

บทความวิชาการ (Article)

สมการหัตถ์จรย: สมการชาชิโย

อุดมศิลป์ ปันสุข

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 เกลล์มันน์และบรูคเนอร์ 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) มีรูปแบบสมการที่ (1) ดังนี้

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

สมการนี้มีพารามิเตอร์สำคัญเพียงสามตัวเท่านั้น ได้แก่ A , B และ C โดยในบทความนี้ผู้เขียนจะกล่าวถึงที่มาอย่างสังเขปของพลังงานสหสัมพันธ์และความสวยงามของรูปแบบของสมการชาชิโย

ก๊าซอิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยา (Interacting Electron Gas)

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

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

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

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (3)$$

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 x_i และ x_j ในบทความนี้เราจะไม่ได้กล่าวถึงการหาผลเฉลยของสมการที่ (3) โดยตรง แต่จะกล่าวถึงผลเฉลยสำเร็จที่มีผู้ทำได้ทำไว้แล้วในอดีต

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

พลังงานสถานะพื้นและพลังงานสหสัมพันธ์ (Ground State Energy and Correlation Energy)

ผลเฉลยที่สำคัญอันหนึ่งของสมการที่ (3) คือค่าพลังงานสถานะพื้น (ground state energy, E_{GS}) ของระบบซึ่งเป็นส่วนสำคัญในการหาค่าพลังงานสหสัมพันธ์ต่อไป อย่างไรก็ตาม ผลเฉลยที่แม่นยำ (exact solution) นั้นยังไม่มีใครหาได้ นักฟิสิกส์จึงต้องพึ่งพาการประมาณ วิธีการประมาณผลเฉลยที่สำคัญอันหนึ่งคือการประมาณว่าอิเล็กตรอนนั้นเป็นอนุภาคอิสระ และฟังก์ชันคลื่นของระบบสามารถเขียนให้อยู่ในรูปของผลคูณของฟังก์ชันคลื่นอนุภาคเดี่ยว (single-particle wave function, $\varphi_i(x_i)$) ดังนี้

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \varphi_1(x_1) \varphi_2(x_2) \cdots \varphi_N(x_N) \quad (4)$$

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

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_N(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(x_N) & \cdots & \varphi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad (5)$$

เมื่อแทนสมการที่ (5) ลงในสมการชโรดิงเงอร์ จะได้ว่า

$$\hat{H}\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (6)$$

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

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

$$E_c = E_{GS} - E_{HF} \quad (7)$$

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

$$\langle XY \rangle = \langle X \rangle \langle Y \rangle \quad (8)$$

แต่ถ้าข้อมูลทั้งสองมีสหสัมพันธ์กันแล้ว จะได้ว่า

$$correlation = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle \neq 0 \quad (9)$$

ซึ่งถ้าพิจารณาในเชิงอุปมาอุปไมยแล้วจะเห็นว่ารูปแบบของสมการที่ (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

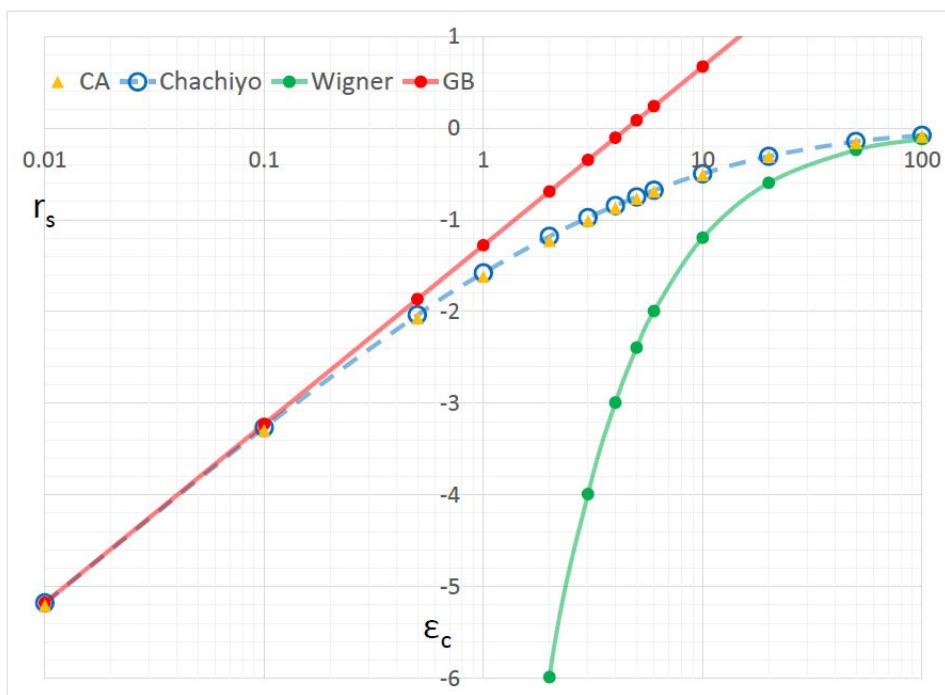
$$\varepsilon_c(r_s) = -\frac{0.8757}{r_s} \quad (10)$$

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

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

$$\varepsilon_c(r_s) = -0.094 + 0.0622 \log(r_s) + O(r_s) \quad (11)$$

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



รูปที่ 1 แสดงพลังงานสหสัมพันธ์จากสมการของวิกเนอร์ (เส้นทึบและวงกลมสีเขียว) สมการของเกลดมันน์-บรูคเนอร์ (เส้นทึบและวงกลมสีแดง) ค่าเชิงตัวเลขจากวิธีมอนติคาร์โล (สามเหลี่ยมสีเหลือง) และสมการซาชิโย (เส้นประและวงกลมสีน้ำเงิน)

สิ่งที่ขาดหายไปจากสมการที่ (10) และ (11) นั่นก็คือความต่อเนื่อง จากรูปที่ 1 เราพบว่าค่าพลังงานสหสัมพันธ์ที่ได้จากสมการที่ (10) (เส้นทึบและวงกลมสีเขียว) นั้นไม่บรรจบกับค่าจากสมการที่ (11) (เส้นทึบและวงกลมสีแดง) ที่บริเวณ $1 \leq r_s \leq 100$ 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 $1 \leq r_s \leq 100$ ซึ่งผลจากงานวิจัยของพวกเขาทำให้เราสามารถคำนวณหาค่าพลังงานสหสัมพันธ์เป็นเชิงตัวเลข (numerical values) ที่บริเวณ $1 \leq r_s \leq 100$ ได้สำเร็จ แม้จะเป็นวิธีเชิงตัวเลข แต่ค่าที่ได้มีความแม่นยำสูง จึงเป็นที่ยอมรับในวงกว้างและใช้เป็นตัวเปรียบเทียบ (benchmark) กับค่าพลังงานสหสัมพันธ์ที่หาได้จากวิธีอื่นๆ หลังจากนั้น เบอร์ดิวและหวัง [7] ได้ขยายค่าพลังงานสหสัมพันธ์เชิงตัวเลขให้ครอบคลุม $0.01 \leq r_s \leq 100$ ด้วยตามที่ปรากฏในรูปที่ 1 (สามเหลี่ยมสีเหลือง) อย่างไรก็ตาม ผลจากวิธีมอนติคาร์โลก็ยังเป็นค่าเชิงตัวเลขและไม่ได้ออกมาเป็นสมการเชิงวิเคราะห์หรือฟังก์ชันที่ต่อเนื่องแต่อย่างใด

ความสวยงามของรูปสมการชาชีโย

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

ในอดีตมีผู้ที่เสนอรูปสมการที่ใช้อธิบายพลังงานสหสัมพันธ์และสอดคล้องกับผลการคำนวณด้วยวิธีมอนติคาร์โลไว้มากมาย แต่สมการที่คำนึงถึงขีดจำกัดเชิงวิเคราะห์ (analytic limits) ด้วยนั้น ได้แก่ สมการของเปอร์คิวและหวัง [7] แต่สมการนั้นก็มิพารามิเตอร์ประกอบจำนวนมาก และเมื่อไม่นานมานี้ ดร.ทีปานิส ชาชีโย [1] ได้เสนอรูปแบบตามสมการที่ (1) ซึ่งเป็นสมการที่มีความเรียบง่าย มีพารามิเตอร์ประกอบรูปสมการเพียง 3 ตัวตามที่ได้กล่าวไว้ตั้งแต่ตอนต้น นอกจากนี้ สมการที่ (1) ยังมีขีดจำกัดต่างๆ ที่สอดคล้องกับสมการที่ (10) และ (11) ด้วยดังนี้

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

$$\varepsilon_c(r_s) \approx A \log(C) - 2A \log(r_s) + O(r_s) \quad (12)$$

สมการที่ (12) นี้มีรูปแบบเดียวกับสมการที่ (11) ของเกลล์มันน์และบรูคเนอร์พอดิ โดยเฉพาะอย่างยิ่งถ้าจัดให้

$$A = -\frac{0.0622}{2} = -0.0311 \quad (13)$$

และจัดให้

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

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

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

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

สมการที่ (15) นี้มีรูปแบบเดียวกับสมการที่ (10) ของวิกเนอร์พอดิ โดยเฉพาะอย่างยิ่งถ้าจัดให้

$$B = -\frac{0.8757}{A} = 28.16 \quad (16)$$

อย่างไรก็ตาม ปรากฏว่าค่า A , B และ C ที่หาได้จากสมการที่ (13) (14) และ (16) ซึ่งสอดคล้องเป็นอย่างดีกับลิมิตในสมการที่ (10) และ (11) นั้นไม่สามารถเข้ากับค่าพลังงานสหสัมพันธ์จากวิธีมอนติคาร์โลได้ดีเท่าที่ควร ในปี พ.ศ. 2559 ดร.ทีปานิส ชาติโย [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 ชาติโย 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 ชาติโย	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-บุรคเนอร์) ปรากฏว่าข้อจำกัดของสมการทั้งสองคือความไม่ต่อเนื่อง ณ ตำแหน่งที่ใช้งานพอดี จากนั้นได้กล่าวถึงวิธีมอนติคาร์โลซึ่งให้ค่าเชิงตัวเลขที่มีความแม่นยำเป็นที่ยอมรับในวงกว้าง และนำมาสู่ความต้องการที่จะมีสมการเชิงวิเคราะห์ที่มีสมบัติความต่อเนื่องตลอดช่วงความหนาแน่นที่เราต้องการ ($0.01 \leq r_s \leq 100$) จึงเป็นที่มาของสมการชาติโย (สมการที่ (1)) ที่มีคุณสมบัติความต่อเนื่องและให้ค่าพลังงานสหสัมพันธ์ที่สอดคล้องเป็นอย่างดีกับค่าเชิงตัวเลขจากวิธีมอนติคาร์โล อีกทั้งยังมีพารามิเตอร์เพียง 3 ตัวและรูปแบบของสมการยังสอดคล้องกับรูปแบบของลิมิตเชิงวิเคราะห์อีกด้วย นับเป็นสมการที่มีรูปแบบสวยงาม หัศจรรย์สมการหนึ่ง 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).