

Последний шаг состоит в замене операторов тока зависящими от времени операторами в представлении Гейзенберга (см. Приложение):

$$j(t) = \exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right) H t\right] j \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right) H t\right].$$

Записывая $\text{Sp}\{\rho_0 j\} = \langle j \rangle$, получаем

$$K_{\mu\nu} = \int_0^{1/\hbar\beta T} d\lambda \langle j_\mu(0) j_\nu(t - i\hbar\lambda) \rangle. \quad (1.74)$$

Выражение (1.69) совместно с (1.74) есть общепринятая форма формулы Кубо.

Формула Кубо очень важна как исходный пункт для вычисления электропроводности. Ввиду сложности мы, однако, не будем использовать ее в дальнейшем. Гринвуд вывел упрощенное выражение, которое представляет интерес для определения локализации и делокализации одноэлектронных состояний.

Для вывода его исходим из одноэлектронного оператора Гамильтона $H = H_0 + H'$. Пусть H_0 описывает свободный электрон, а H' — возмущение, обусловленное постоянным электрическим полем. Пусть, далее, E и ψ_E — энергия и волновая функция электрона. Так же, как в выводе формулы Кубо, используем для вычисления проводимости статистический оператор ρ . Образовывая Sp из (1.62), получаем, что

$$\langle j \rangle = \text{Sp}\{\rho j_{op}\}, \quad (1.75)$$

где оператор тока дается выражением

$$j_{op} = \text{Re} \left[-\frac{e}{V_g} \frac{\hbar}{im} \nabla \right]. \quad (1.76)$$

Используя соотношение $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}$ и предполагая, что зависимость от времени векторного потенциала и напряженности электрического поля имеет вид $\exp(-i\omega t + \alpha t)$ (в пределе $\alpha \rightarrow 0$), получаем

$$H' = \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar e}{im} \mathbf{A} \cdot \nabla = -\frac{\hbar e}{m\omega} \mathbf{E} \cdot \nabla. \quad (1.77)$$

Для описывающей возмущение составляющей статистического оператора $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ находим, подобно (ч. I.13.7),

$$\langle \psi_{E'} | \delta\rho | \psi_E \rangle = \frac{f_0(E') - f_0(E)}{E' - E - \hbar\omega - i\hbar\alpha} \langle \psi_{E'} | H' | \psi_E \rangle. \quad (1.78)$$

Равенство (1.75) может быть записано явно в виде

$$\langle j \rangle = V_g^2 \int \int dE dE' g(E) g(E') \langle \psi_{E'} | \delta\rho | \psi_E \rangle_{av} \langle \psi_E | j_{op} | \psi_{E'} \rangle_{av}. \quad (1.79)$$

Здесь $g(E)$ — плотность состояний для электронных состояний E .