

บทความวิชาการ (Article)

สมการหัตถ์จรรย: แบบจำลองโลหะไฮโดรเจน

อุดมศิลป์ ปิ่นสุข

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

เมื่อวันที่ 29 มกราคม พ.ศ. 2563 ที่เพิ่งผ่านไปนี้ ลูเบียร์และคณะ ได้ประกาศการค้นพบโลหะไฮโดรเจนที่ความดัน 425 GPa โดยผลงานวิจัยนี้ได้รับการตีพิมพ์ในวารสาร Nature ซึ่งเป็นวารสารที่มีชื่อเสียงอย่างมากในวงการวิทยาศาสตร์ของโลก อย่างไรก็ตาม วิกเนอร์และฮันติงตัน ได้ทำนายไว้ตั้งแต่ พ.ศ. 2478 ว่าไฮโดรเจนสามารถมีสถานะเป็นโลหะได้ ดังนั้น ในบทความนี้เราจะกล่าวถึงแบบจำลองที่ใช้ในการทำนายการมีอยู่ของโลหะไฮโดรเจนด้วยการวิเคราะห์สมการพลังงานของโครงผลึกและก๊าซอิเล็กตรอน และด้วยความช่วยเหลือของสมการชาชิโยเราสามารถคำนวณหาพลังงานของโลหะไฮโดรเจนที่ความดัน 0 GPa และที่ความดันสูงชันได้

คำสำคัญ: โลหะไฮโดรเจน สมการชาชิโย

Abstract

On January 29th 2020, Loubeyre et al., have published the evidence of metal hydrogen under pressure of 425 GPa in Nature. However, Wigner and Huntington gave theoretical prediction in 1935 that hydrogen can undergo a phase transition into a metal. In this article, we gave a simplified description of the existence of the so-called metallic hydrogen by using a simple energy equation related to the crystal and electron energy terms. With the usage of the celebrated Chachiyo formula, we evaluated the metallic hydrogen ground state energy at 0 GPa and discussed the high pressure phase.

Keywords: Metallic Hydrogen, Chachiyo Formula

อะตอมไฮโดรเจนประกอบโปรตอน 1 ตัวและอิเล็กตรอน 1 ตัว ไฮโดรเจนเป็นสสารที่มนุษย์ตรวจจับได้ที่มีปริมาณมากที่สุดในการวัด สำหรับบนโลกนั้น ไฮโดรเจนอยู่ในรูปก๊าซของโมเลกุลและอยู่ในโมเลกุลน้ำและสารประกอบอื่น ๆ ปัจจุบันมีการทดลองนำไฮโดรเจนมาใช้เป็นแหล่งพลังงานสำหรับรถยนต์ผ่านทางเซลล์เชื้อเพลิง เพราะมีข้อดีคือผลพลอยได้จากกระบวนการผลิตพลังงานคือน้ำ ในอนาคตเราอาจได้เห็นรถยนต์พลังงานไฮโดรเจนมีใช้งานในเชิงพาณิชย์อย่างกว้างขวาง ส่วนในบทความนี้จะพิจารณาความเป็นไปได้ที่จะมีโลหะไฮโดรเจน โดย วิกเนอร์และฮันดิงตัน [1] ได้ใช้ทฤษฎีควอนตัมทำนายความเป็นไปได้ที่อะตอมของธาตุไฮโดรเจนจะรวมตัวกันเป็นผลึกและมีสมบัติเป็นโลหะไว้ตั้งแต่ปี พ.ศ. 2478 ซึ่งถ้าเกิดได้จริง จะมีประโยชน์อย่างมากเพราะโลหะไฮโดรเจนมีน้ำหนักเบากว่าเหล็กมากกว่า 50 เท่า เพื่อให้เห็นภาพ ถ้าวัดรถยนต์คันหนึ่งทำจากเหล็กทั้งคันมีน้ำหนัก 1,000 กิโลกรัม ถ้าสร้างจากโลหะไฮโดรเจน รถยนต์คันนี้จะมีน้ำหนักเพียง 20 กิโลกรัมเท่านั้น ในบทความนี้จะกล่าวถึงแบบจำลองอย่างง่ายเพื่อแสดงการมีอยู่ของโลหะไฮโดรเจน หลังจากนั้น กล่าวถึงสถานการณ์ล่าสุดของการทดลองค้นหาโลหะไฮโดรเจนในโลกแห่งความเป็นจริง

แบบจำลองโลหะไฮโดรเจน

ในวัสดุควบแน่น (condensed matter) จะมีสมการศูนย์กลาง (central equation) ซึ่งเป็นสมการแบบหลายวัตถุ (many-body equation) ที่ใช้อธิบายอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคทุกตัวที่อยู่ในระบบ ที่สำคัญคือมีเพียงอันตรกิริยาแบบคูลอมบ์ (Coulomb interaction) เท่านั้น สมการศูนย์กลาง [2] เขียนได้ดังนี้

$$\hat{H} = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{I,J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{x}_i|} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \quad (1)$$

โดย $\mathbf{R}_I$ เป็นเวกเตอร์บอกตำแหน่งของนิวเคลียสตัวที่ I และ $\mathbf{x}_i$ เป็นเวกเตอร์บอกตำแหน่งของอิเล็กตรอนตัวที่ i และ ส่วน m เป็นมวลของอิเล็กตรอน M เป็นมวลของนิวเคลียส Z เป็นค่าประจุบวกของนิวเคลียส พจน์แรกอธิบายพลังงานจลน์ของนิวเคลียส พจน์ที่สองอธิบายอันตรกิริยาระหว่างเหล่านิวเคลียส พจน์ที่สามอธิบายอันตรกิริยาระหว่างนิวเคลียสกับอิเล็กตรอนของอะตอม พจน์ที่สี่อธิบายพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอน และพจน์สุดท้ายอธิบายอันตรกิริยาระหว่างเหล่านิวเคลียสในระบบ

เราสามารถสร้างแบบจำลองโลหะไฮโดรเจนอย่างง่ายได้โดยพิจารณาว่าโลหะไฮโดรเจนประกอบด้วยโปรตอน 1 ตัวเป็นฐาน (basis) ของโครงผลึก นั่นคือ กำหนดให้ $Z = 1$ ในสมการที่ (1) ในขณะที่อิเล็กตรอนนั้นออกมารวมตัวกันเป็นก๊าซอิเล็กตรอนและทำหน้าที่เสมือนกาวที่เชื่อมโครงผลึกเข้าไว้ด้วยกัน กล่าวอีกนัยหนึ่งก็คือ โครงผลึกอยู่ในสมดุลระหว่างแรงผลักระหว่างเหล่านิวเคลียสและแรงดึงดูดที่มาจากก๊าซอิเล็กตรอน บางครั้งเรียกแรงดึงดูดนี้ว่าพันธะโลหะ และผู้เขียนขอเรียกโลหะที่มีฐานจากอะตอมไฮโดรเจนนี้ว่า “โลหะไฮโดรเจน” ทั้งนี้ก็เพื่อป้องกันความสับสนกับการค้นพบของ เอร์เมทส์และโทรยัน ในปี พ.ศ. 2554 ที่พบว่าโมเลกุลไฮโดรเจนและดิวทีเรียมก็มีสมบัติเป็นโลหะเหลวภายใต้ความดันสูงประมาณ 260-270 GPa [3] แต่เราไม่ได้พิจารณาโลหะเหลวในที่นี้

ในบทความนี้ เราจะไม่ได้แก้สมการควอนตัมของสมการที่ (1) โดยตรง แต่จะประมาณพลังงานในแต่ละเทอมเป็นฟังก์ชันของ r_s ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ที่บอกรัศมีของทรงกลมสมมติอันหนึ่งที่มีปริมาตรเพียงพอที่จะบรรจุก๊าซอิเล็กตรอนที่มีประจุรวมเท่ากับอิเล็กตรอน

หนึ่งตัว หรืออีกนัยหนึ่งคือความหนาแน่นของก๊าซอิเล็กตรอนจะมีค่าเท่ากับ $\rho = 1/\left(\frac{4}{3}\pi r_s^3\right)$ และเรียกทรงกลมสมมตินี้ว่า เซลล์ของวิกเนอร์-ไซส์ (Wigner-Seitz cell) [1,2] ในแบบจำลองโลหะไฮโดรเจนที่กำลังพิจารณานี้เราจะกำหนดให้โปรตอน 1 ตัวอยู่ที่ศูนย์กลางของเซลล์พอดี ดังนั้นเซลล์หนึ่ง ๆ จะมีความเป็นกลางทางไฟฟ้าและจะไม่มีอันตรกิริยากับเซลล์อื่น ๆ ข้อกำหนดนี้ทำให้เราสามารถละทิ้งพจน์ที่สองของสมการที่ (1) ได้ และถ้าเราสมมติว่าการคำนวณนี้ใช้กับระบบที่มีอุณหภูมิศูนย์สัมบูรณ์ (0 K) นิวเคลียสของระบบจะตรึงอยู่กับที่ในโครงผลึก จะทำให้พจน์แรกของสมการที่ (1) ซึ่งอธิบายพลังงานจลน์ของนิวเคลียสนั้นสามารถละทิ้งได้เช่นกัน ดังนั้นแบบจำลองของเราจะพิจารณาเพียงพลังงานจากอันตรกิริยาแบบคูโลมบ์จากพจน์ที่สามและห้าของสมการที่ (1) ซึ่งคำนวณได้จากพลังงานเมดาลุง (Medalung energy) [2,4] ส่วนพลังงานของพจน์สี่และห้าของสมการที่ (1) สามารถประมาณได้ด้วยพลังงานของก๊าซอิเล็กตรอนและสมการชาชีโย [5,6] ดังนั้นพลังงานเฉลี่ยต่อเซลล์ (หรือต่ออิเล็กตรอน) จึงเหลือเพียง [2,4]

$$\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}_M + \bar{\epsilon}_k + \bar{\epsilon}_x + \bar{\epsilon}_c \quad (2)$$

การประมาณด้วยเซลล์ของวิกเนอร์-ไซส์เป็นหนึ่งในวิธีการการลดองศาความอิสระ (degree of freedom) ของสมการที่ (1) เพื่อให้การคำนวณอยู่ในพิสัยที่ทำได้ง่าย การประมาณอีกวิธีที่ใช้กับกรณีทั่วไปโดยเฉพาะเมื่อมีโครงผลึกเข้ามาเกี่ยวข้องคือการประมาณแบบอะเดียบาติกของบอร์น-ออปเพนไฮเมอร์ (Born-Oppenheimer adiabatic approximation) [7] เริ่มต้นด้วยการแยกพิจารณาสมการที่เกี่ยวข้องกับนิวเคลียส (พจน์ที่หนึ่งและสองของสมการที่ (1)) และกับอิเล็กตรอน (พจน์ที่สาม สี่ และห้าของสมการที่ (1)) ออกจากกัน เนื่องมาจากการเคลื่อนที่ของนิวเคลียสนั้นช้ามากเมื่อเทียบกับการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนซึ่งเป็นผลจากขนาดของมวลที่ต่างกันมาก ๆ แสดงว่าการคำนวณตามสมการที่ (2) คือการพิจารณาเฉพาะส่วนที่เกี่ยวข้องกับอิเล็กตรอนเท่านั้น อย่างไรก็ตาม ผู้อ่านสามารถเพิ่มเติมความละเอียดได้ในหลายส่วน เช่น การใช้เซลล์ที่มีสมมาตรตามโครงผลึกแทนการใช้เซลล์ของวิกเนอร์-ไซส์ หรือ การรวมผลของพลศาสตร์ของโปรตอนตามที่ปรากฏในพจน์ที่หนึ่งและสองของสมการที่ (1) เข้ามาในสมการด้วยก็ได้ ซึ่งผลการทดลองของลูแบร์และคณะ [8] ก็สนับสนุนแนวทางนี้ และนอกจากนี้ สไตเนอร์และแอชคอฟฟ์ [4] ได้เสนอแนวทางปรับปรุงความถูกต้องของสมการที่ (2) โดยการเติมพจน์ที่มีลำดับสูงขึ้น (higher order terms) ในทฤษฎีการตอบสนอง (response theory) แต่พจน์ที่เพิ่มขึ้นเหล่านี้มีการคำนวณที่ยุ่งยากซับซ้อน ผู้เขียนจึงขอละไว้ในที่นี้

ต่อมาคือการพิจารณาพจน์ต่างๆ ของสมการที่ (2) โดยพจน์แรก คือ $\bar{\epsilon}_M$ เป็นพลังงานเมดาลุงมาจากการที่มีโปรตอนที่มีประจุบวก $Z = 1$ อยู่ที่ศูนย์กลางของเซลล์และโปรตอนนี้มีอันตรกิริยาแบบคูโลมบ์กับอิเล็กตรอน และได้รวมผลของอันตรกิริยาแบบคูโลมบ์ของก๊าซอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นสม่ำเสมอภายในเซลล์ไว้ด้วย ในความเป็นจริงแล้ว พลังงานเมดาลุงนี้ขึ้นกับรูปร่างและสมมาตรของโครงผลึก แต่ผลลัพธ์กลับมีความสัมพันธ์ที่เรียบง่ายดังนี้

$$\bar{\epsilon}_M = -\frac{\alpha}{r_s} \quad (3)$$

โดยค่า α เป็นพารามิเตอร์ที่ขึ้นกับโครงผลึกตามที่สรุปไว้ในตารางที่ 1

ตารางที่ 1 พารามิเตอร์ α สำหรับ $\bar{\epsilon}_M$ ในโครงผลึกชนิดต่าง ๆ [2]

โครงผลึก	α
วิกเนอร์-ไซส์	1.8
Simple cubic	1.760
Body-centered cubic	1.79186
Face-centered cubic	1.79175
Hexagonal close-packed	1.79168

พจน์ที่สองคือ $\bar{\epsilon}_k$ เป็นพลังงานจลน์เฉลี่ยของก๊าซอิเล็กตรอน และสำหรับก๊าซอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นสม่ำเสมอจะได้ว่า

$$\bar{\epsilon}_k = \frac{1}{N} \sum_k^{k_F} \epsilon_k = \frac{2.21}{r_s^2} \quad (4)$$

พจน์ที่สามคือ $\bar{\epsilon}_x$ เป็นพลังงานแลกเปลี่ยนเฉลี่ยของก๊าซอิเล็กตรอนเนื่องจากอิเล็กตรอนเป็นเฟอร์มิออน ถ้าให้ $y = \frac{k}{k_F}$ จะได้ว่า

$$\bar{\epsilon}_x = -\frac{1}{2N} \frac{e^2 k_F}{\pi} \sum_k^{k_F} \left(1 + \frac{1-y^2}{2y} \ln \left| \frac{1+y}{1-y} \right| \right) = -\frac{0.916}{r_s} \quad (5)$$

และพจน์สุดท้ายคือ $\bar{\epsilon}_c$ เป็นพลังงานสหสัมพันธ์เฉลี่ยของก๊าซอิเล็กตรอน ซึ่งเราสามารถใช้สมการชาโช [5,6] ได้ทันที

$$\bar{\epsilon}_c = A \log \left(1 + \frac{B}{r_s} + \frac{C}{r_s^2} \right) \quad (6)$$

ดังนั้นพลังงานรวมเฉลี่ยของแบบจำลองโลหะไฮโดรเจนอย่างง่ายของเราสามารถเขียนให้อยู่ในรูปของฟังก์ชันของ r_s ได้ดังนี้

$$\bar{\epsilon} = -\frac{1.8}{r_s} + \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} - 0.0311 \log \left(1 + \frac{20.4562}{r_s} + \frac{20.4562}{r_s^2} \right) \quad (7)$$

สมการนี้สำหรับโครงผลึกแบบเซลล์ของวิกเนอร์-ไซส์ และจุดที่เสถียรที่สุดนั้นมีพลังงานต่ำสุด ซึ่งก็คือจุดที่ $\frac{d\bar{\epsilon}}{dr_s} = 0$ ที่จุดนี้มีค่า $r_s^0 = 1.590a_0$ และ $\bar{\epsilon}^0 = -0.930\text{Ry}$ โดย a_0 เป็นรัศมีของบอร์ (Bohr radius) และพลังงานอยู่ในหน่วยริดเบิร์ก (Rydberg, $1\text{Ry} =$

13.6eV) การคำนวณตามสมการนี้เป็นการประมาณอย่างง่ายที่สุด การคำนวณของวิกเนอร์และฮันดิงตัน [1] พบว่า $r_s^0 = 1.64a_0$ และ $\varepsilon^0 = -1.05Ry$ ซึ่งสอดคล้องกับวิธีแบบมอนติคาร์โลที่กำหนดให้โปรตอนเป็นจุดจริง โดย เชปเพอเลียและอัลเดอร์ [9] ที่ได้ $r_s^0 = 1.61a_0$ และ $\varepsilon^0 = -1.053Ry$ วิธีแบบมอนติคาร์โลนั้นใช้หาผลเฉลยของสมการที่ (1) โดยตรงจึงถือว่ามีความแม่นยำที่สุด สาเหตุของความคลาดเคลื่อนของสมการที่ (7) นั้นมีหลายประเด็นตามที่ได้กล่าวไปแล้ว แต่ส่วนสำคัญอันหนึ่งมาจากการที่เราใช้ค่าพลังงานจลน์โดยประมาณจากพลังงานจลน์ของก๊าซอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นสม่ำเสมอ แต่ในความเป็นจริงแล้วพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนยังขึ้นกับรูปร่างของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนในโครงผลึกด้วย เพราะอิเล็กตรอนมีแนวโน้มจะเข้าไปอยู่ใกล้โปรตอนมากกว่าที่อื่น ๆ ดังนั้นการประมาณที่ดีกว่าคือการแก้สมการหาฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนด้วยเงื่อนไขขอบเขตที่ตรงกับความเป็นจริงมากขึ้น และรวมผลรูปร่างของฟังก์ชันคลื่นเข้ามาในการคำนวณพลังงานเฉลี่ยด้วย ผู้ที่เสนอปรับปรุงค่าพลังงานนี้คือ สไตเนอร์และแอชกรอฟท์ [4] จากนั้น นพปฎล สุทธิศิริ ศาสตราจารย์ ดร.วิจิต ศรีตระกูล และ ศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต [10] รวมถึงรองศาสตราจารย์ ดร.ไพโรจน์ มุลตระกูล และผู้เขียน [11] ก็เคยเสนอแนวทางในการปรับปรุงสมการพลังงานด้วยวิธีนี้ด้วย ค่าที่ได้จากการปรับปรุงทั้งหมดสรุปไว้ในตารางที่ 2 อย่างไรก็ตาม ข้อมูลตามตารางแสดงให้เห็นว่าโมเลกุลไฮโดรเจนนั้นมีพลังงานต่ำที่สุด จึงสรุปได้ว่าโมเลกุลไฮโดรเจนมีเสถียรภาพเชิงพลังงานที่ดีกว่าโลหะไฮโดรเจน หรืออีกนัยหนึ่งคือเราอาจไม่พบโลหะไฮโดรเจนในสภาวะปกติ

ตารางที่ 2 สรุปผลการคำนวณ r_s^0 และ ε^0 ด้วยวิธีต่าง ๆ

ผู้คำนวณ	$r_s^0(a_0)$	$\varepsilon^0(Ry)$	วิธีการ
ผู้เขียน	1.590	-0.930	สมการที่ (7)
วิกเนอร์และฮันดิงตัน [1]	1.64	-1.05	เซลล์ของวิกเนอร์-ไฮส์
สไตเนอร์และแอชกรอฟท์ [4]	1.61	-1.038	ฟังก์ชันคลื่นและเงื่อนไขขอบเขต
ไพโรจน์และอุดมศิลป์ [11]	1.6	-1.07	ฟังก์ชันคลื่นและเงื่อนไขขอบเขต
เชปเพอเลียและอัลเดอร์ [9]	1.61	-1.053	มอนติคาร์โล
อะตอมไฮโดรเจน	-	-1.0	ฟังก์ชันคลื่น
โมเลกุลไฮโดรเจน [12]	-	-1.164	การทดลอง

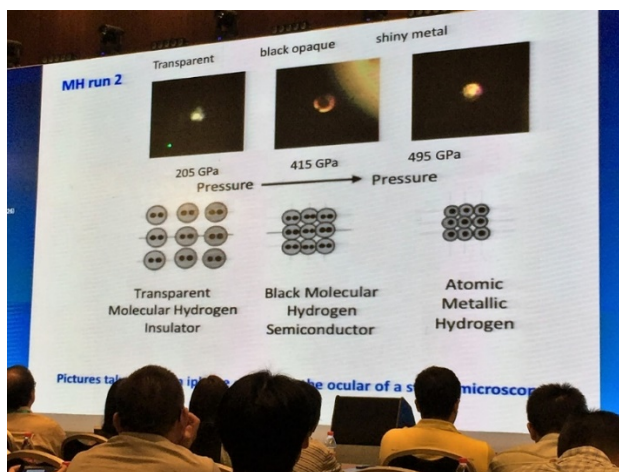
เมื่อเราทราบสมการพลังงานแล้วเราสามารถคำนวณหาความดันได้จากความสัมพันธ์ $P = -\frac{d\varepsilon}{dV}$ โดย $V = \frac{4}{3}\pi r_s^3$ ดังนั้น ค่าพลังงานที่ระบุในตารางที่ 2 จึงเป็นค่าที่ความดันเป็นศูนย์ ซึ่งสรุปได้ว่าอาจไม่พบโลหะไฮโดรเจนที่ผิวโลกหรือระดับน้ำทะเล อย่างไรก็ตาม แม้โลหะไฮโดรเจนจะมีเสถียรภาพเชิงพลังงานต่ำกว่าโมเลกุลไฮโดรเจนที่ความดัน 0 GPa แต่นักทดลองเริ่มมีหลักฐานมากขึ้นว่า โลหะไฮโดรเจนน่าจะมีเสถียรภาพที่ความดันสูง ยกตัวอย่างเช่น ในปี พ.ศ. 2560 ดิแอสและซิลเวรา (Dias and Silvera) [13] ได้ทำการทดลองหาสถานะต่าง ๆ ของไฮโดรเจนที่ความดันสูง โดยทั้งคู่ได้ทำการวัดสมบัติทางแสงและพลังงานของอนุภาคพลาสมอน และ ฌ ความดันที่คาดว่าจะเกิดโลหะไฮโดรเจน พบว่าความถี่พลาสมอนมีค่าประมาณ 32.5 - 33.2 eV เทียบได้กับความหนาแน่นของอิเล็กตรอนประมาณ

$7.7 - 8.1 \times 10^{23}$ อนุภาคต่อลูกบาศก์เซนติเมตร หรือเทียบได้กับ $r_s \approx 1.26 - 1.34 a_0$ [13] ถ้าหากเลือกค่ากลาง เช่น $r_s \approx 1.305 a_0$ และใส่แบบจำลองตามสมการที่ (7) ของเรา จะให้ค่าความดันประมาณ 496 GPa ซึ่งใกล้เคียงกับค่าที่ 495 GPa ที่ ดิแอสและซิลเวรา รายงานไว้อย่างมาก แบบจำลองอย่างง่ายของเรานั้นก็สามารถจับใจความสำคัญของโลหะไฮโดรเจนได้ดีพอควร

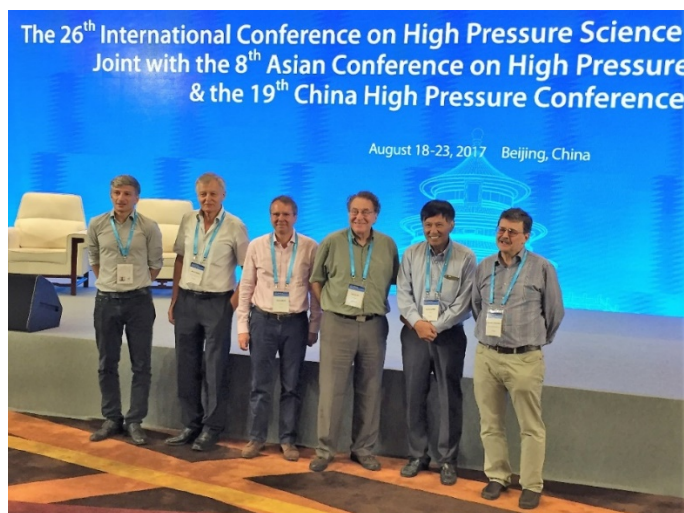
ความท้าทายของการค้นหาโลหะไฮโดรเจน

จากที่ วิกเนอร์และฮันดิงตัน [1] ได้ใช้ทฤษฎีควอนตัมทำนายความเป็นไปได้ที่อะตอมของธาตุไฮโดรเจนจะรวมตัวกันเป็นผลึก และมีสมบัติเป็นโลหะไว้ตั้งแต่ปี พ.ศ. 2478 หลังจากทีเซอร์โรดิงเจอร์ได้รับรางวัลโนเบลจากหัวข้อ "for the discovery of new productive forms of atomic theory" ร่วมกับดิแรกเพียง 2 ปี การทำนายนี้ได้กระตุ้นให้นักทดลองทำการค้นคว้าหาสถานะโลหะของธาตุไฮโดรเจนกันอย่างกว้างขวาง แต่เวลาผ่านไปเกือบ 80 ปีก็ยังไม่มีการประกาศการค้นพบโลหะไฮโดรเจนที่มีโครงสร้างผลึกที่มีฐาน (basis) จากอะตอมไฮโดรเจน จนกระทั่งเมื่อไม่นานนี้ การทดลองโดย ดิแอสและซิลเวรา (Dias and Silvera) [13] ในปี พ.ศ. 2560 พบว่าต้องทำการทดลองที่ความดันสูงถึง 495 GPa เพื่อสังเคราะห์โลหะไฮโดรเจน (ความดันอากาศที่ระดับน้ำทะเลประมาณ 10^5 Pa ความดันที่แก่นโลกประมาณ 350 GPa สูงกว่าที่ระดับน้ำทะเลหลายล้านเท่า) งานวิจัยนี้ได้รับการตีพิมพ์ในวารสาร Science และนอกจากนี้ ซิลเวรา ยังได้ประกาศผลงานวิจัยการค้นพบโลหะไฮโดรเจนในการประชุมวิชาการ 8th Asian Conference in High Pressure Research (ACHPR) ณ กรุงปักกิ่ง ประเทศจีน เมื่อวันที่ 18 เมษายน พ.ศ. 2560 ตามรูปที่ 1 และ 2 โดยผู้เขียนมีโอกาสดำเนินการประชุมด้วยในฐานะเลขานุการของกลุ่ม ACHPR และได้บันทึกภาพไว้ อย่างไรก็ตาม งานวิจัยของดิแอสและซิลเวรานี้ได้รับการวิพากษ์อย่างเข้มข้นถึงความน่าเชื่อถือในการวัดความดันและสมบัติของตัวอย่างการทดลอง [14] พวกเขาได้เคลื่อนย้ายตัวอย่างเพื่อไปทำการทดสอบเพิ่มเติม แต่เกิดอุบัติเหตุทำให้ “ว่าที่โลหะไฮโดรเจน” ชิ้นแรกของโลกหล่นหายไป [15]

ล่าสุดเมื่อวันที่ 29 มกราคม พ.ศ. 2563 ลูแบร์และคณะ [8] ได้ประกาศการค้นพบโลหะไฮโดรเจนที่ความดัน 425 GPa ผลงานวิจัยได้รับการตีพิมพ์ในวารสาร Nature การทดลองของพวกเขาได้มีการประมาณค่าช่องว่างแถบพลังงาน (bandgap) จากสมบัติทางแสงของแข็ง และพบว่าของแข็งไฮโดรเจนที่ความดันไม่ถึง 425 GPa นั้นเป็นสารกึ่งตัวนำซึ่งมีช่องว่างแถบพลังงานลดลงเรื่อยๆ ตามความดันที่เพิ่มขึ้น ผลการทดลองของลูแบร์และคณะยังสนับสนุนทฤษฎีที่รวมผลควอนตัมของนิวเคลียส (Quantum nuclear effects) (นั่นคือผลทางควอนตัมของพจน์ที่หนึ่งและสองของสมการที่ (1) นั้นละทิ้งไม่ได้) และแรงแวนเดอร์วาลส์ (van Der Waals) มีบทบาทสำคัญต่อพฤติกรรมของช่องว่างแถบพลังงานภายใต้ความดันเป็นอย่างมาก เมื่อการทดลองเพิ่มความดันจนถึงจุดเปลี่ยนสถานะ (phase transition) ของแข็งไฮโดรเจนมีการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกและช่องว่างพลังงานลดลงอย่างฉับพลันจนกลายเป็นศูนย์ และพบว่าความดันที่จุดเปลี่ยนสถานะมีค่าประมาณ 425 GPa อย่างไรก็ดี ค่าความดันที่จุดเปลี่ยนสถานะนั้นต่างจากของ ดิแอสและซิลเวรา [13] พอสมควร ซิลเวราจึงออกมาวิพากษ์ความน่าเชื่อถือของการวัดอย่างเข้มข้น ซึ่งก็อาจเป็นเพราะ ลูแบร์และคณะ เคยวิพากษ์ผลงานของ ดิแอสและซิลเวรา อย่างเข้มข้นเช่นกัน [16]



รูปที่ 1 ภาพจากสไลด์ของซิลเวราในงานประชุม 8th ACHPR วันที่ 18 เมษายน พ.ศ. 2560 แสดงภาพสถานะต่าง ๆ ของไฮโดรเจนจากการทดลองโดยมีภาพโลหะไฮโดรเจนอยู่ทางขวามือสุด



รูปที่ 2 ซิลเวราได้ประกาศการค้นพบโลหะไฮโดรเจนในงานประชุม 8th ACHPR ณ กรุงปักกิ่ง ประเทศจีน เมื่อวันที่ 18 เมษายน พ.ศ. 2560 โดยมีนักฟิสิกส์ทดลองที่เกี่ยวข้องกับการสร้างแผนผังสถานะ (phase diagram) ของไฮโดรเจนภายใต้ความดันสูงเข้าร่วมการประชุมหลายท่าน ได้แก่ (จากซ้าย) เกรกอเรียนซ์ (E. Gregoryanz) เอรีเมตส์ (M. Erements) ลูแบร์ (P. Loubeyre) ซิลเวรา (I.F. Silvera) เหมา (H.-K. Mao) และ กอนชาร์อฟ (A.F. Goncharov)

อีกแหล่งหนึ่งที่กำลังจะมีโลหะไฮโดรเจนคือดาวพฤหัสบดี (Jupiter) ในรอบกว่า 40 ปีที่ผ่านมา นาซา (NASA) ได้ส่งยานอวกาศเพื่อไปสำรวจดาวพฤหัสบดีแล้วหลายลำ ยกตัวอย่างเช่น ยานอวกาศไพโอเนียร์ 10 และ 11 เดินทางถึงดาวพฤหัสบดีในปี พ.ศ. 2516 ยานอวกาศวอยเอจเจอร์ 1 และ 2 เดินทางถึงในปี พ.ศ. 2522 ยานอวกาศกาลิเลโอ เดินทางถึงเมื่อปี พ.ศ. 2538 และล่าสุด ยานอวกาศจูโน (JUNO) เดินทางถึงดาวพฤหัสบดีเมื่อปี พ.ศ. 2559 และกำลังสำรวจดาวพฤหัสบดีอยู่ ปัจจุบัน จากข้อมูลที่ยานอวกาศเหล่านี้ส่งกลับมายังโลก นักวิทยาศาสตร์ค้นพบว่าสนามแม่เหล็กของดาวพฤหัสบดีมีความแรงกว่าสนามแม่เหล็กของโลก 20 เท่า มีโมเมนต์แม่เหล็กแรงกว่าของโลกถึงกว่า 20,000 เท่า ทั้งที่องค์ประกอบส่วนใหญ่ของดาวนั้นมาจากไฮโดรเจนและฮีเลียม นักวิทยาศาสตร์ยังได้ค้นพบปรากฏการณ์ออโรรา (Aurora) บนดาวพฤหัสบดีซึ่งเกิดจากอนุภาคที่มีประจุมีอันตรกิริยากับสนามแม่เหล็กของดาวซึ่งเป็นเครื่องยืนยันอีกอันหนึ่งว่าดาวพฤหัสบดีมีสนามแม่เหล็กความเข้มสูง ดังนั้น ถ้าไฮโดรเจนเป็นองค์ประกอบหลักของดาวพฤหัสบดี ก็ควรอยู่ในอณูรูปที่สามารถผลิตสนามแม่เหล็กได้ เช่น มีสถานะเป็นโลหะไฮโดรเจนนั่นเอง สำหรับยานอวกาศจูโนนั้นมีเครื่องมือวัดหลายชนิดที่จะวิเคราะห์องค์ประกอบของชั้นบรรยากาศ สนามแม่เหล็ก และความโน้มถ่วงที่ตำแหน่งต่าง ๆ ของดาวพฤหัสบดี ซึ่งผลการวิเคราะห์ข้อมูลจากการวัดเหล่านี้จะสามารถยืนยันการมีอยู่ของโลหะไฮโดรเจนได้ [17] อย่างไรก็ตามก็มีความผิดพลาดบางอย่างที่ไอพ่นของยาน การวัดทางวิทยาศาสตร์ต่าง ๆ ของยานอวกาศจูโนจึงต้องใช้เวลาานกว่าที่นาซาได้วางแผนไว้ โดยภารกิจของยานจูโนจะสิ้นสุดในปี พ.ศ. 2564 ในขณะที่ผู้แต่งเขียนบทความนี้ การค้นพบโลหะไฮโดรเจนก็ยังคงเป็นปัญหาปลายเปิดต่อไป

เอกสารอ้างอิง

- [1] E. Wigner and H. B. Huntington, "On the possibility of a metallic modification of hydrogen", *Journal of Chemical Physics*, 3, 764-770 (1935).
- [2] G. D. Mahan, "Many-Particle Physics", 3rd Edition, (Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2000).
- [3] M. I. Eremets and I. A. Troyan, "Conductive dense hydrogen", *Nature Materials*, 10, 927-931 (2011).
- [4] D. F. Styer and N. W. Ashcroft, "Ground-state energy of metallic hydrogen in the Wigner-Seitz approximation", *Physical Review B*, 29, 5562 (1984).
- [5] T. Chachiyo, "Simple and accurate uniform electron gas correlation energy for the full range of densities", *Journal of Chemical Physics*, 145, 021101 (2016).
- [6] อุดมศิลป์ ปิ่นสุข, "สมการมหัศจรรย์: สมการชวาชิช", *Thai Journal of Physics*, 36, 100-106 (2019).
- [7] M. Born and J. R. Oppenheimer, "Zur Quantentheorie der Molekeln (On the Quantum Theory of Molecules)", *Annalen der Physik*, 389, 457-484 (1927).
- [8] P. Loubeyre, F. Occelli and P. Dumas, "Synchrotron infrared spectroscopic evidence of the probable transition to metal hydrogen", *Nature*, 577, 631 (2020).

- [9] D. M. Ceperley and B. J. Alder, “The calculation of the properties of metallic hydrogen using Monte Carlo”, *Physica B*, 108, 875 (1981).
- [10] นพปฎล สุทธิศิริ, วิชิต ศรีตระกูล และ วิรุฬห์ สายคณิต, “การหาพลังงานต่ำสุดของโลหะไฮโดรเจน”, *วารสารวิทยาศาสตร์*, 38, 734 (1984).
- [11] P. Moontragoon and U. Pinsook, “Metallic Hydrogen in a More Accurate Wigner-Seitz Approximation”, *Journal of Scientific Research Chulalongkorn University*, 28, 13 (2003).
- [12] C.-F. Cheng, J. Hussels, M. Niu, H. L. Bethlem, K. S. E. Eikema, E. J. Salumbides, W. Ubachs, M. Beyer, N. Hölsch, J. A. Agner, F. Merkt, L.-G. Tao, S.-M. Hu and Ch. Jungen, “Dissociation Energy of the Hydrogen Molecule at 10^{-9} Accuracy”, *Physical Review B*, 121, 013001 (2018).
- [13] R. P. Dias and I. F. Silvera, “Observation of the Wigner-Huntington transition to metallic hydrogen”, *Science*, 355, 715–718 (2017).
- [14] H. Y. Geng, “Public debate on metallic hydrogen to boost high pressure research”, *Matter and Radiation at Extremes*, 2, 275-277 (2017).
- [15] <https://www.sciencealert.com/the-world-s-only-metallic-hydrogen-sample-has-disappeared>
- [16] arXiv:1907.03198 [cond-mat.other] and arXiv:1702.07192 [cond-mat.other]
- [17] C. Jones, “Jupiter’s magnetic field revealed by the Juno spacecraft”, *Nature*, 561, 36-37 (2018).