

Здесь  $e$  и  $m^*$  — заряд и эффективная масса электрона проводимости,  $n$  — концентрация электронов,  $T$  — температура,  $\theta_D$  — Дебая температура,  $M$  — масса атома металла,  $C \sim 1 - 10$  эВ,  $a$  — постоянная решетки,  $K_0 = 2\pi(3n/8\pi)^{1/3}$ . Б.—Г. ф. получена (1930) независимо Э. Грюнайзеном (E. Grüneisen) и Ф. Блохом (F. Bloch). Она приводит для  $T \ll \theta_D$  к зависимости  $\rho \sim T^5$ , а при  $T \gg \theta_D$  к  $\rho \sim T$ .

Б.—Г. ф., не учитывающая анизотропии металла и рассеяние электронов на примесях и дефектах кристаллич. решетки, служит для грубых оценок  $\rho$ .

Лит. см. при ст. *Металлы*.

**БЛОХОВСКИЕ ЭЛЕКТРОНЫ** — электроны в периодич. поле кристаллич. решетки, волновые ф-ции к-рых являются блоховскими ф-циями:

$$\psi_{sk}(\mathbf{r}) = u_{sk}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{r}$  — пространственная координата,  $u_{sk}$  — ф-ция, обладающая периодичностью решетки,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор,  $s$  — номер энергетич. зоны (см. *Зонная теория*). Волновая ф-ция Б. э. удовлетворяет *Блоха теореме*

$$\psi_{sk}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \psi_{sk}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где  $\mathbf{a} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$  — базисные векторы кристаллич. решетки,  $n_1, n_2, n_3$  — целые числа, и периодична в обратном пространстве вследствие эквивалентности состояний с волновыми векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{g}$  ( $\mathbf{g}$  — вектор *обратной решетки*).

Волновые ф-ции Б. э. представляют собой решения одночастичного *Шрёдингера уравнения* с периодич. потенциалом  $U(\mathbf{r})$ . Это ур-ние при заданном  $\mathbf{k}$  имеет бесконечный ряд разл. решений, отвечающих бесконечному ряду дискретных значений энергии  $\mathcal{E}_s(\mathbf{k})$  (индекс  $s$  нумерует эти решения). Зависимость энергии Б. э.  $\mathcal{E}$  от волнового вектора  $\mathbf{k}$  при заданном номере энергетич. зоны  $s$  наз. *дисперсии законом* Б. э. Ф-ции Блоха с различными  $s$  и  $\mathbf{k}$  взаимно ортогональны и подчиняются Блоха теореме. Из ортогональности  $\psi_{sk}$  с различными  $s$  и одинаковыми  $\mathbf{k}$  следует также ортогональность ф-ций  $u_{sk}$ :

$$\int u_{s'k}^*(\mathbf{r}) u_{sk}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}^3 = \delta_{ss'}, \quad (3)$$

где  $\delta_{ss'} = 1$  при  $s = s'$  и 0 при  $s \neq s'$ , а интегрирование ведётся по одной *элементарной ячейке* кристалла.

Периодич. потенциал  $U(\mathbf{r})$ , определяющий свойства Б. э., есть самосогласованный потенциал, включающий в себя взаимодействие между всеми электронами и ионами, образующими кристаллич. решётку. В этом смысле Б. э. представляет собой *квазичастицу*, т. е. частицу, находящуюся в самосогласованном поле окружающих частиц. Обычно при решении многочастичной задачи о поведении электронов в кристалле сначала разделяют движение ионов и электронов (*адиабатическое приближение*), а затем с помощью самосогласованной процедуры (см., напр., *Хартри — Фока метод*) находят потенциал  $U(\mathbf{r})$ . Т. о., с помощью усреднённого поля  $U(\mathbf{r})$  многочастичная задача сводится к одноэлектронной.

**Свойства Б. э. Квазимпульс и энергия.** Волновые ф-ции Б. э. обнаруживают сходство с волновыми ф-циями свободных электронов  $\psi = \text{const } e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ ; их можно представить как промодулированные по амплитуде плоские волны. Роль сохраняющегося импульса  $\mathbf{p}$ , определяющего поведение волновой ф-ции свободного электрона при трансляции на вектор  $\mathbf{a}$ :  $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ , у Б. э. играет квазимпульс  $\hbar\mathbf{k}$ .

Истинного сохраняющегося импульса у Б. э. нет, т. к. в силовом поле закон сохранения импульса не выполняется — квазимпульс сохраняется с точностью до вектора обратной решетки. Так, напр., при столкновении двух электронов  $\hbar\mathbf{k}_1 + \hbar\mathbf{k}_2 = \hbar\mathbf{k}'_1 + \hbar\mathbf{k}'_2 + \hbar\mathbf{g}$ ,

где  $\hbar\mathbf{k}_1, \hbar\mathbf{k}_2, \hbar\mathbf{k}'_1, \hbar\mathbf{k}'_2$  — квазимпульсы Б. э. до и после столкновения. В состоянии с заданным квазимпульсом  $\hbar\mathbf{k}$  истинный импульс Б. э. может иметь (с разл. вероятностями) бесконечное число значений вида  $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{g})$ . Это следует из возможности разложения периодич. функции  $u_{sk}(\mathbf{r})$  в ряд Фурье, после чего волновая ф-ция Б. э. приобретает вид:

$$\psi_{sk} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{sk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{g}} a_s(\mathbf{k} + \mathbf{g}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{g}}. \quad (4)$$

Коэф. разложения  $a_s$  суть амплитуды вероятности того, что импульс имеет значение  $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{g})$ . Тот факт, что коэф. разложения зависит только от суммы  $(\mathbf{k} + \mathbf{g})$ , выражает свойство периодичности волновой ф-ции в обратном пространстве.

Энергия Б. э. также периодична в обратном пространстве:

$$\mathcal{E}_s(\mathbf{k} + \mathbf{g}) = \mathcal{E}_s(\mathbf{k}) \quad (5)$$

и, кроме того, обладает симметрией, связанной с симметрией кристаллич. решетки. При этом, однако, независимо от наличия или отсутствия в данном кристалле центра инверсии:

$$\mathcal{E}_s(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_s(-\mathbf{k}). \quad (6)$$

Это свойство — следствие симметрии по отношению к обращению времени (см. *Симметрия законов физики*).

**Движение Б. э. во внешних полях** можно рассматривать (при не слишком сильных внеш. полях) как движение классич. частицы с кинетич. энергией  $\mathcal{E}_s(\mathbf{k})$ , т. е. как движение классич. частицы со сложным законом дисперсии. Гамильтониан Б. э.:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{E}_s(\mathbf{k}) + V(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где  $V$  — потенциал внеш. поля. Ур-ния движения при этом имеют вид:

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}}; \quad \mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_s(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad (8)$$

а связь между действующей на Б. э. силой  $\mathbf{F}$  и ускорением:

$$\frac{d\mathbf{v}_\alpha}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}_s(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta},$$

где

$$m_{\alpha\beta}^{-1} = [\partial^2 \mathcal{E}_s(\mathbf{k}) / \partial k_\alpha \partial k_\beta] -$$

тензор обратных *эффективных масс*. Это соотношение аналогично второму закону Ньютона, однако направление силы может не совпадать с направлением ускорения. Такое квазиклассич. описание применимо, когда характерный размер орбиты или длина свободного пробега Б. э. велики по сравнению с его длиной волны де Бройля. При этом скорости Б. э. является периодич. ф-цией и обращается в нуль на границе *Бриллюэна зоны*.

Лит.: Займан Дж., Принципы теории твердого тела, пер. с англ., М., 1974; Киттель Ч., Введение в физику твердого тела, пер. с англ., М., 1978; Ашкрофт Н., Мермин Н., Физика твердого тела, пер. с англ., т. 1—2, М., 1979. В. М. Винокур.

**БОГОЛЮБОВА КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ** — линейные преобразования операторов уничтожения и рождения частиц к операторам уничтожения и рождения квазичастиц для неидеальных ферми- и бозе-газов. Предложены Н. Н. Боголюбовым в 1947 для бозе-газа и в 1958 для ферми-газа.

Для неидеального бозе-газа Б. к. п. таковы:

$$\begin{aligned} b_k &= u_k \xi_k + v_k \xi_{-k}^+, \\ b_k^+ &= u_k \xi_k^+ + v_k \xi_{-k}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $b_k, b_k^+$  — операторы уничтожения и рождения частиц в состоянии с импульсом  $\mathbf{k}$ , удовлетворяющие перестановочным соотношениям Бозе статистики,  $\xi_k, \xi_k^+$  — операторы уничтожения и рождения элементар-