



محاسبه‌ی چگالی آهنگ توان همجوشی در نانو ذرات کریستال پالادیوم دوتریوم‌دار با در

نظر گرفتن اثرات پتانسیل همپوشانی و آهنگ افت و خیز دوتریوم‌ها در سه بعد

سیده نسرين حسینی مطلق^۱؛ نازنین تولایی^{۲*}

^۱دانشگاه آزاد اسلامی شیراز، صدرا

^۲دانشگاه پیام نور شیراز، شهرک گلستان

چکیده: در این کار هامیلتونی برهم کنش دوتریوم-فونون در نانو ذرات کریستالی پالادیوم دوتریوم دار را به عنوان اختلالی در سیستم PdD در نظر گرفته و آهنگ افت و خیز دوتریوم‌ها در سه بعد را در سیستم PdD محاسبه کرده و سپس با استفاده از پتانسیل همپوشانی حاصل از برهم کنش یون-یون و قطبش الکترون‌ها به محاسبه‌ی چگالی آهنگ توان همجوشی $D-D$ وابسته به زمان می پردازیم و اثر این آهنگ افت و خیز را بر چگالی آهنگ توان همجوشی بررسی می کنیم.

کلید واژه: پتانسیل همپوشانی- چگالی آهنگ توان همجوشی- جرم موثر- آهنگ افت و خیز دوتریوم

مقدمه: در حدود دو دهه‌ی پیش فلیشمن و پونز تولید گرمای اضافی در طول الکترولیز آب سنگین روی الکترودهایی از نانو ذرات کریستالی پالادیوم گزارش کردند. [۱] این مطلب در طول سالیان بسیار تحقیق شد تا اینکه محصولات تریتیوم، نوترون و هلیوم روی الکتروده پالادیوم کشف شد. [۲] این همجوشی که در کریستال‌ها در دمای پایین به وجود آمده بود همجوشی سرد نامیده شد. در این کار ما قصد داریم که چگالی آهنگ توان همجوشی را با در نظر گرفتن اثرات همپوشانی حاصل از پتانسیل برهم کنش یون‌های دوتریوم و قطبش الکترون [۳] و آهنگ افت و خیز دوتریوم‌ها در سه بعد و اثرات بی نظمی شبکه با فرض اینکه چگالی دوتریوم‌ها به دلیل مصرف آنها با گذشت زمان تغییر می کند را، محاسبه کنیم. [۴]

نانوذرات پالادیوم دوتریوم دار

مواد نانو با اندازه‌ی ۱۵۰ آنگستروم در دو نوع مختلف ذرات طبقه بندی می‌شوند: آنسامبل مجزا که کلا ویژگی‌های خوشه‌های اتمی را نشان می‌دهد و در محدوده‌ی ۱۵۰ آنگستروم است و آنسامبل ذرات جایگزین شده در مواد که ویژگی‌های یکسانی را فقط در ۵۰ آنگستروم نشان می‌دهند. در محدوده‌ی ۵۰-۱۵۰ آنگستروم ویژگی‌های بالک یا توده را ظاهر می‌کنند. مواد بالک و توده‌ای به صورت کاملاً متفاوتی رفتار می‌کنند حتی اگر از مواد یکسانی ساخته شده باشند. مثلاً وقتی دو ماده‌ی A و B که A خوشه‌ی اتمی است، با یکدیگر ترکیب شوند سرعت پخش شدن B در خوشه‌ی اتمی A ، ۱۰ به توان ۹ برابر بزرگتر از پخش شدن آن در یک بالک A است. بنابراین در آزمایشات الکترولیز که توسط فلیشمن و پونز انجام شده بود به جای استفاده از کاتد‌هایی که از مواد بالک ساخته شده بود از یک کاتد با ساختار دوگانه استفاده شد. این کاتد از یک کاتد داخلی (پالادیوم سیاه) و یک کاتد خارجی (ظرف پالادیوم) ساخته شده است. پالادیوم سیاه پودر

بسیار نرمی در مقیاس نانو است که نانو ذره یا خوشه ی اتمی نامیده می شود و در یک فضای خلا در ظرف پالادیوم نگه داشته می شود که قابلیت جذب دوتریوم بیشتری درون ساختار خود دارد. [۱] و [۵]

اثر همپوشانی

اثر همپوشانی در واقع قرار گرفتن الکترون های رسانش فلز در فاصله ی بین هسته های واکنش دهنده به منظور کاهش سد کولنی بین هسته های واکنش دهنده می باشد. در این حالت ضخامت سد کولنی بین دو هسته ی دوتریوم، زمانی که همجوشی در یک سلول کریستال روی می دهد، کاهش می یابد و احتمال نفوذ از میان سد افزایش می یابد. اثر همپوشانی قادر به کاهش دادن فاصله ی بین هسته های است و از این طریق باعث بالا بردن آهنگ همجوشی می شود. زمانیکه یک اتم دوتریوم توسط یک کریستال پالادیوم جذب می شود در جایگاههای چهارگوشی و هشت گوشه نفوذ می کند و ابر الکترونی کروی به ناحیه ی بزرگتری به علت جاذبه ی اطراف یون های پالادیوم، توسعه می یابد. بنابراین انرژی پیوندی بین دوتریوم و الکترون های ظرفیت آن، بسیار زیاد کاهش می یابد و دوترون در ابر الکترونی بسیار سیال می شود و نیروی دافعه ی بین دو دوترون همسایه به علت اثر همپوشانی بسیار زیاد کاهش می یابد. بنابراین برخورد زیاد و همجوشی هسته ای به آسانی بدون نیاز به دمای بالا به وجود می آید. [۳] و [۸-۶]

محاسبه ی میانگین سطح مقطع واکنش با در نظر گرفتن پتانسیل همپوشانی ناشی از برهم کنش یون های دوتریوم و قطبش الکترون

پتانسیل همپوشانی حاصل از برهم کنش دوتریوم ها و قطبش الکترون به ترتیب به صورت زیر تعریف می شود. [۳]

$$H_i(r) = (e^2/b) \left[\begin{array}{l} 1.1547 + 1.1547(1-y) - 0.9935(1-y)^2 + \\ 4.3385(1-y)^3 - 5.3868(1-y)^4 \\ + 1.8728(1-y)^5 \end{array} \right] \quad (1)$$

در این رابطه $y = r/d$ و b ثابت شبکه ی فلز میزبان (پالادیوم)، است و d فاصله ی بین نزدیکترین همسایه های دوتریوم-دوتریوم است. که در آن $d=2,57$ آنگستروم و $b=4,01$ آنگستروم می باشند.

$$H_e(r) = e^2/d [f(y) - 2f(|y+1|/2) - 2f(|y-1|/2) + f(1) + 2k_0] \quad (2)$$

در رابطه ی (۲)، داریم: $f(y) = [1 - \exp(k_0 y)]/y$ و $k_0 = 2.7495(a/a_B)^{1/2}$ در اینجا a_B شعاع بوهر است، a شعاع کره ی ویگنر سایتز و $y = r/d$ می باشد. برای به دست آوردن میانگین سطح مقطع واکنش همجوشی دوتریوم-دوتریوم از رابطه ی زیر استفاده می کنیم: [۸] و [۹]

$$\langle \sigma v \rangle = 10^{-24} \times \frac{4\pi}{(2\pi m_r)^{1/2}} \times \frac{1}{(k_B T)^{3/2}} \int_0^\infty \sigma \cdot E \cdot e^{-E/k_B T} \quad (3)$$

در این رابطه m_r ، جرم کاهش یافته‌ی دوتریوم و E انرژی هسته‌های برخوردی و $k_B T$ ، دمایی است که در آن دما همجوشی اتفاق می‌افتد، ما در اینجا دمای تشدید را در نظر می‌گیریم که این دما معادل با 400 ارگ می‌باشد. همچنین معادله‌ای که برای محاسبه‌ی سطح مقطع واکنش در نظر گرفته شده به صورت زیر می‌باشد.

$$\sigma_{DD} = \frac{S(E)}{E_c \langle m^* \rangle} \exp\left(-\left\{ \frac{E_G}{[E_c + E_s] \langle m^* \rangle} \right\}^{1/2}\right) \quad (4)$$

که در آن، E_G انرژی گاموف هست که تقریباً برابر با $E_G^{1/2} \approx 31.39(keV)^{1/2}$ است. فاکتور S از مقادیر اندازه‌گیری شده به طور آزمایشی برای سطح مقطع $\sigma(E)$ استخراج شده است که تقریباً برابر با $52.9keV$ است. در معادله‌ی (۴)، E_c انرژی پتانسیل دافعه‌ی کولنی و E_s انرژی پتانسیل همپوشانی است. و $\langle m^* \rangle = m^*/m_e$ ، میانگین جرم موثر الکترون‌های پیوندی است که در یک مولکول عادی برابر با یک است، ماکزیمم این جرم موثر برای پالادیوم برابر با 27 است. [۱۰] سطح مقطع میانگین برای پتانسیل همپوشانی با افزایش فاصله‌ی بین هسته‌ها افزایش می‌یابد و هر چه جرم موثر کوچکتر باشد سطح مقطع میانگین بزرگتر است.

محاسبه‌ی آهنگ افت و خیز دوتریوم‌ها در سه بعد

اگر دوتریوم در ابتدا در جایگاه $|m\rangle$ باشد و بعد از گذشت زمان t نیز در جایگاه $|m\rangle$ باشد، احتمال گذار توسط رابطه‌ی زیر به دست می‌آید: [۴]

$$p(t) = \sum 2 \left| \langle n_f m | H_{int} | n_i m \rangle \right|^2 \frac{(1 - \cos \Delta E t)}{\Delta E^2} \quad (5)$$

و $Q(t)$ که توزیع زمان انتظار هست از رابطه‌ی $Q(t) = e^{-P(t)}$ و میانگین زمانی است که یک دوتریوم در جایگاه $|m\rangle$ است و از رابطه‌ی $\langle t \rangle = -\int_0^\infty t dQ(t)$ به دست می‌آید. [۴] در (۵) جمع روی همه‌ی حالت‌های نهایی ممکن فونون و میانگین حرارتی روی جالت پایه‌ی فونون را نشان می‌دهد. ΔE ، اختلاف انرژی بین حالت‌های نهایی و اولیه‌ی فونون است. H_{int} ، هامیلتونی برهم‌کنش دوتریوم- فونون است. فرم واضح H_{int} در تقریب تغییر شکل پتانسیل به صورت زیر است: [۴] و [۱۱]

$$H_{int} = \sum_{m,p} c_m^+ a(\vec{p}) c_m C_i \left[\frac{\hbar}{2NM\omega(p)} \right]^{1/2} \vec{p} \cdot \vec{e}(p) \times \int d\vec{r} a^*(\vec{r}-\vec{m}) a(\vec{r}-\vec{m}') \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}) \quad (6)$$

در سه بعد پتانسیل اختلال به طریق $\delta\varepsilon = C \partial V/V = -1/3 \partial V/V$ محاسبه می‌شود. که در آن ε ، همان پتانسیل برهم‌کنش یون پالادیوم و دوتریوم است و برابر است با $\varepsilon = 3e^2/\sqrt{3}/2a$ و $C = -6.65 \times 10^{-12} \text{ erg}$ است. برای نزدیکترین همسایه، میانگین انتگرال شامل تابع واینر در حدود 0.66 است. سرعت طولی فونون

در سه بعد برابر با $v = 4.24 \times 10^4 \text{ cm/s}$ می‌باشد. [۱۲-۱۳] جایگذاری معادله‌ی (۶) در معادله‌ی (۵) و انجام میانگین حرارتی روی حالت‌های اولیه‌ی فونون و تبدیل جمع به چگالی حالت‌های فونون و در نظر گرفتن شرط $k_B T \gg \hbar \omega$ ، می‌دهد: [۴]

$$p(t) = \frac{C^2 k_B T (0.066)^2}{\hbar N M v^2} \int_0^{\omega'} d\omega \rho(\omega) \frac{1 - \cos \omega t}{\omega^2} \quad (7)$$

در اینجا $\rho(\omega)$ چگالی حالت‌های نهایی فونون در 1 cm^3 که برابر با $\rho(\omega) = 3\omega^2 / 2\pi^2 v^3$ است.

[۱۲ و ۱۳] در اینجا $T = 300 \text{ K}$ و $\omega = 10^{13} / \text{sec}$ در نظر می‌گیریم. [۴] با توجه به رابطه‌ی بردار موج در یک

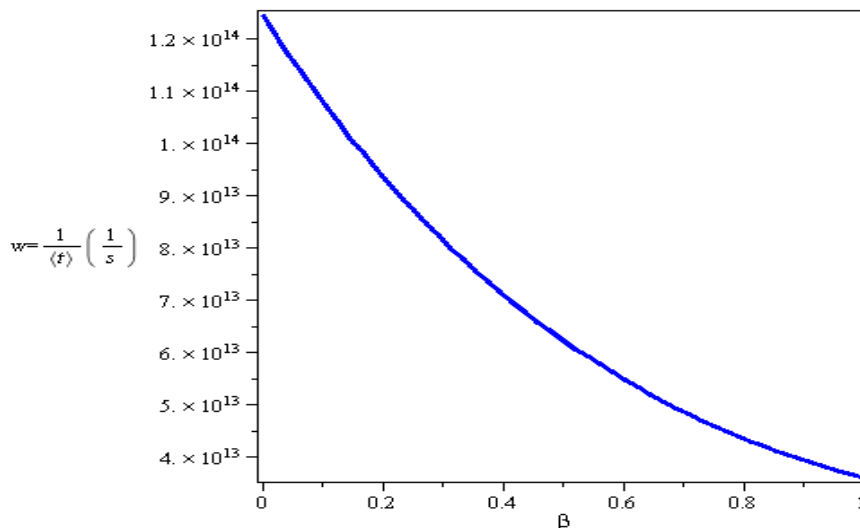
کریستال نامنظم $p = (\omega/v)^{1-\beta} p^{-\beta}$ [۱۴] و جایگذاری چگالی حالت‌ها در (۷) داریم:

$$p(t) = \frac{3C^2 k_B T (0.066)^2}{2\pi^2 \hbar^2 v^{5-2\beta} N M} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^{2\beta} \int_0^{\omega'} d\omega \left(\frac{1 - \cos \omega t}{\omega^{2\beta}} \right) \quad (8)$$

معادله‌ی (۸) حل تحلیلی تقریبی زیر را دارد:

$$p(t) = \frac{3C^2 k_B T (0.066)^2}{2\pi^2 \hbar^2 v^{5-2\beta} N M} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^{2\beta} \frac{1}{2} \frac{1}{3-2\beta} \omega'^{3-2\beta} t^2 = B t^2 \quad (9)$$

با جایگذاری رابطه‌ی (۹) در $Q(t)$ و با استفاده از رابطه‌ی $\langle t \rangle$ و $w = 1/\langle t \rangle$ ، آهنگ افت و خیز دوتریوم‌ها در سه بعد به صورت $w = 1/\langle t \rangle = 2\sqrt{B}/\sqrt{\pi}$ می‌باشد. [۴] نمودار این آهنگ افت و خیز در سه بعد به صورت زیر می‌باشد. آهنگ افت و خیز دوتریوم‌ها با افزایش بتا کاهش می‌یابد.



شکل ۱. نمودار تغییرات آهنگ افت و خیز دوتریوم‌ها بر حسب پارامتر بی‌نظمی شبکه.

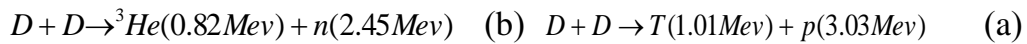
محاسبه‌ی چگالی آهنگ توان همجوشی با در نظر گرفتن اثرات همپوشانی و اثرات بی‌نظمی شبکه و تغییرات نسبت به زمان

آهنگ واکنش همجوشی $R = n_D(t)^2 / 2 \langle \sigma v \rangle_{DD}$ به دست می‌آید. در این رابطه چگالی عددی دوتریوم از

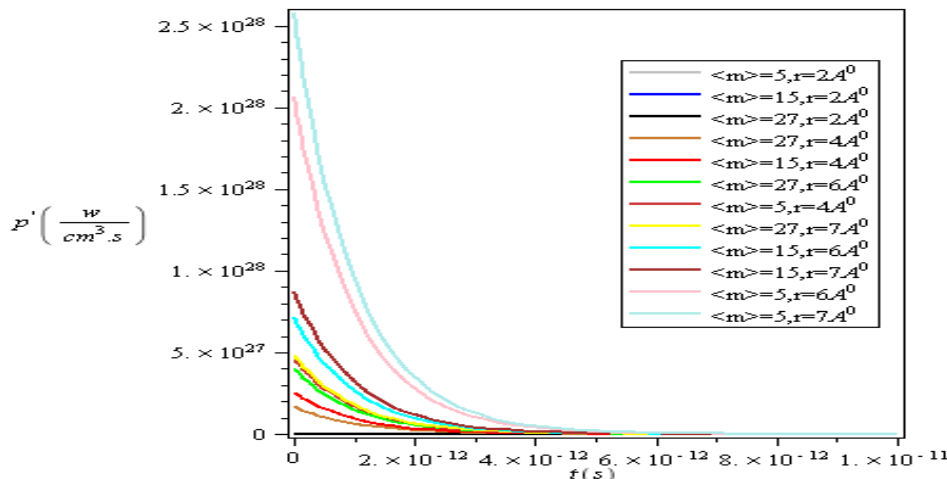
با زمان در حال تغییر است که با حل معادله‌ی دیفرانسیلی $\frac{dn_D(t)}{dt} = S_D - \frac{n_D^2(t)}{2} \langle \sigma v \rangle_{DD} - \frac{n_D(t)}{\tau_D}$

به دست می‌آید که جواب تقریبی آن $n_D(t) = -5 * 10^{22} + 5 * 10^{22} \tanh(2.5 * 10^{11} t + 48.07)$ برای این چگالی به دست می‌آید. در معادله‌ی بالا S_D ، جمله‌ی تزریق دوتریوم به سیستم می‌باشد که مقدار آن برابر با چگالی اولیه‌ی دوتریوم در زمان $t=0$ که فرض می‌کنیم مقدار آن $n_D(0) = 6.68 * 10^{16} \text{ \#/cm}^3$ است و $\tau_D = 10^{-11} \text{ s}$ می‌باشند. سپس با توجه به گرمای واکنش ناشی از واکنش‌های (a) و (b) چگالی توان همجوشی را به صورت

$$P_{DD} = R_{DD} \left(\frac{1}{2} Q_{T,p} + \frac{1}{2} Q_{3He,n} \right) \quad [15 \text{ و } 9]$$



که در آن، $Q_{T,p}$ گرمای تولیدی از شاخه‌ی (a) و $Q_{3He,n}$ گرمای تولیدی از شاخه‌ی واکنش (b) می‌باشد. در نهایت داریم: $P_{DD} = (R_{DD} \times 5.85 \times 10^{-13}) \text{ W/cm}^3$ با جایگذاری R در این رابطه، چگالی توان همجوشی نهایی را به دست می‌آوریم. شکل ۲ نمودار چگالی آهنگ توان همجوشی را به ازای $\beta = 0.8$ برای میانگین جرم موثرهای مختلف و در فواصل مختلف نشان می‌دهد.



شکل ۲. نمودار چگالی آهنگ توان همجوشی را برای پتانسیل همپوشانی حاصل از برهم کنش یون های دوتریوم در فواصل مختلف برای میانگین جرم موثرهای متفاوت.

از شکل ۲ نتیجه می‌شود که چگالی توان همجوشی با گذشت زمان به دلیل مصرف دوتریوم ها در حال کاهش است و با افزایش فاصله، افزایش می‌یابد چون پتانسیل همپوشانی نسبت به r خطی است. و به ازای

میانگین جرم موثر کوچکتر، بزرگتر می باشد. حال اگر چگالی اولیه ی دوتریوم ها از این مقدار بزرگتر باشد بدیهی است که چگالی آهنگ توان همجوشی نیز افزایش می یابد چون با توان دوم چگالی دوتریوم ها رابطه ی مستقیم دارد.

نتیجه گیری

در این کار ما برهم کنش دوتریوم-فونون را به عنوان اختلالی در سیستم PdD در نظر گرفتیم و سپس با استفاده از مفهوم احتمال گذار و نظریه ی اختلال وابسته به زمان، هامیلتونی بر هم کنش دوتریوم-فونون را تعریف کردیم و با استفاده از رابطه ی توزیع زمان انتظار و میانگین زمانی که اختلال در سیستم وجود دارد، آهنگ افت و خیز دوتریوم ها را محاسبه کردیم [۴و۱۱و۱۳] و با در نظر گرفتن اثرات بی نظمی شبکه [۱۴] (در اینجا $\beta=0.8$) و میانگین جرم موثر الکترون، چگالی آهنگ توان همجوشی را با در نظر گرفتن پتانسیل همپوشانی حاصل از برهم کنش یون های دوتریوم و قطبش الکترون ها محاسبه کرده [۳] و نتایج را در شکل ۲. بررسی کردیم. هر چه بتا (عامل بی نظمی شبکه) کوچکتر باشد چگالی توان همجوشی بزرگتر خواهد بود، همچنین چگالی آهنگ توان همجوشی برای این پتانسیل با افزایش I، افزایش و با افزایش جرم موثر کاهش می یابد. همچنین چگالی آهنگ توان همجوشی با گذشت زمان کاهش می یابد چون با توان دوم چگالی دوتریوم-ها متناسب می باشد [۹] و دوتریوم ها هم با گذشت زمان در حال مصرف می باشند.

مراجع

- [۱] Y. Arata, M. J. "Japan Acad", V. ۷۸, ser. B. (۲۰۰۲).
- [۲] David J. Nagel, "Hot and Cold Fusion", journal of condensed matter Nuclear science, (۲۰۱۱).
- [۳] Y. Xinzhong, T. Shitung, G. Shichong, Zh. Zhaoqing, "Chinese Phys Lett", V. ۶, (۱۹۸۹) ۳۴۳.
- [۴] Fu-Sui LIU and Chao WEN, *Theor. Phys*, V. ۴۰, (۲۰۰۳) pp. ۲۰۹-۲۱۱.
- [۵] A. Y, Y. C. Zhang, Proc. *Jpn. Acad. Ser. B*, ۱۹۹۹. ۷۵: p. ۲۸۱.
- [۶] Y. E. Kim, "Fusion Technol", V. ۱۹, p. ۵۸۸, (۱۹۹۱).
- [۷] E. N. Tsyganov, "cold nuclear fusion", vol. ۳۴, (۲۰۱۱).
- [۸] V. C. Rogers, G. M. Sandquist, "Fusion Technolgy", V. ۱۶, (۱۹۸۹).
- [۹] Atzeni, "Nuclear Fusion Reactions", p. ۴, (۲۰۰۴).
- [۱۰] R. W. Bussard, "Fusion Thecnology", V. ۱۶, (۱۹۸۹).
- [۱۱] L.L. Schiff, "Quantum Mechanics", McGraw-Hill Book Company, New York (۱۹۶۸) p. ۳۰۲.
- [۱۲] Ch. Kittel; "Introduction to Solid State Physics", (۱۹۵۶), ISBN: ۹۷۸۰۴۱۱۱۱۸۱۸.
- [۱۳] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, Academic, New York, p. ۶۲۰, (۱۹۹۱).
- [۱۴] G. Bergman, Phys. Rev. **B**۳, p. ۳۷۹۹, (۱۹۷۱).
- [۱۵] A. Takahashi, J. "Condensed Matter Nucl", V. ۴, p. ۲۶۹-۲۸۱, (۲۰۱۱).