Тогда находим для гамильтониана в представлении Ванье

$$H = \sum_{ik\sigma}\left[T_{ik} - \sum_{jl}\left(2\langle ij|g|kl\rangle - \langle ij\;|g|lk\rangle \nu_{jl}\right)\right] \times$$
$$\times c^{+}_{i\sigma}c_{k\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\sum_{\sigma\sigma'}\langle ij|g|kl\rangle c^{+}_{i\sigma}c^{+}_{j\sigma'}c_{l\sigma'}c_{k\sigma}, \qquad (1.52)$$

где теперь при образовании матричных элементов следует использовать функции Ванье. Мы интерпретируем эти матричные элементы как описывающие взаимодействия между электронами, связанными с различными ионами решетки (расположенными в узлах решетки $\mathbf{R}_i$). Взаимодействие между электронами, находящимися у одного и того же иона, будет, конечно, играть главную роль. В качестве первого шага рассмотрения корреляции берем, следовательно, только матричные элементы с $i = j = k = l$. Полагаем $\langle ii|g|ii\rangle = U$ и получаем, таким образом, упрощенный гамильтониан

$$H = \sum_{ik\sigma} T_{ik}c^{+}_{i\sigma}c_{k\sigma} - U\sum_{i\sigma}\nu_{ii}c^{+}_{i\sigma}c_{i\sigma} + \frac{U}{2}\sum_{i\sigma\sigma'}c^{+}_{i\sigma}c_{i\sigma'}c_{i\sigma'}c_{i\sigma}. \qquad (1.53)$$

Теперь $\nu_{ii} = (1/N)\sum_{k\sigma}\nu_{k\sigma}$ — число, так же как и сумма $\sum_{i\sigma}c^{+}_{i\sigma}c_{i\sigma} = \sum_{i\sigma}n_{i\sigma}$, которая остается во втором члене в правой части. Второй член в правой части дает, таким образом, постоянный вклад в энергию и может быть опущен в дальнейшем обсуждении, имеющем дело только с разностями энергий. Первый член в правой части в (1.53) описывает переходы электрона от k-го узла решетки к i-му. Здесь будут доминировать члены, в которых $\mathbf{R}_i$ и $\mathbf{R}_j$ соответствуют соседним узлам решетки.

Последний член в правой части в (1.53) принимает вид

$$(U/2)\sum_{i\sigma\sigma'}n_{i\sigma}n_{i\sigma'} = U\sum_{i}n_{i\sigma}n_{i,-\sigma}.$$

Получаем, следовательно, оператор

$$H = \sum_{ik\sigma}T_{ik}c^{+}_{i\sigma}c_{k\sigma} + U\sum_{i}n_{i\sigma}n_{i,-\sigma}. \qquad (1.54)$$

Этот оператор Гамильтона впервые обсуждался Хаббардом в связи с корреляциями в узкой зоне (*гамильтониан Хаббарда*). Он содержит три параметра: $T_0 = T_{ii}$, $T_1 = T_{ik}$ ($\mathbf{R}_i$, $\mathbf{R}_k$ — ближайшие соседи) и U.

Смысл этих параметров лучше всего можно продемонстрировать, если использовать вместо функций Ванье атомные орбитали. Рассмотрим такую возможность несколько подробнее, чем требуется здесь, чтобы в последующих параграфах можно было к этому вернуться *).

*) Мы следуем здесь немецкому изданию книги, поскольку в ч. I отсутствует параграф, посвященный функциям Ванье и приближению LCAO, вошедший во второе, английское, издание и позволивший автору быстрее прийти там к (1.55). (*Примеч. пер.*)