
The Antiphysical Review

Founded and Edited by M. Apostol

37 (2000)

ISSN 1453-4436

**Program Orizont 2000, Comisia 2 Energie, Subcomisia 2.2 Energie Nucleara
Proiect Tema de Cercetare**

Fenomene Energetice la Absorbtia Hidrogenului si Deuteriului in Paladiu
M. Apostol, Grupul "Teoria Materiei Condensate", Departamentul Fizica Teoretica, INFIN
Department of Theoretical Physics,
Institute of Atomic Physics,
Magurele-Bucharest MG-6,
POBox MG-35, Romania
email:apoma@theory.nipne.ro

Abstract

Degajarea excesiva de energie la absorbtia hidrogenului si deuteriului in paladiu este investigata in cadrul teoriei agregatelor supra-moleculare; punctele centrale ale acestei teorii sunt conceptele "supra-atomului" si "ultra-metalului". Difuzia anomala a hidrogenului si deuteriului in paladiu, dilatarea excesiva a probei de paladiu si productia specifica de raze X si radiatii gama ce acompaniaza aceasta absorbtie sunt de asemenea investigate. Scopul temei este testarea teoretica a unei posibile noi surse de energie aflate la limita dintre fenomenele atomice si fenomenelor nucleare

1. Situatia Domeniului pe Plan International

Absorbtia hidrogenului in paladiu este insotita de anomalii energetice; aceste anomalii sunt cunoscute inca de la inceputul acestui secol. Problema a fost repusa in discutie in 1989, in legatura cu asa-numita "fuziune rece" a deuteriului in paladiu (Fleischmann si Pons). Desi "fuziunea rece" este nedecisa, si probabil ireala, absorbtia hidrogenului si absorbtia deuteriului in paladiu (si in metale similar) sunt intens studiate la ora actuala pe plan international, in tarile dezvoltate, atentia principala fiind concentrata asupra anomalilor fizico-chimice ce insotesc aceste fenomene.

Aceste anomalii sunt: capacitatea foarte mare a paladiului de a absorbi hidrogenul sau deuteriul, cresterea apreciabila a volumului probei de paladiu in urma acestor absorbtii, fenomene insotitoare de emisie de raze X si chiar, in unele cazuri, de radiatii nucleare, precum radiatii gama, si, in principal, degajari energetice (calorice) intense; toate aceste fenomene din sistemul hidrogen (deuteriu)-paladiu se evidentiaza prin intensitatea lor mult mai mare in comparatie cu alte sisteme hidrogen (deuteriu)-metal sau alte gaze-metal.

Anomaliiile fizico-chimice ale absorbtiei hidrogenului si deuteriului in paladiu ridica o serie de probleme de fizica experimentală si teoretică. Din punct de vedere experimental principala preocupare o constituie metodicile de lucru necesare asigurarii repetabilitatii si reproductibilitatii parametrilor masurati; in particular, se acorda o atentie deosebita fenomenelor radiative nucleare si atomice insotitoare. Pe plan teoretic principala intrebare este desigur originea excesului de energie; dar absorbtia prin difuzie rapida, confinarea moleculara a hidrogenului sau deuteriului, cresterea

macroscopica a volumului probei de paladiu, natura legaturii chimice implicate de posibila formare a hidrurii de paladiu, originea radiatiilor atomice si nucleare stau de asemenea in atentia preocuparilor.

Astfel de studii sint derulate in cercetarea stiintifico-tehnica din tarile dezvoltate, rezultatele fiind prezentate sub forma de rapoarte preliminare si de uz intern, si mai putin sub forma articolelor stiintifico-tehnice accesibile publicului larg. Motivele principale pentru aceasta relativa discretie sint caracterul preliminar al rezultatelor, irepetabilitatea si ireproductibilitatea masuratorilor experimentale in multe cazuri, si publicitatea excesiva asociata cu asa-numita "fuziune rece". In acest context este cu atit mai necesar o investigatie teoretica.

2. Obiectivele Temei

Obiectivele temei sint urmatoarele:

1. Descrierea mecanismului de difuzie anomala asimetrica si cu absorbtie a hidrogenului si deuteriului in paladiu prin extinderea teoriei difuziei necentrale;
2. Energia de legatura, densitatea electronica, potentialul de ionizare, afinitatea electronica si spectrul excitatiilor slab, potentialele inter-atomice ale atomului de paladiu;
3. Agregarea atomica hidrogen-paladiu, structura supra-moleculara hidrogen-paladiu si generализarea ei la "supra-atomul" hidrogen-paladiu si la starea "ultra-metalica" a combinatiei anomale "hidrura de paladiu";
4. Rolul efectului izotopic al deuteriului in chestiunile obiectivului 3;
5. Spectrul de vibratii si spectroscopia electronica a structurii supra-molecularare hidrogen (deuteriu)-paladiu;
6. Fenomenele radiative (raze X, gama) precursoare formarii structurilor supra-molecularare hidrogen (deuteriu)-paladiu si efectele specifice starii solide a probei de paladiu.

3. Echipa de cercetare

Grupul extins de "Teoria Starii Condensate a Materiei", Departamentul de Fizica Teoretica, INFIN.

Coordonator: dr. M. Apostol, cerc. st. princ. gr.1

Componenta: fiz. L. C. Cune, cerc. st., dr. H. Scutaru, academician, cerc. st. pr. gr.1, dr. M. Bundaru, cerc. st. pr. gr.2, dr. N. Angelescu, cerc. st. pr. gr.1, fiz. C. Schiaua, cerc. st. fiz. G. Costache, cerc. st. pr. gr.3, dr. G. Adam, cerc. st. pr. gr.1,....

4. Experienta echipei

In 1989, odata cu anuntul publicitar referitor la "fuziunea rece" in Departamentul de Fizica Teoretica, INFIN grupul de "Teoria Materiei Condensate" a inceput studiul fenomenului anomal de absorbtie a hidrogenului si deuteriului in paladiu. Rezultatul principal al acestui studiu este formularea unui model atomic "inversat", cu electronul hidrogenului captat in "golurile" benzii d a paladiului solid si protonul hidrogenului gravitind pina la colapsare in jurul acestei sarcini localizate; modelul este mai realist cu deuteriu in locul hidrogenului (pentru amortizarea necesara a oscilatiilor de zero); modelul prezice un spectru caracteristic de raze X si gama ce poate fi testat experimental. Aceste rezultate au constituit obiectul unei publicatii stiintifice

On a competition between solid state and nuclear scale energies. A possible theoretical approach to cold fusion in palladium and other transitional elements, M. Apostol and I. A. Dorobantu, Rev. Roum. Phys. 34 233 (1989). Rezultatele au mai fost expuse si in cteva seminarii generale ale institutelor si Facultatii de Fizica de pe Platforma Magurele, si consemnate in cteva preprinturi de uz intern.

Obiectivul 1 se bazeaza pe experienta obtinuta in elaborarea teoriei difuziei necentrale ce a constituit subiectul tezei de doctorat al unui membru al grupului in 1997. Obiectivele 2-5 se bazeaza pe experienta grupului in domeniul teoriei legaturilor chimice, a coeziunii agregatelor moleculare, sistemelor mesoscopice si nanostructurilor, a clusterilor atomici liberi sau confinati, cercetari desfasurate dupa 1994 si consemnate in liste de publicatii. Obiectivul 6 se bazeaza pe reluarea problemei din publicatia initiala mentionata mai sus, in ideea fructificarii experientei dobindite intre timp.

5. Descrierea Temei

Conceptul central al obiectivelor acestei teme este investigarea posibilitatii teoretice de a obtine o degajare de energie apreciabila in urma formarii unor noi structuri atomice si moleculare, numite aici "supra-atomii", supra-molecule, si, in general, "ultra-metale". Exista indicii ca legatura chimica comună ar fi numai una din starile locale de echilibru ale agregatelor moleculare, si ca un echilibru global al acestor aggregate ar fi posibil, din principiile generale ale mecanicii cuantice si fizicii atomice; formarea unei asemenea stari suprastabile ar degaja evident un surplus apreciabil de energie; dar, pe de alta parte, formarea ei ar fi extrem de improbabila, cu exceptii totusi; o asemenea exceptie pare a fi oferita de sistemul hidrogen (deuteriu)-paladiu. Prezenta elementelor usoare intr-un astfel de sistem, precum hidrogenul sau deuteriu, este necesara din evidente motive de agregare a sistemelor cuantice; favorizarea unei astfel de agregari pare a fi facilitata de paladiu prin pozitia lui cu totul singulara in sistemul periodic. Paladiu este singurul element chimic ce are patura completa si nici o alta patura incompleta din toate sechetele de metale de tranzitie (cu paturi d, s, sau f incomplete). Anionul de paladiu nu a fost investigat in comparatie cu vecinul urmator al paladiului in tabelul periodic, argintul ($d_{10} s_1$), in vederea evaluarii unor posibile agregari de acest fel (in primul rind pentru evaluarea legaturii chimice a paladiului solid). Posibilitatea unei absorbtii atomice a protonului (sau deuteronului) de catre paladiu ar putea duce la cel putin trei concluzii: o degajare apreciabila de energie, o difuzie apreciabila a hidrogenului (sau deuteriului) in paladiu si o reductie in dimensiunile atomice; cea din urma genereaza o crestere apreciabila in volumul probei solide de paladiu, cea de a doua explica acumularea excesiva de hidrogen, sau deuteriu, in paladiu prin absorbtie atomica, si, in fine, prima consecinta este degajarea de energie urmarita; in plus, captarea protonului sau deuteronului este insotita de fenomene radiative anomale. O astfel de imagine ofera posibilitatea testarii ei prin gradul de generalitate si coerenta pe care il prezinta, si aceasta este scopul principal al temei.

Difuzia anomala specifica acestei descrierii e tratata prin modificarea teoriei difuziei necentrale cu termeni asimetrici si prin contributii de absorbtie pura (captura atomica); acest punct raspunde obiectivului 1; agregarea supra-moleculara, energia de legatura, excesul de energie, reductia dimensiunilor "supra-atomice" si celealte proprietati electronice corespund obiectivului 3; obiectiv ce necesita in prealabil investigarea punctului de la obiectivul 2; efectul izotopic al deuteriului si dinamica moleculara a "supra-atomului" corespund obiectivelor 4 si 5; fenomenele radiative insotitoare si efectele de stare solida in paladiu corespund obiectivului 6, conform cu descrierea expusa aici.

6. Curriculum Vitae al Coordonatorului

1. Nume: Apostol
2. Prenume: Marian
3. Adresa: Fizica Teoretica, Institutul de Fizica Atomica, Bucuresti-Magurele. MG-6, Romania
Tel: 780 70 40/321, email: apoma@theory.nipne.ro
4. Data si locul nasterii: Septembrie 5, 1949 , Giurgiu , Romania
5. Studii si titluri academice: Fizica Teoretica, Universitatea Bucuresti 1972
Doctor in Fizica, Institutul de Fizica Atomica, Magurele-Bucuresti 1984

Profesor, Universitatea Bucuresti 1999
 6. Functia si locul de munca: cercetator stiintific principal gr.1, Fizica Teoretica, Institutul National de Fizica si Inginerie Nucleara INFIN, Magurele-Bucuresti 1972-
 7. Domeniul de activitate: teoria materei condensate, fizica atomica, fizica nucleara
 8. Publicatii: 180 articole stiintifice, 25 comunicari
 Fondator si editor J. Theor. Phys., 50 articole
 Fondator si editor Antiphys. Rev. 35 articole de politica stiintei
 9. Carti: Matematici Elementare, Mechanics, Statistical Physics, Many-Body Theory, Selected Lectures on Condensed Matter
 10. Participare internationala: Scoli Internationale Polonia 1978, Scotia 1979, Bulgaria 1986; Stagi de lucru Trieste Italia 1980, 1981, 1984, 1987, 1992; Franta 1990, 1992, 1995; USA 1997; Conferinte Franta 1982, 1995, Italia 1984, 1987, Croatia 1989, Austria 1995
 11. Referinte bibliografice: Marquis Who's Who in the World, USA 1997-; Marquis Who's Who in Science and Engineering, USA 1998-; Dictionary of International Biography, Cambridge 1997-
 2000 Outstanding People of the 20th Century, Cambridge 1998

7. Lista de Publicatii a Coordonatorului 1995-1999

1. A note on off-centre diffusion
 F. Despa and M. Apostol
 Solid State Commun. 94 153 (1995)
2. Deformation of a spherical molecule
 M. Apostol
 Acta Phys. Pol. A88 315 (1995)
3. High-resolution ^{13}C NMR measurements of RbC₆₀ and CsC₆₀
 C. Goze, F. Rachdi and M. Apostol
 in Physics and Chemistry of Fullerenes and Derivatives, eds. H. Kuzmany et al, World Sci (1995)
 p.356
4. An electron crystal model in one dimension
 M. Apostol
 Tr. J. Phys. 19 1158 (1995)
5. Off-center sites in some lightly intercalated alkali-metal fullerides
 C. Goze, M. Apostol, F. Rachdi and M. Mehring
 Phys. Rev. B52 15 031 (1995)
6. Off-centre sites in alkali fullerides
 M. Apostol, C. Goze, F. Rachdi and M. Mehring
 Solid State Commun. 96 583 (1995)
7. On the long-wavelength limit of the structure factor
 M. Apostol
 Can. J. Phys. 73 647 (1995)
8. X-ray scattering by a superlattice
 M. Apostol
 Superlatt.&Microstr. 17 419 (1995)
9. Structural distortion in Rb_{3-x}C₆₀ and K_{3-x}C₆₀ revealed by ⁸⁷Rb- and ³⁹K-NMR
 M. Apostol
 J. Phys. Chem. 100 3175 (1996)
10. NMR studies of alkali fullerides: Rb₁C₆₀ and Cs₁C₆₀
 C. Goze, F. Rachdi, M. Apostol, J. E. Fischer and M. Mehring

- Synth. Met. 77 115 (1996)
11. On the geometrical factor in the off-centre diffusion
F. Despa and M. Apostol
J. Phys. Chem. Solids 57 1231 (1996)
12. On the low-dimensional solids and their melting
M. Apostol
Synth. Met. 79 253 (1996)
13. On the structural distortion in Rb₃C₆₀ and K₃C₆₀ revealed by ⁸⁷Rb- and ³⁹K-NMR
M. Apostol, C. Goze, F. Rachdi, M. Mehring and J. E. Fischer
Solid State Commun. 98 253 (1996)
14. On a structural distortion effect in the NMR-spectrum of alkali fullerides
M. Apostol
Solid State Commun. 101 21 (1997)
15. On defects in solids
M. Apostol
J. Phys. Chem. 100 14835 (1996)
16. On sodium clusters in C₆₀ fullerides
M. Apostol, F. Rachdi, C. Goze and L. Hajji
Can. J. Chem. 75 77 (1997)
17. Multiple-scattering theory of EXAFS: successive atomic scattering versus
lattice scattering
F. Despa, M. Apostol and O. Dumitrescu
Roum. J. Phys. 41 233 (1996)
18. Dimensionality effects in the ideal Bose and Fermi gases
M. Apostol
Phys. Rev. E56 4854 (1997)
19. On defects in solids
M. Apostol
J. Mat. Sci. Lett. 16 1139 (1997)
20. On the energy spectrum of the C₆₀ fullerene anion
M. Apostol
Fullerene Science&Technology 5 1627 (1997)
21. Some remarks on the two-electron atom
M. Apostol
Roum. J. Phys. 42 49 (1997)
22. On a Thomas-Fermi model of "hollow" atom
M. Apostol
Fullerene Science&Technology 7 25 (1999)
23. On a structural distortion effect in the NMR spectra of alkali fullerides
M. Apostol
Fullerene Science&Technology 7 37 (1999)
24. Comment on "Single-particle Green functions in exactly solvable models of
Bose and Fermi liquids"
L. C. Cune and M. Apostol
Phys. Rev. B60 8388 (1999)