

ແບບພສງນານສ່ວນຂ້າງຂອງຕ້ວອສູທີໃນຜສຶກໂນເລກລົມສົມເຈືອຈາງ



นาย ณรงค์ วรณโชติ

วิทยานิพนธ์ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต

ภาควิชาฟลิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ପ୍ରକାଶକ ପତ୍ରିକା

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

Thesis Title Impurity Side Bands in Dilute Mixed Molecular
 Crystals

By Mr. Kanate Wanachote

Department Physics

Thesis Advisor Dr. I-Ming Tang

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University
in partial fulfillment of the requirements for the Master's degree.

S. Bunnag

..... Dean of Graduate School

(Associate Professor Supradit Bunnag, Ph.D.)

Thesis Committee

Virulh Sayakanit Chairman

(Professor Virulh Sayakanit, F.D.)

I-Ming Tang Member

(I-Ming Tang, Ph.D.)

Somphong Chatraphorn Member

(Assistant Professor Somphong Chatraphorn)

Pisitha Ratanavararaksa Member

(Assistant Professor Pisitha Ratanavararaksa, Ph.D.)

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

Thesis Title Impurity Side Bands in Dilute Mixed Molecular Crystals
By Mr. Kanate Wanachote
Department Physics
Thesis Advisor Dr. I-Ming Tang
Academic Year 1980

ABSTRACT

The bandwidths of the impurity band in isotopic mixed molecular crystals of $C_{10}H_8$ and $C_{10}D_8$ in the very low concentration limit is calculated. A continued fraction representation of the self energy of the monomer series is obtained by a selective summing of a series of graphs. The choice of graphs retained was guided by the desire that the singularities of the resulting monomer states lie on the real axis inside a cut. Using the $C_{10}D_8$ propagator given by Suporn, the width of the band is calculated and is compared with the CPA results of Hoshen and Jortner.

หัวขอวิทยานิพนธ์	แบบพัลส์งานล้วนข้างของศ้าวสุทธิในผสือกโนเมเลกุลสมเจือจาง
ชื่อนิติค	นาย ค เคนศวร์ วรรษพิชัย
ภาควิชา	พลิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	Dr. I-Ming Tang
ปีการศึกษา	๒๕๖๓



บพศดย่อ

:

การคำนวณจะ เป็นการหาความกว้างของแบบพัลส์งานของศ้าวสุทธิในผสือก ไอโซโทปโนเมเลกุลสมเจือจางระหว่าง $C_{10}^{H_8}$ และ $C_{10}^{D_8}$ สำหรับเข็ลฟ์เอเนอซี ของอนุกรมโนโนเมอร์ เรายังด้วย เศษล้วนต่อเนื่อง ซึ่งหาได้จากการเลือกผลบวกของ อุกกรมของกราฟที่ผลของชิงญาติ์ของสถานะโนโนเมอร์ อยู่บนแกนบวกจะริงภายในช่วงตัด และการคำนวณความกว้างของแบบพัลส์งานก็ได้อารียค่า $C_{10}^{D_8}$ โปรปาเกเตอร์จากสูตร และน้ำผลที่ได้ไปเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากไอโซ เช่นกับจัตต์ 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