانشگاه بیرجند ، دانشکده‌ی علوم ، گروه فیزیک

(۲) دانشگاه بیرجند ، دانشکده‌ی علوم ، گروه فیزیک

چکیده:

در این تحقیق، برای بررسی پارامترهای سیستم در یک واکنش کم‌انرژی هسته‌ای از نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده شده است. در این مقاله، انرژی جذب هیدروژن برای سطوح پالادیوم و سزیوم خالص و پالادیوم با پوشش سزیوم بررسی شد. نتایج شبیه سازی‌ها نشان می‌دهند که سطح نمونه‌ی پالادیوم با ناخالصی سزیوم، تحت شرایط LENR بهتر از پالادیوم خالص، هیدروژن را جذب می‌کند. به علاوه با اعمال میدان الکتریکی که در LENR استفاده می‌شود، سزیوم خالص هیدروژن را جذب نمی‌کند و نمی‌تواند نمونه‌ای مطلوب برای آزمایش در این حوزه باشد.

کلمات کلیدی: *واکنش‌های هسته‌ای انرژی پایین، نظریه‌ی تابعی چگالی، انرژی جذب هیدروژن روی سطح*

Abstract:

In this study, Density Functional Theory (DFT) method has been used to investigate the system parameters in a low-energy nuclear reaction. In this paper, the absorption energy of hydrogen was investigated for palladium and cesium and cesium-coated palladium surfaces. The simulated results show that the surface of the sample of palladium with impurity cesium absorbs hydrogen under LENR conditions better than that of pure palladium. In addition, by applying the electric field, cesium sample does not absorb hydrogen and may not be a suitable sample to test in this field.

مقدمه :

یکی از روش‌هایی که برای تبدیل مواد رادیواکتیو و تأمین انرژی می‌تواند استفاده شود، واکنش‌های هسته‌ای انرژی پایین (LENR) است. در سال ۱۹۸۹ مارتین فلیشمن و استنلی پونز در آزمایش‌هایی که انجام می‌دادند مشاهده کردند که یک یا چند فرآیند ناشناخته هسته‌ای وجود دارد [1]. در سال ۱۹۹۰ پژوهشگران دیگر نیز متوجه شدند که نتایج آزمایش‌ها در این فرآیند با توصیف‌ها در مورد همجوشی هسته‌ای مغایرت دارد. آن‌ها چنین واکنشی را واکنش کم انرژی هسته‌ای نامیدند. واکنش‌های کم انرژی هسته‌ای در حقیقت مجموعه‌ای از پدیده‌هایی است که تحت شرایط خاص روی سطح فلزاتی که حاوی هیدروژن و یا ایزوتوپ‌هایش هستند، رخ می‌دهد [2]. این نوع واکنش‌ها، در انرژی‌های پایین می‌تواند رخ دهد و انرژی زیادی در این نوع واکنش

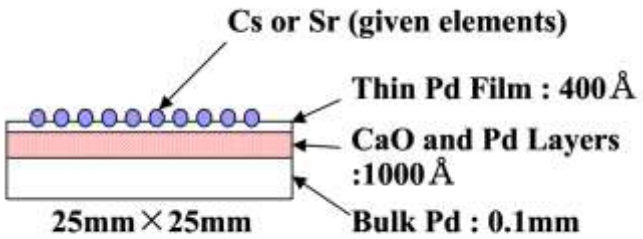
می‌تواند تولید شـود، در حالی که با آزمایش‌هایی که تاکنون انجام شـده، مشـخص شـده اسـت که در این واکنش‌ها، گسیل نوترون و یا گامای پر انرژی مشاهده نشده است.

در سال ۲۰۰۲، ایوامورا اولین گزارش تبدیل Cs به Pr را ارائه کرد که یکی از نقاط برجسته در تاریخ تحقیقات تبدیل در زمینه LENR به شمار می‌آید [3]. در این مطالعه از یک نمونه‌ی خیلی نازک که در شکل(۱) نشان داده شده است، استفاده شد. این نمونه که شامل لایه‌های Pd و CaO و Pd عادی به صورت متناوب بود، در یک محفظه خلاء قرار گرفت و آنالیز عنصـری با اسـتفاده از دسـتگاه طیف‌سـنج فوتوالکترونی پرتو ایکس (XPS) انجام شد. وقتی Cs روی سطح Pd اضافه شد و در معرض نفوذ گاز D_2 در دمای ۳٤۳K و فشار یک اتمسفر به مدت یک هفته قرار گرفت. نتایج نشان داد در حالی که Cs کاهش می‌یابد، Pr روی سطح Pd تولید می‌شود. شکل (۲) تغییرات زمانی چگالی اتمی Cs و Pr را در زمان نفوذ گاز دوتریوم نشان می‌دهد.

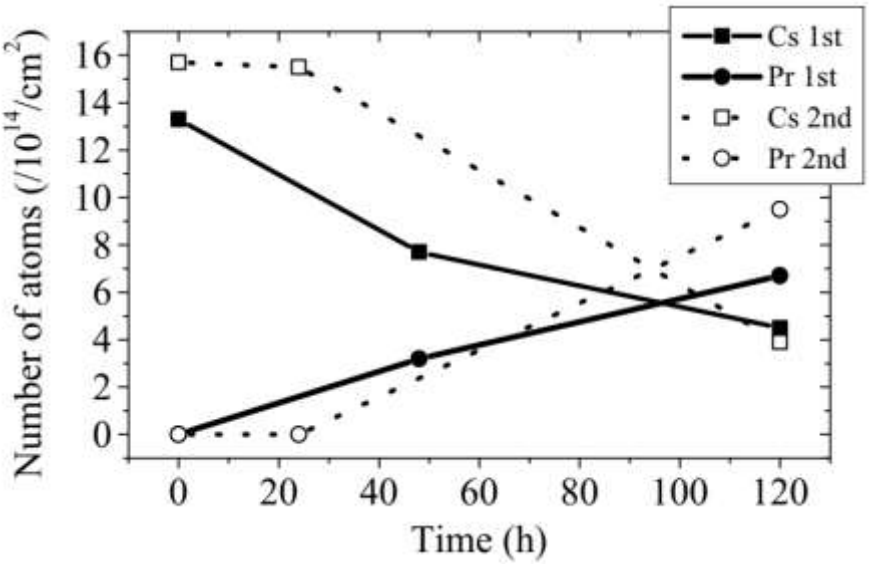
در سال ۲۰۰٦ ویدوم و لارسن به صورت تئوری توانستند پدیده‌ی LENR را توصیف کنند [4]. در حقیقت این پدیده نه براساس همجوشی و نه براساس شکافت است. در حالی که این فرآیند به نیروی هسته‌ای قوی وابسته است، ابتدا نیاز به یک برهم‌کنش ضعیف دارد.

فرآیند گیراندازی الکترون اولین واکنشی است که برای شروع پدیده‌ی LENR نیاز است. در این فرآیند یک پروتون یک الکترون جذب کرده و تبدیل به نوترون می‌شود. همچنین در این فرآیند یک نوترینو الکترونی تولید می‌شود.

$$p + e^- \rightarrow n + \nu_e$$



شکل (۱) ساختار ترکیب Pd که Cs یا Sr روی سطح آن قرار گرفته است.



شکل (۲) تغییرات زمانی چگالی اتمی Cs به Pr در زمان نفوذ گاز دوتریوم

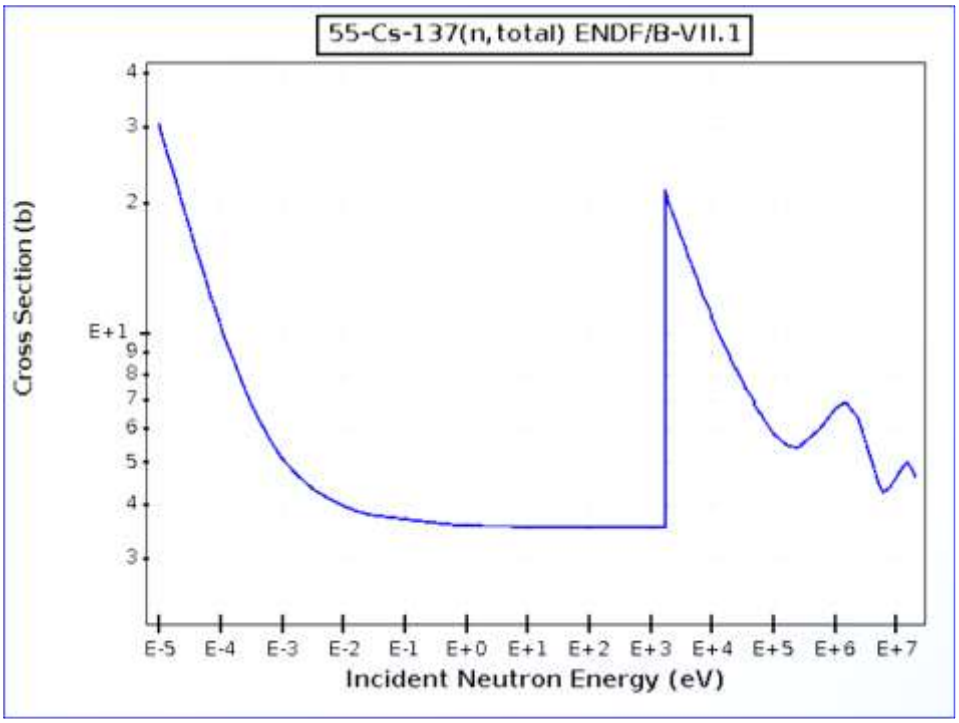
در این فرآیند بین پروتون و الکترون یک جاذبه‌ی کولنی برقرار است و هیچ سد کولنی برای انجام واکنش وجود ندارد. برای اینکه فرآیند گیراندازی الکترونی به صورت خودبه‌خودی رخ دهد باید از نظر انرژی نیز امکان پذیر باشد. برای این منظور شرط آستانه‌ای زیر برای انرژی الکترون وجود دارد.

$$m_e c^2 > m_n c^2 - m_p c^2 \approx 1.293 \text{ MeV}$$

در صورتی که از میون به جای الکترون استفاده شود، به دلیل اینکه جرم میون ۲۰۶ برابر جرم الکترون است، این شرط برای میون بهتر برآورده می‌شود. برای رسیدن به چنین انرژی از میدان الکتریکی می‌توان استفاده کرد. میدان الکتریکی در اینجا علاوه بر اینکه انرژی لازم برای انجام گیراندازی را فراهم می‌کند، چگالی الکترون‌ها در نزدیکی نمونه را نیز افزایش می‌دهد.

پس از گیراندازی الکترون، نوترون کم انرژی و به عبارتی نوترون با طول موج زیاد تولید می‌شود. چنین نوترونی سطح مقطع جذب بالایی دارد. سطح مقطع کل نوترون با Cs (شکل (۳)) نشان می‌دهد که هرچه نوترون کم انرژی‌تر باشد سطح مقطع کل آن افزایش می‌یابد. در مورد سطح مقطع کل نوترون با Pd نیز همین نتیجه را می‌توان گرفت. البته در انرژی‌های بالاتر تشدیدهایی نیز دیده می‌شود. در اینجا چون نوترون‌هایی با انرژی خیلی کم تولید می‌شوند، ابتدای منحنی، مورد نظر است. جذب نوترون‌های کم انرژی باعث تولید

هسته‌های نوترون-غنی می‌شود. حتی هسته‌های هاله‌ای[1] نیز می‌توانند تولید شوند. این هسته‌ها توانایی لازم



برای انجام برهم‌کنش ضعیف و واپاشی بتایی را دارند.

در این مطالعه، جذب دوتریوم و یا هیدروژن در سطح نمونه‌های پالادیوم و سزیوم خالص و پالادیوم همراه با سزیوم تحت شرایط LENR با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. این مطالعه هیچ توضیحی در مورد اساس نظریه‌ی LENR نمی‌دهد و در واقع محیط شیمیایی که در LENR استفاده می‌شود را بررسی می‌کند.

نحوه‌ی شبیه‌سازی :

تمام شبیه سازی‌های این مقاله با استفاده از کد شبیه سازی ADF انجام شده است [5]. هدف از شبیه سازی امکان جذب هیدروژن روی سطح نمونه است که برای این منظور انرژی کل سیستم با استفاده از تقریب

شکل (۳) سطح مقطع کل نوترون با Cs

[1] Halo Nuclei

GGA[1] محاسبه شده است. همه‌ی شبیه‌سازی‌های انجام شده برای گاز هیدروژن انجام شده است ولی نتایج محاسبه‌ها می‌تواند برای گاز دوتریوم نیز استفاده شود.

در شبیه سازی‌ها اجازه داده شد که انرژی هر سیستم کاهش یابد. بعد از اینکه، اتم‌های شبکه‌ی بلوری در موقعیت تعادلی خودشان قرار گرفتند، انرژی کل هر سیستم تخمین زده می‌شود. در نهایت انرژی جذب هیدروژن (E_{ads}) با استفاده از معادله‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$E_{ads} = E_{surf+H} - E_{surf} - \frac{1}{2}E_{H_2}$$

در اینجا، E_{surf} انرژی سطح نمونه، E_{surf+H} انرژی سطح نمونه به علاوه حضور اتم هیدروژن و E_{H_2} انرژی بستگی اتم هیدروژن است.

نتایج:

ابتدا محاسبات در شرایط عادی و بدون اعمال میدان الکتریکی انجام گرفت. در مرحله‌ی بعد، میدان الکتریکی $5 \times 10^{11}\, V/m$ که برابر با میدان اعمال شده در پدیده‌ی LENR است [6]، روی سیستم اعمال شد. نتایج شبیه‌سازی‌ها بدون میدان الکتریکی در جدول (۱) و نتایج همراه با میدان الکتریکی نیز در جدول(۲) قرار داده شده است. به علاوه، انرژی سیستم گاز هیدروژن برای قسمت اول و دوم شبیه‌سازی‌ها به ترتیب eV ۶٫۷۷- و ۹۶٫۹۲- تخمین زده شده است.

جدول (۱) مقدار انرژی هر سیستم بدون میدان الکتریکی

سطح نمونه	انرژی سیستم بدون هیدروژن (eV)	انرژی سیستم با هیدروژن (eV)	انرژی جذب هیدروژن (E_{ads}) (eV)
پالادیوم خالص	۳٫۸۰-	۱۸٫۳۸-	۱۱٫۱۹۵-
سزیوم خالص	۱٫۴۲-	۱۶٫۶۸-	۱۱٫۸۷۵-
پالادیوم با ناخالصی سزیوم	۱٫۲۸	۱۳٫۶۱-	۱۱٫۵۰۵-

[1] Generalized Gradient Approximate

جدول (۲) مقدار انرژی هر سیستم با میدان الکتریکی

سطح نمونه	انرژی سیستم بدون هیدروژن (eV)	انرژی سیستم با هیدروژن (eV)	انرژی جذب هیدروژن (E_{ads}) (eV)
پالادیوم خالص	-٤٧٤٠/٥٢	-٥١٥٤/٥٨	-٣٦٥/٥
سزیوم خالص	-٤٩٠٤/٧٢	-٤٧٢٥/٦٨	٢٢٧/٥
پالادیوم با ناخالصی سزیوم	-٤٠٩٦/٠٨	-٦٣٦٥/١٥	-٢٢٢٠/٦١

بحث ونتیجه گیری :

همانطور که در جدول (۱) مشخص است تمام نتایج به جز انرژی سطح پالادیوم همراه با سزیوم منفی است. علامت مثبت نشان می‌دهد که برای جذب سزیوم بر روی سطح پالادیوم نیاز به صرف انرژی داریم. به هر حال، اعمال میدان الکتریکی، انرژی لازم را برای جذب سزیوم روی سطح پالادیوم تأمین می‌کند. در جدول (۲) نیز انرژی جذب هیدروژن برای سزیوم خالص مقداری مثبت می شود. این مقدار مثبت نشان می‌دهد که استفاده از سزیوم خالص در پدیده‌ی LENR برای تبدیل سزیوم و تأمین انرژی ممکن نخواهد بود. چرا که جذب هیدروژن یکی از شرایط لازم برای پدیده‌ی LENR است.

وقتی سطح پالادیوم همراه با ناخالصی سزیوم باشد، که همان سطح آزمایش ایوامورا است، انرژی جذب هیدروژن برابر ۲۲۲۰/٦١- می‌شود که نشان می‌دهد این سطح از سطح پالادیوم خالص نیز برای جذب هیدروژن بهتر است.

مراجع :

[1] M. Fleischmann, S. Pons, and M. Hawkins, “Electrochemically induced nuclear fusion of deuterium,” *Electroanal. Chem.*, vol. 261, pp. 301–308, 1989.
[2] M. Srinivasan, G. Miley, and E. Storms, “Low Energy Nuclear Reactions: Transmutations,” no. February, 2011.
[3] Y. Iwamura, T. Itoh, M. Sakano, and S. Sakai, “Observation of low energy nuclear reactions induced by D2 gas permeation through Pd complexes,” in *Proc. of ICCF9*, 2002.
[4] A. Widom and L. Larsen, “Ultra Low Momentum Neutron Catalyzed Nuclear Reactions on Metallic Hydride Surfaces,” 2005.
[5] G. te Velde, F. M. Bickelhaupt, E. J. Baerends, C. Fonseca Guerra, S. J. A. van Gisbergen, J. G. Snijders, and T. Ziegler, “Chemistry with ADF,” *J. Comput. Chem.*, vol.

22, no. 9, pp. 931–967, 2001.
[6] Y. N. Srivastava, A. Widom, and L. Larsen, “A primer for electroweak induced low-energy nuclear reactions,” *Indian Acad. Sci.*, vol. 75, pp. 617–637, 2010.