การหาค่าศักย์แผนเดิมยังผลที่เหมาะสมที่สุดด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีแบบการแปรผัน

นาย ธวัชชัย ชัยสวัสดิ์

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2536

ISBN 974-583-012-7

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

019653
i17107313

VARIATIONAL PATH-INTEGRAL APPROACH TO OPTIMIZING THE EFFECTIVE CLASSICAL POTENTIALS

Mr. Tawatchai Chaisawat

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1993

ISBN 974-583-012-7

Thesis Title	Variational Path-Integral Approach to Optimizing the Effective Classical Potentials
By	Mr. Tawatchai Chaisawat
Department	Physics
Thesis Advisor	Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.

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

Thavorn Vajrabhaya ..... Dean of Graduate School

(Professor Thavorn Vajrabhaya, Ph.D.)

Thesis Committee

Ahpisit Ungkitchanukit ..... Chairman

(Ahpisit Ungkitchanukit Ph.D.)

Virulh Sayit ..... Thesis Advisor

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

Kitt Visoottiviseth ..... Member

(Associate Professor Kitt Visoottiviseth, Ph.D.)

Pisistha Ratanavararaksa ..... Member

(Assistant Professor Pisistha Ratanavararaksa, Ph.D.)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

นายธวัชชัย ชัยสวัสดิ์ : การหาค่าศักย์แผนเดิมยังผลที่เหมาะสมที่สุดด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีแบบการแปรผัน (VARIATIONAL PATH-INTEGRAL APPROACH TO OPTIMIZING THE EFFECTIVE CLASSICAL POTENTIALS) อ. ที่ปรึกษา : ศ.ดร. วิรุฬห์ สายคณิต, 120 หน้า. ISBN 974-583-012-7

จุดมุ่งหมายหลักของงานนี้ คือ การนำเสนอวิธีการประมาณค่า ศักย์แผนเดิมยังผล ด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีแบบการแปรผัน เพื่อการคำนวณหา ฟังก์ชันพาร์ทิชันทางควอนตัม ที่เหมาะสมที่สุดของระบบทางควอนตัมเชิงสถิติ งานนี้แสดงการพัฒนาอย่างเป็นระบบ ของวิธีการอินทิเกรตตามวิถีแบบการแปรผันตามแนวทางของฟายน์แมน อันเป็นวิธีที่จะนำไปสู่ผลลัพธ์ที่แม่นตรง เราพบว่า ด้วยวิธีการประมาณตามแบบของ ฟายน์แมน-โคลเนิร์ท เราสามารถได้รับผลลัพธ์ที่ดีพอควร ยิ่งไปกว่านั้น งานนี้ยังได้แสดงถึงการปรับปรุงวิธีของ ฟายน์แมน-โคลเนิร์ท เพื่อการเพิ่มความถูกต้องในการประมาณให้มากยิ่งขึ้น วิธีการที่นำเสนอเหล่านี้ เป็นการใช้ประโยชน์จาก หลักความไม่เท่ากันของเจนเซน-ไพร์เออร์ และการกระจายแบบคิวมิวแลนท์ การประยุกต์ที่น่าสนใจที่สุดถูกแสดงให้เห็น โดยการประยุกต์กับตัวสั่นแบบแอนฮาร์มอนิก ที่มีศักย์ในรูปแบบ $V(x) = x^2/2 + gx^4/4$ ซึ่งปรากฏว่า ได้ผลการประมาณที่นับว่าถูกต้องมากทีเดียว สำหรับทุกค่าคงตัวของการคู่ควบใด ๆ แม้ในขอบเขตอุณหภูมิต่ำก็ตาม

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต Nawatchai Chaisat

สาขาวิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา Virulh Sa-yakanit

ปีการศึกษา 2535 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

C125351 : MAJOR PHYSICS
KEY WORD: PATH INTEGRALS / VARIATIONAL METHOD / EFFECTIVE CLASSICAL POTENTIALS
TAWATCHAI CHAISAWAT : VARIATIONAL PATH-INTEGRAL APPROACH TO OPTIMIZING THE EFFECTIVE CLASSICAL POTENTIALS THESIS ADVISOR : PROF. VIRULH SA-YAKANIT, F.D. 120 PP. ISBN 974-583-012-7

The main purpose of this work is the presentation of the methods of approximating the effective classical potential for calculating an optimal quantum partition function of a quantum statistical mechanical system by path integrals. This shows the systematic development of the Feynman variational path integral as an approach to the exact result. We see that by means of the Feynman-Kleinert approximation, we can obtain a good result. Furthermore, this work also presents an improvement to Feynman-Kleinert method for increasing the accuracy of the approximation. These present methods make use of the Jensen-Peierls inequality and the cumulant expansion. The most interesting application is illustrated by application to the anharmonic oscillator with a potential $V(x) = x^2/2 + gx^4/4$ where it yields a quite accurate approximation for any coupling constant even in the low temperature limit.

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา	ฟิสิกส์	ลายมือชื่อนิสิต	Tawatchai Chaisawat
สาขาวิชา	ฟิสิกส์	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา	Virulh Sa-yakanit
ปีการศึกษา	2535	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	

ACKNOWLEDGMENTS

The author wishes to express his sincere thanks to Prof. Virulh Sa-yakanit for his continuous encouragement, guidance and help during the course of his work as thesis advisor. The author also wishes to express his thanks to Assoc. Prof. Jong-orn Berananda and Assoc. Prof. Wichit Sritrakool for their many helpful suggestions.

Thanks also to Dr. David Ruffolo for his patient corrections of the English usage. It goes without saying to the thesis committee, Dr. Ahpisit Ungkitchanukit, Assoc. Prof. Kitt Visoottiviseth and Asst. Prof. Pisistha Ratanavararaksa for their reading and criticizing the manuscript. Special thanks are due to Mr. Peerapol Prasertsil for their assistance in typing all of this thesis.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

TABLE OF CONTENTS

Page

ABSTRACT IN ENGLISH iv

ABSTRACT IN THAI v

ACKNOWLEDGMENTS vi

LIST OF FIGURES ix

LIST OF TABLES x

INTRODUCTION AND SCOPE OF THESIS 1

CHAPTER I USEFUL FUNDAMENTAL CONCEPTS 3

Motion in Classical Mechanics 3

Time Displacement Operator 6

Propagator as the Time Displacement Amplitude 9

The Partition Function 11

CHAPTER II FEYNMAN PATH INTEGRALS 15

Path Integral Representation 15

Exact Solution for the Free Particle 23

Exact Solution for the Harmonic Oscillator 32

Path Integrals with the External source 38

Time Displacement Amplitude with a Source Term 45

CHAPTER III PATH INTEGRAL IN QUANTUM STATISTICS .. 48

Path Integral Approach 48

The Density Matrix 50

Quantum Statistics of Harmonic Oscillator 58

CHAPTER IV EARLIER APPROXIMATIONS TO STATISTICAL PATH INTEGRALS.....67

Approximation in Classical Limit 67

Approximation with Quantum Correction 69

Feynman Variational Approximation 71

CHAPTER V SYSTEMATIC IMPROVING FEYNMAN VARIATIONAL METHOD.....79

Functional in Fourier Space 79

The Effective Classical Potential 81

Feynman-Kleinert Variational Approach 84

Optimizing the Trial Partition Function 90

Application to Anharmonic Oscillator 94

Application to Double-well Potential 95

New Improvement to Variational Approximation 96

CHAPTER VI DETAILED DISCUSSION AND CONCLUSION *101*

REFERENCES 113

APPENDIX 115

CURRICULUM VITAE 120

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF FIGURES

Page

Fig. 2.1 The zigzag path of propagation of a particle..... *21*

Fig. 3.1 Geometric illustration of the eigenvalues of the fluctuation matrix..... *59*

Fig. 6.1 Comparison of free energy F_1 of the anharmonic oscillator with F_{ex}, F_{cl} and F_0..... *103*

Fig. 6.2 The effective potential for double-well potential at $T = 0$ and $T = \infty$..... *106*

Fig. 6.3 Comparison of free energy F_1 of the double-well with F_{ex}, F_{cl} and F_0..... *107*

Fig. 6.4 Comparison of approximation $W_1(x_0)$ with the exact one..... *108*

Fig. 6.5 Comparison of Z_1, Z_3 and Z_{ex}..... *109*

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF TABLES

Page

Table 4.1 Simple numerical comparison of free energies calculated by different methods *77*

Table 6.1 Comparison of the variational energy E_1 with the exact ground state energy E_{ex}^0 ..... *105*

Table 6.2 Comparison of Z_1, Z_2 and Z_3 ..... *110*

Table 6.3 Comparison of the ground state energy E_3^0, E_{ex}^0, E_1^0 and E_2^0 ..... *111*

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย