

Первый член в (1.94) описывает невозмущенную поляронную систему с перенормированными энергиями η_n ; второй описывает фононную систему. Третий член описывает переходы поляронов от узла решетки R_m к узлу решетки R_n . Последний член представляет эффективное поляронное взаимодействие, которым мы будем пренебрегать.

В дальнейшем нас больше всего будет интересовать третий член, который перепишем следующим образом:

$$\sum_{mn} V_{mn} B_{mn} c_m^\dagger c_n = \sum_{mn} \tilde{V}_{mn} c_m^\dagger c_n + \sum_{mn} V_{mn} (B_{mn} - \bar{B}_{mn}) c_m^\dagger c_n, \quad (1.96)$$

$$V_{mn} = \bar{B}_{mn} V_{mn}.$$

Здесь $\bar{B}_{mn}$ — ожидаемое значение оператора B_{mn} для невозмущенной системы ($V_{mn} = 0$). Для $\bar{B}_{mn}$ находим

$$\bar{B}_{mn} = \exp \left[- \sum_{jq} u_{jq} \sin^2 \frac{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega_{jq}}{2k_B T} \right]. \quad (1.97)$$

Два члена в (1.96) описывают поляронные переходы между различными узлами решетки. Первый член описывает процессы, в которых фононная система остается неизменной, второй член — процессы, в которых каждый отдельный шаг связан с поглощением или испусканием фононов. Это означает возможность *зонной проводимости и термически активированных перескоков*. Интеграл V_{mn} определяет меру зонной проводимости. Здесь можно видеть, что поляронная зона уже электронной и что ее ширина уменьшается с ростом температуры.

В дальнейшем мы обсудим только прыжковую часть равенства (1.96). Она может быть вычислена с помощью формулы Кубо (1.69). Кроме гамильтониана H для расчета необходим оператор тока j . Из определения $j = e\dot{\mathbf{r}} = (e/i\hbar)[\mathbf{r}, H]$, где $\mathbf{r} = \sum_n \mathbf{R}_n c_n^\dagger c_n$, следует

$$j = \frac{e}{i\hbar} \sum_{mn} V_{mn} (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n) c_m^\dagger c_n. \quad (1.98)$$

Если использовать теперь то же самое каноническое преобразование, что и для H , то к (1.98) добавится только фактор B_{mn} . Таким образом j можно свести к совокупности зонного и прыжкового вкладов, причем прыжковый вклад содержит фактор $(B_{mn} - \bar{B}_{mn})$.

Подстановка (1.98) и соответствующих частей из (1.94) и (1.96) в формулу Кубо ведет тогда к выражению для прыжковой проводимости. Не будем явно приводить трудоемкие вычисления или конечный результат; вместо этого отсылаем читателя к упомянутой работе Шнакенберга.

Важны следующие результаты.