บทความวิชาการ (Article)

สมการมหัศจรรย์: สมการชาชิโย

อุดมศิลป์ ปิ่นสุข

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

บทความนี้จะกล่าวถึงความสวยงามของรูปสมการชาชิโยซึ่งเสนอโดย ดร.ทีปานิส ชาชิโย ในปี พ.ศ. 2559 โดยสมการนี้อธิบายพลังงานสหสัมพันธ์ของก๊าซอิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยา โดยสมการชาชิโยมีคุณสมบัติความต่อเนื่องและให้ค่าพลังงานสหสัมพันธ์ที่สอดคล้องเป็นอย่างดีกับค่าเชิงตัวเลขจากวิธีมอนติคาร์โลในช่วง $0.01 \leq r_s \leq 100$ อีกทั้งยังมีความเรียบง่ายโดยมีพารามิเตอร์ประกอบเพียง 3 ตัวและรูปแบบของสมการชาชิโยยังสอดคล้องกับรูปแบบของลิมิตเชิงวิเคราะห์ของพลังงานสหสัมพันธ์ที่เสนอโดย วิกเนอร์ ในปี พ.ศ. 2477 สำหรับก๊าซอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นต่ำๆ ($r_s \gg 1$) และโดย เกลล์มานน์และบรุคเนอร์ ในปี พ.ศ. 2500 สำหรับก๊าซอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นสูงๆ ($r_s \ll 1$)

คำสำคัญ: สมการชาชิโย, ก๊าซอิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยา, พลังงานสหสัมพันธ์

ในปี พ.ศ. 2559 ดร.ทีปานิส ชาชิโย ได้ประกาศการค้นพบสำคัญอันหนึ่งของวงการฟิสิกส์ไทยและของโลก นั่นคือการเสนอสมการชาชิโย [1] ซึ่งอธิบายพลังงานสหสัมพันธ์ของก๊าซอิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยา (interacting electron gas) มีรูปตามสมการที่ (1) ดังนี้

$$\varepsilon_c(r_s) = A\ \log\left(1 + \frac{B}{r_s} + \frac{C}{r_s^2}\right) \tag{1}$$

สมการนี้มีพารามิเตอร์สำคัญเพียงสามตัวเท่านั้น ได้แก่ A, B และ C โดยในบทความนี้ผู้เขียนจะกล่าวถึงที่มาอย่างสังเขปของพลังงานสหสัมพันธ์และความสวยงามของรูปแบบของสมการชาชิโย

ก๊าซอิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยา (Interacting Electron Gas)

ก๊าซอิเล็กตรอนหมายถึงระบบที่มีอิเล็กตรอนจำนวน N ตัวมาอยู่รวมกันในปริมาตรจำกัด V โดยสมมติว่าระบบนี้เป็นระบบเอกพันธ์ (homogeneous) นั่นคือ ความหนาแน่นมีค่าสม่ำเสมอ ρ ซึ่งนิยามดังนี้

$$\rho = \frac{N}{V} = 1/\left(\frac{4}{3}\pi r_s^3\right) \tag{2}$$

โดย r_s คือพารามิเตอร์ที่บอกรัศมีของทรงกลมสมมติอันหนึ่งที่มีปริมาตรเพียงพอที่จะบรรจุอิเล็กตรอนได้หนึ่งตัวพอดี เรียกรัศมีนี้ว่า รัศมีไซส์ (Seitz radius) และเพื่อให้ระบบก๊าซอิเล็กตรอนนี้เป็นกลางทางไฟฟ้า เราจะสมมติด้วยว่า มีประจุบวกสม่ำเสมอเป็นพื้นหลังอยู่ บางครั้งเรียกแบบจำลองนี้ว่า แบบจำลองเจลเลียม (jellium) โดยแฮมิลโทเนียน (Hamiltonian) ของระบบคือ

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{3}$$

โดย $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \nabla_i^2$ เป็นแฮมิลโทเนียนของก๊าซอิเล็กตรอนอิสระ และ $\hat{V} = \sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|x_i - x_j|}$ คืออันตรกิริยาคูลอมบ์ (Coulomb interaction) ระหว่างอิเล็กตรอนที่ตำแหน่ง $\boldsymbol{x}_i$ และ $\boldsymbol{x}_j$ ในบทความนี้เราจะไม่ได้กล่าวถึงการหาผลเฉลยของสมการที่ (3) โดยตรง แต่จะกล่าวถึงผลเฉลยสำเร็จที่มีผู้ที่ได้ทำไว้แล้วในอดีต

ในบทความนี้ เราจะระบุพลังงานของก๊าซอิเล็กตรอนเป็นฟังก์ชันของ r_s และกำหนดให้ $\hbar = 2m = 1$ ซึ่งจะทำให้พลังงานอยู่ในหน่วยริดเบอร์ก (Rydberg units, Ry) โดยพลังงาน 1 Ry = 13.6 eV และภายใต้หน่วยนี้ ระยะทางจะวัดเทียบกับรัศมีของบอห์ร (Bohr radius) a_0

พลังงานสถานะพื้นและพลังงานสหสัมพันธ์ (Ground State Energy and Correlation Energy)

ผลเฉลยที่สำคัญอันหนึ่งของสมการที่ (3) คือค่าพลังงานสถานะพื้น (ground state energy, E_{GS}) ของระบบซึ่งเป็นส่วนสำคัญในการหาค่าพลังงานสหสัมพันธ์ต่อไป อย่างไรก็ดี ผลเฉลยที่แม่นตรง (exact solution) นั้นยังไม่มีใครหาได้ นักฟิสิกส์จึงต้องพึ่งพาการประมาณ วิธีการประมาณผลเฉลยที่สำคัญอันหนึ่งคือการประมาณว่าอิเล็กตรอนนั้นเป็นอนุภาคอิสระ และฟังก์ชันคลื่นของระบบสามารถเขียนให้อยู่ในรูปของผลคูณของฟังก์ชันคลื่นอนุภาคเดี่ยว (single-particle wave function, $\varphi_i(\boldsymbol{x}_i)$) ดังนี้

$$\psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, .., \boldsymbol{x}_N) = \varphi_1(\boldsymbol{x}_1)\varphi_2(\boldsymbol{x}_2) \cdot\cdot\, \varphi_N(\boldsymbol{x}_N) \tag{4}$$

แต่นักฟิสิกส์ทราบว่าอิเล็กตรอนมีสปิน $\frac{1}{2}$ ฟังก์ชันคลื่นจึงต้องเขียนให้อยู่ในรูปปฏิสมมาตร (anti-symmetric form) หรือที่เรียกว่า ดีเทอร์มิแนนต์ของสเลเตอร์ (Slater determinant) ดังนี้

$$\psi(\boldsymbol{x}_1, .., \boldsymbol{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_1(\boldsymbol{x}_1) & \cdots & \varphi_N(\boldsymbol{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\boldsymbol{x}_N) & \cdots & \varphi_N(\boldsymbol{x}_N) \end{vmatrix} \tag{5}$$

เมื่อแทนสมการที่ (5) ลงในสมการชโรดิงเจอร์ จะได้ว่า

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, .., \boldsymbol{x}_N) = E\psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, .., \boldsymbol{x}_N) \tag{6}$$

และจะทำให้เราประมาณสถานะพื้นของระบบได้จากทฤษฎีการรบกวน (perturbation theory) เรียกพลังงานสถานะพื้นที่ประมาณได้จากวิธีนี้ว่า พลังงานฮาร์ทรี-ฟอค (Hartree-Fock energy, E_{HF})

หากเรามีวิธีที่จะทราบพลังงานสถานะพื้นที่แท้จริง (E_{GS}) ของระบบก๊าซอิเล็กตรอนแล้ว พลังงานสหสัมพันธ์ (correlation energy, E_c) สามารถหาได้จากสมการที่ (7) ดังนี้

$$E_c = E_{GS} - E_{HF} \tag{7}$$

โดยชื่อสหสัมพันธ์ (correlation) นี้ผู้เขียนคาดว่ามาจากการเลียนแบบชื่อเรียกของความสัมพันธ์เชิงสถิติของข้อมูล ถ้าชุดข้อมูลไม่มีสหสัมพันธ์กันจะได้ว่าค่าเฉลี่ยของผลคูณของชุดตัวแปร $\{X\}$ และ $\{Y\}$ จะเท่ากับผลคูณของค่าเฉลี่ย ดังนี้

$$\langle XY \rangle = \langle X \rangle \langle Y \rangle \tag{8}$$

แต่ถ้าข้อมูลทั้งสองมีสหสัมพันธ์กันแล้ว จะได้ว่า

$$correlation = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle \neq 0 \tag{9}$$

ซึ่งถ้าพิจารณาในเชิงอุปมาอุปมัยแล้วจะเห็นว่ารูปแบบของสมการที่ (8) มีความคล้ายคลึงกับรูปแบบของสมการที่ (4) หรือ (5) มาก ดังนั้นเราอาจพิจารณาได้ว่านิยามของพลังงานสหสัมพันธ์ตามสมการที่ (7) ก็คือการที่เราตัดผลที่มองว่าอิเล็กตรอนอธิบายได้ด้วยสมการที่ (4) หรือ (5) ออกจากค่าพลังงานสถานะพื้นของระบบ หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งก็คือการตัดผลที่ได้จากการใช้ฟังก์ชันคลื่นอนุภาคเดี่ยวออก ซึ่งก็จะเหลือเฉพาะองค์ประกอบที่มาจากฟังก์ชันคลื่นที่มีสหสัมพันธ์กันเท่านั้น พลังงานที่ได้จึงเรียกว่าพลังงานสหสัมพันธ์ พลังงานนี้มีในระบบหลายอนุภาค (many-body system) ที่มีอันตรกิริยาต่อกัน อย่างเช่น ในก๊าซอิเล็กตรอน ที่เรากำลังพิจารณาอยู่นี้เอง

ในปี พ.ศ. 2477 วิกเนอร์ [2] ได้ทำการประมาณค่าพลังงานสถานะพื้นของระบบก๊าซอิเล็กตรอนที่มีความหนาแน่นต่ำ (หรือเจือจางมากๆ) หรืออีกนัยหนึ่งคือลิมิตที่ $r_s \gg 1$ จากนั้นจึงทำการประมาณค่าพลังงานสหสัมพันธ์ไว้ดังนี้

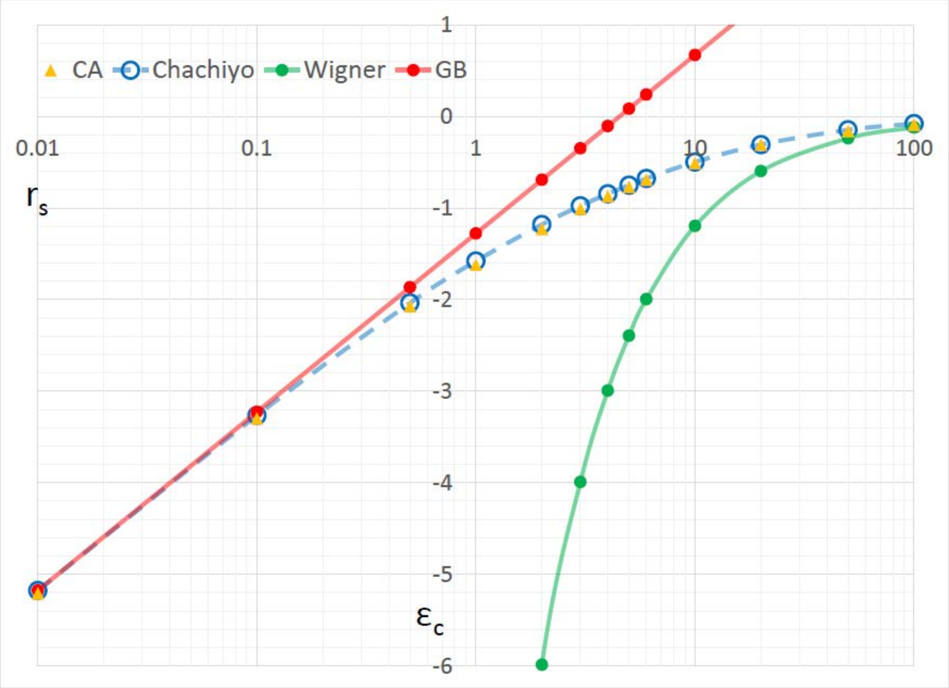
$$\varepsilon_c(r_s) = -\frac{0.8757}{r_s} \tag{10}$$

สมการที่ (10) นี้เป็นค่าพลังงานสหสัมพันธ์เฉลี่ยต่ออนุภาค ผู้เขียนจึงขอใช้สัญลักษณ์ ε_c ให้แตกต่างจาก E_c ในสมการที่ (7) ซึ่งเป็นพลังงานสหสัมพันธ์ของทั้งระบบ นักฟิสิกส์คนแรกที่เรียกพลังงานนี้ว่าพลังงานสหสัมพันธ์ก็คือวิกเนอร์นั่นเอง

ต่อมาในปี พ.ศ. 2500 เกลล์มานน์และบรุคเนอร์ [3] ได้ใช้วิธีทฤษฎีสนามควอนตัม (quantum field theory) เพื่อหาค่า ε_c ที่ลิมิต $r_s \ll 1$ ทั้งนี้เพื่อใช้อธิบายอนุภาคเฟอร์มิออนที่มีความหนาแน่นสูงๆ อย่างเช่น ภายในนิวเคลียสของอะตอม โดยมีรูปสมการเป็นดังนี้

$$\varepsilon_c(r_s) = -0.094 + 0.0622\log(r_s) + O(r_s) \tag{11}$$

สมการที่ (10) และ (11) อยู่ในรูปแบบเชิงวิเคราะห์ (analytic form) ซึ่งทำให้เราเห็นความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานสหสัมพันธ์กับรัศมีไซส์ หรืออีกนัยหนึ่งคือความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานสหสัมพันธ์กับความหนาแน่นของระบบ นักฟิสิกส์พบว่าสสารควบแน่น (condensed matter) ทั่วไปมีค่าอยู่ระหว่าง $0.01 \le r_s \le 100$



รูปที่ 1 *แสดงพลังงานสหสัมพันธ์จากสมการของวิกเนอร์ (เส้นทึบและวงกลมสีเขียว) สมการของเกลล์มานน์-บรุคเนอร์ (เส้นทึบและวงกลมสีแดง) ค่าเชิงตัวเลขจากวิธีมอนติคาร์โล (สามเหลี่ยมสีเหลือง) และสมการชาชิโย (เส้นประและวงกลมสีน้ำเงิน)*

สิ่งที่ขาดหายไปจากสมการที่ (10) และ (11) นั้นก็คือความต่อเนื่อง จากรูปที่ 1 เราพบว่าค่าพลังงานสหสัมพันธ์ที่ได้จากสมการที่ (10) (เส้นทึบและวงกลมสีเขียว) นั้นไม่บรรจบกับค่าจากสมการที่ (11) (เส้นทึบและวงกลมสีแดง) ที่บริเวณ $1 \le r_s \le 100$ ซึ่งสาเหตุส่วนหนึ่งเป็นเพราะสมการที่ (10) และ (11) นั้นเป็นการประมาณที่หยาบเกินไป นักฟิสิกส์รุ่นหลังได้ทำการคำนวณที่ละเอียดขึ้น [4,5] แต่ทั้งสองลิมิตก็ยังไม่บรรจบกันอยู่ดีโดยเฉพาะที่ $r_s{\sim}4$ เหตุการณ์นี้ได้สร้างปัญหาให้กับนักทฤษฎีในสมัยนั้นเป็นอย่างมากและเป็นเวลายาวนานหลายสิบปี เพราะความหนาแน่นช่วง $r_s{\sim}4$ นี้เป็นความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในธาตุโลหะและสารประกอบที่เป็นโลหะจำนวนมากในตารางธาตุ จนกระทั่งในปี พ.ศ. 2523 เซปเปอลีย์และอัลเดอร์ [6] ได้ใช้วิธีมอนติคาร์โล (Monte-Carlo method) เพื่อหาค่าพลังงานสถานะพื้นของก๊าซอิเล็กตรอนที่ $1 \le r_s \le 100$ ซึ่งผลจากงานวิจัยของพวกเขาทำให้เราสามารถคำนวณหาค่าพลังงานสหสัมพันธ์เป็นเชิงตัวเลข (numerical values) ที่บริเวณ $1 \le r_s \le 100$ ได้สำเร็จ แม้จะเป็นวิธีเชิงตัวเลข แต่ค่าที่ได้มีความแม่นยำสูง จึงเป็นที่ยอมรับในวงกว้างและใช้เป็นตัวเปรียบเทียบ (benchmark) กับค่าพลังงานสหสัมพันธ์ที่หาได้จากวิธีอื่นๆ หลังจากนั้น เปอร์ดิวและหวัง [7] ได้ขยายค่าพลังงานสหสัมพันธ์เชิงตัวเลขให้ครอบคลุม $0.01 \le r_s \le 100$ ด้วยตามที่ปรากฏในรูปที่ 1 (สามเหลี่ยมสีเหลือง) อย่างไรก็ดี ผลจากวิธีมอนติคาร์โลก็ยังเป็นค่าเชิงตัวเลขและไม่ได้ออกมาเป็นสมการเชิงวิเคราะห์หรือฟังก์ชันที่ต่อเนื่องแต่อย่างใด

ความสวยงามของรูปสมการชาชิโย

หากนักฟิสิกส์จะนำค่าพลังงานสหสัมพันธ์ไปใช้ประโยชน์ แม้ว่าไม่มีสมการเชิงวิเคราะห์ เราก็อาจจะต้องการค่าพลังงานที่ต่อเนื่อง ทั้งนี้เนื่องจากค่าอนุพันธ์ของพลังงานนำไปสู่ปริมาณทางฟิสิกส์ที่สำคัญอื่นๆ เช่น แรง ความดัน ความจุความร้อน ฯลฯ หากจะนำค่าพลังงานสหสัมพันธ์นี้ไปใช้ประโยชน์ในการหาโครงสร้างหรือสภาวะของสสารควบแน่นที่เสถียรที่สุด การคำนวณค่าอนุพันธ์หรือคำนวณแรงจะมีความสำคัญขึ้นมาทันที การมีสมการเชิงวิเคราะห์จึงกลายเป็นสิ่งจำเป็นอย่างหลีกเลี่ยงไม่ได้

ในอดีตมีผู้ที่เสนอรูปสมการที่ใช้อธิบายพลังงานสหสัมพันธ์และสอดคล้องกับผลการคำนวณด้วยวิธีมอนติคาร์โลไว้มากมาย แต่สมการที่คำนึงถึงลิมิตเชิงวิเคราะห์ (analytic limits) ด้วยนั้น ได้แก่ สมการของเปอร์ดิวและหวัง [7] แต่สมการนั้นก็มีพารามิเตอร์ประกอบจำนวนมาก และเมื่อไม่นานมานี้ ดร.ทีปานิส ชาชิโย [1] ได้เสนอรูปแบบตามสมการที่ (1) ซึ่งเป็นสมการที่มีความเรียบง่าย มีพารามิเตอร์ประกอบรูปสมการเพียง 3 ตัวตามที่ได้กล่าวไว้ตั้งแต่ตอนต้น นอกจากนี้ สมการที่ (1) ยังมีลิมิตต่างๆ ที่สอดคล้องกับสมการที่ (10) และ (11) ด้วยดังนี้

1) ที่ลิมิต $r_s \ll 1$ พจน์ที่ใหญ่ที่สุดในฟังก์ชันลอการิทึมคือ $\frac{C}{r_s^2}$ ซึ่งจะทำให้เราสามารถประมาณสมการที่ (1) ได้เป็นดังนี้

$$\varepsilon_c(r_s) \approx A\ \log(C) - 2A\ \log(r_s) + O(r_s) \tag{12}$$

สมการที่ (12) นี้มีรูปแบบเดียวกับสมการที่ (11) ของเกลล์มานน์และบรุคเนอร์พอดี โดยเฉพาะอย่างยิ่งถ้าจัดให้

$$A = -\frac{0.0622}{2} = -0.0311 \tag{13}$$

และจัดให้

$$C = \exp\left(-\frac{0.094}{A}\right) = 20.5 \tag{14}$$

สมการที่ (13) นั้นยังสอดคล้องกับทฤษฎีสนามควอนตัมที่เสนอว่า $A = (\log 2 - 1)/\pi^2$ ส่วนสมการที่ (14) นั้นให้ผลที่ต่างจากค่า $C = 20.4562557$ ที่ ดร.ทีปานิส ชาชิโย [1] เสนอไว้เล็กน้อย ส่วนพจน์สุดท้ายของสมการที่ (12) เป็นพจน์ที่มีลำดับการประมาณที่สูงขึ้นโดยเป็นฟังก์ชันที่ขึ้นตรงกับ r_s

2) ที่ลิมิต $r_s \gg 1$ พจน์ $\frac{C}{r_s^2}$ จะมีค่าน้อยจนสามารถตัดทิ้งได้ ซึ่งจะทำให้เราสามารถประมาณสมการที่ (1) ได้เป็นดังนี้

$$\varepsilon_c(r_s) \approx A\ \log\left(1 + \frac{B}{r_s}\right) \approx \frac{AB}{r_s} \tag{15}$$

สมการที่ (15) นี้มีรูปแบบเดียวกับสมการที่ (10) ของวิกเนอร์พอดี โดยเฉพาะอย่างยิ่งถ้าจัดให้

$$B = -\frac{0.8757}{A} = 28.16 \tag{16}$$

อย่างไรก็ตาม ปรากฏว่าค่า A, B และ C ที่หาได้จากสมการที่ (13) (14) และ (16) ซึ่งสอดคล้องเป็นอย่างดีมากกับลิมิตในสมการที่ (10) และ (11) นั้นไม่สามารถเข้ากับค่าพลังงานสหสัมพันธ์จากวิธีมอนติคาร์โลได้ดีเท่าที่ควร ในปี พ.ศ. 2559 ดร.ทีปานิส ชาชิโย [1] ได้เสนอสมการที่ (1) และได้เสนอให้ใช้ค่า $B = C$ ซึ่งทำให้ค่าพลังงานสหสัมพันธ์จากสมการที่ (1) สอดคล้องกับค่าที่ได้จากวิธีมอนติคาร์โลมากขึ้น ดังแสดงในกราฟที่ 1 (เส้นประและวงกลมสีน้ำเงิน) ผู้เขียนได้สรุปผลทั้งหมดไว้ในตารางที่ 1 โดยจะเห็นว่าค่า A, B และ C ที่หาได้จากสมการที่ (13) (14) และ (16) ให้ค่า $\chi^2 \approx 0.0036$ ในขณะที่พารามิเตอร์ของ ดร.ทีปานิส ชาชิโย ให้ค่า $\chi^2 \approx 0.0009$ โดยค่า χ^2 นี้บ่งบอกความคลาดเคลื่อนรวมของค่าที่ได้จากสมการเทียบกับค่าที่ได้จากวิธีมอนติคาร์โล และในการวิเคราะห์ชุดข้อมูลต่างๆ นั้นเรามักมองหาวิธีที่ทำให้ χ^2 มีค่าต่ำที่สุด

ตารางที่ 1 สรุปพารามิเตอร์ต่างๆ ของสมการที่ (1) โดยกำหนดให้ $A = (\log 2 - 1)/\pi^2$

	พารามิเตอร์ที่เสนอโดย ดร.ทีปานิส ชาชิโย	พารามิเตอร์จากสมการที่ (13) (14) และ (16)
B	20.4562557	28.16
C	20.4562557	20.5
χ^2	0.0009	0.0036

สรุป

บทความนี้ได้กล่าวถึงพลังงานสหสัมพันธ์โดยสังเขปโดยเริ่มต้นจากสมการที่อธิบายก๊าซอิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยา จากนั้นผู้เขียนได้ชี้ให้เห็นถึงการมีอยู่ของพลังงานสหสัมพันธ์ซึ่งเกิดขึ้นในระบบหลายวัตถุซึ่งมีอันตรกิริยากัน และได้กล่าวถึงสมการเชิงวิเคราะห์ของพลังงานสหสัมพันธ์ของก๊าซอิเล็กตรอนที่ลิมิตต่างๆ ได้แก่ ที่ความหนาแน่นต่ำมาก (สมการที่ (10) ของวิกเนอร์) และความหนาแน่นสูงมากๆ (สมการที่ (11) ของเกลล์มานน์-บรุคเนอร์) ปรากฏว่าข้อจำกัดของสมการทั้งสองคือความไม่ต่อเนื่อง ณ ตำแหน่งที่ใช้งานพอดี จากนั้นได้กล่าวถึงวิธีมอนติคาร์โลซึ่งให้ค่าเชิงตัวเลขที่มีความแม่นยำเป็นที่ยอมรับในวงกว้าง และนำมาสู่ความต้องการที่จะมีสมการเชิงวิเคราะห์ที่มีสมบัติความต่อเนื่องตลอดช่วงความหนาแน่นที่เราต้องการ ($0.01 \le r_s \le 100$) จึงเป็นที่มาของสมการชาชิโย (สมการที่ (1)) ที่มีคุณสมบัติความต่อเนื่องและให้ค่าพลังงานสหสัมพันธ์ที่สอดคล้องเป็นอย่างดีกับค่าเชิงตัวเลขจากวิธีมอนติคาร์โล อีกทั้งยังมีพารามิเตอร์เพียง 3 ตัวและรูปแบบของสมการยังสอดคล้องกับรูปแบบของลิมิตเชิงวิเคราะห์อีกด้วย นับเป็นสมการที่มีรูปแบบสวยงามมหัศจรรย์สมการหนึ่ง นอกจากนี้ พลังงานสหสัมพันธ์นี้มีประโยชน์อย่างมากในสาขาวัสดุควบแน่น และนำไปสู่การสร้างทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (density functional theory) ซึ่งใช้งานกันมากในปัจจุบัน โดยเฉพาะในด้านการคำนวณสมบัติทางฟิสิกส์ต่างๆ ในวัสดุทุกชนิด รวมไปถึงการทำนายสมบัติใหม่ๆ ของวัสดุชนิดใหม่ๆ อีกด้วย จนทำให้ วอลเตอร์ โคน (Walter Kohn) ได้รับรางวัลโนเบลสาขาเคมีในปี พ.ศ. 2541 จากทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นนี้เอง

เอกสารอ้างอิง

[1] T. Chachiyo, “Simple and accurate uniform electron gas correlation energy for the full range of densities”, Journal of Chemical Physics, 145, 021101 (2016).

[2] E. Wigner, “On the interaction of electrons in metals”, Physical Review, 46, 1002 (1934).

[3] M. Gell-Mann and K. A. Brueckner, “Correlation energy of an electron gas at high density”, Physical Review, 106, 364 (1957).

[4] W. J. Carr Jr., “Energy, specific heat, and magnetic properties of the low-density electron gas”, Physical Review, 122, 1437 (1961).

[5] W. J. Carr Jr. and A. A. Maradudin, “Ground-state energy of a high-density electron gas”, Physical Review, 133, A371 (1964).

[6] D. M. Ceperley and B. J. Alder, “Ground state of the electron gas by a stochastic method”, Physical Review Letters, 45, 566 (1980).

[7] J. P. Perdew and Y. Wang, “Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy”, Physical Review B, 45, 13244 (1992).

Thai Journal of Physics Vol. 36 No. 4 (2019) 107-110

The immersed boundary method for simulating structure-fluid interaction

Petch Khunpetch

School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, China

Abstract

The immersed boundary (IB) method is the method for studying flexible structure-fluid interaction. In this article, we present the mathematical structure of the method which aims to simulate mostly the problems in biofluid dynamics. The philosophy of the IB method is to make the communication between the Eulerian variables that are used in fluid dynamics and the Lagrangian variables that are used to describe the elasticity of the material through the Dirac delta function. Since the method was introduced in 1972, it has been used widely in various structure-fluid interactions. Some applications are mentioned in this article.

Keywords: biofluid dynamics, immersed boundary method, Lagrangian, Eulerian

Introduction

The immersed boundary (IB) method was first proposed by Charles S. Peskin [1] and it has been used to study various flexible material-fluid interactions, such as deformation of red blood cells under shear flow [2], DNA coiling [3], and cellular growth [4]. The method is both a mathematical formulation and numerical simulation. In this article, a brief review of the method and some applications will be given. The mathematical formulation of the IB method and descriptions of the numerical algorithm will be presented. Some applications to structure-fluid interactions will be mentioned as well.

Mathematical Formulation

The spirit of the IB method is the connection between the Lagrangian and Eulerian variables through the Dirac delta function. Roughly speaking, the structure is described by Lagrangian variables (curvilinear coordinates). Since the structure is deformed throughout the process, the key step is to introduce the Eulerian variables (Cartesian coordinates) describing the fluid velocity along the way. The Dirac delta function is then introduced in order to make the communication between the structure and the fluid.

Let us consider an incompressible elastic material embedded in a three-dimensional space. The curvilinear coordinates attached on the material is specified by $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$. At time t, the material's Cartesian coordinates $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$ are related to $\mathbf{q}$ through;

$$X_1 = X_1(q_1, q_2, q_3, t),$$
$$X_2 = X_2(q_1, q_2, q_3, t), \qquad (1)$$
$$X_3 = X_3(q_1, q_2, q_3, t).$$

Let $M(q_1,q_2,q_3)$ be the mass density of the material. Then, the integration $\int M dq_1 dq_2 dq_3$ gives the mass occupied in the volume $dq_1 dq_2 dq_3$. Please note that M is not a function of time because mass is conserved. We further assume that the elastic energy stored in the material is a functional of $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$ at time t such that $E[\mathbf{X}(q_1,q_2,q_3,t)]$. The elastic force density $\mathbf{F}(q_1,q_2,q_3)$ can be calculated from;

$$\mathbf{F} = -\frac{\delta E}{\delta \mathbf{X}}. \tag{2}$$

Note that Eq. (2) is completely in Lagrangian form. The equations of fluid are given by the Navier-Stokes equations which can be described in Eulerian form;

$$\rho\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}(\mathbf{x},t)\cdot\nabla\right)\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = -\nabla P(\mathbf{x},t) + \mu\nabla^2\mathbf{u}(\mathbf{x},t) + \mathbf{f}(\mathbf{x},t), \tag{3}$$

and

$$\nabla\cdot\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = 0, \tag{4}$$

where ρ is the density of the fluid, $\mathbf{u}(\mathbf{x},t)$ is the fluid velocity, $P(\mathbf{x},t)$ is the pressure, μ is the dynamic viscosity of the fluid, and $\mathbf{f}(\mathbf{x},t)$ is the external force per unit volume acting on the fluid element. Eq. (3) describes the conservation of momentum. While, Eq. (4) is the conservation of mass which is the condition of incompressible fluid. The connection between the Lagrangian and Eulerian variables is done through the Dirac delta function;

$$\rho(\mathbf{x},t) = \int M(q_1,q_2,q_3)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{X})dq_1dq_2dq_3,$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x},t) = \int \mathbf{F}(q_1,q_2,q_3,t)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{X})dq_1dq_2dq_3.$$

These equations show the density $\rho(\mathbf{x},t)$ and the elastic force density $\mathbf{f}(\mathbf{x},t)$ in the Eulerian variables. The velocity of the material point is given by;

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = \int \mathbf{u}(\mathbf{x},t)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{X})d\mathbf{x}. \tag{5}$$

The point on the boundary will move with the local fluid velocity associated to that point. This enforces the no-slip boundary condition.

Numerical IB Method

In this section, we shall first discuss the spatial discretization by employing two independent grids, i.e., the fluid and structure grids. Next, the approximate form of the Dirac delta function is discussed. We then describe the temporal discretization. Finally, we will give the numerical algorithm used for numerical IB method.

Spatial discretization

The fluid grid for the Eulerian variables (simply called the Eulerian grid) is denoted by g_e. It is a 3-vector in Cartesian coordinates with integer components of the form $\mathbf{x} = h\mathbf{e}$, where $\mathbf{e} = (e_1, e_2, e_3)$ and h is the size of the spatial step. Similarly, the structure grid (or the Lagrangian grid) denoted by G_l is the set of $(k_{q_1}\Delta q_1, k_{q_2}\Delta q_2, k_{q_3}\Delta q_3)$, where k_{q_1}, k_{q_2}, and k_{q_3} are integers. The discretization of the elastic energy can be written as;

$$E_h = \sum_{k'_{q_1},k'_{q_2},k'_{q_3}} \varepsilon_{k'_{q_1},k'_{q_2},k'_{q_3}} \left(\mathbf{X}_{k_{q_1},k_{q_2},k_{q_3}}\right) \Delta q_1 \Delta q_2 \Delta q_3, \tag{6}$$

where $\varepsilon_{k'_{q_1},k'_{q_2},k'_{q_3}}$ is the local energy density. Then, the discrete elastic force density associated with the point $(k_{q_1}\Delta q_1, k_{q_2}\Delta q_2, k_{q_3}\Delta q_3)$ is of the form;

$$\mathbf{F}_{k_{q_1},k_{q_2},k_{q_3}} = -\sum_{k'_{q_1},k'_{q_2},k'_{q_3}} \frac{\partial \varepsilon_{k'_{q_1},k'_{q_2},k'_{q_3}}}{\partial \mathbf{X}_{k_{q_1},k_{q_2},k_{q_3}}}. \tag{7}$$

Now, we can write the discrete form of the equations of motion described in Sec. II as;

$$\rho(\mathbf{x},t) = \sum_{(q_1,q_2,q_3)\in G_l} M(q_1,q_2,q_3)\delta_h(\mathbf{x}-\mathbf{X})\Delta q_1 \Delta q_2 \Delta q_3,$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x},t) = \sum_{(q_1,q_2,q_3)\in G_l} \mathbf{F}(q_1,q_2,q_3,t)\delta_h(\mathbf{x}-\mathbf{X})\Delta q_1 \Delta q_2 \Delta q_3,$$

and

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \sum_{\mathbf{x}\in g_e} \mathbf{u}(\mathbf{x},t)\delta_h(\mathbf{x}-\mathbf{X})h^3. \tag{8}$$

The approximate Dirac delta function

The three-dimensional Dirac delta function in a discrete form with the spatial width h can be written as;

$$\delta_h(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^3}\varphi\left(\frac{x_1}{h}\right)\varphi\left(\frac{x_2}{h}\right)\varphi\left(\frac{x_3}{h}\right), \tag{9}$$

where $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ is a three-dimensional vector in Cartesian coordinates. Peskin and McQueen [5] give the choice of the delta function by the simple formula;

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{4}\left(1+\cos\left(\frac{\pi r}{2}\right)\right), & |r| \le 2, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{10}$$

where $\varphi(r) = \varphi(x_i/h), i = (1,2,3)$. Other choices for the successfully approximate delta function are in [8].

Temporal discretization

In order to make the temporal discretization, we use the midpoint method (also known as the second-order Runge-Kutta method). Let us consider the differential equation of the form;

$$\frac{dy}{dt} = \mathrm{f(y)}, \tag{11}$$

with the initial condition $y(t_0) = y_0$. We define;

$$y_{n+1} - y_n = (\Delta t) f\left(y_{n+\frac{1}{2}}\right),$$

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t,$$

for $n = 0,1,2,3, \dots$. From this scheme, we can move the material point from the position $\mathbf{X}_n$ to $\mathbf{X}_{n+1}$;

$$\mathbf{X}_{n+1} - \mathbf{X}_n = (\Delta t)\sum_{\mathbf{x}\in g_e} \mathbf{u}_{n+\frac{1}{2}}(\mathbf{x})\,\delta_h\left(\mathbf{x}-\mathbf{X}_{n+\frac{1}{2}}\right)h^3. \tag{12}$$

Numerical algorithm

The numerical algorithm is described as follows. For each time step;

1. Calculate the elastic force density $\mathbf{F}(q_1, q_2, q_3, t)$ on Lagrangian grid
2. Spread the force density from the Lagrangian grid to the Eulerian grid: $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \sum_{(q_1,q_2,q_3)\in G_l} \mathbf{F}(q_1, q_2, q_3, t)\delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X})\Delta q_1 \Delta q_2 \Delta q_3$,
3. Solve the Navier-Stokes equations on the Cartesian coordinates
4. Update the material point position: $\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \sum_{\mathbf{x}\in g_e} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X})h^3$.

Applications

Many authors have used the IB method for studying various structure-fluid interactions. Since it was introduced to study the fluid dynamics of heart valves by Peskin [1], the diverse phenomena and systems such as modeling of the whole heart [5], the deformation of red blood cells under shear flows [2], and fluid-interaction of flexible bacterial flagella [6] have been studied. Recently, the method has been used to simulate the dynamics of growth vesicles with permeability [7].

Conclusions

The immersed boundary method is the method for simulating incompressible elastic bodies immersed in viscous incompressible fluid. The main idea of the method is to spread the elastic energy stored in the material from the curvilinear coordinates to the Cartesian coordinates with the help from the Dirac delta function. Since the IB method was introduced in 1972, a wide range of applications has been demonstrated. This assures the robustness of the method.

References

[1] C. S. Peskin, “Flow patterns around heart valves: A numerical method”, Journal of Computational Physics, 10, 252 (1972).

[2] C. D. Eggleton and A. S. Popel, “Large deformation of red blood cell ghosts in a simple shear flow”, Physics of Fluids, 10, 1834 (1998).

[3] S. Lim, A. Fernet, X. S. Wang and C. S. Peskin, “Dynamics of a closed rod with twist and bend in fluid”, SIAM Journal of Scientific Computing, 31, 273 (2008).

[4] Y. Li, A. Yun and J. Kim, “An immersed boundary method for simulating a single axisymmetric cell growth and division”, Journal of Mathematical Biology 65, 653 (2012).

[5] C. S. Peskin and D. M. McQueen, “Fluid dynamics of the heart and its valves”, In *Case Studies in Mathematical Modeling: Ecology, Physiology, and Cell Biology* (H. G. Othmer, F. R. Adler, M. A. Lewis and J. C. Dallon, eds.), Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, pp. 309-337 (1996).

[6] S. Lim and C. S. Peskin, “Fluid-mechanical interaction of flexible bacterial flagella by the immersed boundary method”, Physical Review E, 85, 036307 (2012).

[7] T. Ruiz-Herrero, T. G. Fai, and L. Mahadevan, “Dynamics of growth and form in prebiotic vesicles”, Physical Review Letters, 123, 038102 (2019).

[8] C. S. Peskin, “The immersed boundary method”, Acta Numerica, 11, 479 (2002).

บทความวิชาการ (Article)

การกักขังอะตอมเดี่ยวครั้งแรกในประเทศไทย

กฤษณะ สระแก้ว[1], จินดารัศมี พรหมเผ่า[1], ชาญกิจ คันฉ่อง[2] และ วรานนท์ อนุกูล[1]

[1]ห้องปฏิบัติการทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

[2]ภาควิชาฟิสิกส์และวัสดุศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

บทคัดย่อ

ในปี ค.ศ. 2019 กลุ่มนักฟิสิกส์ไทยจากห้องวิจัยทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ได้ถ่ายภาพอะตอมเดี่ยวเป็นครั้งแรกของประเทศไทย ภายหลัง 8 ปีของการพัฒนาอุปกรณ์วิทยาศาสตร์ทั้งหมดที่จำเป็น กลุ่มก๊าซอะตอมรูบิเดียม-85 ในสุญญากาศสูงได้รับการทำความเย็นด้วยเลเซอร์ไปที่อุณหภูมิ 50 ไมโครเคลวิน ก่อนถ่ายเทไปสู่แถวหนึ่งมิติของคีบจับเชิงแสงในขอบเขตการบรรจุแบบการแจกแจงปัวซองชั้นรอง การกระจายเชิงสถิติของจำนวนโฟตอนตรวจนับที่สร้างขึ้นจากภาพถ่าย 1,000 ภาพโดยอาศัยกล้อง EMCCD แสดงผลลัพธ์สุ่มเพียงสองแบบ คือ 0 หรือ 1 อะตอมในแต่ละกับดักแสง บทความนี้ได้อธิบายอย่างย่อถึงระเบียบวิธีหลักบางประการ และประโยชน์ของอะตอมเดี่ยวเชิงบิทควอนตัมในเทคโนโลยีการคำนวณ การตรวจจับเซนเซอร์และระบบเครือข่าย

คำสำคัญ: อะตอมเดี่ยว, รูบิเดียม-85, คีบจับเชิงแสง, การคำนวณควอนตัม, การตรวจจับเซนเซอร์ควอนตัม, เครือข่ายควอนตัม

Abstract

In year 2019, a group of Thai physicists at Quantum Atom Optics Laboratory, Chiang Mai University, has taken pictures of single atoms for the first time in Thailand. After 8 years of self-developing all necessary scientific apparatus, gaseous atoms of rubidium-85 in ultra-high vacuum had been laser-cooled to 50 μK before transferred into a 1D array of optical tweezers in the sub-Poissonian loading regime. A statistical distribution of photon counts created from a thousand images taken with an EMCCD camera demonstrated only two random outcomes, i.e. 0 or 1 atom in each trap. This article briefly described some key methodology and the usefulness of single atoms as quantum bits in computing, sensing and networking technologies.

Keywords: single atoms, rubidium-85, optical tweezers, quantum computing, quantum sensing, quantum network

อะตอม คือหน่วยย่อยขนาดเล็กของสสาร มีขนาดประมาณ 0.1 นาโนเมตร ซึ่งเล็กกว่าความหนาของเส้นผมมนุษย์ประมาณล้านเท่า พฤติกรรมของอะตอมไม่ใช่ปรากฏการณ์ทางกายภาพที่สังเกตพบเห็นได้โดยตรงในชีวิตประจำวันของคนเรา แต่กลับมีความแปลกประหลาดอันน่าเหลือเชื่อที่อธิบายได้ด้วยกลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งมีแนวคิดสำคัญ เช่น การซ้อนทับโคฮีเรนต์ (coherent superposition) และความพัวพันควอนตัม (quantum entanglement) ซึ่งพออธิบายโดยสังเขปดังนี้

ในกลศาสตร์ควอนตัม อนุภาคควอนตัม เช่น อะตอม สามารถอยู่ในสถานะฐานหลัก (basis state) ได้มากกว่าหนึ่งสถานะในเวลาเดียวกัน สถานะซ้อนทับ (superposition state) ของอะตอมนี้สามารถเขียนตัวแทนเชิงคณิตศาสตร์ในรูปของผลรวมเชิงเส้น (linear combination) ของสถานะฐานหลักชุดหนึ่ง ซึ่งก็คือ ฟังก์ชันคลื่น (wave function) หรือ ฟังก์ชันสถานะ (state function) นั่นเอง เมื่อทำการวัดเชิงควอนตัม (quantum measurement) สภาพซ้อนทับของสถานะจะสลายไป (collapse) โดยอะตอมจะอยู่ได้ในสถานะฐานหลักใดสถานะหนึ่งเท่านั้น และจะมีสภาพเป็นอะตอมในกลศาสตร์แบบฉบับ (classical atom) ในทันที ทฤษฎีควอนตัมจะบอกได้เพียงความน่าจะเป็นที่จะพบอะตอมในแต่ละสถานะเมื่อทำการวัดแต่ละครั้งไว้ในค่าฟังก์ชันคลื่น เมื่อทำการวัดแบบเดียวกันกับระบบที่เหมือนกันทุกประการจำนวนมาก ก็จะได้ผลลัพธ์เป็นกราฟสถิติแสดงค่าความถี่ (histogram) ของการปรากฏสถานะที่วัดได้ตามความน่าจะเป็นที่กำกับสถานะนั้น ๆ การกระจายตัวของผลการวัดรอบ ๆ ค่าสูงสุดเฉพาะที่ ดังกล่าว สนับสนุนหลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg's uncertainty principle)

ยังมีสถานการณ์พิเศษที่กลุ่มอะตอมมีอันตรกริยาต่อกันในแบบที่ทำให้สถานะทางควอนตัมของแต่ละอะตอมเหล่านั้นไม่เป็นอิสระจากกันและก็ไม่ใช่ความสัมพันธ์เชิงสถานะ (state correlation) แบบทั่วไปด้วย กล่าวคือ สถานะใหม่ของกลุ่มอะตอมดังกล่าวไม่สามารถสร้างขึ้นได้จากผลรวมเชิงเส้นของสถานะอะตอมหน่วยย่อย ทำให้ความเป็นตัวตนของแต่ละอะตอมสูญสลาย เกิดเป็นระบบใหม่ที่อยู่ในสถานะพัวพันควอนตัม ปรากฏการณ์นี้ส่งผลให้การวัดสถานะ (Hermitian operation) หรือการรบกวนสถานะ (non-Hermitian operation) ทางควอนตัมของอะตอมตัวหนึ่ง จะส่งผลกับอะตอมตัวอื่น ๆ ที่พัวพันกันอย่างทันที ถึงแม้ว่าอะตอมแต่ละตัวจะอยู่ห่างกันมากก็ตาม ซึ่งไม่เป็นไปตามหลักแห่งเหตุและผล (principle of causality) ของกลศาสตร์แบบฉบับ (classical mechanics) ในกลศาสตร์แบบฉบับนั้น ปฏิสัมพันธ์ของ เหตุ (เช่น แรง อันตรกิริยา หรือ การวัด) ไปยัง ผลลัพธ์ (ความเปลี่ยนแปลงสถานะ) จะส่งผ่านในรูปการกระเพื่อมของสนาม (field) ที่ใช้เวลาเดินทางไปในอวกาศไม่ไวเกินกว่าอัตราเร็วแสง อย่างไรก็ดี แม้สมบัติทางควอนตัมของอะตอมเดี่ยวและกลุ่มของอะตอมยังไม่สามารถเป็นที่เข้าใจได้ทั้งหมดด้วยไวยากรณ์ของกลศาสตร์แบบฉบับ ขณะนี้นักวิจัยทั่วโลกกำลังประยุกต์ใช้งานฟิสิกส์ควอนตัมของอะตอมในเชิงเทคโนโลยีอย่างแข็งขัน

ประโยชน์ของเทคโนโลยีควอนตัม

ปัจจุบันนักฟิสิกส์ได้ศึกษาและประยุกต์ใช้สมบัติเชิงควอนตัมของอะตอมเดี่ยวเพื่อพัฒนาเทคโนโลยีใหม่ ๆ ซึ่งแบ่งออกได้เป็น 3 กลุ่ม ได้แก่

1. การคำนวณควอนตัมและการจำลองควอนตัม (quantum computing and quantum simulation) คือ การสร้างอุปกรณ์คำนวณ การจำลองระบบ และการออกแบบอัลกอริทึม เพื่อแก้ปัญหาบางประเภทที่ยากลำบากเกินกว่าคอมพิวเตอร์คลาสสิกจะจัดการได้แม้แต่ในอนาคต โดยอาศัยหน่วยย่อยในระบบทวิภาค (binary) ของการประมวลผลทางควอนตัม ที่เรียกว่า *คิวบิต (qubit)* หรือ ควอนตัม

บิต (quantum bit) ซึ่งสามารถเก็บข้อมูลการซ้อนทับของ 2 สถานะ ที่เรียกเป็น "0" และ "1" โดยเมื่อเพิ่มจำนวนคิวบิตในระบบ จำนวนสถานะของระบบรวมจะเพิ่มขึ้นอย่างเอ็กโพเนนเชียล ทำให้ระบบรวมที่ประกอบขึ้นจากเพียงแค่ไม่กี่อะตอมสามารถเป็นตัวแทนของข้อมูลขาป้อนเข้าได้จำนวนมหาศาลพร้อม ๆ กันทั้งหมด โดยอาศัยวงจรควอนตัม (quantum circuit) และกระบวนการเชิงกายภาพของประตูตรรกะควอนตัม (quantum gate) ที่บังคับควบคุมคิวบิตอีกที อัลกอริทึมควอนตัมซึ่งเขียนด้วยภาษาคอมพิวเตอร์คลาสสิกระดับสูงจะสามารถดำเนินการกับทุกสถานะที่ซ้อนทับไปแบบคู่ขนานในครั้งเดียว จึงทำให้คอมพิวเตอร์ควอนตัมมีขีดความสามารถเชิงขนาดข้อมูลและความเร็วในการแก้ปัญหามากกว่าคอมพิวเตอร์คลาสสิกอย่างมาก ความฝันถึงเครื่องคำนวณอันทรงพลังดังกล่าวของนักฟิสิกส์ได้รับการวิศวกรรมจนเริ่มเป็นจริงขึ้นมาบ้างแล้ว โดยเมื่อวันที่ 23 ตุลาคม พ.ศ. 2562 บริษัท กูเกิล (Google) ได้ประกาศความสำเร็จของความเหนือกว่าเชิงควอนตัม (quantum supremacy) เป็นครั้งแรกของโลก โดยทีมนักวิจัยได้ใช้งานคอมพิวเตอร์ควอนตัมแบบสภาพนำยวดยิ่ง (superconducting quantum computer) ซึ่งภายในประกอบด้วยวงจรรอยต่อโจเซฟสัน (Josephson junction circuit) อันเปรียบได้กับอะตอมจำลอง (artificial atom) จำนวน 53 คิวบิต พวกเขาได้นำไปใช้คำนวณแก้ปัญหาที่ได้รับการออกแบบมาอย่างพิเศษโดยคาดการณ์ว่าหากใช้ซุปเปอร์คอมพิวเตอร์ ไอบีเอ็ม ซัมมิท (Summit) ที่เทียบเท่ากับคอมพิวเตอร์ตั้งโต๊ะประมาณ 100,000 เครื่อง จะใช้เวลากว่า 10,000 ปี ในขณะที่ใช้คอมพิวเตอร์ควอนตัมดังกล่าวสามารถย่นเวลาเหลือเพียง 3 นาที 20 วินาทีเท่านั้น [1]

นอกจากเทคโนโลยีสภาพนำยวดยิ่งที่กูเกิลลงทุนวิจัยไปมากมายแล้ว ยังมีระบบเชิงกายภาพอื่นที่สามารถนำไปสู่คอมพิวเตอร์ควอนตัมสากล (universal) ที่ทนทานต่อสัญญาณรบกวน (fault tolerance) ได้ คู่แข่งที่มีศักยภาพและมีข้อดีข้อด้อยที่สมน้ำสมเนื้อกันก็คืออะตอมเย็น ซึ่งเป็นระบบที่ได้รับการพัฒนาในมหาวิทยาลัยเชียงใหม่อีกด้วย แต่ถึงแม้ว่าการบวนการจัดเรียงอะตอมเดี่ยวในแลตทิซแสงที่ถูกพัฒนาขึ้นมาได้ไม่นานมานี้จะสร้างจุดเด่นในเรื่องการขยายสเกลไปสู่ระบบคำนวณแบบ 2 มิติ และ 3 มิติ อีกทั้งยังมีการสร้างประตูตรรกะเชิงควอนตัมแบบอะตอมริดเบิร์ก (Rydberg atom – อะตอมที่มีอย่างน้อยหนึ่งอิเล็กตรอนถูกกระตุ้นไประดับพลังงานสูง มีเลขควอนตัมหลักมากกว่า 20 โดยประมาณ) ซึ่งทำให้อันตรกิริยาระหว่างคิวบิตปรับความแรงได้จากระดับอ่อนเนื่องจากอันตรกิริยาวันเดอร์วาลส์ไปจนถึงระดับแรงของการเหนี่ยวนำไดโพลที่ใกล้เคียงกับอันตรกิริยาระหว่างไอออน คุณสมบัติที่โดดเด่นไม่เหมือนใครดังกล่าวมาเป็นตัวอย่างนั้น ก็ยังไม่เพียงพอที่จะทำให้ฐานเทคโนโลยีการสร้างคอมพิวเตอร์ควอนตัมเชิงพาณิชย์หันมาทุ่มเททุนวิจัยให้กับระบบอะตอมเดี่ยว เพราะหลักไมล์สำคัญที่ยังไม่มีวี่แววว่าจะทำสำเร็จได้ในทุกระบบทางกายภาพรวมถึงอะตอมเย็นด้วยก็คือ กระบวนการแก้ไขข้อผิดพลาด (error correction) ขณะคำนวณที่ต้องใช้คิวบิตนับแสนในการตรวจปรับแก้หนึ่งคิวบิตคำนวณ แต่หากจำต้องยอมรับในข้อจำกัดเรื่องสัญญาณรบกวนที่เป็นอยู่และในทางกลับกันมุ่งหาวิธีใช้ประโยชน์ให้ได้แล้วนั้น เทคโนโลยีระบบอะตอมเดี่ยว ก็น่าจะสามารถเป็นสถาปัตยกรรมแกนนำในด้าน คอมพิวเตอร์ควอนตัมชั้นรอง (noisy intermediate-scale quantum computer) และการจำลองควอนตัม (quantum simulation) ได้อย่างไม่ยากเย็น

2. การตรวจจับเซนเซอร์ควอนตัมและมาตรวิทยาควอนตัม (quantum sensing and quantum metrology) คือ การประยุกต์ใช้คุณสมบัติความไม่ต่อเนื่องของระดับพลังงาน และ/หรือ การซ้อนทับโคฮีเรนต์ และ/หรือ สถานะพัวพัน ของอนุภาคควอนตัมซึ่งมีความละเอียดและความไวสูงต่อสภาวะแวดล้อม เพื่อวัดปริมาณทางกายภาพทั้งที่เป็นเชิงคลาสสิกและเชิงควอนตัม เช่น การวัดความหนาแน่นของฟลักซ์แม่เหล็กโดยใช้อะตอมร้อนในกรอบไร้การผ่อนคลายแลกเปลี่ยนสปิน (spin exchange relaxation free) [2-4] การวัดสนามไฟฟ้าความละเอียดสูงโดยใช้อะตอมริดเบิร์ก [5-8] และการวัดอัตราเร่งเนื่องจากสนามโน้มถ่วงแบบอะตอมเย็น (cold atom gravimeter) [9-11]

เป็นต้น ซึ่งในเชิงเทคนิค ระบบที่ใช้เป็นเซนเซอร์ควอนตัมได้นั้น คือ ระบบที่ระดับพลังงานสามารถแยกแยะออกจากกันได้ โดยมากเป็นระบบสองสถานะที่สามารถเตรียมสถานะเริ่มต้นและตรวจเช็คสถานะได้เมื่อเกิดอันตรกิริยากับสนามกายภาพที่ใส่เข้าไปในระหว่างการควบคุมและจัดการแบบโคฮีเรนต์ นอกจากนี้ยังต้องเกิดการแยก หรือ การเลื่อนของระดับพลังงานผ่านการคู่ควบ (coupling) กับสนามที่ต้องการวัดอีกด้วย อย่างไรก็ดี การจะใช้ศักยภาพอันทรงพลังของกลศาสตร์ควอนตัมได้ ระบบการวัดจำเป็นต้องมีการใช้สมบัติสถานะพัวพัน ซึ่งระบบเล็กที่สุดนั้นจะต้องประกอบไปด้วยอย่างน้อยสองหน่วยควอนตัม และหน่วยควอนตัมที่สอดคล้องกับสมบัติที่กล่าวมาแล้วทุกข้อ ก็คือ คิวบิต นั่นเอง ตัวอย่างสำคัญในการนำคิวบิตที่สร้างจาก อะตอมเดี่ยว มาใช้งานเชิงเซนเซอร์ควอนตัมและมาตรวิทยาควอนตัม ก็คือ นาฬิกาอะตอม [12-14] (atomic clock) ที่เราคุ้นเคยกันดีนั่นเอง เพราะเป็นหัวใจของระบบนำทางความแม่นยำสูงในปัจจุบัน

3. การสื่อสารควอนตัม (quantum communication) คือ การรับส่งข้อมูลควบคู่กับการเข้ารหัสทางควอนตัม โดยอาศัยการสร้างเลขสุ่มเชิงควอนตัม (quantum random number generation) และหลักการแจกจ่ายกุญแจเข้ารหัสเชิงควอนตัม (quantum key distribution: QKD) ในช่องทางสื่อสารควอนตัมคู่ขนานไปกับช่องทางคลาสสิกที่มีแบนด์วิดท์กว้างสำหรับข้อมูลปริมาณมาก เนื่องจากผลของทฤษฎีบทห้ามการคัดลอก (no-clone theorem) ในกลศาสตร์ควอนตัม ที่กล่าวว่า “เป็นไปไม่ได้ที่จะทำสำเนาหรือคัดลอกสถานะทางควอนตัมใดใด ให้เหมือนกันทุกประการ” ทำให้นักวิจัยสามารถออกแบบการสื่อสารที่การดักฟังไม่สัมฤทธิ์ผล หรือไร้ประโยชน์ กล่าวคือ เมื่อมีผู้ลอบฟังสารระหว่างการส่ง ความพยายามนั้นจะไปรบกวนและเปลี่ยนแปลงสถานะควอนตัมไปจากเดิม ทำให้ตรวจสอบได้ว่ามีผู้พยายามดักฟังอยู่ และการรับส่งข้อมูลในช่องทางคลาสสิกจะยุติทันที นอกจากนั้นยังรวมถึง การเคลื่อนย้ายข้อมูลเชิงควอนตัมระยะไกล (quantum teleportation) [15-16] ถ้ามองในภาพที่ใหญ่กว่า ก็อาจจะจินตนาการได้ว่า ระบบการสื่อสารควอนตัมที่มีผู้เล่นหลักเป็น โฟตอน หรือ คิวบิตเคลื่อนที่ จะทำหน้าที่รับส่งข้อมูลในรูปแบบคิวบิตระหว่างหน่วยประมวลผลควอนตัม (quantum processor) ซึ่งอาจมีตัวแสดงนำเป็นอะตอมเดี่ยว หรือ คิวบิตประจำที่ โดยข้อมูลเชิงคิวบิตที่รับเข้ามาเพื่อคำนวณก็จะได้มาจากเซนเซอร์ควอนตัมรูปแบบต่าง ๆ ที่อยู่ตรงปลายสายของแต่ละเครือข่ายควอนตัม เมื่อมีการคู่ควบระหว่างคิวบิตทุกชนิดที่ดีพอ (ตัวอย่างเช่น การคู่ควบผ่านช่องแคบ (cavity) ที่ทำหน้าที่เป็นตัวสั่นพ้อง (resonator)) ทุกส่วนจะทำงานร่วมกันและเชื่อมต่อกันผ่านเครือข่ายควอนตัมเฉพาะที่ (local quantum network) ซึ่งทุกแห่งจะสื่อสารกันและประกอบเข้าเป็นอินเตอร์เน็ตควอนตัมในที่สุด

หนทางการไปสู่อะตอมเดี่ยว

กระบวนการกำเนิดอะตอมเดี่ยวสำหรับการประยุกต์ใช้ต่อไปนั้นมีด้วยกันสองแบบ กล่าวคือ การจับอะตอมเดี่ยวที่มีสภาพเป็นประจุ (ion) [17] และชนิดที่มีสภาพเป็นกลางทางไฟฟ้า (neutral) [18-19] ประการหลังคือประเด็นหลักในบทความนี้ การแบ่งแยกอะตอมเพียงตัวเดียวของธาตุรูบิเดียม-85 (rubidium-85) ให้ออกจากสภาพแวดล้อมนั้นทำได้ค่อนข้างยาก เพราะไม่เพียงแต่รูบิเดียม-85 จะเกิดอันตรกิริยาเคมีกับธาตุหมู่เดียวกันได้ง่าย ระเบิดได้เมื่อรวมตัวกับออกซิเจน และยึดเกาะได้ดีกับพื้นผิวแทบทุกชนิด ยังมีผลจากพลังงานจลน์ โดยที่อุณหภูมิห้องปกตินั้นอัตราเร็วเฉลี่ยของอะตอมจะมีค่าประมาณ 345 เมตรต่อวินาที หรือคิดเป็น 3 เท่าของอัตราเร็วของรถไฟที่เร็วที่สุดในโลกเลยทีเดียว ด้วยเหตุที่อัตราเร็วมีความสัมพันธ์กับอุณหภูมิเชิงจลน์ การลดอัตราเร็วของอะตอมลงนอกจากจะลดการสุ่มสถานะเชิงอุณหภูมิซึ่งเป็นสิ่งจำเป็นในการควบคุมสถานะของคิวบิตแล้ว ยังทำให้อะตอมช้าพอที่จะกักขังไว้ได้ด้วยสนามศักย์ชนิดต่าง ๆ ที่สร้างได้ในห้องทดลอง กระบวนการที่นักวิจัยของมหาวิทยาลัยเชียงใหม่เลือกใช้ เรียกว่า *กับดักทัศนศาสตร์แม่เหล็ก (Magneto-optical*

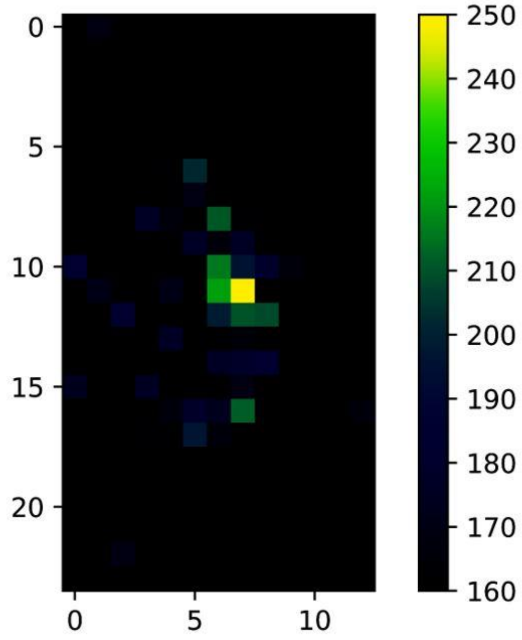
Trap - MOT) [20] ประกอบไปด้วยการทำความเย็นด้วยเลเซอร์ดอปเพลอร์ (Doppler laser cooling) ภายใต้สนามแม่เหล็กจากขดลวดต้านเฮล์มโฮลทซ์ (anti-Helmholtz coils) โดยเมื่อความยาวคลื่นของเลเซอร์ได้รับการควบคุมอย่างแม่นยำมากพอ และมีความเข้มพอเหมาะที่จะยังคงอนุญาตให้อะตอมปลดปล่อยโฟตอนโดยตัวของมันเอง (spontaneous emission) อันตรกิริยาเชิงควอนตัมระหว่างอะตอมกับโฟตอนจะทำให้อะตอมแทบหยุดนิ่งได้ในเสี้ยววินาที

ถ้าเปรียบอะตอมเสมือนเป็นลูกบาสเกตบอลที่เคลื่อนที่อยู่ แต่ถูกโฟตอนที่ประหนึ่งว่าเป็นลูกปิงปองจำนวนมหาศาลชนในทิศตรงกันข้ามกับความเร็วของลูกบาสเกตบอล ลูกบาสเกตบอลจะช้าลงตามกฎอนุรักษ์โมเมนตัมและกระบวนการดอปเพลอร์อุณหภูมิเชิงจลน์ของกลุ่มอะตอมสามารถลดลงไปได้ถึง 50 ไมโครเคลวิน หรือเทียบเท่ากับอัตราเร็วเฉลี่ยประมาณ 10 เซนติเมตรต่อวินาที เนื่องจากกระบวนการนี้ใช้เวลาประมาณ 200 มิลลิวินาทีเท่านั้น ดังนั้นอัตราหน่วง (deceleration) ที่แต่ละอะตอมได้รับมีค่าราว 1,700 เมตร/วินาที^{2} ในขณะเดียวกัน สนามแม่เหล็กแบบเกรเดียนต์คงที่จากขดลวดต้านเฮล์มโฮลทซ์ที่ใส่เข้าไปตั้งแต่เริ่มต้นจะทำให้แรงผลักบนอะตอมโดยโฟตอนแปรผันกับระยะการกระจัดจากจุดกึ่งกลางร่วมของสามแกน เกิดเป็น แรงส่งคืน (restoring force) โดยบ่อพลังงานศักย์อนุรักษ์ที่สัมพันธ์กับแรงดังกล่าวถูกใช้เป็น ศักย์กักขังอะตอมเย็น นั่นเอง เมื่ออัตราการใส่อะตอมเย็นเข้าในบ่อศักย์มากกว่าอัตราการเล็ดลอดออกมา กลุ่มก๊าซอะตอมเย็นที่ถูกกักขังไว้ที่จุดกึ่งกลางร่วมก็จะเริ่มหนาแน่นขึ้น ซึ่งบางครั้งคำว่า กับดักทัศนศาสตร์แม่เหล็ก หรือ MOT ก็ถูกใช้เรียกกลุ่มก๊าซอะตอมเย็นนี้ โดยปกติ MOT จะเป็นทรงกลมเส้นผ่านศูนย์กลางประมาณ 2 มิลลิเมตร และบรรจุได้ประมาณพันล้านอะตอม การแยกอะตอมเพียงหนึ่งตัวจากกลุ่มอะตอมเย็นระดับพันล้าน สามารถทำได้โดยใช้เลเซอร์ที่มีพลังงานต่อโฟตอนน้อยกว่าพลังงานกระตุ้นขั้นที่หนึ่งของอะตอมเพื่อสร้าง *คีมจับเชิงแสง (optical tweezer)* [21] การทดลองที่มหาวิทยาลัยเชียงใหม่เลือกโฟกัสเลเซอร์ความยาวคลื่น 840 นาโนเมตร ลงไปยังขอบของกลุ่มอะตอมเย็นดังกล่าว กับดักแสงนี้จะจับอะตอมไว้ที่จุดโฟกัสของเลเซอร์ ด้วยขนาดเอวของเลเซอร์ที่จุดโฟกัสประมาณ 1 ไมโครเมตร ปริมาตรอันเล็กจิ๋วนี้บังคับให้อะตอมชนกันถี่จนทำให้จำนวนอะตอมสูงสุดที่คีมจับเชิงแสงนี้จะหนีบไว้ได้มีเพียงแค่ 1 อะตอม เมื่อปรับตัวแปรต่าง ๆ ให้อยู่ในขอบเขตการบรรจุแบบการแจกแจงปัวซองชั้นรอง (sub-Poissonian loading regime) โอกาสที่จะได้ผลลัพธ์เป็น 0 หรือ 1 อะตอมในกับดักจะมีค่าเท่ากันคือ 50 เปอร์เซ็นต์ ด้วยเหตุที่อะตอมในคีมจับเชิงแสงจะดูดกลืนและปลดปล่อยโฟตอนตลอดเวลา ทำให้สามารถใช้กล้อง Electron Multiplying Charge-Coupled Device (EMCCD) ที่มีความไวต่อโฟตอนเดี่ยวตรวจนับโฟตอนภายในมุมตันค่าหนึ่งที่อะตอมเดี่ยวปลดปล่อยออกมาในระยะเวลาสั้น ๆ ได้ ปริมาณดังกล่าวได้รับการตีความเป็นจำนวนอะตอมในกับดักของคีมจับเชิงแสง

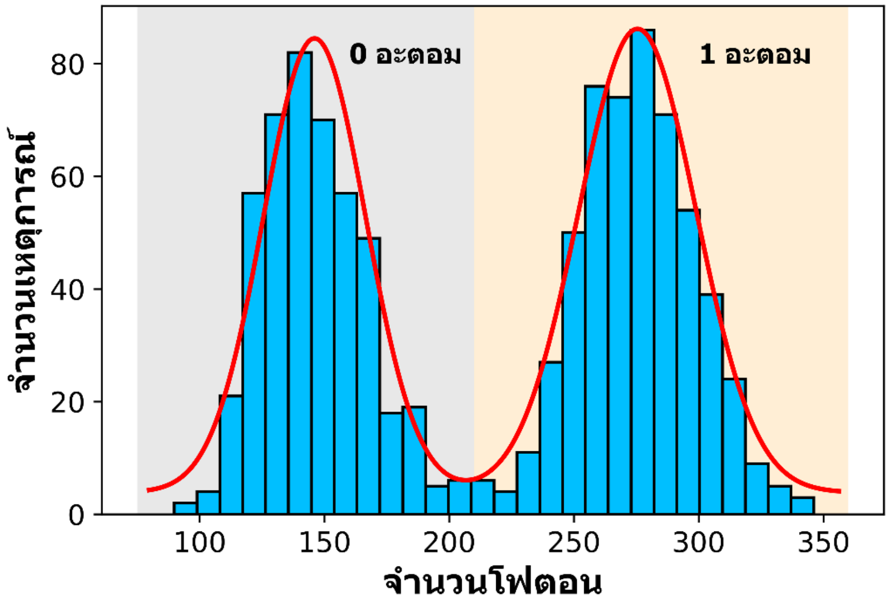
การตรวจวัดสัญญาณจากอะตอมเดี่ยว

ขั้นตอนการกักขังอะตอมเดี่ยวที่ว่ายากแล้ว แต่การตรวจวัดเพื่อยืนยันว่าสิ่งที่ได้คือ อะตอมเดี่ยว นั้นยากยิ่งกว่า เพราะสัญญาณจากอะตอมเดี่ยวนั้นมีค่าน้อยมาก ดังนั้นระบบตรวจนับโฟตอนต้องมีการป้องกันแสงรบกวนจากภายนอกให้ดีที่สุด โดยเมื่อวันที่ 10 กันยายน พ.ศ. 2562 นักวิจัยของ*ห้องปฏิบัติการทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม (Quantum Atom Optics Laboratory)* คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ก็สามารถทำการกักขังอะตอมเดี่ยวของธาตุรูบิเดียม-85 และตรวจวัดสัญญาณได้สำเร็จเป็นครั้งแรกของประเทศไทย หลังจาก 8 ปีของการพัฒนาอุปกรณ์วิทยาศาสตร์ทั้งหมดที่จำเป็นขึ้นมาใช้งานเอง ภาพสัญญาณของอะตอมเดี่ยวนั้นเกิดจากการฉายเลเซอร์ความถี่ใกล้เคียงกับช่องว่าง (gap) ระหว่างชั้นพลังงานของอะตอม ทำให้อะตอมเดี่ยวดูดกลืนและปลดปล่อยโฟตอนอย่างต่อเนื่อง โฟตอน

ที่ถูกปลดปล่อยออกมานี้ได้ถูกรวบรวมด้วยชุดเลนส์รับแสงและโฟกัสลงบนกล้อง EMCCD ทำให้เกิดภาพสัญญาณดังแสดงในรูปที่ 1 โดยเมื่อทำการถ่ายภาพอะตอมเดี่ยวจำนวน 1000 ครั้ง เพื่อให้ได้ความน่าจะเป็นของการจับอะตอมเดี่ยวในกับดักเชิงแสง จะเห็นได้ว่า ผลลัพธ์กราฟสถิติแสดงค่าความถี่จำนวนโฟตอนตรวจนับแสดงโอกาสของการตรวจวัดสูงที่สุดเพียง 2 จุด คือ ที่ประมาณ 150 โฟตอน ซึ่งเป็นจำนวนโฟตอนจากอะตอมพื้นหลัง (background) ที่แสดงถึงการไม่มีอะตอมเดี่ยวในกับดัก และที่ประมาณ 280 โฟตอน ที่เกิดจากอะตอมพื้นหลังรวมกับโฟตอนจากอะตอมเดี่ยวอีก 130 โฟตอน ผลการทดลองที่ได้สอดคล้องอย่างดีกับผลการคำนวณทางทฤษฎี จึงเป็นการยืนยันความถูกต้องของเหตุการณ์กักขังอะตอมเดี่ยวดังกล่าว พื้นที่ใต้กราฟทั้งสองส่วนที่บ่งบอกถึงโอกาสของการกักขัง 0 และ 1 อะตอมตามลำดับนั้นมีค่าเท่า ๆ กัน คือ 50 เปอร์เซ็นต์



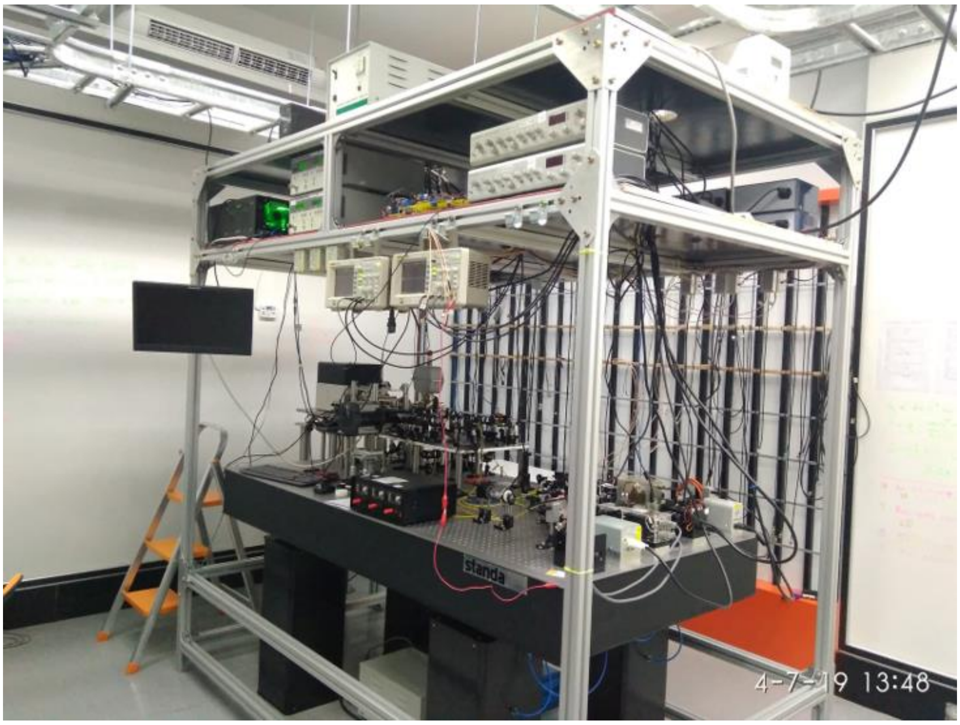
รูปที่ 1 *ภาพสัญญาณแสงหรือโฟตอนที่ปลดปล่อยจากอะตอมเดี่ยวที่บันทึกไว้ด้วยกล้อง EMCCD*



รูปที่ 2 *กราฟสถิติแสดงค่าความถี่จำนวนโฟตอนตรวจนับด้วยกล้อง EMCCD จำนวน 1,000 ครั้ง ใช้เวลาบันทึก 50 มิลลิวินาทีต่อครั้ง แท่งสีฟ้าแสดงผลการทดลอง เส้นสีแดงแสดงฟังก์ชันการกระจายแบบระฆังคว่ำ (Gaussian distribution) จากทฤษฎี การกระจายตัวของจำนวนโฟตอนตรวจนับรอบ ๆ ค่าสูงสุดเฉพาะที่ทางซ้ายมือ คือ สัญญาณจากแสงพื้นหลัง (background) ส่วนการกระจายข้อมูลทางขวามือแสดงจำนวนโฟตอนที่ปลดปล่อยออกมาจากอะตอมเดี่ยวในกับดักและแสงพื้นหลัง*

ความเป็นมาของห้องปฏิบัติการทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม

ย้อนไปเมื่อเก้าปีที่แล้ว ในปี พ.ศ. 2553 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วรานนท์ อนุกูล อดีตนักเรียนทุนโครงการพัฒนาและส่งเสริมผู้มีความสามารถพิเศษทางวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีหรือ พสวท. ณ ขณะนั้นเพิ่งจบปริญญาเอกจากมหาวิทยาลัยเคมบริดจ์ด้านสภาพนำยวดยิ่ง (superconducting) และกลับมารับตำแหน่งอาจารย์ประจำที่ภาควิชาฟิสิกส์และวัสดุศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ได้เพียงห้าปี ได้เข้าพูดคุยกับศาสตราจารย์เกียรติคุณ ดร.ถิรพัฒน์ วิลัยทอง ผู้อำนวยการของศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ (Thailand Center of Excellence in Physics - ThEP) ณ ขณะนั้น ทั้งสองได้เล็งเห็นความสำคัญของเทคโนโลยีควอนตัมและมีความหวังที่จะให้ประเทศไทยมีการทำวิจัยเชิงทดลองที่ทัดเทียมกับประเทศชั้นนำของโลก จึงตัดสินใจก่อตั้งห้องปฏิบัติการทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม (Quantum-Atom Optics Laboratory - QAO) รูปที่ 3 ภายใต้การสนับสนุนของศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ณ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ โดยมีวัตถุประสงค์หลักในการก่อตั้ง คือ การสร้างสสารควบแน่นโบส-ไอน์สไตน์ และการกักขังอะตอมเดี่ยวเพื่อใช้สำหรับการคำนวณควอนตัม งานที่ท้าทายมักเริ่มจากความคิด ความเชื่อกับห้องอันว่างเปล่า ทุนวิจัยที่สุดจำกัด แต่ที่สำคัญคือความช่วยเหลือจากพี่ ๆ น้อง ๆ นักวิจัยและคณาจารย์ ผู้มีอุดมการณ์เดียวกันที่อยากจะเห็นการริเริ่มใหม่ ๆ และความเปลี่ยนแปลงของฟิสิกส์ทดลองในประเทศไทย



รูปที่ 3 *แสดงการทดลองกักขังอะตอมเดี่ยวในปี พ.ศ. 2562 ซึ่งเป็นหนึ่งใน 10 แผนวิจัยในห้องปฏิบัติการทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่*

ทีมนักวิจัยของห้องปฏิบัติการทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัมใช้เวลากว่าเก้าปีผนวกกับความทุ่มเททั้งกายและใจของนักเรียนไทยรุ่นต่อรุ่น คณาจารย์ และผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วรานนท์ หัวหน้าห้องวิจัย ในการเรียนรู้ทั้งฟิสิกส์และวิศวกรรมศาสตร์ในหลายสาขาย่อย เพื่อพัฒนาและสร้างอุปกรณ์ที่จำเป็นในการทำวิจัยกักขังอะตอมเดี่ยว เช่น วงจรควบคุมกระแสและอุณหภูมิของไดโอดเลเซอร์ วงจรควบคุมอุปกรณ์กล้ำแสงด้วยเสียง (acousto-optic modulator) เป็นต้น โดยมีการออกแบบและพัฒนาเป็นลำดับขั้นอย่างก้าวหน้าตลอดมาจนในที่สุดสามารถทำงานสอดประสานกันเพื่อกักขังอะตอมเดี่ยวได้ในปี พ.ศ. 2562 อันถือได้ว่าเป็นครั้งแรกของประเทศไทย ปัจจุบันห้องปฏิบัติการตั้งอยู่ที่ชั้นสองของอาคารปฏิบัติการกลาง คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ และกำลังสร้างการทดลองที่น่าทึ่งอื่น ๆ อีกเช่น การสร้างอุปกรณ์โฟโตนิกส์ซิลิคอนสำหรับการตรวจวัดสารชีวภาพร่วมกับสถาบันวิศวกรรมชีวการแพทย์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่, การวัดสนามแม่เหล็กเชิงอะตอม, และการสร้างเซนเซอร์ควอนตัมหาแหล่งน้ำมันและแร่ธาตุใต้พิภพโดยใช้อะตอม เป็นต้น ทั้งหมดนี้ดำเนินงานภายใต้ *โครงการจัดตั้งศูนย์วิจัยเทคโนโลยีควอนตัม* ซึ่งมีสถานะเป็นหน่วยงานภายในมหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ภาพฉายพัฒนาการจาก อดีต ปัจจุบัน และความมุ่งหวังในอนาคต อาจอธิบายพอสังเขปได้ดังนี้

อดีต - ปลายปี พ.ศ. 2553 ศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ภายใต้สำนักงานคณะกรรมการการอุดมศึกษา (สกอ.) ได้ทำการให้ทุนวิจัยและจัดตั้งห้องวิจัยทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม ณ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ในเวลานั้น ถือได้ว่าเป็นห้องวิจัยด้านอะตอมเย็นแห่งเดียวในประเทศไทย และเป็นหนึ่งในสองของภูมิภาคเอเชียตะวันออกเฉียงใต้ (อีกแห่งอยู่ที่ประเทศสิงคโปร์ ซึ่งเริ่มดำเนินการก่อนหน้าประเทศไทยเพียง 3 ปี) เมื่อสิ้นสุดระยะเวลาปฏิบัติงานตามแผน 5+3 ปี (พ.ศ. 2553-2558 และ 2559-ปัจจุบัน) ได้มีการออกแบบ สร้าง ทดสอบ ผลิตเชิงพาณิชย์ อุปกรณ์ออปโตอิเล็กทรอนิกส์พื้นฐานที่จำเป็นสำหรับสาขาวิจัยวิทยาศาสตร์ของอะตอม-โมเลกุล-แสง จำนวน 14 รายการ และส่งมอบเทคโนโลยีไปสนับสนุนกิจกรรมวิจัยในห้องปฏิบัติการวิทยาศาสตร์ควอนตัมเกิดใหม่ทั่วประเทศไทย มีการดำเนินงานและแสดงผลสัมฤทธิ์ที่สำคัญทั้งด้านการออกแบบและผลิตอุปกรณ์วิจัย สร้างเทคโนโลยีอะตอมเย็น จนถึงการพัฒนานักศึกษา-นักวิจัย และสร้างความร่วมมือกับสถาบันวิจัยในต่างประเทศ ดังแสดงไว้ใน รูปที่ 4 เมื่อสิ้นสุดห้วงเวลาดังกล่าวประเทศไทยจึงได้มีเทคโนโลยีในการสร้างเครื่องมือวิจัยราคาสูงที่จำเป็นจนถือได้ว่าเพียงพอต่อการดำเนินงานวิจัยขั้นต่อไปคือ การประดิษฐ์นวัตกรรมขึ้นจากเทคโนโลยีควอนตัม

ปัจจุบัน - เมื่อวันที่ 10 กันยายน พ.ศ. 2562 ที่ผ่านมา ทีมนักฟิสิกส์วิศวกรรม ของมหาวิทยาลัยเชียงใหม่ ได้ใช้เลเซอร์และระบบควบคุมที่พัฒนาเอง ในการลดพลังงานของกลุ่มก๊าซของอะตอมรูบิเดียม-85 ลงไปที่อุณหภูมิต่ำประมาณ 50 ไมโครเคลวิน (ต่ำกว่าจุดที่เย็นที่สุดในจักรวาลอีกกว่าหนึ่งแสนเท่า) อะตอมกว่าพันล้านตัวถูกหย่อนลงในกับดักแสงเลเซอร์ที่ออกแบบมาเป็นพิเศษ จนมีเพียงอะตอมเดียวที่ถูกกักขังไว้และได้รับการบันทึกภาพด้วยกล้อง EMCCD ทั้งหมดนี้เกิดขึ้นภายในระยะเวลาเพียงแค่เสี้ยววินาที ในสภาพสุญญากาศระดับเดียวกับบรรยากาศบนดวงจันทร์ จึงถือเป็นหลักไมล์อันสำคัญยิ่งของการวิจัยระดับแนวหน้าในประเทศไทย อุปมาได้ว่า การมองหาอะตอมเดี่ยว 1 อะตอมบนเหรียญ 1 บาทนั้น ยากเย็นพอ ๆ กับการมองหาเหรียญ 1 บาท บนดวงจันทร์ และอะตอมเดี่ยวนี้ คือ หน่วยย่อยเล็กสุดของคอมพิวเตอร์ควอนตัม เซนเซอร์ควอนตัม และการสื่อสารควอนตัม ที่จะประสานเข้ากับเครือข่ายควอนตัมมากมายจนในที่สุดรวมเป็นระบบควอนตัมอินเทอร์เน็ต

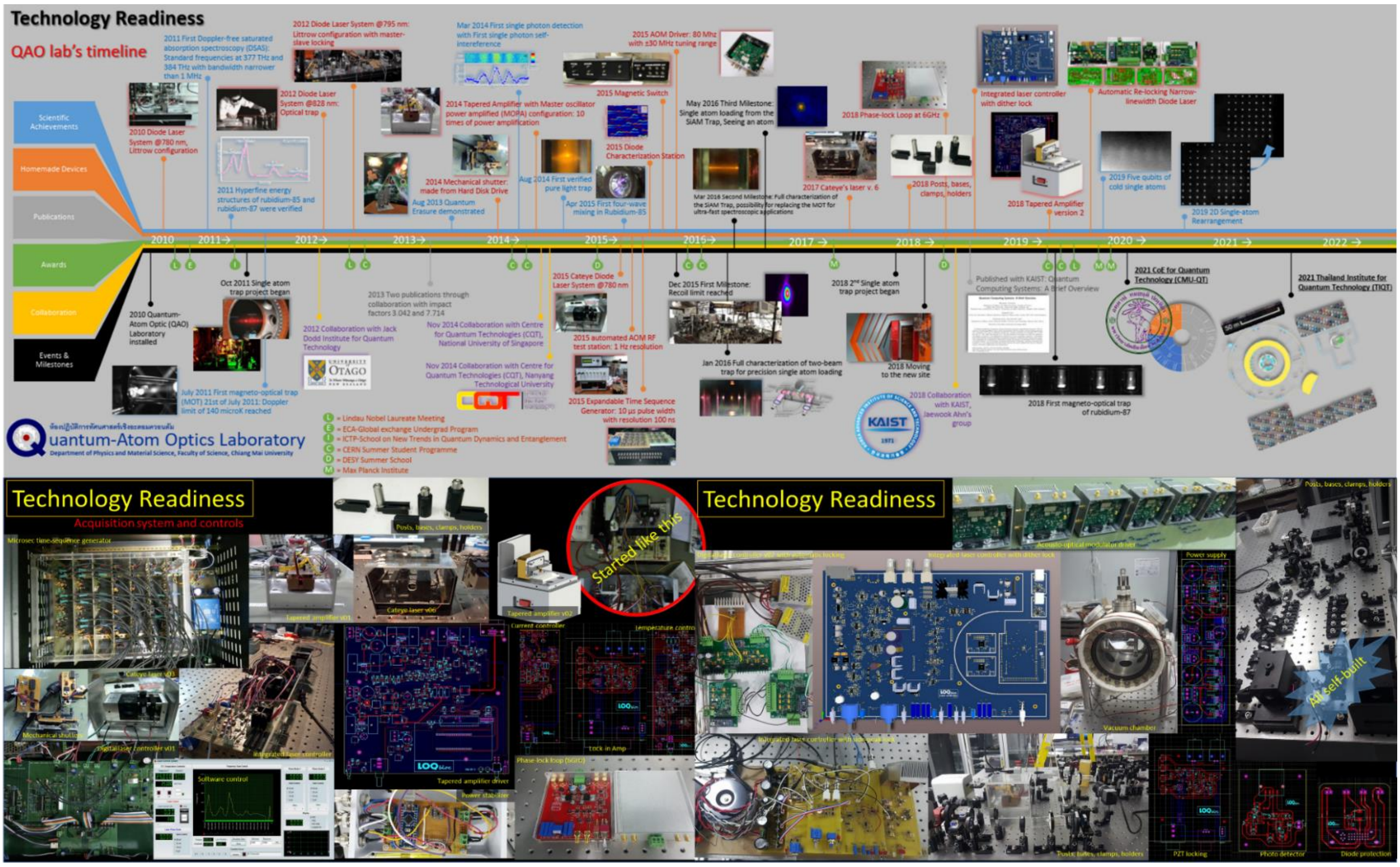
เนื่องจากได้มีการวางแผนงานและสั่งสมประสบการณ์ด้านเทคโนโลยีควอนตัมมาเป็นระยะเวลากว่า 9 ปี ปัจจุบันมหาวิทยาลัยเชียงใหม่มีนักวิจัยควอนตัม ตำแหน่งอาจารย์จากคณะต่าง ๆ เช่น วิทยาศาสตร์ (27) วิศวกรรมศาสตร์ (15) เศรษฐศาสตร์ (8) เภสัชศาสตร์ (3) และสถาบันวิศวกรรมชีวการแพทย์ (5) เป็นต้น รวมเป็นจำนวนรวมทั้งสิ้น 58 คน อีกทั้งภายในระยะเวลา 5 ปีข้างหน้าจะมีนักวิจัยที่สำเร็จการศึกษาจากต่างประเทศกลับมาสมทบตามแผนงานที่วางไว้อย่างต่อเนื่องอีกไม่น้อยกว่า 17 คน ทีมวิจัยควอนตัมของมหาวิทยาลัยเชียงใหม่ได้สร้างความร่วมมือวิจัยอย่างใกล้ชิดกับ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล, มหาวิทยาลัยบูรพา และมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และกับสถาบันต่างประเทศ เช่น Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST), Korea; Max Planck Institute of Quantum Optics, Germany; Centre for Quantum Technologies (CQT), Singapore เป็นต้น รวมทั้งยังมี MOUs ด้านความร่วมมือเพื่อสร้างคอมพิวเตอร์ควอนตัมแบบสภาพนำยวดยิ่งกับ สถาบันวิจัยดาราศาสตร์แห่งชาติ (องค์การมหาชน) สถาบันวิจัยแสงซินโครตรอน (องค์การมหาชน) มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีมหานคร และจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อีกทั้งยังสร้างวัฒนธรรมการแบ่งปันทรัพยากรวิจัย *ภายใต้โครงการจัดตั้งศูนย์วิจัยเทคโนโลยีควอนตัม* เพื่อวิจัย พัฒนา และผลิตนวัตกรรมฐานเทคโนโลยีควอนตัมได้ในระยะเวลาสั้นที่สุดผ่านการจัดตั้งโรงประลองเพื่อเทคโนโลยีควอนตัม (Fabrication Laboratory for Quantum Technology) ในปี พ.ศ. 2562

โดยในเบื้องต้นกิจกรรมวิจัยกำลังเน้นหนักไปที่การสร้างเซนเซอร์ควอนตัม และคอมพิวเตอร์ควอนตัมโดยใช้ทั้งอะตอมเย็น และวงจรรวมตัวนำยวดยิ่ง

อนาคต - ในระยะเวลา 3 ปีข้างหน้า หน่วยวิจัยต่าง ๆ ภายใต้โครงการจัดตั้งศูนย์วิจัยเทคโนโลยีควอนตัม มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ จะเริ่มย้ายสถานที่ปฏิบัติงานไปวิทยาเขตแม่เหียะเพื่อสถาปนาระบบนิเวศควอนตัมที่ยั่งยืน (sustainable quantum ecosystem) อันประหนึ่งเป็นการเริ่มต้นของ “วิทยาเขตแห่งนวัตกรรม” (innovation campus) โดยจะยังคงเน้นงานวิจัยในสามเสาหลัก คือ ด้านการคำนวณควอนตัม (รวมถึงวงจรและซอฟท์แวร์ควอนตัม) เซนเซอร์ควอนตัม และวิศวกรรมควอนตัม กิจกรรมวิจัยจะเริ่มจากการจัดตั้งอุทยานซอฟท์แวร์ (software park) ภายใต้สถาบันวิจัยเทคโนโลยีควอนตัม (Research Institute for Quantum Technology) ที่จะทำงานร่วมกับโรงประลองเพื่อผลิตนวัตกรรมฐานเทคโนโลยีควอนตัม อันจะทำหน้าที่เชื่อมต่อและผลักดันผลงานวิจัยและพัฒนาจนสามารถเข้าสู่โปรแกรมบ่มเพาะเชิงธุรกิจของอุทยานวิทยาศาสตร์แห่งชาติภาคเหนือ (Northern Science Park) ให้สามารถสร้างมูลค่าเพิ่ม เพื่อนำไปสู่ความยั่งยืนในการพัฒนาเทคโนโลยีควอนตัมและเข้าสู่ช่วงเวลาแห่งการ *“อินโนเวทเทตในประเทศไทย” (Innovated in Thailand)* ภายใน 5 ปีนับจากนี้ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ต้องสามารถแปลงการลงทุนด้านนวัตกรรมเทคโนโลยีควอนตัมให้เกิดเป็นผลลัพธ์ให้ได้ โดยคาดว่าสิ่งประดิษฐ์ 5 รายการแรก กล่าวคือ หน่วยความจำควอนตัมที่ใช้อะตอมเดี่ยวในการเก็บข้อมูลในคอมพิวเตอร์ควอนตัม เครื่องวัดความหนาแน่นของฟลักซ์แม่เหล็กความไวสูงสำหรับงานสำรวจธรณีวิทยา/ งานด้านการแพทย์ เซนเซอร์ตรวจหาแหล่งน้ำมันและก๊าซธรรมชาติความไวสูง อุปกรณ์ตรวจคัดกรองทางการแพทย์ความไวสูงโดยใช้ซิลิกอนนาโนโฟโตนิกส์ และเครื่องวัดสนามแม่เหล็กความไวสูงเพื่องานด้านความมั่นคง น่าจะสามารถใช้งานได้จริงและเป็นประโยชน์กับสังคมและชุมชน รวมถึงสามารถเข้าสู่กระบวนการบ่มเพาะเชิงธุรกิจ ทั้งหมดนี้จะสามารถดำเนินการได้จากภายในวิทยาเขตแม่เหียะ นอกจากนี้ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ยังมีแผนงานในการดึงเอากลุ่มคนที่มีความสามารถระดับโลก (global talents) เข้ามาร่วมกันทำวิจัยผ่านการประสานงานของกลุ่มนักวิชาชีพในสหรัฐอเมริกาและแคนาดา (The Association of Thai Professionals in America and Canada - ATPAC) อย่างต่อเนื่อง

กิติกรรมประกาศ

ขอขอบพระคุณศาสตราจารย์เกียรติคุณ ดร. ถิรพัฒน์ วิลัยทอง ผู้อำนวยการศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ที่สนับสนุนการก่อตั้งห้องปฏิบัติการทัศนศาสตร์เชิงอะตอมควอนตัม และให้การสนับสนุนเรื่อยมาจนถึงปัจจุบัน ขอขอบพระคุณศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ และมหาวิทยาลัยเชียงใหม่ที่ให้งบดำเนินการและสนับสนุนสถานที่ในการทำวิจัย ขอบพระคุณศาสตราจารย์ ดร. สิทธิชัย โภไคยอุดม มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีมหานคร ที่เอื้อเฟื้อกล้อง EMCCD ในการถ่ายภาพอะตอมเดี่ยวครั้งนี้ นอกจากนั้นขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์บุญรักษา สุนทรธรรม สถาบันวิจัยดาราศาสตร์แห่งชาติ (องค์การมหาชน) สำหรับโต๊ะปฏิบัติการทัศนศาสตร์ และสุดท้าย ดร. ประพงษ์ คล้ายสุบรรณ์ สถาบันสถาบันวิจัยแสงซินโครตรอน (องค์การมหาชน) ที่เอื้อเฟือเครื่องดูดสุญญากาศเชิงประจุในการทำระบบสุญญากาศสูงในงานวิจัยนี้มา ณ ที่นี้



รูปที่ 4 การดำเนินงานและผลสัมฤทธิ์ที่สำคัญ ด้านการออกแบบและผลิตอุปกรณ์วิจัย สร้างเทคโนโลยีอะตอมเย็น จนถึงการพัฒนานักศึกษา-นักวิจัย และความร่วมมือกับสถาบันต่างประเทศ ในระยะดำเนินการปี พ.ศ. 2553-2562

เอกสารอ้างอิง

[1] F. Arute, K. Arya, R. Babbush et al., "Quantum supremacy using a programmable superconducting processor", Nature, 574, 505 (2019).

[2] D. Sheng, S. Li, N. Dural and M. V. Romalis, "Subfemtotesla scalar atomic magnetometry using multipass cells", Physical Review Letters 110, 160802 (2013).

[3] Q. Zhao, B. L. Fan, S. G. Wang and L. J. Wang, "A vector atomic magnetometer based on the spin self-sustaining Larmor method", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 481, 257 (2019).

[4] J. D. Li, W. Quan, B. Q. Zhou, Z. Wang, J. X. Lu, Z. H. Hu, G. Liu and J. C. Fang, "SERF atomic magnetometer–recent advances and applications: A review", IEEE Sensors Journal, 18, 8198 (2018).

[5] J. A. Sedlacek, A. Schwettmann, H. Kübler and J. P. Shaffer, "Atom-based vector microwave electrometry using Rubidium Rydberg atoms in a vapor cell", Physical Review Letters, 111(6), 063001 (2013).

[6] A. Facon, E. K. Dietsche, D. Grosso, S. Haroche, J.-M. Raimond, M. Brune and S. Gleyzes, "A sensitive electrometer based on a Rydberg atom in a Schrödinger-cat state", Nature 535, 262 (2016).

[7] H. Q. Fan, S. Kumar, J. Sedlacek, H. Kübler, S. Karimkashi and J. P. Shaffer, "Atom based RF electric field sensing", Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 48(20), 202001 (2015).

[8] S. Kumar, H. Q. Fan, H. Kübler, A. J. Jahangiri and J. P. Shaffer, "Rydberg-atom based radio-frequency electrometry using frequency modulation spectroscopy in room temperature vapor cells", Optics Express, 25(8), 8625 (2017).

[9] S. Abend, M. Gebbe, M. Gersemann, H. Ahlers, H. Müntinga, E. Giese, N. Gaaloul, C. Schubert, C. Lämmerzahl, W. Ertmer, W. P. Schleich and E. M. Rasel, Atom-chip fountain gravimeter, Physical Review Letters 117, 203003 (2016).

[10] X. J. Wu, Z. Pagel, B. S. Malek, T. H. Nguyen, F. Zi, D. S. Scheirer and H. Müller, "Gravity surveys using a mobile atom interferometer", Science Advances, 5(9), eaax0800 (2019).

[11] V. Ménoret, P. Vermeulen, N. Le Moigne, S. Bonvalot, P. Bouyer, A. Landragin and B. Desruelle, "Gravity measurements below 10—9g with a transportable absolute quantum gravimeter", Scientific Reports, 8, 12300 (2018).

[12] I. S. Madjarov, A. Cooper, A. L. Shaw, J. P. Covey, V. Schkolnik, T. H. Yoon, J. R. Williams and M. Endres, "An atomic-array optical clock with single-atom readout", Physical Review X, 9, 041052 (2019).

[13] M. A. Norcia, A. W. Young, W. J. Eckner, E. Oelker, J. Ye and A. M. Kaufman, "Seconds-scale coherence on an optical clock transition in a tweezer-array", Science, 366(6461), 93 (2019).

[14] S. L. Campbell, R. B. Hutson, G. E. Marti, A. Goban, N. Darkwah Oppong, R. L. McNally, L. Sonderhouse, J. M. Robinson, W. Zhang, B. J. Bloom and J. Ye, "A Fermi-degenerate three-dimensional optical lattice clock", Science 358, 90, (2017).

[15] J. Yin, Y. Cao, Y. H. Li et al., “Satellite-based entanglement distribution over 1200 kilometers”, Science, 356(6343), 1140, (2017).

[16] L.-M. Duan, M. D. Lukin, J. I. Cirac and P. Zoller, “Long-distance quantum communication with atomic ensembles and linear optics”, Nature 414, 413, (2001).

[17] C. D. Bruzewicza, J. Chiaverinib, R. McConnellc and J. M. Sage, “Trapped-ion quantum computing: Progress and challenges”, Applied Physics Reviews, 6, 021314 (2019).

[18] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch and S. Kuhr, “Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator”, Nature 467, 68 (2010).

[19] D. Barredo, V. Lienhard, S. de Léséleuc, T. Lahaye and A. Browaeys, “Synthetic three-dimensional atomic structures assembled atom by atom”, Nature 561, 79 (2018).

[20] K. Krzysztof, V. C. Long, K. D. Xuan M. Głódź, B. N. Huy and J. Szonert, “Magneto-optical trap: Fundamentals and realization”, Computational Methods in Science and Technology, SI(2), 115 (2010).

[21] M. S. Rocha, “Optical tweezers for undergraduates: Theoretical analysis and experiments”, American Journal of Physics, 77, 704 (2009).