

การหามวลยังผลอีกแบบหนึ่งของโพลาโรน

นายกอบชัย ดายนะสานติ



สถาบันวิทยบริการ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2539

ISBN 974-636-799-4

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ALTERNATIVE DERIVATION OF THE EFFECTIVE MASS OF THE POLARON

Mr. Kobchai Tayanasanti



A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science in Physics

Department of Physics

Graduate School


Chulalongkorn University

Academic Year 1996

ISBN 974-636-799-4

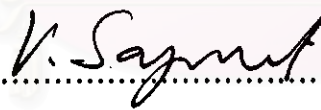
Thesis Title Alternative Derivation of the effective mass of the Polaron
By Mr. Kobchai Tayanasanti
Department Physics
Thesis Advisor Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.

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

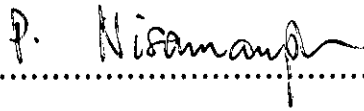

..... Dean of Graduate School
(Professor Supawat Chutivongse, M.D.)

Thesis Committee


..... Chairman
(Associate Professor Mayuree Netrapit, Ph.D.)


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


..... Member
(Associate Professor Wichit Srirakool, Ph.D.)


..... Member
(Pornthep Nisamanepong, Ph.D.)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสี่เหลี่ยมนี้เพียงแผ่นเดียว

นายกอบชัย ดาชนะตานติ : การหามวลยังผลอีกแบบหนึ่งของโพลาารอน (ALTERNATIVE DERIVATION OF THE EFFECTIVE MASS OF THE POLALRON)

อาจารย์ที่ปรึกษา ศาสตราจารย์ ดร. วิรุฬห์ สายกษิต, 75 หน้า. ISBN 974-636-799-4

มวลยังผลของโพลาารอนโดยวิธีอินทิเกรตตามวิถีถูกเสนอเป็นครั้งแรกโดยฟายน์แมน โดยแสดงให้เห็นว่าพลังงานที่สถานะพื้นและมวลยังผล m_F สามารถหาได้จากฟังก์ชันแบ่งส่วน และโดยฟังก์ชันแบ่งส่วนนี้ใคร่โวกลาซและเพการได้เสนอนิยามที่สอดคล้องของมวลยังผลซึ่งให้มวล m_F และ m_{KP} ศ.ดร. วิรุฬห์ สายกษิตได้แสดงให้เห็นว่ามวลของฟายน์แมนและของใคร่โวกลาซและเพการ สามารถหาได้จากเมทริกซ์ความหนาแน่นที่อยู่ในรูปตัวแทนของการอินทิเกรตตามวิถี ในวิทยานิพนธ์นี้ได้เสนอนิยามที่สอดคล้องของมวลยังผลซึ่งให้มวล m_F และ m_{KP} มีค่าเท่ากัน ได้แสดงให้เห็นว่าฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากเมทริกซ์ความหนาแน่นควรจะถูกลงเอนได้ และได้แสดงการเปรียบเทียบผลที่ได้กับผลงานล่าสุดของแวงและคณะด้วย



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา.....ฟิสิกส์
สาขาวิชา.....ฟิสิกส์
ปีการศึกษา.....2539

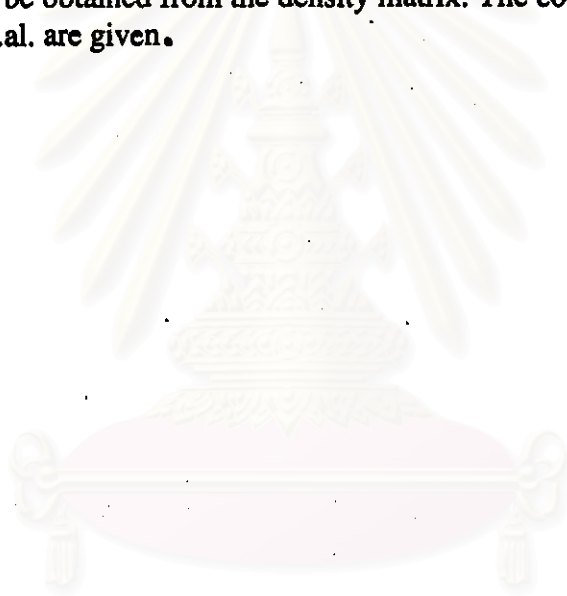
ลายมือชื่อนิติ.....อนุช อนุชานนท์
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....วิรุฬห์
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษารวม.....-

C725744 : MAJOR PHYSICS
KEY WORD: POLARON/ EFFECTIVE MASS/ PATHINTEGRALS/ GROUND STATE ENERGY/ PHONON

KOBCHAI TAYANASANTI: ALTERNATIVE DERIVATION OF THE EFFECTIVE MASS OF THE POLARON.

THESIS ADVISOR : PROFESSOR VIRULH SA-YAKANIT, F.D. 75PP. ISBN 974-636-799-4.

The polaron effective mass using the path integral approach was first introduced by Feynman. He has shown that from the partition function, he obtained the ground state energy and the effective mass m_F of the polaron. By using the partition function, Krivoglaz and Pekar proposed another definition of the effective mass m_{KP} . Sa-yakanit has shown that using the density matrix in Feynman's path integral representation, it is possible to obtain both Feynman's and Krivoglaz and Pekar's results. In this thesis we propose a consistent definition of effective mass that m_F and m_{KP} should be equal. We have shown that the wave functions obtained from the density matrix should be normalized. We have also shown that the dynamic mass of the polaron can be obtained from the density matrix. The comparison of our results with recent work by Wang et.al. are given.



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา..... ฟิสิกส์
สาขาวิชา..... ฟิสิกส์
ปีการศึกษา..... 2539

ลายมือชื่อนิสิค..... *Kobchai Tayanasanti*
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา..... *Virulh Sa-yakanit*
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....



ACKNOWLEDGEMENTS

The author would like to express his deep gratitude to his advisor Professor Virulh Sa-yakanit for his valuable advice, discussion and helps to this thesis. Thanks are also due to Associate Professor Jong-orn Berananda for warmly kindness. He is greatly indebted to Associated Professor Wichit Sritakool for his advice and computer preparation and to Dr. Pornthep Nisamaneepong for his warm suggestion, advice, discussion and helps.

He is grateful to Dr. Chaisingh Poo-rakkiat and Dr. Aphisit Ungkitchanukit for their suggestions. Special thanks go to Miss Sivinee Sawasdiaree, Mr. Udom Robkob, Mr. Varagorn Piputnchonlathee, Mr. Jessada Sukpitak and Mr. Porncharoen Palotaidumkerng for their suggestion and discussion.

Thanks also go without saying to thesis committee and Assoc. Prof. Mayuree Netnapiit for their reading and critizing the manuscript.

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

TABLE OF CONTENTS

	Page
ABSTRACT IN THAI.....	iv
ABSTRACT IN ENGLISH.....	v
ACKNOWLEDGEMENT.....	vi
LIST OF FIGURES.....	ix
LIST OF TABLES.....	x
CHAPTER I INTRODUCTION.....	1
CHAPTER II THE FROEHLICH HAMILTONIAN.....	8
CHAPTER III PATH INTEGRAL APPROACH TO THE FROEHLICH POLARON	
3.1 STATEMENT OF THE PROBLEM.....	19
3.2 VARIATIONAL APPROACH.....	20
3.3 THE TRIAL ACTION.....	23
3.4 EVALUATION OF ENERGY.....	23
3.5 THE EFFECTIVE MASS.....	26
CHAPTER IV THE POLARON DENSITY MATRIX	
4.1 THE FINITE TEMPERATURE POLARON ACTION.....	29
4.2 THE FINITE TEMPERATURE TRIAL ACTION.....	31

4.3 CONSTRUCTION OF THE GENERATING FUNCTIONAL.....	33
4.4 THE POLARON DENSITY MATRIX.....	38
CHAPTER V GROUND STATE OF THE POLARON	42
CHAPTER VI RESULTS, DISCUSSION AND CONCLUSION.....	52
REFERENCES.....	68
APPENDIX... ..	72
CURRICULUM VITAE.....	75



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF FIGURES

	Page
Figure 6.1 The polaron effective mass plotting versus the coupling constants.....	58
Figure 6.2 Relations between the polaron effective mass and its momentum plotting for various coupling constants.....	61
Figure 6.3 Relations between the energy and momentum of the polaron at various coupling constants.....	63
Figure 6.4 Total energy $E(Q)$ versus the total momentum Q of the electron and phonon with different coupling constants for $Q < 10$	65
Figure 6.5 The effective mass as a function of the total momentum with various coupling constants.....	65

LIST OF TABLES

	Page
Table 2.1 Summary of the methods applied to the polaron problem.....	17
Table 6.1 The variational parameters obtained from the minimization of the ground state energies and the effective mass was re-calculated.....	54
Table 6.2 The ground state energies and the effective masses of the polaron by the definition of Krivoglaz-Pekar and Feynman. The variational parameters obtained from minimizing the ground state energies.....	55
Table 6.3 Comparison of Feynman's energies, E_F with our results, E_{new} at various coupling constants.....	56
Table 6.4 Comparison of Feynman's mass, m_F with our results, m_{new} at various coupling constants.....	57