

интегралы, соответствующие переходам между состояниями, локализованными в узлах  $R_n$  и  $R_m$ . Пренебрегая энергией нулевых колебаний, запишем фононную часть согласно (ч. I.31.30):

$$H_{ph} = \sum_{j=1}^2 \sum_q \hbar \omega_{qj} a_{qj}^+ a_{qj}. \quad (1.91)$$

Здесь индекс  $j=1$  объединяет акустические ветви, в то время как  $j=2$  объединяет оптические;  $a_{qj}^+$  и  $a_{qj}$  — операторы рождения и уничтожения фононов с волновым числом  $q$  в  $j$ -й ветви.

Наконец, имеем для электрон-фононного взаимодействия

$$H_{el-ph} = - \sum_{j=1}^2 \sum_{n,q} \sqrt{u_{qj}} \omega_{qj} [\exp(iqR_n) a_{qj} + \exp(-iqR_n) a_{qj}^+] c_n^+ c_n. \quad (1.92)$$

Это выражение может быть получено из (ч. II.49.4) путем использования в каждом из матричных элементов в (ч. II.49.4) локализованных функций. Помимо фононных частот  $u_{qj}$  также содержат постоянные взаимодействия электрона с акустическими или оптическими фононами.

Полный гамильтониан  $H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph}$  содержит два компонента возмущения. Один — электрон-фононное взаимодействие (1.92), а второй — член в (1.90), который описывает процессы, включающие смену положения. Поскольку электрон-фононное взаимодействие в полярных твердых телах может быть сильным, мы исключим  $H_{el-ph}$  с помощью канонического преобразования и, таким образом, перейдем от системы электронов с взаимодействием к поляронной системе, в которой пока только часть взаимодействий по-прежнему должна быть рассмотрена точно.

Примем в качестве нового гамильтониана  $\bar{H} = \exp(-s) H \exp(s)$ , где

$$s = \sum_{jnq} \sqrt{u_{qj}} [\exp(-iqR_n) a_{qj}^+ - \exp(iqR_n) a_{qj}] c_n^+ c_n. \quad (1.93)$$

Для него получаем

$$\bar{H} = \sum_n \eta_n c_n^+ c_n + \sum_{jq} \hbar \omega_{qj} a_{qj}^+ a_{qj} + \sum_{mn} V_{mn} B_{mn} c_m^+ c_n + \bar{H}_{pp}, \quad (1.94)$$

где

$$\eta_n = E_n - \sum_{jq} u_{qj} \hbar \omega_{qj},$$

$$B_{mn} = \exp \left( \sum_{jq} \sqrt{u_{qj}} \{ [\exp(-iqR_m) - \exp(-iqR_n)] a_{qj}^+ - \text{к.с.} \} \right). \quad (1.95)$$