แบบจำลองสภาพนำไฟฟ้าของโลหะเหลวไฮโดรเจน

นายชัชวาล ศรีภักดี

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2541

ISBN 974-332-542-5

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I19301954

A MODEL OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF LIQUID METALLIC HYDROGEN

Mr. CHATCHAWAL SRIPAKDEE

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science in Physics

Department of Physics

Graduate School

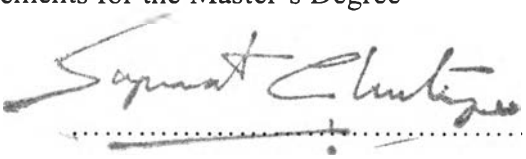
Chulalongkorn University

Academic Year 1998

ISBN 974-332-542-5

Thesis Title	A Model of Electrical Conductivity of Liquid Metallic Hydrogen
By	Mr. Chatchawal Sripakdee
Department	Physics
Thesis Advisor	Associate Professor Wichit Sritrakool, Ph.D.

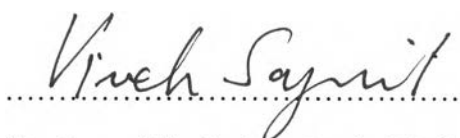
Accepted by Graduate School, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of Requirements for the Master's Degree



.....Dean of Graduate School

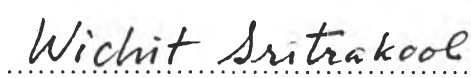
(Professor Supawat Chutivongse, M.D.)

Thesis Committee



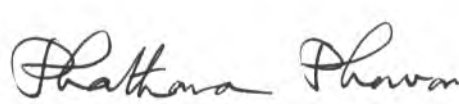
..... Chairman

(Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.)



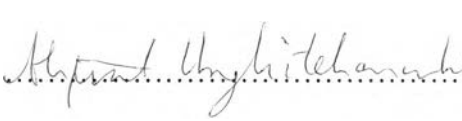
..... Thesis Advisor

(Associate Professor Wichit Sritrakool, Ph.D.)



..... Member

(Associate Professor Rathana Phavanantha, Ph.D.)



..... Member

(Ahpisit Ungkitchanukit, Ph.D.)

..... Member

(Chaisingh Poo-Rakkiat, Ph.D.)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแห่งเดียว

C825483 : MAJOR Physics

KEY WORD: LIQUID METAL / CONDUCTIVITY / HYDROGEN

CHATCHAWAL SRIPAKDEE: A MODEL OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF LIQUID METALLIC HYDROGEN.THESIS ADVISOR: ASSOCIATE PROFESSOR Dr. WICHIT SRITRAKOOL, Ph.D. 69pp. ISBN 974-332-542-5

We apply the Ziman theory (1961) to calculate the electrical conductivity of liquid metallic hydrogen. The pseudopotential between the ions and the conduction electrons is chosen to be a screened Coulomb potential. Two forms of the radial distribution function are used; one is from the result of density functional theory calculation while the other is from the molecular dynamics simulation result. Our result agrees with the experimental data by Nellis et al (1997).

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต.....

สาขาวิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....

ปีการศึกษา 2541 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแห่งเดียว

นายชัชวาล ศรีภักดี : แบบจำลองสภาพนำไฟฟ้าของโลหะเหลวไฮโดรเจน
(A MODEL OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF LIQUID METALLIC HYDROGEN)
อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร. วิชิต ศรีตระกูล, 69 หน้า.
ISBN 974-332-542-5

ได้ประยุกต์ทฤษฎีของไซแมนเพื่อคำนวณหาสภาพนำไฟฟ้าของโลหะเหลวไฮโดรเจน โดยได้เลือกศักย์เทียมระหว่างไอออนและอิเล็กตรอนตัวนำให้เป็นศักย์บดบังคูลอมบ์ และได้เลือกฟังก์ชันการแจกแจงเชิงรัศมีจากสองแหล่งที่มา คือ จากผลการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีเชิงฟังก์ชันความหนาแน่น และจากผลการจำลองพลวัตโมเลกุล ผลการคำนวณที่ได้มีความสอดคล้องอย่างดีกับข้อมูลทางการทดลองของเนลลิสและคณะ

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต.....

สาขาวิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....

ปีการศึกษา 2541 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....

ACKNOWLEDGEMENTS

The author would like to express his gratitude to Professor Dr. Virulh Sa-yakanit for his invaluable discussions, suggestions and his advisor Associate Professor Dr. Wichit Sritrakool for his invaluable advice, discussions and helps of every sort in writing this thesis.

He is also grateful to Mr. Paisan Tooprakai and Mr. Suchat Kaskamalas for their advice and training for computer programming. Special thanks go to Mr. Kobchai Taiyanasanti for his computer preparation and to Mr. Poncharoen Palotaidumkerng, Mr. Jesada Sukpitak, Mr. Santipong Boribarn, Mr. Supit Khaemanee, Mr.Prathan Sriwilai, Mr. Sutee Boonchui, who helped create a warm and funny atmosphere among the group and discussion.

The author feels greatly indebt to the thesis committee, Assoc. Prof. Dr. Pathana Phavanantha, Dr. Ahpisit Ungkitchanukit, Dr. Chaisingh Poo-Rakkiat and Dr. Rujikorn Dhanawittayapol for their efforts in reading and criticizing the manuscript.

TABLE OF CONTENTS

Page

ABSTRACT IN ENGLISH iv

ABSTRACT IN THAI v

ACKNOWLEDGEMENTS vi

CHAPTER I METALLIC HYDROGEN 1

1.1 METALLIZATION 1

1.2 HISTORY OF METALLIC HYDROGEN.....1

1.3 MEASURING A METALIZATION OF LIQUID HYDROGEN 2

1.4 THE ORGANIZATION OF THIS THESIS 5

CHAPTER II ELECTRICAL CONDUCTIVITY.....6

2.1 INTRODUCTION.....6

2.2 BOLTZMANN TRANSPORT EQUATION.....6

2.3 ELECTRICAL CONDUCTIVITY.....8

2.4 CALCULATION OF RELAXATION TIME.....14

CHAPTER III ZIMAN THEORY OF ALKALI METALLIC LIQUID.....18

3.1 INTRODUCTION.....18

3.2 STRUCTURE OF LIQUIDS 18

3.3 THE PSEUDOPOTENTIAL 22

3.4 CORRELATION IN LIQUID 22

CHAPTER IV ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF METALLIC HYDROGEN....25

4.1 INTRODUCTION.....25

4.2 RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION AND FITTING 25

4.3 TRIAL PSEUDOPOTENTIAL 30

4.4 CALCULATION THE ELECTRICAL CONDUCTIVITY 32

4.5 RESULT 37

CHAPTER V CONCLUSION AND DISCUSSION.....42
REFERENCES.....43
APPENDIX A GAUSS-LEGENDRE INTEGRATION TECHNIQUE.....45
A.1 GAUSS-LEGENDRE QUADRATURE.....45
A.2 COMPOSITE GAUSS-LEGENDRE QUADRATURE FORMULA.....47
A.3 THE SOURCE CODE FOR CALCULATION.....47
APPENDIX B ANALYTICAL FORM OF RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION 56
B.1 LEAST SQUARE APPROXIMATION.....56
B.2 ANALYTIC FORM OF RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION.....57
CURRICULUM VITAE.....59

LIST OF FIGURES

Page

Figure 1.1 The metallic phase of liquid hydrogen initially has occur at pressure 140 GPa and temperature 3000 K. 3

Figure 1.2 The electrical conductivity of caesium, rubidium and hydrogen as a function of atomic density at temperature of about 1750 K. 4

Figure 3.1 A radial distribution $g(r)$ measures the probability to find another atom from the fixed atom. 20

Figure 4.1 The radial distribution function $g(r)$ at 3000 K from the density functional theory. The solid line represent for $r_S = 0.5$, dash line for $r_S = 1.0$, dot for $r_S = 1.5$ and large dot from molecular dynamics simulation. 26

Figure 4.2 Radial distribution functions of liquid metallic hydrogen with fixed $r_s = 2.0$. The highest peak and the another lowering peak represent respectively $g(r)$ at temperatures 3000, 5000, 10000, 15000 and 20000 K. 27

Figure 4.3 The interpolated result of radial distribution function $g(r)$ fitting by using 2-point Lagrange interpolation technique, for $r_s = 0.5$ at temperature 3000 K. 29

Figure 4.4 A rough drawing of the screened Coulomb potential $U(R)$. 31

Figure 4.5 The d.c. electrical conductivity of liquid metallic hydrogen for $r_s = 0.5, 1.0$ and 1.5 at temperature 3000 K. 39

Figure 4.6 The electrical conductivity of liquid metallic hydrogen for $r_s = 2.0$ at various temperatures 3000, 5000, 10000, 15000 and 20000 K. 40

Figure 4.7 The electrical conductivity of liquid metallic hydrogen at two temperatures. Small dots for T=1750 K and big dots for T= 3000 K.....41

LIST OF TABLES

Page

Table 4.1 The electrical conductivity of liquid metallic hydrogen at various electron concentrations n at T=3000 K.....37

Table 4.2 The electrical conductivity of liquid metallic hydrogen for a fixed concentration $r_s = 2.0$ at various temperatures. 3000, 5000, 10000, 15000 and 20000 K. 38