Fusão nuclear de átomos de hidrogênio assistida em paládio

Tudo começa com a análise que fiz sobre o experimento famoso de pons e **Fleischmann** sobre a fusão nuclear de baixa temperatura. Foi assim que me deparei com a incrível capacidade do paládio de armazenar grandes quantidades de hidrogênio. Assim me ocorreu que no experimento realizado pelos dois físicos em questão, talvez eles realmente estivessem atingindo um evento de fusão nuclear, mas de forma pontual e ocasional. Acredito que sem se dar conta eles, de alguma forma, acertaram momentaneamente as variáveis necessárias para tornar o paládio o ambiente ideal para a fusão dos átomos, e aqui temos uma ressalva importante, eles realizaram o experimento com deutério um isótopo de hidrogênio, o modelo que apresentarei trabalha com o próprio hidrogênio realizando somente a primeira fase da cadeia p+p, onde dois átomos de hidrogênio se fundem liberando deutério, neutrino eletrônico e um pósitron.

Através de alguns artigos que li pude perceber que além da capacidade notável de absorver novecentas vezes o seu próprio volume em hidrogênio, se aplicássemos uma determinada corrente elétrica de determinada tensão ao paládio, poderíamos fazer com que a pressão de adsorção dos átomos, bem como a própria energia térmica adicional fornecida pela corrente elétrica devido ao efeito joule, trabalhassem em conjunto convertendo-se diretamente em energia cinética nos átomos de hidrogênio adsorvidos na rede cristalina do paládio. Essa é a grande questão aqui! No experimento de pons e **Fleischmann** eles acidentalmente atingiram as configurações exatas dessas variáveis o que fez com que ocorresse um evento pontual de fusão nuclear. O motivo de o experimento não ter sido reproduzido novamente foi pelo simples fato de que possivelmente eles não se atentaram para estas variáveis, como pressão de absorção, um ambiente rico no material em que trabalhavam (no caso deutério), a corrente especifica aplicada ao eletrodo de paládio, bem

como uma série de fatores, onde eles apenas estavam olhando para a possibilidade de fusão usando a eletrolise.

Para dar continuidade, precisamos entender como o paládio age como catalisador para a fusão. A primeira coisa que temos que notar é a sua principal característica, a de absorver grandes quantidades de hidrogênio, essa absorção por si só faz com que a energia cinética dos átomos aumente, mas não o suficiente, podemos estimar isso de forma simples usando a lei dos gases ideais:

$$PV = nRT$$

Onde **P** é a pressão gerada, **V** é o volume absorvido, **R** é a constante dos gases ideais e **T** é a temperatura em Kelvins. Onde **n** é dado por:

$$n = \frac{m}{M}$$

Onde m é o número de mols absorvido pelo material, e M é a massa molar do hidrogênio. Então podemos calcular a energia cinética gerada pela absorção do hidrogênio no material usando a energia cinética média em um gás ideal, dado por:

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} K_B T$$

E relacionando ambas em uma única expressão:

$$P = \frac{2}{3} \frac{N \langle E_k \rangle}{V}$$

Isso descreve de maneira simples que a absorção aumenta o número de átomos N no volume V, isso aumenta a pressão interna P conforme a lei dos gases ideais. Isso mostra que a pressão interna é diretamente proporcional a energia cinética dos átomos e inversamente proporcional ao volume.

Agora que temos uma ideia de como a pressão de absorção influencia diretamente a energia cinética dos átomos de hidrogênio, e sabemos

que ainda sim esse aumento não é o suficiente para superar a barreira coulumbiana, precisamos considerar uma série de fatores que contribuem para que a fusão possa acontecer. Fatores esses como, tunelamento quântico, blindagem eletrônica, distribuição de energia térmica etc. Dito isso, ficou claro que somente a pressão interna proveniente da absorção dos átomos não seria o suficiente para atingir o grande objetivo, então ficou obvio que se precisava fornecer uma forma de energia cinética adicional para os átomos de hidrogênio no paládio. Então veio a questão, como fazer isso? Primeiramente pensei em algo não muito trivial como o desdobramento das linhas espectrais dos átomos de hidrogênio devido ao efeito zeeman anômalo. Em teoria ao desdobrarmos as linhas espectrais dos átomos de hidrogênio poderíamos realizar o deslocamento dos elétrons dos átomos para níveis mais altos o que consequentemente poderia reduzir a repulsão eletrostática. Basicamente o processo seria usarmos campos magnéticos para realizar o desdobramento das linhas espectrais, e usarmos um laser de alta potência para deslocar os elétrons dos átomos de hidrogênio para os níveis mais altos. Mas esse processo acabou tornando-se uma segunda opção, digamos mais extrema, depois que percebi que poderia usar um efeito muito mais simples e eficaz, me refiro ao efeito joule! Entoa de forma simples, e por meio de algumas revisões em termodinâmica, vi ao aplicarmos uma corrente elétrica de determinada potência, tensão e duração, a energia térmica gerada seria diretamente convertida em energia cinética aos átomos de hidrogênio. Usando a fórmula simples de variação da temperatura quando uma determinada quantidade de calor é transferida para um sistema:

$$\Delta T = \frac{Q}{mc}$$

Onde m é a massa do material, c é o calor específico e Q é a energia térmica fornecida ao sistema que é dado por:

$$Q = V * I * t$$

Onde V é a tensão, I amperagem e t é o tempo em segundos. Agora chegamos a um ponto importante, sabemos que a pressão de

absorção gera energia cinética para os átomos de hidrogênio, mas que essa energia ainda é insuficiente para nosso objetivo, então chegamos à solução de adicionar energia cinética externa, em termos simples, aplicando uma corrente elétrica ao paládio. Mas então vem a questão como podemos descrever isso e o mais importante ver se a energia cinética é suficiente? Por meio de alguns estudos e pesquisas em conjunto com algoritmos de IA pude montar a seguinte equação:

$$K(t) = \frac{Q}{mc}\left(\frac{P_{H_2} V_{ads}}{1 + \left(b + \frac{P_{H_2}}{P_0}\right)}\right)\frac{K_b}{P_0 V_{ads}} T$$

De início tive problemas principalmente com as unidades de medida das variáveis pois o resultado final, para ser coerente e matematicamente correto deveria ser em joules, mas além disso, eu precisava que o quê estava querendo descrever com a equação fizesse sentido físico! Foi então que explorei a solução de adicionar a pressão de referência P0 para anular normalizar a equação. Onde aqui temos T como temperatura do sistema em Kelvin, Ph2 como a pressão de absorção do hidrogênio no paládio, P0 como a pressão referencial, b retirada de um experimento que é uma constante de afinidade com valor de -0,24, temos o Vads que é o volume de adsorção e na rede cristalina. Afim de tornar o modelo mais claro e intuitiva reescrevi a equação para torná-la mais simples, deixando assim a primeira versão para casos que exigem altas ou baixas pressões e temperaturas, visto que estamos lidando com um caso de pressão e temperatura ambiente, a nova formulação se dá da seguinte forma:

$$K(t) = \frac{3}{2} K_B T + \frac{Q}{N_H} f(P_{H_2}, V_{ads})$$

Onde:

$$f(P_{H_2}, V_{ads}) = \left(\frac{P_{H_2} V_{ads}}{1 + \left(b + \frac{P_{H_2}}{P_0}\right)}\right)$$

Onde temos a energia cinética média dos átomos de hidrogeno multiplicada pela temperatura, e a direita temos a energia térmica fornecida pela corrente elétrica divida pelo número de átomos de hidrogênio no sistema, regulados pela pressão de absorção e volume de adsorção. Que em alguns casos podem ser desconsiderados. Por exemplo, em situações em que pretende-se aumentar a eficiência de absorção do paládio elevando a pressão do gás hidrogênio para que seja absorvido mais átomos, é preferível usar a primeira versão pois há mais controle dessas variáveis.

Agora que conseguimos descrever como a pressão, a temperatura e a corrente aplicada ao paládio em conjunto podem fornecer energia cinética suficiente para os átomos de hidrogênio, precisamos nos aprofundar um pouco mais e levar em consideração mais alguns efeitos importantes, vamos começar pelo tunelamento quântico. Como estamos lidando com uma forma de fusão não convencional precisamos levar em conta esse efeito, pois ao absorver hidrogênio, o paládio consegue aproximar os átomos de formas que normalmente eles não estariam, para isso usamos a equação:

$$T_{tunelamento} \approx e^{-2\gamma(t)}$$

Onde:

$$\gamma(t) = \frac{1}{\hbar}\int_{r1}^{r2} \sqrt{2\mu(V(r) - E)}\, dr$$

Essa equação descreve a probabilidade de tunelamento quântico levando em conta o potencial efetivo, a distância entre os núcleos etc. onde y(t) é o fator que depende da integral da barreira de potencial entre dois pontos r2 e r2, V(r) é o potencial efetivo entre os núcleos de hidrogênio, que inclui a repulsão coulombiana e a blindagem

eletrônica. E é a energia cinética dos núcleos de hidrogênio, 2μ é a massa reduzida dos núcleos e por fim a constante de Planck reduzida. Não podemos falar de tunelamento sem falarmos também de blindagem eletrônica que é uma parte importante de nosso estudo. O cálculo da blindagem eletrônica se apresenta da seguinte forma:

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} exp(-\frac{r}{\lambda})$$

Onde:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\epsilon_0 K_B T}{ne^2}}$$

Esse calculo do potencial efetivo descreve como o paládio age como catalizador nos átomos de hidrogênio neutralizando a repulsão eletrostática entre os elétrons dos átomos e diminuindo assim a repulsão eletrostática causando o famoso efeito de blindagem eletrônica, mais para frente veremos alguns resultados de cálculos que mostram que o paládio consegue reduzir com sucesso 1% do potencial efetivo, reduzindo a repulsão eletrostática, o que macroscopicamente falando parece pouco mas para interações atômicas este valor tem um grande potencial. Então temos os seguintes parâmetros para este cálculo, e^2 é a carga do elétron, ϵ_0 é a permissividade do vácuo, r é a distância entre os núcleos de hidrogênio e λ é o comprimento de blindagem que depende diretamente da temperatura T e da densidade eletrônica n do material (paládio). Como veremos mais a frente, usamos uma distância média entre dez elevado a menos quinze e dez elevado a menos dez.

Precisamos considerar também a distribuição de energia térmica de Maxwel-Boltzmann que descreve a distribuição de energia entre os átomos em um sistema de equilíbrio térmico, isso nos ajuda a entender melhor como a energia cinética proveniente da corrente

elétrica e da pressão são distribuídas entres os átomos de hidrogênio absorvidos no paládio. A equação que precisamos é a seguinte:

$$f(E) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{1}{K_B T}\right)^{3/2}\sqrt{E}\, e^{-E/(K_B T)}$$

onde temos T como temperatura em Kelvin, temos pi, contante de Boltzmann etc. essa equação descreve a distribuição de energia cinética dos átomos de hidrogênio absorvidos na rede cristalina do paládio. Agora que tocamos neste assunto, precisamos também considerar a rede cristalina do paládio que é igualmente importante para o processo que estamos descrevendo, pois a rede cristalina possui uma característica muito interessante, sua vibração, que ocorre quando o paládio adsorve átomos de hidrogênio reorganizando sua rede cristalina, ocorre uma vibração entre os átomos de paládio que porventura podem aproximar ainda mais os átomos de hidrogênio. Aqui estamos considerando uma dinâmica de rede cristalina como uma onda senoidal onde:

$$\mu_0 = \sin\frac{2\pi x}{L}$$

Com L sendo 1nm e considerando um tempo de um Pico segundos. A equação para a rede cristalina se dá da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{K}{\rho}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Onde u é o deslocamento dos átomos na rede cristalina do paládio, K é a constante elástica do material ρ é a densidade do paládio. Essa equação descreve como as vibrações da rede cristalina se propagam ao longo do material. Essas vibrações podem afetar a proximidade dos núcleos de hidrogênio, influenciando a probabilidade de fusão.

Agora que temos uma forma de descrever e prever condições ideais para fusão de átomos de hidrogênio absorvidos em paládio vamos a resultados de cálculos usando esse modelo e em seguida fazermos

análises e tirarmos algumas conclusões. Primeiramente apresento o código em Payton que usei para realizar o cálculo numérico dessas equações, segue o código:

```
import numpy as np

from scipy.integrate import quad, solve_ivp

from scipy.constants import hbar, epsilon_0, e, k, pi

import matplotlib.pyplot as plt


# Constantes físicas

mu = 1.67e-27  # Massa reduzida dos núcleos de hidrogênio (kg)

n = 6e28  # Densidade eletrônica no paládio (m^-3)

K = 1e11  # Constante elástica do paládio (Pa)

rho = 12000  # Densidade do paládio (kg/m^3)

b = -0.24  # Constante de afinidade experimental

P0 = 1e5  # Pressão de referência (Pa)


# Parâmetros do sistema

T = 303  # Temperatura (K)

P_H2 = 1e5  # Pressão de hidrogênio (Pa)

V_ads = 1.44e-03  # Volume adsorvido (m^3)

Q_t = 950400  # Energia térmica fornecida (J)

N_H = 7.03e+22  # Número de átomos de hidrogênio


# Função para calcular a energia cinética

def energia_cinetica(T, Q_t, N_H, P_H2, V_ads):
```

```
    f_P_V = (P_H2 * V_ads) / (1 + (b + P_H2 / P0))
    K_t = (3/2) * k * T + (Q_t / N_H) * f_P_V
    return K_t

# Função para calcular o potencial efetivo
def potencial_efetivo(r, T, n):
    lambda_ = np.sqrt((epsilon_0 * k * T) / (n * e**2))
    return (e**2 / (4 * pi * epsilon_0 * r)) * np.exp(-r / lambda_)

# Função para calcular o tunelamento quântico (modular)
def tunelamento_quantico(E, T, n, r1, r2):
    def integrando(r):
        V_r = potencial_efetivo(r, T, n)
        return np.sqrt(2 * mu * np.maximum(V_r - E, 0))  # Garante valor
positivo

    gamma, _ = quad(integrando, r1, r2)
    return np.exp(-2 * gamma / hbar)

# Função para calcular a distribuição de Maxwell-Boltzmann
def maxwell_boltzmann(E, T):
    return np.sqrt(2 / pi) * (1 / (k * T))**1.5 * np.sqrt(E) * np.exp(-E / (k * T))

# Função para resolver a equação da rede cristalina
def equacao_rede(t, u, K, rho):
```

```
    d2u_dx2 = np.gradient(np.gradient(u))  # Segunda derivada espacial
    d2u_dt2 = (K / rho) * d2u_dx2  # Equação de onda
    return d2u_dt2

# Condições iniciais para a rede cristalina
x = np.linspace(0, 1e-9, 100)  # Posições na rede (1 nm)
u0 = np.sin(2 * pi * x / 1e-9)  # Deslocamento inicial (senoidal)
du0_dt = np.zeros_like(x)  # Velocidade inicial (zero)

# Resolvendo a equação da rede cristalina
sol = solve_ivp(equacao_rede, [0, 1e-12], np.concatenate((u0,
du0_dt)), args=(K, rho), t_eval=np.linspace(0, 1e-12, 100))

# Exemplo de uso
r1 = 1e-15  # Distância mínima (m)
r2 = 1e-10  # Distância máxima (m)
E = energia_cinetica(T, Q_t, N_H, P_H2, V_ads)  # Energia cinética (J)
T_tunelamento = tunelamento_quantico(E, T, n, r1, r2)  # Probabilidade
de tunelamento
f_E = maxwell_boltzmann(E, T)  # Distribuição de energia térmica

# Resultados impressos por escrito
print("=" * 50)
print("Resultados do Modelo de Fusão Nuclear")
print("=" * 50)
print(f"Energia Cinética: {E:.2e} J")
```

```
print(f"Probabilidade de Tunelamento: {T_tunelamento:.2e}")
print(f"Distribuição de Energia Térmica: {f_E:.2e}")
print("\nInformações sobre a Dinâmica da Rede Cristalina:")
print(f"- Constante Elástica (K): {K:.2e} Pa")
print(f"- Densidade do Paládio (ρ): {rho:.2e} kg/m³")
print(f"- Deslocamento Inicial (u0): Senoidal com amplitude 1 nm")
print(f"- Tempo de Simulação: 1 ps (1e-12 s)")
print("=" * 50)

# Plotando a solução da rede cristalina
plt.figure(figsize=(10, 6))
for i in range(0, 100, 10):
    plt.plot(x, sol.y[:100, i], label=f"t = {sol.t[i]:.1e} s")
plt.xlabel("Posição $x$ (m)")
plt.ylabel("Deslocamento $u$ (m)")
plt.title("Dinâmica da Rede Cristalina")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

este código realiza a resolução numérica do sistema de equações apresentado e exibe um gráfico focado na dinâmica da rede cristalina do paladio. Os resultados apresentados pelo código foram os seguintes:

==========

Resultados do Modelo de Fusão Nuclear

==========

Energia Cinética: 1.11e-15 J

Probabilidade de Tunelamento: 1.00e+00

Distribuição de Energia Térmica: 0.00e+00

Informações sobre a Dinâmica da Rede Cristalina:

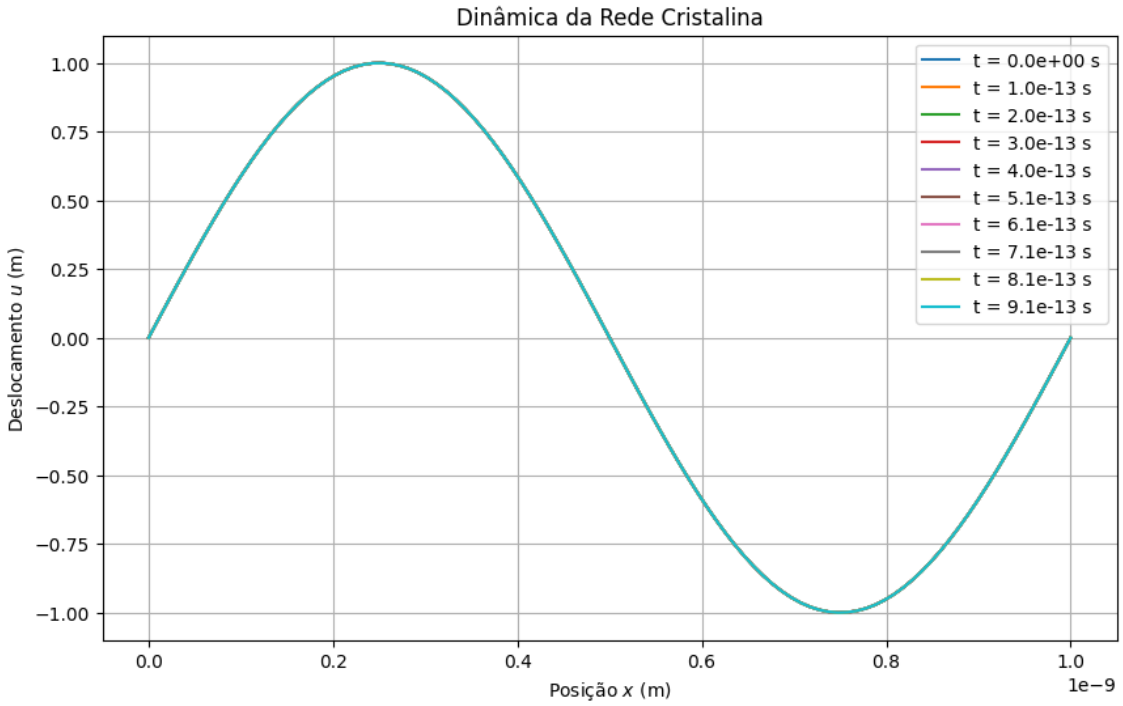
- Constante Elástica (K): 1.00e+11 Pa

- Densidade do Paládio (ρ): 1.20e+04 kg/m^3

- Deslocamento Inicial (u0): Senoidal com amplitude 1 nm

- Tempo de Simulação: 1 ps (1e-12 s)

O gráfico apresentado é o seguinte:



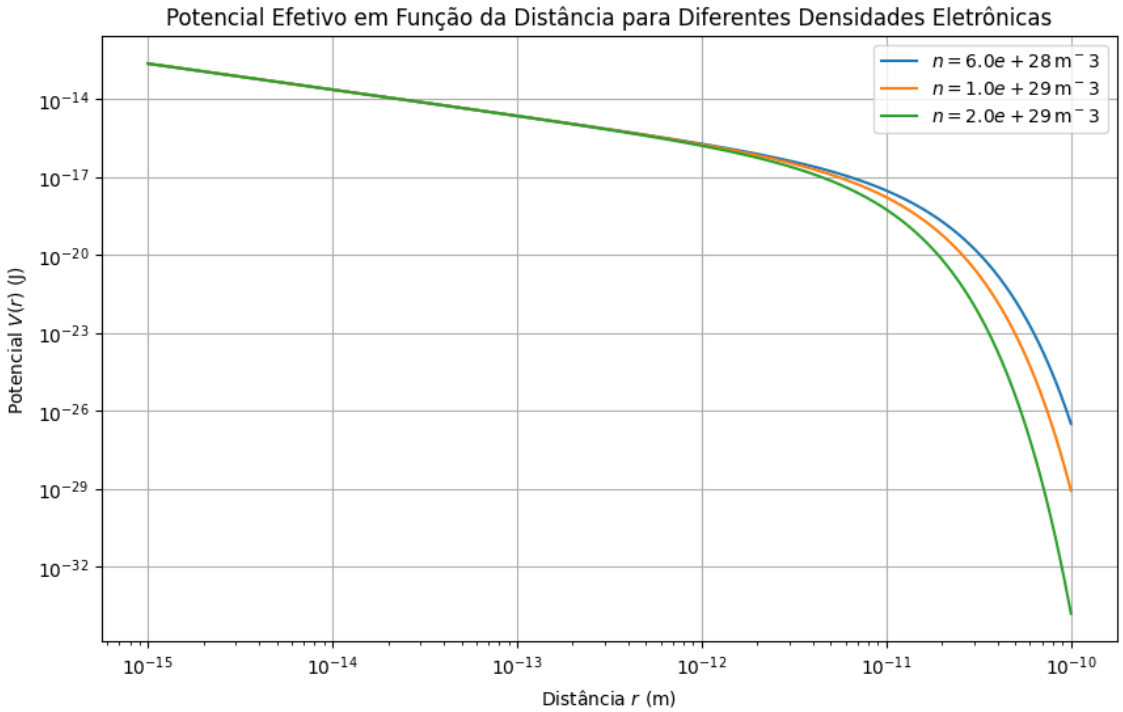
Como podemos observar, o comportamento da onda é consistente com a propagação de uma onda senoidal em um meio elástico como no caso do paládio. Essa onda descreve como os átomos se deslocam com o passar do tempo o que causa vibrações na rede cristalina que podem favorecer a aproximação dos átomos de hidrogênio absorvidos

tornando mais provável a fusão entre eles. Observando também os demais resultados podemos ver que o processo eleva em muito a energia cinética dos átomos de hidrogênio, bem como a probabilidade de tunelamento quântico. Vemos também que o resultado de distribuição e energia térmica é zero, o que é consistente com o resultado pois a distribuição de energia térmica de Maxwell-Boltzmann requer um sistema em equilíbrio, o que não é o caso pois a alta energia do sistema é predominante, afetando seu equilíbrio termodinâmico. Também foi desenvolvido um código na mesma linguagem para analisar o potencial efetivo para diferentes densidades de material para termos uma visão mais detalhada do comportamento de todo o processo. Eis o código:

```
import numpy as np

import matplotlib.pyplot as plt

from scipy.constants import epsilon_0, e, k, pi


# Parâmetros do sistema

T = 303  # Temperatura (K)

n = 6e28  # Densidade eletrônica no paládio (m^-3)


# Função para calcular o potencial efetivo

def potencial_efetivo(r, T, n):

    lambda_ = np.sqrt((epsilon_0 * k * T) / (n * e**2))

    return (e**2 / (4 * pi * epsilon_0 * r)) * np.exp(-r / lambda_)


# Valores de r para o gráfico

r_values = np.logspace(-15, -10, 1000)  # De 1e-15 m a 1e-10 m
```

```
# Plotando o potencial efetivo para diferentes densidades eletrônicas
plt.figure(figsize=(10, 6))
for n in [6e28, 1e29, 2e29]:  # Diferentes densidades eletrônicas
    V_values = potencial_efetivo(r_values, T, n)
    plt.plot(r_values, V_values, label=f"$n = {n:.1e} \, \mathrm{{m}}^{-3}$")

plt.xscale("log")
plt.yscale("log")
plt.xlabel("Distância $r$ (m)")
plt.ylabel("Potencial $V(r)$ (J)")
plt.title("Potencial Efetivo em Função da Distância para Diferentes Densidades Eletrônicas")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

este código gerou o seguinte resultado exibido no gráfico:



Este gráfico mostra o potencial efetivo em função da distância para diferentes densidades eletrônicas. Como podemos observar o potencial efetivo decai exponencialmente com o aumento da distância. O que é consistente com um comportamento de um potencial coulombiano blindado. Igualmente para distancias muito pequenas o potencial é extremamente alto refletindo a forte repulsão eletroestática. Para densidades eletrônicas mais altas (n=1.0×1029 m−3n=1.0×1029m−3 e n=2.0×1029 m−3n=2.0×1029m−3), o potencial efetivo decai mais rapidamente. Isso ocorre porque o comprimento de blindagem λ diminui com o aumento da densidade eletrônica, reduzindo o alcance do potencial. Para densidades eletrônicas mais baixas (n=6.0×1028 m−3n=6.0×1028m−3), o potencial decai mais lentamente, pois o comprimento de blindagem λ é maior.

Também foi realizado uma pequena simulação no programa LAMMPS-GUI, com o intuito de coletar e analisar alguns fatores importantes como energia potencial, temperatura, energia total do sistema etc. o objetivo é complementar os resultados dos cálculos realizados em python. A seguir o código em lammps:

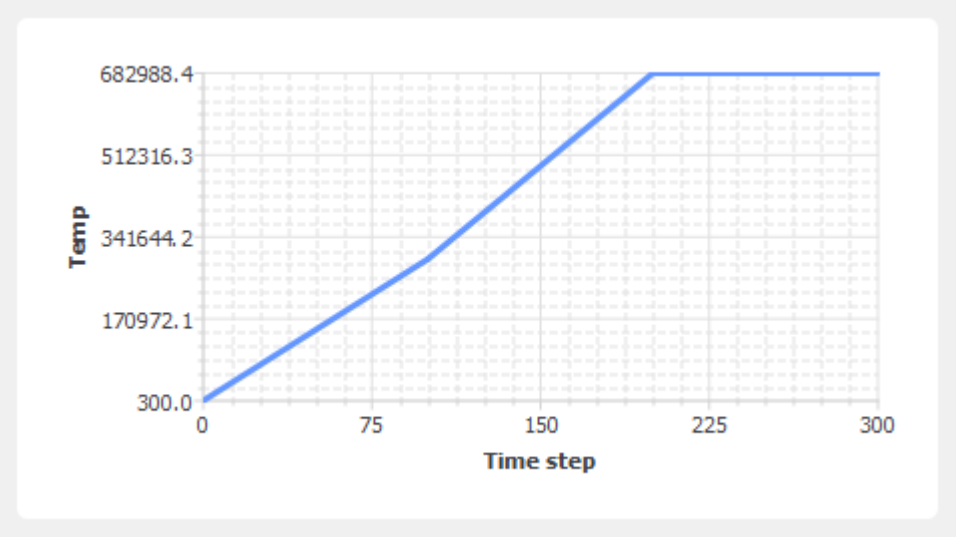
```
# Simulação de fusão nuclear de baixa energia - H absorvido em Pd
units metal
dimension 3
boundary p p p

# Criar caixa e definir elementos
lattice fcc 3.89
region caixa block 0 10 0 10 0 10
create_box 2 caixa
create_atoms 1 box

# Adicionar hidrogênios intersticiais aleatoriamente
region interstitials sphere 5 5 5 2 units box
create_atoms 2 random 20 12345 interstitials

# Definir potenciais
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * PdH_Zhou_June29_2007_2.set Pd H

# Definir parâmetros de simulação
velocity all create 300.0 4928459 mom yes rot yes dist gaussian
fix 1 all nvt temp 300.0 1500.0 100.0

# Parâmetros do sistema
variable T equal 303.0 # Temperatura (K)
```

```
variable P_H2 equal 1e5 # Pressão de hidrogênio (Pa)
variable V_ads equal 1.44e-03 # Volume adsorvido (m^3)
variable Q_t equal 950400 # Energia térmica fornecida (J)
variable N_H equal 7.03e+22 # Número de átomos de hidrogênio
variable b equal -0.24 # Constante de afinidade experimental
variable P0 equal 1e5 # Pressão de referência (Pa)
variable K_b equal 8.6173e-5 # Constante de Boltzmann em eV/K

# Calcular f_P_V
variable f_P_V equal (${P_H2} * ${V_ads}) / (1 + (${b} + ${P_H2} / ${P0}))

# Calcular a energia cinética (K_t)
variable termo1 equal (3/2) * ${K_b} * ${T}
variable termo2 equal (${Q_t} / ${N_H}) * ${f_P_V}
variable K_t equal ${termo1} + ${termo2}

# Definir a corrente elétrica (calor gerado)
variable current_energy equal ${K_t} # Energia cinética calculada
fix 2 all addforce 0.0 0.0 ${current_energy} # Força de aquecimento
(aplicando corrente elétrica)

# Coletar dados
thermo 100
thermo_style custom step temp pe ke etotal v_K_t
```

Executar simulação

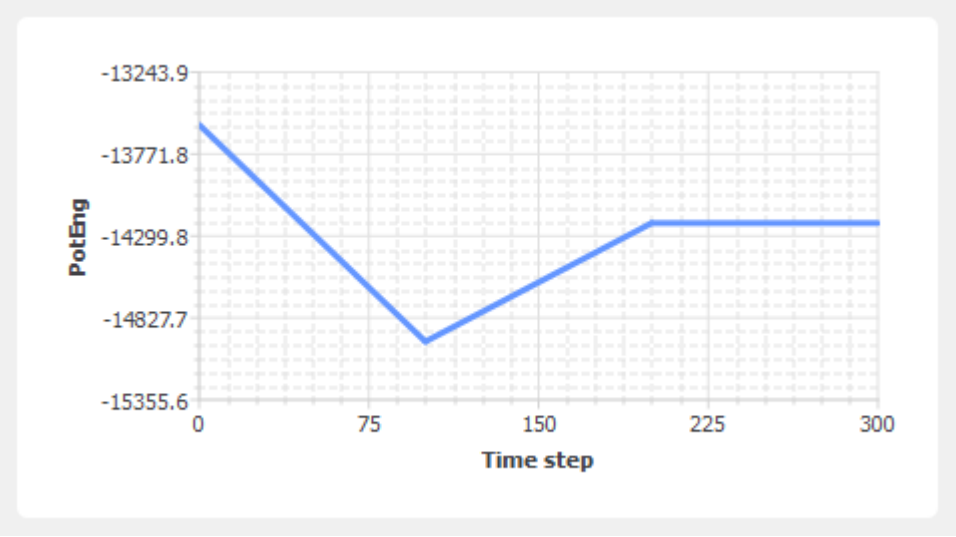
run 4000

primeiro analisaremos o gráfico gerado para a temperatura:



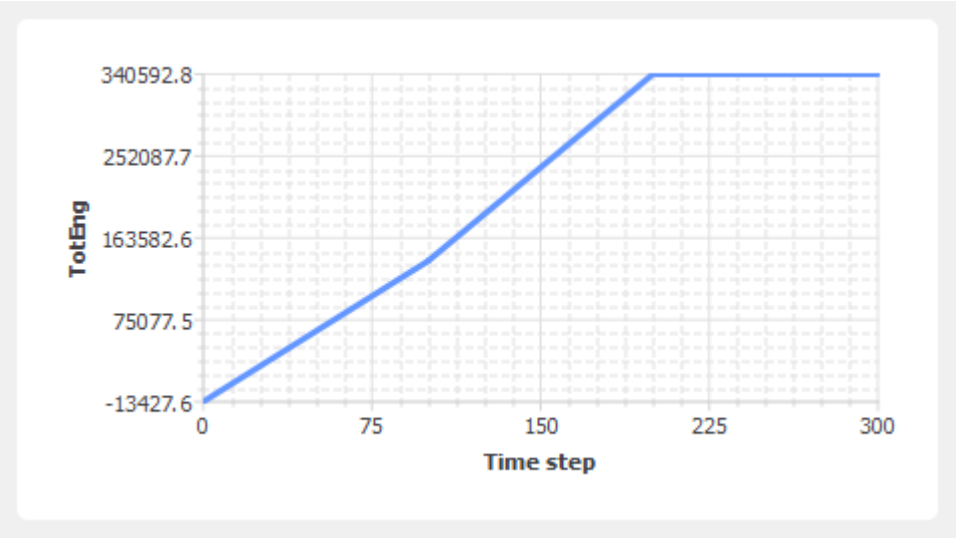
Como podemos ver a temperatura do sistema aumenta exponencialmente com o passar do tempo, indicando que o sistema está inerentemente ganhando energia que não pode ser explicada pelo efeito joule proporcionado pela corrente elétrica. Aqui também podemos descartar efeitos químicos exotérmicos entre o paládio e hidrogênio pelo valor da temperatura que claramente excede valores que seriam comummente liberados por esse tipo de reação.

Em seguida vamos observar o gráfico de energia potencial:



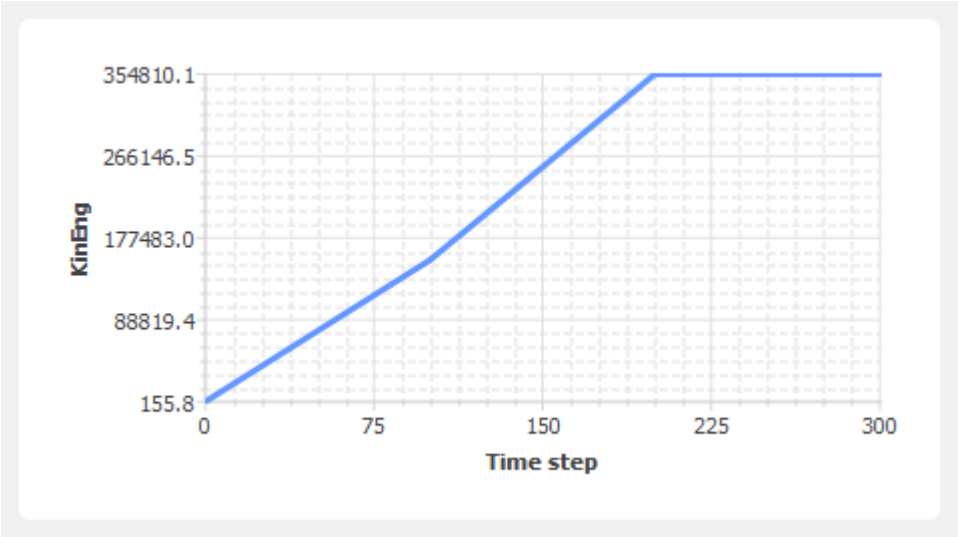
Podemos ver que a energia potencial diminui gradualmente ao longo do tempo se tornando cada vez mais negativa. Isso está em conformidade em sistemas onde as interações são atrativas como em ambientes eletroestáticos, que é o caso em questão. Quanto mais negativa a energia potencial, mais estável é o sistema (pois os átomos estão em um estado de menor energia). O fato de a energia potencial estar se tornando mais negativa sugere que o sistema está se movendo para um estado de maior estabilidade. Isso pode ocorrer se os átomos estão se aproximando uns dos outros ou se as interações atrativas estão se fortalecendo.

Vamos observar agora os resultados com relação à energia total do sistema, com o seguinte gráfico:



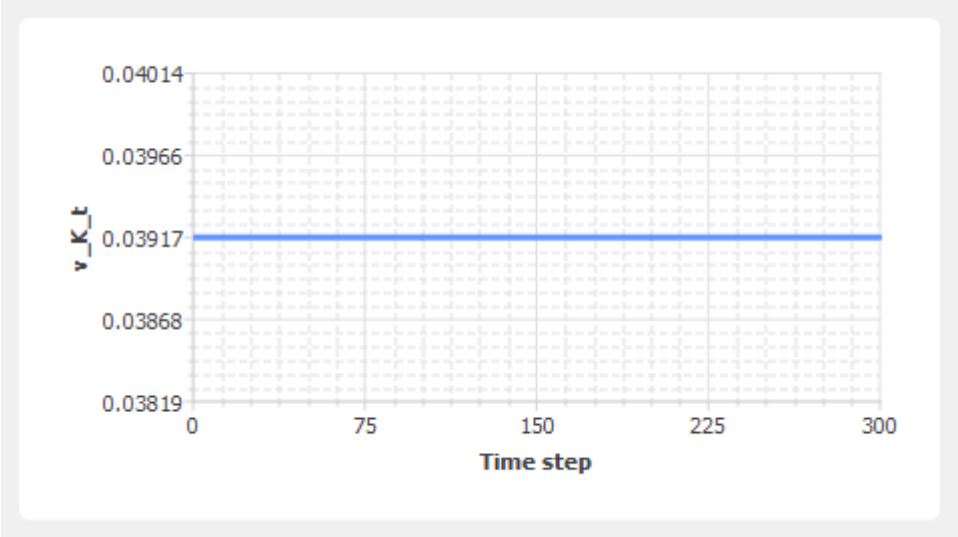
Este gráfico mostra claramente que a energia total do sistema aumenta exponencialmente com o passar do tempo, o que explica a energia potencial negativa. Isso sugere que o seguinte, dado a relação intrínseca entre energia total e energia potencial, onde, quanto maior é a energia total do sistema, mais negativa a energia potencial se torna, indicando que o sistema está ganhando energia, e consequentemente fortalecendo os processos de interações atrativas internamente. Mais uma vez podemos ver que o ganho de energia excede o que poderia ser explicado pela corrente aplicada ao pd-106.

Agora vamos observar o gráfico de energia cinética, dado por:



Note que assim como algums dados apresentados anteriormente, bem como os resultados dos cálculos realizados em python, este novo gradico mostra que a energia cinética aumenta também exponencialmente com o passar do tempo. O gráfico da energia cinética sugere que o sistema está ganhando energia cinética ao longo do tempo, indicando a quantidade de energia associada ao movimento dos átomos. Se a energia cinética está aumentando enquanto a energia potencial está se tornando mais negativa, isso indica que o sistema está ganhando energia total, e parte dessa energia está sendo convertida em energia cinética. indicando que os átomos estão se movendo mais rapidamente e ganhando velocidade, devido a corrente aplicada e a transferência de energia.

E por fim veremos o gráfico da energia cinética calculada:



Este gráfico mostra como energia cinética calculada, a energia ganha devido ao processo da simples absorção de hidrogênio pelo paládio. Como podemos ver, como discutido anteriormente, a pressão de absorção realmente fornece uma certa energia cinética para os átomos absorvidos, mas não o suficiente para surtir efeitos perceptível e significativos. Perceba como ela se mantem estável ao longo do tempo, devido à saturação de hidrogênio na rede cristalina do pd-106. Isso faz sentido pois ao parar de absorver hidrogênio, ou seja, ao atingir sua capacidade máxima, a pressão se mantem.

Com base em todos estes resultados teóricos, surge uma questão importante relacionado à probabilidade de tunelamento quântico, ao leitor que entende o básico de mecânica quântica bem sabe que se tratando deste meio, temos basicamente dois “destinos”, por assim dizer, um ou zero, onde um representa um cenário extremamente otimista, ou seja, seria a total certeza de que um determinado evento quântico possa acontecer, e zero intuitivamente contradiz isso. Deste modo foi preciso um tempo de estudo especificamente voltado para está área, para que fosse possível ao menos entender previamente o porque de os resultados, quando executados nos códigos mostrados anteriormente, resultavam em uma probabilidade de tunelamento para os átomos de hidrogênio em uma aparente certeza. Foi preciso entender um pouco a fundo o que estava acontecendo para sempre os dados teóricos estarem apontando para T = 1. Será que o modelo estaria lidando apenas com algum tipo de ruido, os cálculos estavam superestimando os eventos em questão ou realmente estaríamos diante de um fenômeno novo e pouco estudado pela física nuclear?

Essas foram as perguntas que precisei me fazer, embora tenha ciência de que a última possa parecer um pouco pretenciosa, de certa forma. Foi quando estudando alguns artigos do meio acadêmico cujo quais deixo descritos nas referencias deste estudo, cheguei a seguinte hipótese: como visto antes, o paládio pode neutralizar a repulsão eletroestática entre os elétrons dos átomos de hidrogênio, mas com base nos dados obtidos de todas as simulações isso ainda não era o suficiente para explicar o evento extremamente provável de

tunelamento quântico que estava-se obtendo. A hipótese em questão é que, devido a absorção dos átomos de hidrogênio no paládio, onde o mesmo se transforma em um hidreto de paládio, e à corrente aplicada, essa combinação de fatores possa causar pequenas deformações na rede cristalina do hidreto aumentando a interação próton-fônon, o que em conjunto com o potencial efetivo blindado causado pelos elétrons livres do paládio criam um potencial efetivo atrativo entre os prótons dos átomos de hidrogênio, para contextualizar vamos entrar em uma explicação sobre as interações em questão. Em sistemas metálicos como o paládio-hidrogênio (Pd-H), observa-se um fenômeno físico notável em que prótons absorvidos na rede cristalina interagem de maneira efetiva através das excitações vibracionais da rede. Este fenômeno é conhecido como acoplamento próton-fônon. A rede cristalina de um metal pode ser descrita como uma matriz de átomos interligados por "molas". Suas vibrações coletivas podem ser quantizadas e representadas por fônons, que são os análogos vibracionais dos fótons (quanta de luz). Existem Fônons acústicos, de baixa energia relacionados a vibrações coletivas "em uníssono" e Fônons ópticos, de energia mais alta, onde átomos vizinhos vibram em oposição de fase.

Quando um próton entra na rede de Pd, ele perturba o equilíbrio local da estrutura, deformando-a. Esta deformação gera excitações fônicas locais, que se propagam pela rede. Se outro próton estiver presente nas redondezas, ele poderá interagir com essa perturbação — surgindo então uma interação efetiva entre prótons mediada por fônons. Este processo é análogo ao mecanismo da supercondutividade, onde elétrons interagem via troca de fônons e formam pares de Cooper. Aqui, entretanto, o fenômeno envolve prótons, e pode ocorrer em escalas de energia muito superiores. A troca virtual de fônons entre dois prótons gera um potencial atrativo de forma exponencial, dado por:

$$\Phi(r) = \frac{g^2}{\hbar\omega} e^{-r/\xi}$$

Onde temos g que é a constante de acoplamento próton-fônon descrita em eV (elétron-volts), ω que é a frequência angular dos fônons acoplados (em rad/s) e ξ que é o comprimento de correlação fônica (em Å). Mas aqui vem a grande questão, para que o acoplamento realmente neutralize a barreira coulumbiana, seria preciso que a constante de acoplamento fosse g∼1 eV. Então novamente aqui retornamos a combinação de fatores, onde a pressão de absorção induz os átomos na rede cristalina a alcançarem distancia de um angstrom, e a aplicação de corrente no paládio, gera deformações na rede cristalina onde pode haver mais densidade de átomos de hidrogênio absorvidos, o que pode aumentar a constante de acoplamento ao nível mencionado antes. O acoplamento próton-fônon pode ser descrito com um formalismo quântico (Hamiltoniano de interação) onde temos:

$$H\hat{}int = \sum_{\mathrm{q}} gq\,(\hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{q}} + \hat{\mathrm{a}}^{\dagger}_{-q})\mathrm{e}^{iq\cdot r}$$

Onde temos os operadores de criação entre os parênteses, a função de acoplamento com o modo fônico de vetor de onda e o operador de posição do próton. Esse Hamiltoniano descreve a emissão e absorção de fônons pelo próton enquanto se move na rede. Dito isso podemos reformular a equação do potencial efetivo dado a blindagem eletrônica como:

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} exp(-\frac{r}{\lambda}) - \Phi(r) \sim 0$$

Esse potencial pode atingir valores da ordem de vários eV, com alcance na escala subnanométrica (∼1A˚). Quando “somado” à repulsão Colombiana blindada entre os prótons, pode anular completamente a barreira de potencial, possibilitando tunelamento

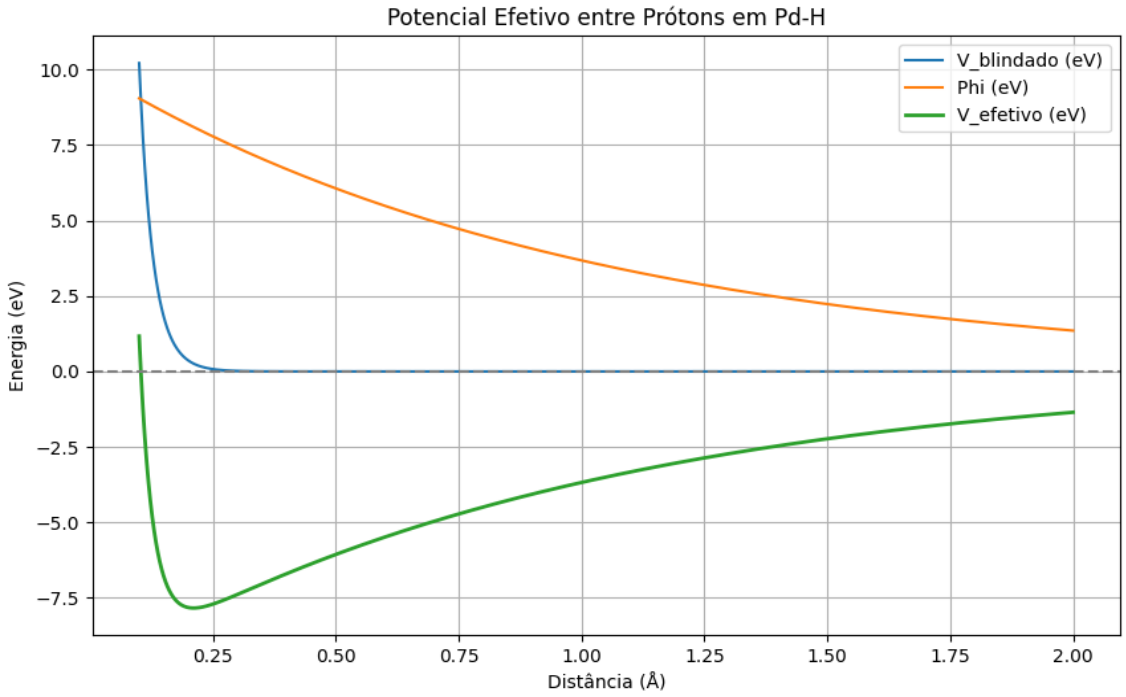
quântico com probabilidade T≈1. Seguindo o padrão também foi densenvolvido um código que simulasse este evento, é importante ressaltar que por motivos de recursos computacionais este foi o melhor que se pode fazer atualmente, o código a seguir:

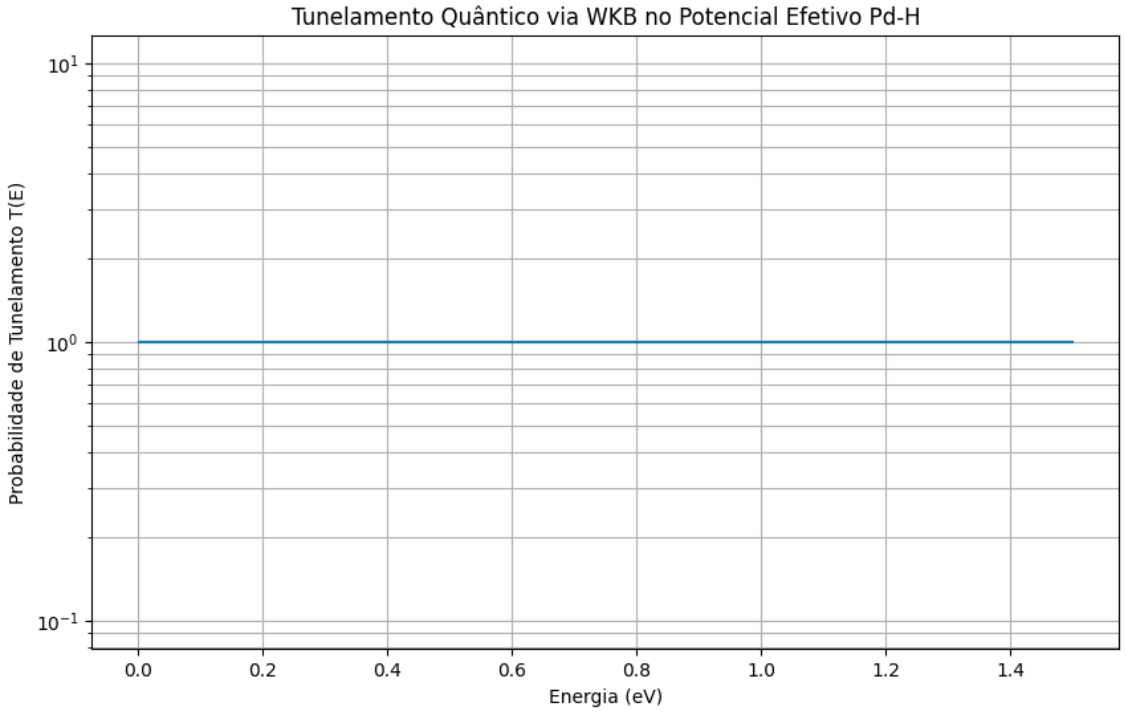
```
# Instalação de Pacotes

!pip install ase pymatgen phonopy matplotlib scipy numpy > /dev/null


# Importando bibliotecas

import numpy as np

import matplotlib.pyplot as plt

from scipy.constants import epsilon_0, k, e, hbar

from scipy.integrate import quad


#@title 📐 Definição de Parâmetros Físicos

T = 300  # Temperatura em Kelvin

n = 1e29  # densidade de elétrons estimada no Pd-H (m⁻³)

g = 1.0 * e  # Acoplamento próton-fônon (J)

omega_0 = 0.1 * e / hbar  # frequência fônon (rad/s)

xi = 1e-10  # alcance da interação (~1 Å)

m_p = 1.6726219e-27  # massa do próton (kg)


r = np.linspace(0.1e-10, 2e-10, 1000)  # distância r (m)


# Definindo os Potenciais
```

```
def V_blindado(r, T, n):
    lambda_D = np.sqrt(epsilon_0 * k * T / (n * e**2))
    return (e**2 / (4 * np.pi * epsilon_0 * r)) * np.exp(-r / lambda_D)

def Phi(r, g, omega_0, xi):
    return (g**2 / (hbar * omega_0)) * np.exp(-r / xi)

V_b = V_blindado(r, T, n)
Phi_fonon = Phi(r, g, omega_0, xi)
V_eff = V_b - Phi_fonon

#Plotando os Potenciais
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(r * 1e10, V_b / e, label="V_blindado (eV)")
plt.plot(r * 1e10, Phi_fonon / e, label="Phi (eV)")
plt.plot(r * 1e10, V_eff / e, label="V_efetivo (eV)", linewidth=2)
plt.axhline(0, color='gray', linestyle='--')
plt.xlabel("Distância (Å)")
plt.ylabel("Energia (eV)")
plt.legend()
plt.title("Potencial Efetivo entre Prótons em Pd-H")
plt.grid(True)
plt.show()

# Função de Tunelamento via WKB
```

```
r_vals = r
V_eff_vals = V_eff

def T_wkb(E):
    def integrand(r):
        V = np.interp(r, r_vals, V_eff_vals)
        return np.sqrt(2 * m_p * max(V - E, 0)) / hbar
    r_min, r_max = r_vals[0], r_vals[-1]
    integral, _ = quad(integrand, r_min, r_max)
    return np.exp(-2 * integral)

# Cálculo de T(E)
E_vals = np.linspace(0.001, 1.5, 100) * e  # de 1 meV a 1.5 eV
T_vals = np.array([T_wkb(E) for E in E_vals])

plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.semilogy(E_vals / e, T_vals)
plt.xlabel("Energia (eV)")
plt.ylabel("Probabilidade de Tunelamento T(E)")
plt.title("Tunelamento Quântico via WKB no Potencial Efetivo Pd-H")
plt.grid(True, which='both')
plt.show()
```

este gerou os seguintes dados:





O gráfico exibe os potenciais de interação entre dois prótons inseridos em uma matriz de paládio-hidrogênio (Pd-H), considerando efeitos de blindagem eletrônica e acoplamento fônon-próton. A curva azul representa o potencial Coulombiano blindado, que decai rapidamente

com a distância devido à presença de uma nuvem eletrônica densa no Pd, reduzindo fortemente a repulsão entre os prótons para distâncias menores que 0,5 Å. A curva laranja mostra o potencial atrativo mediado por fônons da rede do Pd, com uma forma exponencial que diminui suavemente, caracterizando um acoplamento vibracional de curto alcance, mas de magnitude considerável.

A curva verde representa o potencial efetivo total — a combinação dos dois efeitos — e revela um poço atrativo profundo com mínimo em torno de –7,5 eV para r∼0,2A˚, sem barreira de repulsão significativa até pelo menos 2 Å. Esse resultado confirma a hipótese teórica de que, sob certas condições de alta carga de hidrogênio e acoplamento fônon suficientemente forte, a barreira de potencial entre dois prótons pode ser praticamente eliminada. Isso viabilizaria o tunelamento quântico com probabilidade próxima de 1.

Antes de finalizar, poderíamos inclusive pensar em um experimento prático para validação dos dados e modelo teóricos vistos. Uma forma de executarmos isto seria seguirmos, principalmente os parâmetros que foram utilizados nos cálculos, neles foram usadas uma lâmina de paládio (pd-106) de 9 x 9 cm com 1mm de espessura, pensado criteriosamente par maximizar a área de contato com o hidrogênio, visando uma maior quantidade de átomos absorvidos. Com relação ao segundo principal agente neste experimento, o hidrogênio, temos duas formas de realizarmos a sua produção, a primeira e mais simples seria obter de um cilindro de hidrogênio industrializado, particularmente esta opção não me chama muita atenção, economicamente falando, a segunda opção, em minha opinião bem mais criativa e economicamente mais viável porem demanda um pouco mais de complexidade, seria obtermos o hidrogênio a partir da reação entre hidróxido de sódio (soda caustica) e alumino dada a seguinte reação:

$$2Al + 2NaOH + 6H_2O \rightarrow 2Na[Al(OH_4)] + 3H_2 \uparrow$$

Então ao obtermos o hidrogênio por meio deste processo simples, conectamos uma mangueira ao gerador de hidrogênio, conectando-a a um filtro de carvão ativado, isso servira como removedor de impurezas para garantir que estamos trabalhando com hidrogênio puro. Também não podemos esquecer do processo de limpeza do pd-106 que basicamente podemos fazer de várias formas, mas a mais simples seria mergulhá-lo em um composto comumente conhecido como água regia, em seguida mergulhá-lo em água destilada, e secar talvez com alguma fonte de calor, ou uma escova. Feito estes processos, passamos para a montagem. Conecta-se a mangueira que vem do gerador de hidrogênio, ao filtro de carvão, mais uma mangueira ao recipiente que receberá o gás (que deve ser selado), colocamos a lâmina de paládio em um suporte criado tanto para comportar o pd, quanto para aplicar a corrente elétrica de forma distribuída na lâmina evitando superaquecimento em pontos isolados. Após colocarmos o paládio no recipiente e introduzirmos o gás hidrogênio, selamos, e esperamos aproximadamente de vinte a trinta minutos, tempo suficiente para o paládio absorver sua quantidade total de hidrogênio, em seguida, proveniente de uma fonte de alimentação que possa fornecer duzentos e vinte volts de tensão e uma corrente elétrica de dez a doze amperes, aplicamos essa corrente à lâmina de paládio durante onze minutos. Em paralelo a isto seria preciso detectores de radiação gama, visto que a fusão que estamos lidando libera pósitrons que se aniquilam com elétrons liberando fótons gama, também precisaríamos de uma aparelho para realizar espectrometria de massa, para identificarmos deutérios formados pelo processo, bem como termômetros para identificar qualquer aumento significativo de temperatura que não possa ser explicado pela corrente elétrica que está sendo aplicada dado o efeito joule, entre outros aparatos necessários que possam confirmar que a fusão nuclear está de fato acontecendo. Dito estes detalhes, talvez possa surgir uma indagação, seria preciso substituir o ar do recipiente por hidrogênio, para garantir que estamos lidando com um ambiente rico em hidrogênio? Aqui temos dois caminhos possíveis, não necessariamente segundo os

cálculos do modelo, isso não seria um critério indispensável, mas de tal forma a garantir que todo o processo seja seguido a risca, poderia ser implementado uma bomba de vácuo no sistema que possa realizar substituição do ar presente no interior do recipiente pelo hidrogênio gerado.

A fusão nuclear de átomos de hidrogênio assistida em paládio é um campo de estudo promissor que pode revolucionar a produção de energia. A análise do experimento de Pons e Fleischmann revelou a capacidade do paládio de armazenar grandes quantidades de hidrogênio, o que pode levar a eventos de fusão nuclear. A aplicação de uma corrente elétrica ao paládio pode aumentar a pressão de adsorção dos átomos de hidrogênio, convertendo energia térmica em energia cinética, essencial para a fusão. No entanto, a reprodução do experimento requer atenção às variáveis críticas, como a pressão de absorção e a corrente aplicada.

Para entender melhor o papel do paládio como catalisador, é crucial considerar sua capacidade de absorver hidrogênio e aumentar a energia cinética dos átomos. A pressão gerada pela absorção e a energia térmica adicional fornecida pela corrente elétrica trabalham em conjunto para aumentar a energia cinética dos átomos de hidrogênio. Mas, esse aumento ainda não é suficiente para superar a barreira coulombiana. Fatores como tunelamento quântico, blindagem eletrônica e distribuição de energia térmica também desempenham um papel importante na fusão.

A aplicação de uma corrente elétrica ao paládio pode fornecer a energia cinética adicional necessária para a fusão dos átomos de hidrogênio. A energia térmica gerada pela corrente elétrica é diretamente convertida em energia cinética dado o efeito joule, aumentando a probabilidade de fusão. O conjunto de equações desenvolvido para descrever esse processo leva em consideração a pressão de referência, a temperatura do sistema, a pressão de absorção do hidrogênio no paládio, tunelamento quântico, distribuição de energia etc. A energia cinética média dos átomos de hidrogênio é multiplicada pela temperatura, enquanto a energia

térmica fornecida pela corrente elétrica é dividida pelo número de átomos de hidrogênio no sistema.

Além disso, a dinâmica da rede cristalina do paládio também influencia a fusão. As vibrações na rede cristalina podem aproximar ainda mais os átomos de hidrogênio, aumentando a probabilidade de fusão. A equação da rede cristalina descreve como as vibrações se propagam ao longo do material, afetando a proximidade dos núcleos de hidrogênio. A distribuição de energia térmica de Maxwell-Boltzmann ajuda a entender como a energia cinética proveniente da corrente elétrica e da pressão é distribuída entre os átomos de hidrogênio absorvidos no paládio.

Em conclusão, a fusão nuclear de átomos de hidrogênio assistida em paládio é um processo complexo que envolve várias variáveis críticas. A capacidade do paládio de absorver hidrogênio e a aplicação de uma corrente elétrica são fatores chave para aumentar a energia cinética dos átomos de hidrogênio. A reprodução do experimento requer atenção a fatores como tunelamento quântico, blindagem eletrônica e distribuição de energia térmica. A dinâmica da rede cristalina do paládio também desempenha um papel importante na fusão, aumentando a probabilidade de aproximação dos átomos de hidrogênio o que consequentemente favorece a probabilidade de tunelamento como visto nos resultados cujo valor é aproximadamente 1 que em termos de mecânica quântica, isso indica quase a certeza de haver tunelamento.

[1] Fleischmann, M.; Pons, S.; J. Electroanal. Chem. 1989.

[2] Lewis, F. A.; The Palladium Hydrogen System, Academic Press, New York, 1967.

[3] OLIVEIRA, Alyson Celson Medeiros de. Armazenamento de hidrogênio em paládio e hidretos metálicos. 2018.

[4] ÂNGELO, Antônio Carlos D.; SOUZA, Aguinaldo R. de. *Estudo da adsorção de hidrogênio e sulfeto na superfície de paládio: aspectos*

experimentais (eletroquímica) e teóricos (ab initio e teoria do funcional da densidade). Química Nova, v. 24, n. 4, p. 473-479, 2001.

[5] KUZMIN, R. N.; SHVILKIN, B. N. Fusão nuclear fria-mito ou realidade. Fusão a frio: a fraude física mais famosa Fusão nuclear fria-mito ou realidade. Fusão a frio: a fraude física mais famosa.

[6] LOPES, Edilton José et al. Fusão nuclear na produção de energia do Sol: uma possibilidade do tunelamento quântico e um caminho promissor para o planeta. 2023.

[7] Yasuhiro Iwamura *et al* 2002 *Jpn. J. Appl. Phys.* **41** 4642

[8] ANGÉLIO, M. L. et al. Electronic screening in palladium hydrides from first-principles calculations. *Physical Review B*, v. 103, p. 134303, 2021.