

PATH INTEGRAL THEORY
OF THE
EFFECTIVE MASS OF POLARONS

Miss Orapin Wipasuramonton

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1974

ทฤษฎีการอินทิเกรตตามเส้นทางของมวลเอฟเฟกทีฟของโพลารอน



นางสาวอรพินท์ วิชาสุรเมณฑล

006399

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

แผนกวิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

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



B. Tamthas
.....

Dean of the Graduate School

Thesis Committee *Korn Kitayakiri* Chairman
..... *A. Petch*
..... *Wijit Suthaporn*
..... *Preechawan Rinchon*

Thesis Supervisors Dr. Virulh Samathiyakanit

Dr. Anantasin Tehchakumpucha

Thesis Title Path Integral Theory of the Effective Mass of Polarons
Name Miss Orapin Wipasuramonton
Department Physics
Academic Year 1973



ABSTRACT

The Feynman's path integral variational calculation of the polaron self-energy is extended to obtain the polaron effective mass at considerably low temperatures. The effective mass is defined from the kinetic off-diagonal part of the density matrix.

An attempt is made to evaluate the full expression of the density matrix. The explicit result is given in terms of a two-particle model system with two variable parameters. The optimal choice of these parameters has already been found by Feynman and Schultz.

The polaron effective mass for two limiting analytical cases, small and large electron-phonon coupling strength, has been carried out and compared with those obtained previously by another definition which defines the effective mass from the partition function. The implicit physical ideas in each definition have also been discussed in this research.

หัวข้อวิทยานิพนธ์ ทฤษฎีการอินทิเกรตตามเส้นทางของมวลเอฟเฟคทีฟของโพลารอน
ชื่อ นางสาว อรพินท์ วิชาสุรมณฑล แผนกวิชา ฟิสิกส์
ปีการศึกษา ๒๕๑๖

บทคัดย่อ

วิธีการคำนวณพลังงานของโพลารอนโดยใช้หลักการอินทิเกรตตามเส้นทางของพายน์แมนได้ถูกขยายต่อ เพื่อหาค่ามวลเอฟเฟคทีฟของโพลารอนที่อุณหภูมิค่าต่างๆ มวลเอฟเฟคทีฟในที่นี้ นิยามจากส่วนพลังงานจลน์ออฟโคอะ โคนอดของเคนซิคีแมทริกซ์

ได้พยายามคำนวณเอกเปรสชันของเคนซิคีแมทริกซ์ ผลชัดเจนเขียนได้ในเทอมของระบบสองอนุภาคซึ่งประกอบด้วยพารามิเตอร์แปรค่าได้ ๒ ตัว การเลือกค่าพารามิเตอร์ที่ดีที่สุดได้ทำไว้แล้ว โดยพายน์แมนและชูลทซ์

มวลเอฟเฟคทีฟของโพลารอนสำหรับกรณีจำกัด ๒ กรณีคือ เมื่อแรงกระทำระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟนอนมีค่ามากๆและน้อยมาก ได้ถูกคำนวณและเปรียบกับค่าที่หาได้ก่อนหน้านี้โดยใช้คำนิยามอีกอย่างหนึ่งซึ่งนิยามมวลเอฟเฟคทีฟจากพาร์ทิชันฟังก์ชัน ความหมายลึกซึ้งที่ซ่อนอยู่เบื้องหลังแต่ละคำนิยามได้ตีความไว้แล้วเช่นกันในงานวิจัยนี้



ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express her sincere appreciation to Dr. Virulh Samthiyakanit for his helpful and valuable suggestions, the encouragement and the patience he has shown throughout this research.

She is grateful to Dr. Wijit Senghaphan, Dr. Kopr Kritayakirana and Dr. Preedeepon Limcharoen for occasional stimulating discussions and general assistance.

The author would like to acknowledge Dr. Anantasin Tehchakumpucha in acting as a co-preceptor.

Sincere thanks are also given to Miss Mayuree Natenapit, the students in the Department of Chemistry, Mahidol University and other colleagues at Chulalongkorn University for their various helps.

Finally, she would like to acknowledge the kind support of the University Development Commission, National Education Council, in providing a graduate scholarship.

CONTENTS

	Page
ABSTRACT	iii
ACKNOWLEDGEMENTS	iv
LIST OF ILLUSTRATIONS	vii
CHAPTER I INTRODUCTION	1
I.1 The Polaron Problem	1
I.2 Classical Lagrangian and Hamiltonian of the System	5
I.3 Quantitative Theories of Polarons	11
(I.3.1) Self-energy	11
(I.3.2) Effective mass	15
II FEYNMAN PATH INTEGRAL FORMULATION OF QUANTUM MECHANICS	18
II.1 Feynman Propagator	18
II.2 Forced Harmonic Oscillator Propagator ...	23
II.3 Density Matrix	28
III FEYNMAN PATH-INTEGRAL APPROACH TO THE POLARON AT ABSOLUTE ZERO TEMPERATURE	29
III.1 The Polaron Action	29
III.2 Evaluation of the Ground State Energy ...	35
III.3 Evaluation of the Effective Mass	49

CHAPTER IV	VARIOUS APPROACHES TO THE POLARON EFFECTIVE MASS...	53
IV.1	Schultz's Approximation	53
IV.2	Marshall-Chawla Method	62
IV.3	The Polaron Action at Finite Temperatures ...	66
IV.4	Krivoglaz-Pekar Approach	70
IV.5	Hellwarth-Platzman Method	76
V	THE POLARON EFFECTIVE MASS AT LOW TEMPERATURES, DENSITY MATRIX APPROACH	82
V.1	The Statement of the Problem	83
V.2	The Two-Particle Model Lagrangian	85
V.3	Evaluation of the Quantities $\langle \bar{\psi}(t) \rangle$ and $\langle \bar{\psi}(0) \rangle$..	87
V.4	Evaluation of the Polaron Effective Mass	92
VI	DISCUSSION	103
VI.1	Comparison of Results	103
VI.2	Conclusions	112
VI.3	Recommendations	121
REFERENCES	125
VITA	129



LISTS OF ILLUSTRATIONS

Figure	Page
I. The Field Produced by the Electron in the Static Case	14
II. Construction of the Path Integral	22
III. Comparison of the Polaron Effective Mass as a Function of the Coupling Constant Approached by Various Methods	81
IV. The Two Coupled Particle Model	102
V. The Three Coupled Particle Model	102