ผลงานวิจัยโดยสรุปของ ศ.ดร.ชูกิจ ลิมปิจำนงค์

การศึกษาวิทยานิพนธ์ของ ดร.ชูกิจ ระหว่างปี ค.ศ. 1995-2000 นั้นเป็นการใช้การคำนวณสมบัติของผลึกโดยอาศัยควอนตัมฟิสิกส์ (คล้ายควอนตัมเคมีคำนวณ*) ซึ่งอาศัยทฤษฎีควอนตัมคำนวณหาสถานะอิเล็กตรอนรอบอะตอมที่ประกอบกันเป็นผลึก ทำให้สามารถทราบถึงแรงยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอมในผลึก ตลอดจนสมบัติทางไฟฟ้า แสง และ แม่เหล็กของสาร โดยไม่ต้องพึ่งผลการทดลอง และ สามารถนำไปเทียบกับข้อมูลจากการวัดได้ โดยในระหว่างที่ทำวิทยานิพนธ์นั้น Computer ยังมีความเร็วไม่สูงนักทำให้การศึกษาค่อนข้างจำกัดโดยทรัพยากรคำนวณ ศึกษาได้เฉพาะระบบที่เป็นผลึกสมบูรณ์ที่มีหน่วยย่อยของผลึก (unit cell) ประกอบด้วยอะตอมไม่เกิน 10 อะตอม โดยหัวข้อที่ศึกษาเป็นการศึกษาข้อแตกต่างระหว่างผลึก SiC โครงสร้างต่างๆ ได้แก่ โครงสร้าง 2H, 3C, 4H, 6H, 9R และ 15R ซึ่งได้ผลที่สามารถเปรียบเทียบกับการทดลองได้ และ สามารถอธิบายได้ว่าเหตุใดโครงสร้าง 4H และ 6H จึงพบได้บ่อยในธรรมชาติ

หลังจากนั้น ดร.ชูกิจ ได้ไปทำวิจัยหลังปริญญาเอกที่ Xerox Palo Alto Research Center, California ภายใต้การดูแลของ Dr. Chris G. Van de Walle (ปัจจุบันย้ายไปเป็น Prof. ที่ Dept. of Material, UC Santa Barbara) โดยได้อาศัยความรู้ที่เรียนมาขยายผลไปศึกษาระบบที่ใหญ่ขึ้น คือ ศึกษาผลทางแสง การสั่นของอะตอม และ ผลทางไฟฟ้า ของการเจือหรือการโดปสารกึ่งตัวนำ GaN ด้วยธาตุต่างๆ ซึ่งการศึกษานี้ต้องใช้ unit cell ที่ใหญ่ขึ้นในระดับประมาณ 100 อะตอม เหตุผลที่ทำการศึกษาในหัวข้อนี้เป็นเพราะ GaN เป็นสารที่ใช้ในการผลิต Blue Laser ซึ่งทางบริษัท Xerox ให้ความสนใจเป็นอย่างยิ่งในขณะนั้น เพื่อใช้ใน Laser printer โดยการศึกษานั้นได้ร่วมมืออย่างใกล้ชิดกับกลุ่มทดลองของบริษัท Xerox ที่เป็นเพียง 1 ใน 5 กลุ่มของโลกที่ผลิต Blue Laser ได้ในขณะนั้น การศึกษาในช่วงนั้นได้องค์ความรู้ที่เป็นประโยชน์ต่อการพัฒนา GaN หลายด้าน โดยเฉพาะการศึกษาโอกาสการเกิดความบกพร่องมูลฐานชนิดต่างๆและสมบัติเฉพาะของความบกพร่องแต่ละชนิดนั้น ได้รับการอ้างถึงอย่างมากหลังจากตีพิมพ์จวบจนถึงปัจจุบัน นอกจากนั้น ยังได้ทำการคำนวณพบว่า Be เป็นธาตุเจือที่น่าจะดีกว่า Mg ที่ใช้กันอยู่ อย่างไรก็ดี เนื่องจากความเป็นพิษต่อมนุษย์และระบบนิเวศน์ของ Be ทำให้ยังไม่มีกลุ่มทดลองใดตัดสินใจที่จะทดลองใช้จวบจนทุกวันนี้ แม้ว่าผลงานดังกล่าวของเราได้ถูกตีพิมพ์ไปกว่า 6 ปีและได้ถูกอ้างถึงในวงกว้าง เหตุผลหนึ่งอาจจะเป็นเพราะเทคโนโลยีปัจจุบันสามารถโดป Mg ใน GaN จนผลิต Laser ที่มีมาตรฐานที่อุตสาหกรรมยอมรับได้แล้ว จึงมีความจำเป็นในการพัฒนาสาร GaN น้อยลง

---

* ข้อแตกต่างระหว่างควอนตัมเคมีคำนวณ (Computational quantum chemistry หรือ Ab-initio calculations) และควอนตัมฟิสิกส์คำนวณ (First principles calculations) คือ ควอนตัมเคมี ศึกษาโมเลกุลหรือระบบอสัญฐาน แต่ของฟิสิกส์ศึกษาระบบผลึกที่มีการเรียงตัวของ Unit cell แบบซ้ำๆ (Periodicity)

หลังจากทำงานวิจัยที่ Xerox ดร.ชูกิจ ได้กลับมาบรรจุเข้าทำงานที่ สาขาวิชาฟิสิกส์ ม. เทคโนโลยีสุรนารี (มทส.) ในตำแหน่งอาจารย์ และ ได้ใช้ความรู้ที่ได้จากการศึกษาปริญญาเอก และการวิจัยหลังปริญญาเอก ในการศึกษาสารกึ่งตัวนำชนิดอื่น ตลอดจนการเจือธาตุลงในสารกลุ่ม Oxides ที่มีการศึกษากันค่อนข้างมากในหมู่นักทดลองวัสดุศาสตร์ของไทย เนื่องจากการคำนวณแบบ First principles ไม่อาศัยตัวแปรจากการทดลอง จึงใช้ยืนยันการทดลองได้อย่างเป็นกลางเป็นอย่างดี และ เป็นนักวิจัยในระดับสากลก็นิยมใช้ประกอบการทดลองจนแทบจะขาดไม่ได้ในระยะหลัง ในการคำนวณแบบ First principles นั้น เมื่อหาคำตอบของสถานะอิเล็กตรอนได้แล้ว จะทำให้ทราบถึงสมบัติทุกด้านของสารตั้งแต่ สมบัติทางไฟฟ้า ทางแสงตั้งแต่ย่านใต้แดงจนถึงรังสีเอ็กซ์ และสมบัติแม่เหล็ก จึงสามารถใช้เทียบกับผลการทดลองได้หลากหลายอย่าง ตัวอย่างเช่น (1) เทียบกับการวิเคราะห์สารโดยใช้แสงใต้แดง (Infrared Spectroscopy) โดยการคำนวณสมบัติการสั่นของอะตอมในผลึก เพราะความถี่การสั่นอยู่ในย่านความถี่ของแสงใต้แดง และสเปกตรัมการดูดกลืนแสงใต้แดงก็ขึ้นอยู่กับการสั่นพ้องของอะตอมในผลึกนั่นเอง (2) เทียบกับการวิเคราะห์สารโดยใช้รังสีเอ็กซ์ (X-ray Absorption Spectroscopy และ X-ray Photoemission Spectroscopy) โดยการคำนวณสถานะต่างๆของอิเล็กตรอน และ โอกาสการกระโดดระหว่างสถานะของมัน เพราะรังสีเอ็กซ์กระตุ้นให้อิเล็กตรอนวงในของธาตุกระโดดขึ้นมาในสถานะที่สูงขึ้น การทราบสถานะของอิเล็กตรอนในการคำนวณสามารถจำลองสเปกตรัมการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ได้ (3) การทราบค่าพลังงานการก่อตัวของผลึกทำให้ทราบถึงความสเถียรของผลึกในโครงสร้างต่างๆ กัน ภายใต้แรงดัน หรือ ความเค้นต่างๆ ซึ่งใช้เปรียบเทียบกับการทดลอง X-ray Diffraction (XRD) ที่ใช้ดูโครงสร้างผลึก โดยเฉพาะอย่างยิ่งการทดลองภายใต้แรงดันสูง ได้เป็นอย่างดี

ทั้งนี้ โดยปกติแล้ว การเจือสารต่างๆ ลงไปในผลึกนั้นนักทดลองจะยังไม่ทราบตำแหน่งของสารเจือในผลึกว่าลงไปแทนที่อะตอมใด หรือ ไปก่อให้เกิดการเรียงตัวใหม่ในผลึกหรือไม่ แต่สามารถทำการทดลองวัดสมบัติต่างๆ ที่เปลี่ยนไปเนื่องจากสารเจือ โดยเฉพาะอย่างยิ่ง สามารถวัดสมบัติทางแสงที่ขึ้นตรงเฉพาะกับสารเจือ เช่น ความถี่การสั่นที่เกิดขึ้นใหม่โดยใช้ Infrared spectroscopy หรือ วัดสเปกตรัมการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ในย่านของอะตอมสารเจือเฉพาะชนิด ข้อมูลเหล่านี้หากนำมาเปรียบเทียบกับการคำนวณสมบัติของสารเจือที่แทนที่ตำแหน่งต่างๆในผลึกจะทำให้สามารถระบุได้ว่าสารเจือนั้นไปแทนที่อยู่ในผลึก ณ ตำแหน่งใด หรือ ไปทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างผลึกอย่างไร

ตัวอย่างงานวิจัยของดร.ชูกิจ ในระยะหลังได้แก่ (1) การร่วมมือกับนักทดลองในการพยายามที่จะลด Optical Bandgap ของสาร TiO_2 [อาจารย์ ม.เกษตร และ นักวิจัย MTEC] ซึ่งปกติแล้วเป็นสาร Photocatalytic ที่ดีภายใต้แสง UV แต่มีประสิทธิภาพต่ำภายใต้แสงอาทิตย์เพราะใน

แสงอาทิตย์มี UV อยู่ในสัดส่วนที่ค่อนข้างน้อย การลด Bandgap เป็นความคาดหวังว่าจะเพิ่มประสิทธิภาพของปฏิกิริยาภายใต้การใช้งานโดยใช้แสงอาทิตย์ โดยนักทดลองพยายามที่จะเจือธาตุต่างๆเข้าไป อย่างเช่น N C S Ag เป็นต้น ในการคำนวณจะสามารถบอกได้ว่าธาตุใดชอบที่จะไปแทรกตัวอย่างไรในผลึก ภายใต้ภาวะการปลูกผลึกแบบต่างๆ และการไปแทรกตัวในแต่ละรูปแบบจะทำให้สาร TiO_2 ที่ได้มีสมบัติทางไฟฟ้าและแสงอย่างไร เป็นสมบัติที่คาดหวังหรือไม่ และ สามารถเทียบกับผลการทดลองวิเคราะห์ว่าตัวอย่างที่เตรียมได้นั้นสอดคล้องกับการที่สารเจือเข้าไปอยู่อย่างไรในผลึก นอกจากนั้น การคำนวณยังสามารถช่วยหาล่วงหน้าได้ว่าธาตุใดน่าจะมีสมบัติเหมาะสมที่สุด เพื่อเป็นแนวทางให้ดำเนินการทดลองต่อไป (2) การร่วมมือกับนักทดลองในการศึกษาโครงสร้างของผลึกที่ใช้เคลือบแว่นตานาโน [จาก สจล.ลาดกระบัง และศูนย์ฯซินโครตรอน] ที่เป็นนวัตกรรมสำหรับนิติวิทยาศาสตร์ โดยสารที่เคลือบคือ Indium Oxynitride (InON) โดยจากการทดลองพบว่าสามารถปรับย่านของแสงที่ส่งผ่านได้โดยการปรับส่วนประกอบของ O และ N นักทดลองจึงนำฟิล์มที่เคลือบด้วยองค์ประกอบ O ต่อ N ต่างๆกันมาวัดการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ (XAS) ได้สเปกตรัมการดูดกลืนที่แตกต่างกัน ซึ่งการคำนวณสามารถใช้อธิบายถึงโครงสร้างของผลึกนี้ ในระดับอะตอม เป็นการไขปัญหาเชิงลึกให้เข้าใจโครงสร้างพื้นฐานเพื่อเป็นข้อมูลในการพัฒนาสารกลุ่มนี้ต่อไป (3) การศึกษาสารสำหรับเก็บไฮโดรเจน (Hydrogen storage) เพื่อใช้ในเซลล์เชื้อเพลิง โดยร่วมมือกับนักวิจัยจาก National Renewable Energy Laboratory (USA) ในการศึกษาสารแอมโมเนียบอเรน (NH_3BH_3) ซึ่งมีสัดส่วน H สูงถึง 75 at% หรือ 33% โดยมวล โดยคาดว่าการนำความรู้จากที่เคยศึกษาความบกพร่องในผลึกสารกึ่งตัวนำโดยเทคนิค First principles method ที่ได้ผลดี มาประยุกต์ใช้กับ NH_3BH_3 ซึ่งเป็น Molecular solid น่าจะได้ผลลัพท์ที่เป็นมุมมองใหม่ และ ทำให้ทราบว่าในธรรมชาติแล้วสารนี้น่าจะมีความบกพร่องชนิดใดบ้าง และ จะมีผลต่อการเก็บกัก ตลอดจนการนำ H ออกมาใช้อย่างไร

ดร.ชูกิจ มีผลงานวิจัยตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติที่มีค่า Journal Impact Factor (JIF) รวมแล้วกว่า 50 เรื่อง โดยมีค่าเฉลี่ยของ JIF ประมาณ 3.3 และ ผลงานดังกล่าวได้ถูกนำไปใช้ประโยชน์มีการอ้างถึงแล้วกว่า 800 ครั้ง มีค่า *h*-index = 19