พลังงานเสรีของอนุภาคที่รวมศักย์จุดอานม้าในสนามแม่เหล็ก

นาย สันติพงศ์ บริบาล

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2540

ISBN 974-638-711-1

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

FREE ENERGY OF A PARTICLE WITH SADDLE POINT POTENTIAL IN MAGNETIC FIELD

Mr. Santipong Boribarn

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 1997

ISBN 974-638-711-1

Thesis Title	Free Energy of A Particle with Saddle Point Potential in Magnetic Field
By	Mr. Santipong Boribarn
Department	Physics
Thesis Advisor	Professor Virulh Sa-yakanit, F. D.

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

.....Dean of Graduate School

(Professor Supawat Chutivongse, M.D.)

Thesis committee

.....Chairman

(Assistant Professor Pisistha Ratanavararaksa, Ph.D.)

.....Thesis Advisor

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

.....Member

(Associate Professor Kitt Visoottiviseth, Ph.D.)

.....Member

(Associate Professor Prapaipan Chantikul, Ph.D.)

.....Member

(Chaisingh Poo-Rakkiat, Ph.D.)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

สันติพงศ์ บริบาล : พลังงานเสรีของอนุภาคที่รวมศักย์จุดอานม้าในสนามแม่เหล็ก
(FREE ENERGY OF A PARTICLE WITH SADDLE POINT POTENTIAL IN
MAGNETIC FIELD) อ. ที่ปรึกษา : ศ. ดร. วิรุฬห์ สายคณิต ; 62 หน้า. ISBN 974-638-711-1.

พลังงานเสรีและฟังชันก์แบ่งส่วนของระบบของอนุภาคตัวหนึ่งที่รวมศักย์จุดอานม้าในสนามแม่เหล็กสามารถคำนวณได้อย่างแม่นตรงโดยใช้วิธีอินทิเกรตตามวิถีของฟายน์แมน วิธีนี้ใช้แก้ปัญหากรณีอนุภาคในสนามแม่เหล็กที่รวมศักย์แบบนอนโลคอลโดย Sa-yakanit, Choosiri และ Robkob (Phys. Rev. B. **37**, 1998) แนวคิดหลักที่คำนวณคือ ตัวแผ่กระจายด้วยแอกชัน $S = \int L dt$ โดย L คือ ลากรานเจียน $L = (m/2)\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \omega(x\dot{y} - y\dot{x}) - (\Omega_x^2 x^2 - \Omega_y^2 y^2)\right)$ ω คือ ความถี่ไซโคลตรอน และ Ω_x และ Ω_y คือ ความถี่ของศักย์จุดอานม้า การแปรผันของแอกชันทำให้ได้สมการการเคลื่อนที่คู่ควบสองสมการและเมื่อแก้ปัญหาจะได้แอกชันคลาสซิก S_{cl} ใช้สูตร แวน แฟล็ก-เพาลี เพื่อหาค่าพรีแฟกเตอร์ $F(\tau)$ ได้ตัวแผ่กระจายของระบบเป็น $K(r_b, r_a; \tau) = F(\tau)\exp(iS_{cl}/\hbar)$ ผลลัพธ์ที่ได้นี้สามารถลดทอนในกรณีลิมิตต่างๆ เช่น กรณีสนามแม่เหล็กเป็นศูนย์ $\omega = 0$ ตัวแผ่กระจายถูกลดทอนเป็นผลคูณของออสซิลเลเตอร์สองตัว ตัวที่หนึ่งเป็นศักย์ทั่วไปและตัวที่สองเป็นศักย์ผกผัน และสำหรับกรณีศักย์จุดอานม้าเป็นศูนย์ ตัวแผ่กระจายจะถูกลดทอนเป็นตัวแผ่กระจายในสนามแม่เหล็ก เนื่องจากความสัมพันธ์ระหว่างตัวแผ่กระจายและเมทริกซ์ความหนาแน่นได้ฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบโดยการหาเทรซของเมทริกซ์ความหนาแน่น พลังงานเสรีหาได้จาก $F = -\beta^{-1}\ln Z$ ได้แสดงผลการคำนวณของพลังงานเสรีในกรณีลิมิตต่างๆและแสดงด้วยรูปกราฟ

ภาควิชา	ฟิสิกส์	ลายมือชื่อนิสิต	สันติพงศ์ บริบาล
สาขาวิชา	ฟิสิกส์	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา	
ปีการศึกษา	2540	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	

C825543 : MAJOR PHYSICS
KEY WORD: FREE ENERGY / SADDLE POINT POTENTIAL / MAGNETIC FIELD

SANTIPONG BORIBARN: FREE ENERGY OF A PARTICLE WITH SADDLE POINT POTENTIAL IN MAGNETIC FIELD. THESIS ADVISOR : PROF. VIRULH SA-YAKANIT, Ph.D. 62pp. ISBN 974-638-711-1.

The free energy and the partition function of the system of a particle with saddle point potential in the presence of magnetic field are calculated exactly using the Feynman path integral method. The technique used for solving the problem is based on the method developed by Sa-yakanit, Choosiri and Robkob (Phys. Rev B. **37**, 1988) for a particle in the presence of magnetic field with non-local potential. The main idea is to calculate the propagator with the following action, $S = \int L dt$, where L is the Lagrangian $L = (m/2)\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \omega(x\dot{y} - y\dot{x}) - (\Omega_x^2 x^2 - \Omega_y^2 y^2)\right)$. Here ω is the cyclotron frequency and Ω_x and Ω_y are frequencies of the saddle point potential. The variation of the action leads to two coupled equations of motion which can be solved and lead to the classical action S_{cl}. The prefactor $F(\tau)$ is also obtained by using Van Vleck-Pauli formula, which gives the propagator of system as $K(r_b, r_a; \tau) = F(\tau)\exp(iS_{cl}/\hbar)$. This result can be reduced to several limit cases, i.e. $\omega = 0$, zero magnetic field. In this case the propagator is reduced to product of two oscillators with one as an inverse potential. For the case of zero saddle point potential, the propagator of a particle in magnetic field is obtained. Using relationship between the propagator and the density matrix, we can express the partition function of the system in terms of trace of density matrix. The free energy is obtained as $F = -\beta^{-1} \ln Z$. Calculated results for free energy with different limiting cases are presented in the graphic forms.

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต สันติพงศ์ บริบาล

สาขาวิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา วิฐูรย์ สาระยานนท์

ปีการศึกษา 2540 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

ACKNOWLEDGEMENTS

Acknowledgements are made to the following contributions:

Professor Dr. Virulh Sa-yakanit, thesis advisor who suggested the problem treated in the thesis, for his advice, guidance and encouragement, and invaluable discussions throughout development, and for his resource facilities.

Associate Professor Dr. Chaiyute Thunpithayakul for warmly kindness and Associate Professor Dr. Wichit Sritrakool for his advice and computer system.

Assistant Professor Dr. Pisistha Ratanavararaksa, Associate Professor Dr. Kitt Visoottiviseth, Associate Professor Dr. Prapaipan Chantikul, and especially Dr. Chaisingh Poo-Rakkiat for their efforts in reading, and made the thesis complete.

Members of the Forum Theoretical Sciences, Mr. Chanin Churrahman, Mr. Porncharoen Palotaidumkaeng, Mr. Kobchai Tayanasanti, etc. for their encouragement and shared experiences .

Special thanks went to parents for their love and attention,
and Miss Chutiporn Eamoraphan for her willpower.

TABLE OF CONTENTS

Abstract in Thai iv

Abstract in English v

Acknowledgements vi

Table of Contents vii

List of Figures ix

Chapter

1 Introduction and Scope of the Thesis 1

2 Statistical Mechanics 4

2.1 The Partition Function 4

2.2 Density Matrices 6

3 Path Integral 11

3.1 Introduction 11

3.2 Events in Succession 15

3.3 Relation with Wave Function 16

3.4 Exact Solution 17

3.5 Relation with Thermodynamics 20

4 A Particle with Saddle Point Potential 21

4.1 The Lagrangian 21

4.2 Kernel of The Particle with SPP 22

4.3 The Partition Function and Free Energy of a particle with SPP . 26

4.4 Calculated Results 28

5 Partition Function and Free Energy of A Particle with SPP in Magnetic Field 31
5.1 The Lagrangian 32
5.2 Kernel of The Particle with SPP in Magnetic Field 32
5.3 The Partition Function and Free Energy of The Particle with SPP in Magnetic Field 38
5.4 Calculated Results 39

6 Conclusion 49

References 50
Curriculum Vitae 52

LIST OF FIGURES

3.1 The sum over paths is defined as a limit, in which at first the path is specified by giving only its coordinate x at a large number of specified times separated by very small intervals ϵ. The path sum is then an integral over all these specific coordinates. Then to achieve the correct measure, the limit is taken as ϵ approach 0. 14

4.1 The HP when $m = 1, \Omega_x = 2$ and $\Omega_y = 3i$ 23

4.2 The SPP when $m = 1, \Omega_x = 2$ and $\Omega_y = 3$ 24

4.3 The free energy of the particle with HP when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$ and $\Omega_y = 3i$ 29

4.4 The free energy of the particle with SPP when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$ and $\Omega_y = 3$ 30

5.1 The free energy of the particle with HP when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$, $\Omega_y = 3i$ and $\omega = 0$ 41

5.2 The free energy of the particle with SPP when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$, $\Omega_y = 3$ and $\omega = 0$ 42

5.3 The free energy of the particle in magnetic field when $m = 1$, $\hbar = 1$, $\Omega_x = 0$, $\Omega_y = 0$ and $\omega = 2$ 43

5.4 The free energy of the particle with SPP in the magnetic field when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$, $\Omega_y = 3$, and $\omega = 2$ 44
5.5 The free energy of the particle with SPP in the magnetic field when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$, $\Omega_y = 3$, and $\omega = 6$ 45
5.6 The free energy of the particle with SPP in the magnetic field when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$, $\Omega_y = 3$, and $\omega = 10$ 46
5.7 The free energy of the particle with SPP in the magnetic field when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$, $\Omega_y = 3$, and $\omega = 100$ 47
5.8 The free energy of the particle with SPP in the magnetic field when $\hbar = 1$, $\Omega_x = 2$, $\Omega_y = 3$, and $\omega = 1000$ 48