

Das Polaron in Pfadintegral-Darstellung

Daniel Wigger

19.05.2010

1 Einleitung

Das Polaron ist ein Quasiteilchen in der Festkörperphysik. Es besteht aus einem Elektron, das sich durch einen Kristall mit ionischem Bindungsanteil bewegt und dabei eine Polarisation des Gitters mit sich trägt. Das Elektron ist also von einer Phonon-Wolke umgeben, hierbei handelt es sich im wesentlichen um optische Phononen, bei denen verschiedene Atome gegenphasig schwingen, denn die positiv geladenen Gitteratome werden vom Elektron angezogen, die negativ geladenen dagegen werden abgestoßen.

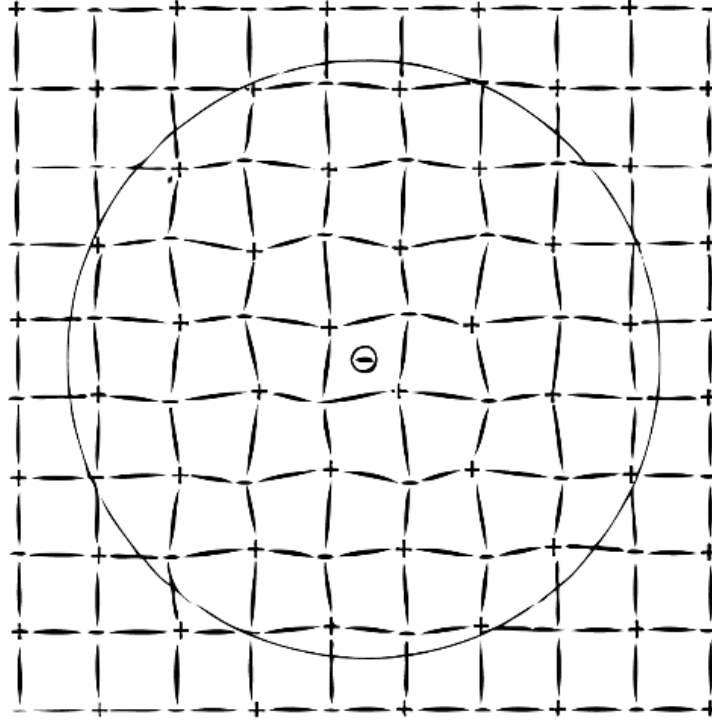


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines Polarons: Das Elektron trägt eine Verzerrung der Gitters mit sich.

Jedes Gitteratom einzeln betrachtet führt, nachdem es nicht mehr unter dem direkten Einfluss des Elektrons steht, harmonische Schwingungen aus. Betrachtet man die Dispersionsrelation der optischen Phononen, so ist diese für kleine Wellenlängen ω annähernd konstant und es reicht aus, nur eine Phononmode zu betrachten.

In der Fockdarstellung ist der Hamiltonoperator für die Kopplung zwischen Elektron und Phonon gegeben als:

$$H_{ep} = \sum_{k,q} \alpha_{k,q} c_{k+q}^+ (b_q + b_{-q}^+) c_k$$

$$\Rightarrow H_{ep} = \sum_{k,q} [\alpha_{k,q} c_{k+q}^+ b_q c_k + \alpha_{k,q}^* c_k^+ b_q^+ c_{k+q}]$$

Dabei sind c, c^+ die Vernichter und Erzeuger der Elektronen und b, b^+ die der Phononen,

$$\alpha_{k,q} = \sqrt{\frac{e^2 \hbar \omega_{LO}}{2 \varepsilon_0}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right)$$

stellt das Fröhlich-Kopplungselement dar. Dieses lässt sich im Wesentlichen aus der statischen ϵ_s und der Hochfrequenz-Dielektrizitätskonstante ϵ_∞ berechnen. Aus der zweiten Gleichung kann man nun direkt ablesen, welche Prozesse bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in dieser Betrachtung möglich sind.

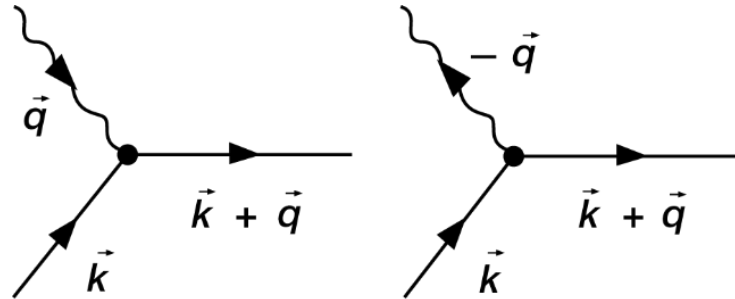


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung: Ein Elektron kann ein Phonon absorbieren und dessen Impuls aufnehmen, oder ein Phonon anregen und dabei an Impuls verlieren.

Zum einen kann ein Elektron ein Phonon absorbieren und dabei dessen Impuls aufnehmen, zum anderen kann das Elektron spontan ein Phonon anregen und muss dabei den Impuls des erzeugten Phonons verlieren.

Beim Polaron finden nun beide Prozesse nacheinander statt, was durch folgendes Bild veranschaulicht wird:

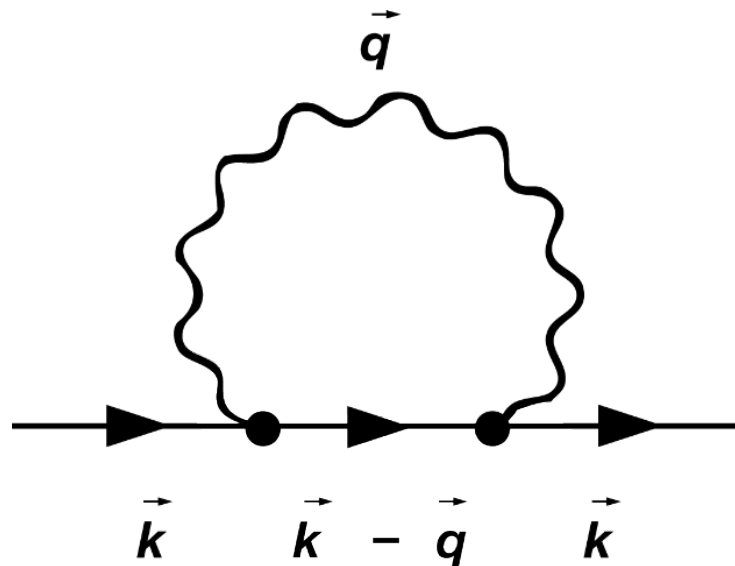


Abbildung 3: Schematische Darstellung des Polaron-Prozesses: Ein Elektron ein Phonon an, an das es selbst wieder koppelt.

1.1 Motivation des Kopplungsterms

Die vom Elektron erzeugten Gitterschwingungen erzeugen eine Polarisation des Mediums, an die das Elektron wieder rückwirkend koppeln kann. Das Elektron bewegt sich damit in einem Potential, welches durch die Laplace-Gleichung mit der Polarisation \vec{P} des Kristalls wie folgt verknüpft ist:

$$\vec{\nabla}^2 V(x) = -e \vec{\nabla} \vec{P}(x)$$

Dabei ist die Polarisation gegeben als Fourierentwicklung:

$$\vec{P}(x) = - \left(\sqrt{2\pi\alpha} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar^5 \omega^3}{m} \right)^{1/4} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_{i=1}^3 \left[a_i(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}} \vec{e}_i + a_i^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{e}_i \right]$$

Wobei die Fourierkoeffizienten a_i und a_i^* nach der Quantisierung in die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren b und b^+ der Phononen übergehen. Die Polarisationsvektoren \vec{e}_i bilden eine Orthonormalbasis.

Um nun das Potential zu bestimmen muss die Polarisation abgeleitet werden, was Terme $\sim \vec{k} \vec{e}_i$ ergibt. Diese sind nur für Vektoren $\vec{k} \parallel \vec{e}_i$ von Null verschieden. Dadurch bleiben von der Summe lediglich die longitudinalen Phononmoden übrig.

Aus der Laplace-Gleichung ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}^2 V(x) &\sim \vec{\nabla} \vec{P} \sim \vec{k} \cdot \left[a_i(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}} \vec{e}_i - a_i^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{e}_i \right] \\ \Rightarrow V &\sim \frac{1}{k} \cdot \left[a_i(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}} \vec{e}_i + a_i^*(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{e}_i \right] \end{aligned}$$

Damit erhält man den von Fröhlich eingeführten Hamiltonoperator für das gesamte Elektron-Phonon-System:

$$H = \frac{p^2}{2} + \sum_k a_k^+ a_k + \frac{i (\sqrt{2\pi\alpha})^{1/2}}{L^3} \sum_k \frac{1}{k} \left[b_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{x}} + b_k e^{i\vec{k}\vec{x}} \right]$$

Dabei wurde angenommen, dass $\hbar = m = \omega = 1$ sind.

Geht man nun auch für die Phononen zu Ortskoordinaten über, indem man die Definitionen der c, c^+, b, b^+ einsetzt, so erhält man folgende Lagrangefunktion:

$$L = \underbrace{\frac{1}{2} \dot{x}^2}_e + \underbrace{\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} (\dot{q}_k^2 + q_k^2)}_{ph} + \underbrace{\sqrt{2\sqrt{2\pi\alpha}} \frac{1}{k} q_k e^{i\vec{k}\vec{x}}}_{ep}$$

x - Ort Elektron q - Ort Phonon

Sie besteht aus einem reinen Elektronen-Anteil (e), einem reinen Phononen-Anteil (ph) und dem zuvor motivierten Wechselwirkungsanteil (ep) Nach einem Übergang ins Kontinuierliche findet man dann für die Wirkung:

$$S = \int dt \left[\frac{1}{2} \dot{\vec{r}}^2(t) + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{2} (\dot{q}^2(t, k) + q^2(t, k)) + \sqrt{2\sqrt{2\pi\alpha}} \frac{1}{k} q(t, k) e^{i\vec{k}\vec{x}(t)} \right) \right]$$

Der Anteil der Phononen entspricht einem getriebenen Oszillator, später wird die Lösung dieses Systems ohne weitere Berechnung angegeben und weiter verwendet.

2 Feynman Variationsprinzip

Das Pfadintegral lässt sich mit $t = -i\tau$ als euklidisches Pfadintegral wie folgt darstellen:

$$\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S} = \text{Sp}(e^{-H\tau})$$

Dies folgt aus Betrachtungen von Erwartungswerten bei großen Zeiten und tiefen Temperaturen.

Wir betrachten die Amplitude:

$$\begin{aligned} \left\langle x, \frac{\tau}{2} \middle| A \middle| y, -\frac{\tau}{2} \right\rangle &= \langle x | e^{-H\frac{\tau}{2}} A e^{-H\frac{\tau}{2}} | y \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle x | n \rangle \langle n | A | m \rangle \langle m | y \rangle e^{-E_n \frac{\tau}{2}} e^{-E_m \frac{\tau}{2}} \end{aligned}$$

Setzt man hier $y = x$ und integriert über x , so ergibt sich im Limes großer Zeiten:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(e^{-H\tau} A) &= e^{-E_0\tau} \langle 0 | A | 0 \rangle \{1 + \mathcal{O}(e^{-c\tau})\} \\ \Rightarrow \langle 0 | A | 0 \rangle &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\text{Sp}(e^{-H\tau} A)}{\text{Sp}(e^{-H\tau})} \end{aligned}$$

An dieser Stelle erkennt man, dass sich der Einfluss der Randbedingungen aus dem Bruch herauskürzt.

Wählt man nun $A = e^{-H\tau}$, so ergibt sich ein Ausdruck für das Pfadintegral in der Form:

$$\langle 0 | e^{-H\tau} | 0 \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\text{Sp}(e^{-2H\tau})}{\text{Sp}(e^{-H\tau})} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \text{Sp}(e^{-H\tau})$$

Dabei wurde folgender Ausdruck mit $A = 1$ verwendet:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \text{Sp}(e^{-H\tau} \cdot 1) = e^{-E_0\tau} \cdot 1$$

Also ergibt sich die gewünschte Form für das Pfadintegral:

$$\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S} = \text{Sp}(e^{-H\tau}) = e^{-E_0\tau}$$

2.1 Das Variationsprinzip

Nun wollen wir das Feynmansche Variationsprinzip einführen um eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie zu berechnen. Dazu zunächst folgender Trick:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S} &= \frac{\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-(S-S')} e^{-S'}}{\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'}} \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'} \\ &\equiv \langle e^{-(S-S')} \rangle_{S'} \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'} \end{aligned}$$

Dabei stellt S' eine Testwirkung dar, die Parameter enthält, die später zur Minimierung dienen.

Im nächsten Schritt verwenden wir die Jensensche Ungleichung:

$$\langle e^x \rangle \geq e^{\langle x \rangle}$$

Diese ist durch vollständige Induktion beweisbar oder durch folgendes Bild leicht ersichtlich: Durch die konkave Krümmung der Exponentialfunktion liegt der Massenschwer-

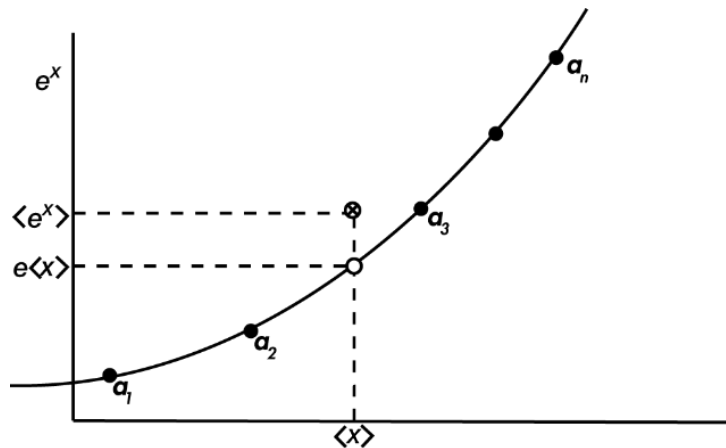


Abbildung 4: Veranschaulichung der Jensenschen Ungleichung: Die Krümmung des Graphen bewirkt, dass der Massenschwerpunkt oberhalb des Graphen liegt.

punkt der Punkte auf der Kurve oberhalb dieser, wo hingegen der Funktionswert des x -Mittelwerts natürlich auf der Kurve liegt (siehe Abb. 2.1).

Wendet man nun diese Ungleichung auf den Erwartungswert in dem Pfadintegral an, so ergibt sich:

$$\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S} \geq e^{-\langle S-S' \rangle_{S'}} \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'}$$

mit $\langle S-S' \rangle_{S'} \equiv \frac{\int \mathcal{D}x(\tau) (S-S') e^{-S'}}{\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'}}$

Wir hatten zuvor für große Zeiten τ eine einfache Darstellung des Pfadintegrals hergeleitet, die jetzt Verwendung findet:

$$\begin{aligned}
\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S} &= e^{-E_0\tau} \geq e^{-\langle S-S' \rangle_{S'}} \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'} \\
\Rightarrow -E_0\tau &\geq -\langle S-S' \rangle_{S'} + \ln \left(\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'} \right) \\
\Rightarrow E_0 &\leq E' + \frac{1}{\tau} \langle S-S' \rangle_{S'} \\
\text{mit: } E' &\equiv -\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \ln \left(\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'} \right)
\end{aligned} \tag{1}$$

Damit haben wir einen Ausdruck für eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie gefunden. Ziel ist es jetzt die rechte Seite von Gleichung (1) zu minimieren, sodass die Energie des Grundzustands möglichst genau angenähert wird.

Nun muss eine geeignete Wahl für die Testwirkung S' getroffen werden. Die Wahl ist abhängig von der Kopplungsstärke α . Wir betrachten hier einen Bereich $1 \leq \alpha \leq 6$, da viele reale Kristalle in diesen Bereich fallen:

Material	α
GaAs	0,068
CdS	0,53
AgGr	1,53
TlBr	2,55
KCl	3,44

Man kann zeigen, dass das Feynmansche Prinzip für große Kopplungen äquivalent zum Ritzschen Variationsprinzip ist. Für kleine Kopplungsstärken ist es jedoch sinnvoll die Energien mit Hilfe der Störungsrechnung zu bestimmen. Diese Berechnung liefert in 2. Ordnung eine Grundzustandsenergie von

$$E_0 \approx -\alpha - 1,26 \left(\frac{\alpha}{10} \right)$$

3 Berechnung der Grundzustandsenergie

Als Pfadintegral liegt nun, mit dem Ergebnis des getriebenen harmonischen Oszillators wie folgt:

$$\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S} = \int \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d\tau \dot{x}^2(\tau) - 2\sqrt{2}\pi\alpha \underbrace{\int d\tau ds \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2} e^{ik(x(\tau)-x(s))} e^{-|\tau-s|}}_{\equiv F} \right\}$$

Dabei beinhaltet F die Fouriertransformation von $1/k^2$, diese ist $1/|x|$, also:

$$F = \frac{\alpha}{\sqrt{8}} \int d\tau ds \frac{e^{-|\tau-s|}}{|x(\tau) - x(s)|}$$

Damit ergibt sich dann für die Wirkung:

$$S = \frac{1}{2} \int d\tau \dot{x}^2(\tau) - \frac{\alpha}{\sqrt{8}} \int d\tau ds \frac{e^{-|\tau-s|}}{|x(\tau) - x(s)|}$$

Wir wählen nun folgende Testwirkung

$$S' = \frac{1}{2} \int d\tau \dot{x}^2(\tau) + \frac{C}{2} \int d\tau ds (x(\tau) - x(s))^2 e^{-W|\tau-s|}$$

Mit Koeffizienten C und W , die so angepasst werden müssen, dass S' minimal wird. Diese Wahl von S' hat folgende Gründe:

- Sie ist der Wirkung S sehr ähnlich, damit $S - S'$ leicht klein wird
- Sie ist quadratisch in x und sollte dadurch integriert werden können
- Sie enthält den retardierten Charakter der Kopplung

Wir beginnen mit der Berechnung des Erwartungswertes $\langle S - S' \rangle_{S'}$. Der Term lautet nun explizit:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} \langle S - S' \rangle_{S'} &= -\frac{\alpha}{\sqrt{8}\tau} \left\langle \int d\tau ds \frac{e^{-|\tau-s|}}{|x(\tau) - x(s)|} \right\rangle_{S'} \\ &\quad - \frac{C}{2\tau} \left\langle \int d\tau ds (x(\tau) - x(s))^2 e^{-W|\tau-s|} \right\rangle_{S'} \\ &\equiv A + B \end{aligned}$$

Die Exponentialfunktionen können aus dem Erwartungswert gezogen werden, da diese nicht explizit vom Weg abhängen.

Zunächst zu Term A :

Der Bruch ist bekannt und kann wieder als Fourier-Transformation dargestellt werden:

$$\frac{1}{|x(\tau) - x(s)|} = \int \frac{d^3k}{2\pi^2 k^2} e^{ik(x(\tau) - x(s))}$$

Also werten wir

$$\left\langle e^{ik(x(\tau') - x(s'))} \right\rangle_{S'} \stackrel{\equiv I}{=} \frac{\int \mathcal{D}x(\tau) e^{ik(x(\tau') - x(s'))} e^{-S'}}{\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'}} \quad (2)$$

weiter aus.

Das Integral im Zähler hat die Form:

$$I = \int \mathcal{D}x(\tau) \exp \left[\underbrace{-\frac{1}{2} \int d\tau \dot{x}^2(\tau) - \frac{C}{2} \int d\tau ds (x(\tau) - x(s))^2 e^{-W|\tau-s|}}_{S'} + \int d\tau f(\tau)x(\tau) \right]$$

$$\text{mit: } f(\tau) = ik(\delta(\tau - \tau') - \delta(\tau - s'))$$

Jetzt wird eine Substitution vorgenommen analog zu der beim harmonischen Oszillator: $x(\tau) = x'(\tau) + y(\tau)$. Dabei ist für $x'(\tau)$ der Exponent maximal und $y(\tau)$ wird zur Integrationsvariable. Es ist dann möglich y als quadratischen Faktor abzuseparieren, der nicht mehr von $f(\tau)$ abhängt. Diese Integration gibt dann einen Beitrag, der nur von T abhängt und sich später aus dem Bruch in Gl. (2) herauskürzen lässt. Daher wird er nicht weiter betrachtet. Die Endpunkte für x' können nun beliebig gewählt werden, also aus Bequemlichkeit zu $x'(0) = x'(T) = 0$. Damit bleibt von dem Erwartungswert auch nur noch der Zähler

$$I = \exp \left[-\frac{1}{2} \int d\tau \dot{x}'^2(\tau) - \frac{C}{2} \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))^2 e^{-W|\tau-s|} + \int d\tau f(\tau)x'(\tau) \right] \equiv e^J$$

zu berechnen.

Für x' soll nun I minimal werden, dies führt über die Euler-Lagrange-Gleichung zu der Differentialgleichung:

$$\frac{d^2 x'(\tau)}{d\tau^2} = 2C \int (x'(\tau) - x'(s)) e^{-W|\tau-s|} ds - f(\tau) \quad (3)$$

Damit lässt sich der Exponent in I vereinfachen. Wir betrachten zunächst:

$$\begin{aligned} \int d\tau \dot{x} \dot{x} &= \underbrace{[\dot{x}x]_0^T}_{=0} - \int d\tau \frac{d^2 x}{d\tau^2} x \\ \Rightarrow J &= -\frac{1}{2} \int d\tau \dot{x}'^2(\tau) - \frac{C}{2} \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))^2 e^{-W|\tau-s|} + \int d\tau f(\tau)x'(\tau) \\ &= \frac{1}{2} \int d\tau \frac{d^2 x}{d\tau^2} x - \frac{C}{2} \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))^2 e^{-W|\tau-s|} + \int d\tau f(\tau)x'(\tau) \\ &= C \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))x(\tau) e^{-W|\tau-s|} - \frac{C}{2} \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))^2 e^{-W|\tau-s|} \\ &\quad - \frac{1}{2} \int d\tau f(\tau)x'(\tau) + \int d\tau f(\tau)x'(\tau) \\ &\quad \text{mit: } C \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))x(\tau) e^{-W|\tau-s|} \\ &= \frac{C}{2} \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))x(\tau) e^{-W|\tau-s|} + \frac{C}{2} \int d\tau ds (x'(s) - x'(\tau))x(s) e^{-W|\tau-s|} \\ &= \frac{C}{2} \int d\tau ds (x'(\tau) - x'(s))^2 e^{-W|\tau-s|} \\ &\Rightarrow I = \exp \left[\int \frac{1}{2} f(\tau)x'(\tau) d\tau \right] \end{aligned}$$

Es bleibt nun noch (3) zu lösen, dazu definieren wir:

$$\begin{aligned}
z(\tau) &= \frac{W}{2} \int e^{-W|\tau-s|} x'(s) ds \\
\Rightarrow \frac{dz(\tau)}{d\tau} &= -\frac{W^2}{2} \int e^{-W|\tau-s|} \varepsilon(\tau-s) x'(s) ds \quad \text{mit: } \varepsilon(u) = \begin{cases} -1, & u < 0 \\ 0, & u = 0 \\ 1, & u > 0 \end{cases} \\
\Rightarrow \frac{d^2 z(\tau)}{d\tau^2} &= W^2 [z(\tau) - x'(\tau)]
\end{aligned}$$

Also folgt für (3):

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 x'(\tau)}{d\tau^2} &= 2C \int x'(\tau) e^{-W|\tau-s|} ds - \int x'(s) e^{-W|\tau-s|} ds - f(\tau) \\
&= 2C \left(\int_0^t x'(\tau) e^{-W(\tau-s)} ds + \int_t^T x'(\tau) e^{W(\tau-s)} ds \right) - \frac{4C}{W} z(\tau) - f(\tau) \\
\text{für große } T: &= 2C \frac{2}{W} x'(\tau) - 2C \underbrace{\frac{1}{W} x'(\tau) e^{-Wt}}_{\rightarrow 0} - \frac{4C}{W} z(\tau) - f(\tau) \\
&\Rightarrow \frac{d^2 x'(\tau)}{d\tau^2} = \frac{4C}{W} [x'(\tau) - z(\tau)] - f(\tau)
\end{aligned}$$

Die beiden Differential-Gleichungen können leicht separiert und gelöst werden. Damit ergibt sich dann für den Erwartungswert:

$$\begin{aligned}
\left\langle e^{ik(x(\tau')-x(s'))} \right\rangle_{s'} &= I = \exp[ik(x(\tau') - x(s'))] \\
&= \exp \left[-\frac{2Ck^2}{UW} (1 - e^{U|\tau'-s'|}) - \frac{W^2}{2U^2} k^2 |\tau' - s'| \right] \quad (4) \\
\text{mit: } \quad U^2 &\equiv W^2 + \frac{4C}{W}
\end{aligned}$$

Abschließend ergibt sich für A nach einer einfachen Gauß-Integration über k und einer Integration über s :

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\alpha U}{W} \int_0^\infty \left[W^2 \tau' + \frac{U^2 - W^2}{U} (1 - e^{-U\tau'}) \right] e^{-W\tau'} d\tau'$$

Um nun auch B zu bestimmen muss $\langle |x(t) - x(s)|^2 \rangle$ bestimmt werden, dazu entwickelt man beide Seiten von Gleichung (4) nach k bis zur Ordnung k^2 , dabei fällt die erste Ordnung der linken Seite weg, da dies eine Sattelpunktentwicklung ist.

$$\begin{aligned}
\langle |x(\tau') - x(s')|^2 \rangle &= \frac{d^2}{dk^2} \langle e^{ik(x(\tau)-x(s))} \rangle = \frac{4C}{U^3 W} (1 - 3e^{-W|\tau-\sigma|}) + \frac{W^2}{U^2} |\tau - \sigma| \\
&\Rightarrow B = \frac{3C}{UW}
\end{aligned}$$

Wir berechnen abschließend die Energie E' mit Hilfe eines Tricks, wir bestimmen:

$$\begin{aligned}
 \frac{dE'(C)}{dC} &= - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \frac{d}{dC} \ln \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'} \\
 &= - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \frac{1}{\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'}} \frac{d}{dC} \int \mathcal{D}x(\tau) e^{-S'} \\
 &= - \frac{1}{T} \left\langle - \frac{d}{dC} S' \right\rangle_{S'} \\
 &= - \frac{1}{T} \left\langle - \frac{1}{2} \int_0^T d\tau ds |x(\tau) - x(s)|^2 e^{-W|\tau-s|} \right\rangle_{S'}
 \end{aligned}$$

Dieser Mittelwert wurde bereits zuvor berechnet. Man findet damit:

$$\left\langle - \frac{1}{2} \int_0^T d\tau ds |x(\tau) - x(s)|^2 e^{-W|\tau-s|} \right\rangle_{S'} = \frac{6T}{UW}$$

Also ergibt sich für die Ableitung:

$$\frac{dE'(C)}{dC} = \frac{3}{UW}$$

Und damit für die Energie E' :

$$E' = \int dC \frac{3}{W \sqrt{W^2 + 4C/W}} = \frac{3}{2} \sqrt{W^2 + 4C/W} + D$$

Die Integrationskonstante D muss gerade so gewählt werden, dass für $C = 0$ die Energie E' auch Null wird, da dann auch keine Wirkung S' vorliegt, also:

$$\begin{aligned}
 \frac{3}{2} \sqrt{W^2 + 4C/W} + D \Big|_{C=0} &= 0 \\
 \Rightarrow D &= -\frac{3}{2}W \\
 \Rightarrow E' &= \frac{3}{2}(U - W)
 \end{aligned}$$

Mit $E' + B = \frac{3}{4U}(U - W)^2$ folgt dann:

$$\boxed{E_0 \leq \frac{3}{4U}(U - W)^2 + A}$$

4 Ergebnisse

Es müssen also W und U (bzw. C) nun so angepasst werden, dass die rechte Seite der Ungleichung minimal wird. Man findet für die verschiedenen Bereiche von α unterschiedliche Lösungen:

Für kleine Werte von α findet man folgende Parameter:

$$W = 3 \quad U = 3 \left[1 + \frac{2\alpha}{3W} \left(1 - \frac{2}{W} \left[\sqrt{1-W} - 1 \right] \right) \right]$$

Und damit für die Grundzustands-Energie:

$$E \leq -\alpha - 1,23 \left(\frac{\alpha}{10} \right)$$

Dieses Ergebnis ist vergleichbar mit dem Befund aus der Störungsrechnung für kleine α :

$$E \approx -\alpha - 1,26 \left(\frac{\alpha}{10} \right)$$

Für große α findet man als beste Parameter:

$$W = 1 \quad U = \frac{4\alpha^2}{p\pi} - 4 \left(\ln(2) + \frac{1}{2} \mathfrak{E} \right) + 1$$

Dabei ist $\mathfrak{E} = 0,57721566490$ die Euler-Konstante. Dies führt zu der Energie:

$$E \leq -\frac{\alpha^2}{2\pi} - \frac{3}{2}(2\ln(2) + \mathfrak{E}) - \frac{3}{4} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\alpha^2}\right)$$

5 Literatur

- R. P. Feynman, A. R. Hibbs:
Quantum Mechanics and Path Integrals
- G. Münster:
Quantentheorie
- M. Chaichian, A. Damichiev:
Path Integrals in Physics Vol. 1 & 2
- L. S. Schulmann:
Techniques and Applications of Path Integration
- T. Kuhn:
Skript zur Vorlesung: Einführung in die Festkörpertheorie
- G. Czycholl:
Theoretische Festkörperphysik
- J. T. Devreese: „Polarons“. In: *Encyclopedia of Physics, R.G. Lerner and G.L. Trigg (eds.)*