метим теперь в общих чертах приближение, которое, посредством учета корреляционных эффектов в зонной модели, ведет к локализованному описанию. Будем основывать наше изложение подхода на первом из приведенных здесь примеров, и будем поэтому рассматривать (узкую) s-зону, заполненную точно наполовину N электронами N узлов решетки.

Состояния в зоне описываются энергиями $E(\mathbf{k})$ и волновыми функциями $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$. Индекс зоны опускаем. Чтобы учесть приближенным образом корреляцию в гамильтониане, удаляем из $E(\mathbf{k})$ среднее межэлектронное взаимодействие, содержащееся в описании зонной модели и заменяем его полным электрон-электронным взаимодействием.

В качестве первого шага можно воспользоваться формализмом, развитым в ч. I § 43 для проблемы экситона. Согласно (ч. I. 43.3) разность $E(\mathbf{k})-W(\mathbf{r})$ дается в представлении Блоха выражением

$$E_1 = W(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}} (2\langle \mathbf{k}, \varkappa | g | \mathbf{k}, \varkappa\rangle - \langle \mathbf{k}, \varkappa | g | \varkappa, \mathbf{k}\rangle)\, \nu_{\varkappa\sigma}. \quad (1.49)$$

Здесь $g = e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, $W(\mathbf{k})$ — одноэлектронная энергия в приближении Хартри — Фока в представлении Блоха; суммирование проводится по всем состояниям зоны, причем число заполнения $\nu_{\varkappa\sigma}$ гарантирует, что в расчет принимаются только заполненные состояния. Соответствующий (1.49) оператор Гамильтона может быть записан в представлении чисел заполнения и имеет вид

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_1 c^{+}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

Добавим к H_1 межэлектронное взаимодействие. Полный гамильтониан принимает вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_1 c^{+}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\\ \mathbf{k}'_1,\mathbf{k}'_2\\ \sigma_1,\sigma_2}} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | g | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2\rangle\, c^{+}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} c^{+}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}'_2\sigma'_2} c_{\mathbf{k}'_1\sigma'_1}. \quad (1.50)$$

Нашей целью является описание корреляций в узких зонах. Поскольку при этом мы подходим к локальному описанию, представляется целесообразным принять вместо представления Блоха представление Ванье (использованное в ч. I, § 43). Воспользуемся соотношениями (ч. I. 43.3) и (ч. I. 47.2) для определения функций Ванье $a(\mathbf{R}_m, \mathbf{r})$ и введения операторов рождения и уничтожения в представлении Ванье. Далее определяем

$$\begin{aligned} T_{ij} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)], \\ \nu_{ij} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \nu_{\mathbf{k}\sigma} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)]. \end{aligned} \quad (1.51)$$