В (2.96) следует суммировать по всем конечным фононным состояниям и усреднить по всем возможным, обозначенным через n, исходным состояниям, принимая во внимание их соответствующие статистические веса. Таким образом, вместо (2.96) исходим из

$$\sigma(\omega) \propto \mathop{\mathrm{Av}}_{n} \sum_{n'} |\langle j', n' | \exp(-i\varkappa\cdot\mathbf{r})\, \mathbf{e}\cdot\nabla | j, n\rangle|^2 \delta(E_{j'n'} - E_{jn} - \hbar\omega). \tag{2.98}$$

Здесь E_{jn} — энергия системы электрон + фононы *).

Матричный элемент в (2.98) можно легко свести к соответствующему матричному элементу в (2.96). Поскольку оператор в матричном элементе действует только на координаты электрона, имеем

$$\langle j'n' | \exp(-i\varkappa\cdot\mathbf{r})\, \mathbf{e}\cdot\nabla | j, n\rangle =$$
$$= \langle j' | \exp(-i\varkappa\cdot\mathbf{r})\, \mathbf{e}\cdot\nabla | j\rangle \prod_{k=1}^{3N} \left[\int dQ_k\, \chi_{n'_k}(Q_k - Q_{k0})\, \chi_{n_k}(Q_k)\right] \equiv$$
$$\equiv \langle j' | \exp(-i\varkappa\cdot\mathbf{r})\, \mathbf{e}\cdot\nabla | j\rangle \langle n' | n\rangle. \tag{2.99}$$

Это позволяет представить (2.98) в виде

$$\sigma(\omega) \propto |\langle j' | \exp(-i\varkappa\cdot\mathbf{r})\, \mathbf{e}\cdot\nabla | j\rangle|^2 G(\omega), \tag{2.100}$$

где $G(\omega)$ есть следующая функция:

$$G(\omega) = \mathop{\mathrm{Av}}_{n} \sum_{n'} |\langle n' | n\rangle|^2 \delta(E_{j'n'} - E_{jn} - \hbar\omega). \tag{2.101}$$

Она определяет форму линии или полосы поглощения.

Таким образом, проблема сведена к определению фактора $|\langle n'|n\rangle|^2$. Мы приводим здесь только наиболее важные результаты. Относительно вывода см., например, работы Прайса [121] и Чаротти [113b]. Необходимо проводить различие между приближениями слабой и сильной электрон-фононной связи. Здесь важна величина фактора $S = \sum_k (n_k + 1/2) Q_{k0}^2$, появляющегося в $|\langle n'|n\rangle|^2$. Если S мало по сравнению с единицей, доминируют бесфононные и однофононные процессы; если S велико по сравнению с единицей, важны многофононные процессы.

В приближении слабой связи $|\langle n'|n\rangle|^2 = \exp(-S)$, и, следовательно, вклад бесфононных процессов в $G(\omega)$ составляет

$$G_0(\omega) = \exp(-S)\, \delta(E_{j'} - E - \hbar\omega). \tag{2.102}$$

Это — резкая спектральная линия.

---

*) Аббревиатура $\mathop{\mathrm{AV}}_{n}$ обозначает усреднение по n. (*Примеч. пер.*)