# ทฤษฎีการอินทิเกรทตามเส้นทางของโพลารอน

นางสาว มยุรี เนตรนภิส

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
แผนกวิชา ฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณมหาวิทยาลัย
พ.ศ. ๒๕๑๖

002332

i 16991096

# PATH INTEGRAL THEORY OF POLARONS

Miss Mayuree Natenapit

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1973

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in partial fulfillment of the requirements for the Degree of Master of Science .

B. Tamthai

.....

Dean of the Graduate School

Thesis Committee ..... Chairman

.....

.....

.....

Thesis Supervisor Dr. Preedeeporn Limcharoen

Dr. Virulh Samathiyakanit

Thesis Title Path Integral Theory of Polarons
Name Miss Mayuree Natenapit
Department Physics
Academic Year 1972

## ABSTRACT

The path integral theory has been applied to the Fröhlich idealized polaron model in order to evaluate the polaron energy. The plan of the investigation is first to average out the contributions from the phonons and to pay particular attention on the electron alone. Then the polaron is described by the action with the phonon effect taken into account in the form of a time dependent coulomb potential. The more appropriate trial action, with the potential energy varied by means of the adjustable parameters, is supposed, and then the variational method is applied in the evaluation of the polaron energy.

The original formulation given by Feynman for the polaron at absolute zero temperature involved two parameters. This has recently been improved by Abe and Okamoto with the introduction of two more parameters. A reformulation of the Feynman theory applicable to the case of finite temperatures has been performed by Osaka using a model Lagrangian. In the present research, an attempt has been made to improve this theory so as to be an extension of Abe and Okamoto's theory to the case of finite temperatures by using four parameters.

The detailed evaluation of the polaron energy in various cases and situations, the results, a theoretical discussion, and some recommendations for future investigations are presented in this thesis.

หัวข้อวิทยานิพนธ์ ทฤษฎีการอินทิเกรทตามเส้นทางของโพลารอน
ชื่อ นางสาว มยุรี เนตรนภิส แผนกวิชา ฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2515

## บทคัดย่อ

ทฤษฎีการอินทิเกรทตามเส้นทางได้ถูกนำไปประยุกต์กับโพลารอนในทัศนะของฟรอห์ลิช เพื่อการคำนวณพลังงาน แผนดำเนินการวิจัยขั้นแรก คือ เฉลี่ยส่วนของที่มาจากโฟนอนออกเสียก่อน แล้วมุ่งสนใจที่อิเล็คตรอนเท่านั้น ดังนั้น จึงอธิบายโพลารอนได้ด้วยแอ็คชั่น ซึ่งซ่อนอิทธิพลของโฟนอนไว้ในรูปพลังงานศักยะคูลอมบ์ที่ขึ้นกับเวลา แล้วสมมุติแอ็คชั่นในรูปที่เหมาะสมกว่า ซึ่งแปรค่าพลังงานศักยะได้ด้วยพารามิเตอร์ต่างๆ หลังจากนั้น ใช้วิธีแวริเอชั่นหาค่าพลังงานของโพลารอนออกมา

วิธีการนี้ เริ่มบัญญัติโดยฟายน์แมน ซึ่งใช้ได้สำหรับโพลารอนที่อุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์ โดยใช้พารามิเตอร์สองตัว เมื่อเร็วๆนี้ แอ็บบี้และโอคาโมโต้ได้ปรับปรุงทฤษฎีนี้โดยเพิ่มพารามิเตอร์อีกสองตัว การปฏิรูปทฤษฎีของฟายน์แมนให้ใช้ได้กับโพลารอนที่อุณหภูมิปกติ ทำได้โดยใช้ลากรางเจียนแบบของโอซากา ในการวิจัยครั้งนี้ ได้พยายามปรับปรุงทฤษฎีนี้ต่อไปโดยใช้พารามิเตอร์สี่ตัว ซึ่งเท่ากับเป็นการขยายทฤษฎีของแอ็บบี้และโอคาโมโต้ไปสู่กรณีที่ใช้ได้กับอุณหภูมิปกติด้วย

รายละเอียดของการคำนวณพลังงานของโพลารอน ในกรณีและสภาวะต่างๆ ผลการคำนวณ ข้อสรุปทางทฤษฎี และข้อเสนอแนะบางประการสำหรับการวิจัยต่อไป ได้เสนอไว้ในวิทยานิพนธ์นี้

# ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express her deep gratitude to Dr. Virulh Samathiyakanit for his valuable suggestions and expert guidance through a number of problems throughout the course of this research.

She is grateful to Dr. Preedeeporn Limcharoen for his interest , valuable suggestions, discussions, and helps in the writing this thesis.

She appreciates the general assistance and encouragement given her by Dr. Wijit Senghaphan and Dr. Kopr Kritayakirana. Sincere thanks are due to Miss Prapaipan Thaveesomboon, the students in the Department of Chemistry, Mahidol University, and many other friends for their helps in various ways.

The author wishes to acknowledge the kind support of the University Development Commission, National Education Council, in providing the graduate scholarship.

CONTENTS


| | | Page |
|---|---|---|
| ABSTRACTS | | iii |
| ACKNOWLEDGEMENTS | | v |
| LIST OF TABLES | | viii |
| LIST OF ILLUSTRATIONS | | ix |
| CHAPTER I | INTRODUCTION | 1 |
| | I.1 The Polaron Problem | 1 |
| | I.2 Outline of the Thesis | 5 |
| | I.3 Lagrangian of the System | 7 |
| II | QUALITATIVE SURVEY | 14 |
| | II.1 Feynman Path Integral | 14 |
| | II.2 Forced Harmonic Oscillator Propagator | 18 |
| | II.3 Density Matrix | 25 |
| III | FEYNMAN PATH INTEGRAL APPROACH TO THE POLARON AT ABSOLUTE ZERO TEMPERATURE | 28 |
| | III.1 Elimination of the Field Coordinates | 28 |
| | III.2 Variational Principle | 36 |
| | III.3 Ground State Energy | 38 |
| IV | AN IMPROVEMENT OF THE FEYNMAN ACTION | 46 |
| | IV.1 The Trial Action | 47 |
| | IV.2 Ground State Energy | 47 |
| V | THE POLARON AT FINITE TEMPERATURES | 60 |
| | V.1 The Polaron Action | 60 |
| | V.2 Model Lagrangian | 64 |
| | V.3 Evaluation of the Polaron Energy | 68 |

CHAPTER VI AN IMPROVEMENT OF THE POLARON THEORY AT FINITE TEMPERATURES..... 76

VI.1 Statement of the Problem..... 76

VI.2 The New Trial Action..... 77

VI.3 Evaluation of the Polaron Energy.. 78

VII DISCUSSION..... 100

VII.1 Conclusions..... 100

VII.2 Comparison of Results..... 109

VII.3 Recommendations..... 113

REFERENCES..... 117

VITA..... 120

# LIST OF TABLES

TABLE Page

1. Feynman's parameters and comparison of ground state energies.....110

2. Improved Feynman's parameters and comparison of ground state energies..... 110

# LIST OF ILLUSTRATIONS

Figure Page

1. The frequency dependence of the dielectric constant 12
2. Dispersion curves of lattice vibrations.....12
3. The construction of the path integral.....17
4. The physical picture of Feynman's potential.....48
5. The physical picture of Abe and Okamoto'spotential..48
6. The two and three coupled particle models.....48
7. Polaron ground state energy.....111
8. Polaron self energy and average energy for $\alpha=3$.....111