

แถบพลังงานส่วนข้างของตัวอสุติในผลึกโมเลกุลผสม เจือจาง



นาย คณศวรรี วรรณโชติ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

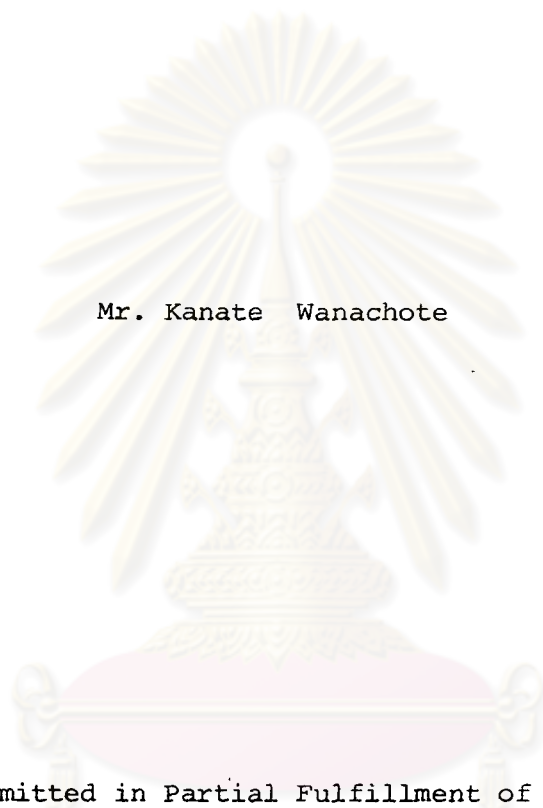
ภาควิชาฟิสิกส์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. ๒๕๖๔

IMPURITY SIDE BANDS IN DILUTE MIXED MOLECULAR CRYSTALS



Mr. Kanate Wanachote

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1981

หัวข้อวิทยานิพนธ์	แถบพลังงานส่วนข้างของตัวอสุทธีในผลึกโมเลกุลผสม เจือจาง
ชื่อ นิสิต	นาย คณศวร์ วรรณโชติ
ภาควิชา	ฟิสิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	Dr. I-Ming Tang
ปีการศึกษา	๒๕๖๓



บทคัดย่อ

การคำนวณจะเป็นการหาความกว้างของแถบพลังงานของตัวอสุทธีในผลึกไอโซโทปโมเลกุลผสม เจือจางระหว่าง $C_{10}H_8$ และ $C_{10}D_8$ สำหรับเซลล์เอเนอจีของอนุกรมโมโนเมอร์ เราแทนด้วย เศษส่วนต่อเนื่อง ซึ่งหาได้จากการเลือกผลบวกของอนุกรมของกราฟที่ผลของซิงกูลาริตีของสถานะโมโนเมอร์ อยู่บนแกนบวกจริงภายในช่วงตัด และการคำนวณความกว้างของแถบพลังงานก็ได้อาศัยค่า $C_{10}D_8$ โปรปาเกเตอร์จากสูตรและนำผลที่ได้ไปเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากโฮ เช่นกับจ็อด เนอร์

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Acknowledgements

The author wishes to express his appreciation to Dr. I-Ming Tang for his helpful and valuable suggestions throughout the course of this research.

He is grateful to Dr. I-Ming Tang for the assistance in correcting this English manuscript.

Sincere thanks are given to Miss Tasanee Viriyothai for her helping in correcting the FORTRAN IV program and also to Mr. Sagjuansak Suthipong for careful help on printing.



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

CONTENTS

	page
ABSTRACT	iv
ACKNOWLEDGEMENTS	vi
CONTENTS	vii
LIST OF TABLES	ix
LIST OF FIGURES	x
CHAPTER I INTRODUCTION	1
1.1 Approximation Methods	1
1.2 Methods for Approximating Green's Function $\langle G \rangle$	3
1.2.1 Virtual Crystal Approximation (VCA) ..	3
1.2.2 Average t-Matrix Approximation (ATA) .	4
1.2.3 The Coherent Potential Approximation (CPA)	5
1.2.4 Cumulant Expansion Method	7
1.2.5 Connection between Perturbation Expansion and Diagram Approach	8
CHAPTER II ISOTOPIC MIXED CRYSTALS	21
2.1 Elementary Excitation in Molecular Crystals .	21
2.1.1 Phonon Excitations	21
2.1.2 Excitons	21
2.1.3 High-frequency Excitons	22



2,2	Excitons	22
2.2.1	Wannier Excitons	23
2.2.2	Frenkel Excitons	24
2.2.3	Restricted Frenkel Excitons Limit	26
2.2.4	Exciton Band	26
2,3	Molecular Crystals	28
2,4	Naphthalene	30
2,5	Mixed Crystals	33
CHAPTER III	DIAGRAMMATIC INTERPRETATION OF MONOMER SERIES	35
3,1	Monomer Series Expansion	35
3,2	Modified Monomer Series of Self Energy	45
CHAPTER IV	RESULTS AND DISCUSSION	51
4,1	Results	51
4,2	Discussion	52
REFERENCES	66
APPENDIX	FLOW CHARTS & FORTRAN IV PROGRAM FOR SOLVING	
	$C_{10}D_8$ PROPAGATOR	68
VITA	70

LIST OF TABLES

Table	page
I Concentrations & $C_{10}D_8$ Propagator	54
II Concentrations & Energy Bandwidths	58
III Concentrations & Energy Bandwidths as Predicted by Hoshen and Jortner	62



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF FIGURES

Figure	page
2.1 Exciton States	23
2.2 Mott-Wannier Excitons	23
2.3 Schematic Representation of a Tightly Bound or Frenkel Excitons	25
2.4 Propagation of an Exciton in a One-dimensional Infinite Crystal	25
2.5 Scale of Approximate Conductivities	29
2.6a Benzene	30
2.6b Naphthalene	31
2.7 Structure of Naphthalene	31
2.8 Hybrid of Three Structures of Naphthalene	31
2.9 Axis Convection in Naphthalene Crystal	32
2.10 Monoclinic Unit Cell	32
2.11 Naphthalene-d ₈	34
3.1 Modified Monomer Series	46
3.2 Energy Bandwidths of Isotopic Mixed Molecular Crystals in Very Low Concentration	49

ศูนย์วิจัยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย