โครงการวิจัย: การศึกษาเชิงทฤษฎีของอะตอมริดเบอร์ก อันตรกิริยากับอะตอมสถานะพื้น และการแทรกสอดในสนามภายนอก

หัวหน้าโครงการ: ดร. ทีปานิส ชาชิโย <ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร>

ผู้ร่วมวิจัย: ดร. หทัยทิพย์ ชาชิโย <Private Residence>

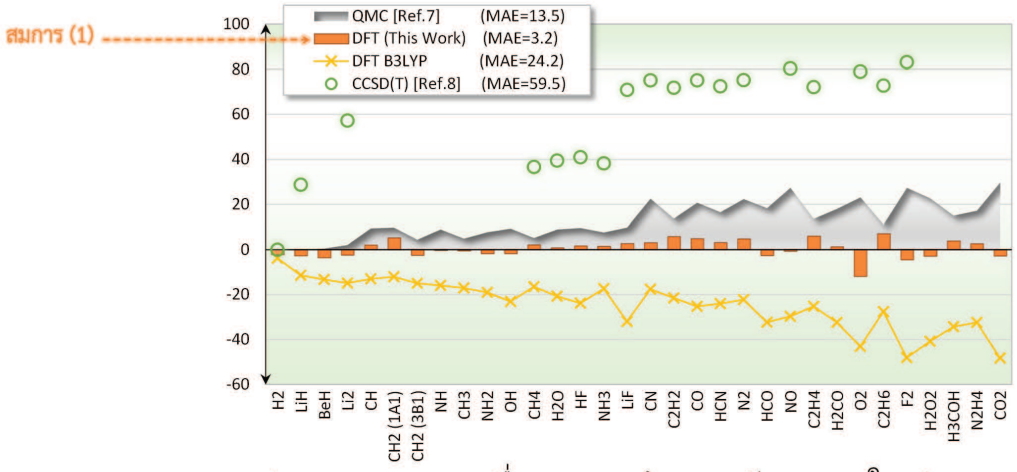
(ESA/Hubble)

สมการชาชิโย (กรณีทั่วไป)

เราสร้างสมการ ที่คำนวณพลังงานรวมของโมเลกุล ได้*แม่นยำที่สุดเท่าที่มนุษย์รู้จัก*

$$E_{total} = \sum_n \int \phi_n^* \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + \vartheta_{ext} + \frac{1}{2}\vartheta_j + \varepsilon_x \frac{3x^2 + \pi^2 \ln(x+1)}{(3x+\pi^2)\ln(x+1)} + \varepsilon_c (1+t^2)^{h/\varepsilon_c} \right] \phi_n d^3r$$

และนี่คือข้อมูลที่คำนวณได้ เทียบกับวิธีอื่นๆที่โดดเด่น ในประวัติศาสตร์ 90 ปีของฟิสิกส์ควอนตัม



กราฟแสดงความคลาดเคลื่อนของการคำนวณพลังงานรวม ในหน่วย kcal/mol

การถูกอ้างอิงที่น่าสนใจ

- สูตร $E_x = \int \rho \varepsilon_x \frac{3x^2+\pi^2\ln(x+1)}{(3x+\pi^2)\ln(x+1)} d^3r$ ถูกเรียกว่า "Chachiyo Exchange" ในบทความโดย S. Lehtola (2019) ในวารสาร Journal of Chemical Theory and Computation (Q1)
- ถูกวิเคราะห์ในวิทยานิพนธ์ของ A. V. Mironenko มหาวิทยาลัย Delaware (อาจารย์ที่ปรึกษา Dionisios G. Vlachos, H-index 87, 24957 Citations) มีถ้อยคำบางส่วนว่า
  - "we loosely follow the ingenious approach due to Chachiyo and Chachiyo"
  - "remarkably simple expression"
  - "the new functional describes atomic exchange energies more accurately than established methods (PBE, MGGA_MS2, SCAN, and B88)"
  - "The functional simplicity and accuracy are astounding; in fact, it probably represents the first-of-a-kind, fully non-empirical expression."
- สูตร $E_c = \int \rho \varepsilon_c (1+t^2)^{h/\varepsilon_c} d^3r$ เป็นพลังงานสหสัมพันธ์เพียงสูตรเดียว ที่ถูกอ้างถึงในบทความรีวิวประวัติศาสตร์ของพันธะเคมี โดย E. C. Constable และ C. E. Housecroft ชื่อ "Chemical Bonding: The Journey from Miniature Hooks to Density Functional Theory"(2020) ในวารสาร *Molecules* (Q1)

[แม้พลังงานสหสัมพันธ์ที่ถูกเสนอขึ้นมามีไม่น้อยกว่า 50 สูตรจากนักฟิสิกส์จำนวนมาก การอ้างถึงสูตรที่เพิ่งตีพิมพ์เมื่อต้นปี 2020 เพียงสูตรเดียว ในงานรีวิวเชิงประวัติศาสตร์นั้น มีนัยยะสำคัญว่า กลุ่มนักวิชาการบางส่วน กำลังมองว่านี้เป็น "สูตรสุดท้าย" ของการค้นหาที่ยาวนาน]

อ่านบทความ และ ดาวน์โหลดโปรแกรม Siam Quantum ของเรา

(1) Chachiyo, T. Chachiyo, H. Understanding electron correlation energy through density functional theory, Comput. Theor. Chem. 2020, 1172, 112669.

(2) T. Chachiyo, H. Chachiyo, Simple and accurate exchange energy for density functional theory, (2017) ArXiv Preprint 1706.01343.

เป้าหมาย

เพื่อสร้างองค์ความรู้

- ศึกษาสมบัติทางกายภาพของอะตอมริดเบอร์ก และ อันตรกิริยากับอะตอมสถานะพื้น
- ศึกษาพลศาสตร์ของอะตอมที่อยู่ภายใต้สนามภายนอก
- เพื่อศึกษาการแทรกสอดของอะตอมริดเบอร์ก ณ อุณหภูมิใกล้ศูนย์องศาสัมบูรณ์เพื่อการประยุกต์ในการวัดค่าความเร่งจากแรงโน้มถ่วงของโลก

งบประมาณรวม 3.2 ล้านบาท
ช่วงเวลาดำเนินการ มีนาคม 2560 – มีนาคม 2563

ประสิทธิผล

องค์ความรู้

- สูตรพลังงาน Exchange ของอิเล็กตรอนที่อยู่ในอะตอม
- เข้าใจธรรมชาติของพลังงาน Correlation ของอิเล็กตรอนพร้อมได้สูตรที่คำนวณได้แม่นยำสูง

ผลผลิต

- เพิ่มศักยภาพโปรแกรม Siam Quantum ให้ใช้กับทฤษฎี DFT
- 1 บทความตีพิมพ์ในวารสาร
- 1 บทความกำลังอยู่ระหว่างการรีวิว

ผลกระทบ

ทำให้การพัฒนาทางด้านเคมีภัณฑ์ และทางวัสดุศาสตร์ มีสมการที่แม่นยำ เพื่อใช้ในการออกแบบนวัตกรรมได้เร็วขึ้น

ความสอดคล้อง

เป็นจุดเริ่มต้นของนวัตกรรม เพื่อเป็นฐาน ในการต่อยอดทางเทคโนโลยี โดยเฉพาะในด้านฟิสิกส์ควอนตัม

ความยั่งยืน

โปรแกรม Siam Quantum ถูกพัฒนาขึ้นโดยคนไทยล้วนๆ อีกทั้งเรามีสมการของเราเอง เมื่อองค์ความรู้และทักษะเกิดขึ้นภายในประเทศ จึงถือได้ว่า สามารถพึ่งพาตนเอง

โปสเตอร์สรุปโครงการวิจัย 2560
การประชุมศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ประจำปี 2563
ณ โรงแรม เดอะ สุโกศล กรุงเทพมหานคร วันที่ 28 สิงหาคม พ.ศ. 2563

ThEP
http://thep-center.org/