

Где мы воспользовались тригонометрическим тождеством

$$\cos(\varphi_1 - \varphi_2) = \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 + \sin \varphi_1 \sin \varphi_2. \quad (83)$$

Это хороший пример эффективности векторных методов (попробуйте получить формулу (82) другим способом!).

б) Подобным же образом, образуя векторное произведение $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2$, найдите соотношение для $\sin \theta_{12}$.

Цилиндрические полярные координаты ρ , φ , z определяются следующими их соотношениями с прямоугольными координатами:

$$x = \rho \cos \varphi, \quad y = \rho \sin \varphi, \quad z = z.$$

При использовании двух измерений координаты сводятся только к ρ и φ .

Дополнение 2. Кристаллические решетки и обратная решетка

Предположим, что пространство внутри определенной области является евклидовым. Наше предположение означает, что если все предметы, как-либо участвующие в данном опыте или наблюдении, сместить параллельно их первоначальным положениям на величину одного и того же вектора переноса \mathbf{t} , то в результате этого опыта ничего не изменится. Поэтому, когда мы говорим, что законы физики

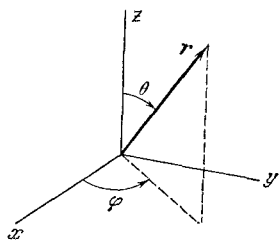


Рис. 2.38.

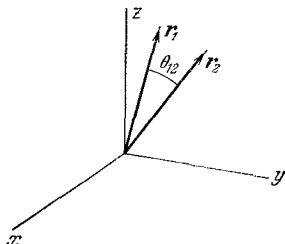


Рис. 2.39.

инвариантны по отношению к любому параллельному переносу \mathbf{t} , то это значит, что все тела, как-то участвующие в данном опыте, должны совершать одинаковое перемещение. Например, законы движения маятника не останутся инвариантными, если перенести этот маятник с уровня моря на вершину Эвереста: мы знаем, что в результате такого перемещения маятника относительно окружающих предметов, оставшихся неподвижными, изменится его собственная частота, так как изменится величина ускорения силы тяжести g .

Кристалл представляет собой регулярное расположение атомов в пространстве. Если мысленно представить себя движущимся внутри *неподвижного* кристалла, то мы увидим, что окружающая среда значительно меняется от точки к точке. Окружающий мир, каким он представлялся бы электрону, движущемуся внутри неподвижного кристалла, не обладает по отношению к параллельному переносу *) той полной инвариантностью, которая характерна для мира вне кристалла, в свободном пространстве. В кристалле окружающая среда вокруг точки \mathbf{r}' будет такой же, что и окружающая среда вокруг точки \mathbf{r} , только в том случае, если эти две точки находятся друг от друга на расстоянии, кратном периоду повторяемости кристаллической решетки.

По определению мы называем идеальным кристаллом систему, состоящую из атомов, расположенных в кристаллической решетке таким образом, что существуют три *вектора элементарных трансляций* \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , обладающие следующим свойством: расположение атомов, если смотреть на него из любой точки \mathbf{r} , выглядит во всех отношениях одинаковым с расположением атомов, наблюдаемым из точки

*) В кристаллографии такой параллельный перенос называется трансляцией. (Прим. ред.)

\mathbf{r}' , связанной с точкой \mathbf{r} следующим соотношением:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}, \quad (84)$$

где n_1, n_2, n_3 — произвольные целые числа. Заметьте, что $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ — это не векторы единичной длины; обычно они имеют длину порядка размеров атомов или немного больше. Система векторов элементарных трансляций называется *примитивной*, если л ю б ы е две точки \mathbf{r} и \mathbf{r}' , из которых расположение атомов выглядит совершенно одинаковым, могут быть связаны соотношением типа (84) при соответствующем выборе целых чисел n_1, n_2, n_3 .

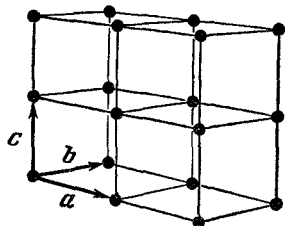


Рис. 2.40. Изображение небольшой части кристаллической решетки с векторами элементарных трансляций $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$. В изображенном здесь частном случае векторы \mathbf{a}, \mathbf{b} и \mathbf{c} с ортогональны, но для многих кристаллов \mathbf{a}, \mathbf{b} и \mathbf{c} не ортогональны.

Таким образом, пространство внутри неподвижного кристалла обладает инвариантностью не относительно любого параллельного переноса, а только относительно параллельных переносов следующего вида:

$$\mathbf{t} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}, \quad (85)$$

где n_1, n_2, n_3 — целые числа. Законы механики для движения электрона внутри неподвижного кристалла могут существенно отличаться от тех простых законов механики, которые выполняются в свободном пространстве. Для ознакомления с особенностями движения электронов внутри кристалла можно рекомендовать книгу Ч. Киттеля «Введение в физику твердого тела» (Физматгиз, 1963), содержание которой будет вполне понятно вам после изучения т. IV этого курса, посвященного квантовой физике.

Чаще всего примитивные векторы элементарных трансляций $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ не ортогональны. Математический анализ явлений, связанных с кристаллическим состоянием, и, в частности, дифракции рентгеновских лучей и электронов в кристаллических решетках сильно упрощается с помощью введенного Дж. В. Гиббсом

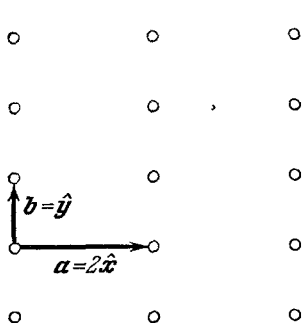


Рис. 2.41. Прямая кристаллическая решетка, для которой $\mathbf{a} = 2\hat{x}$ и $\mathbf{b} = \hat{y}$.

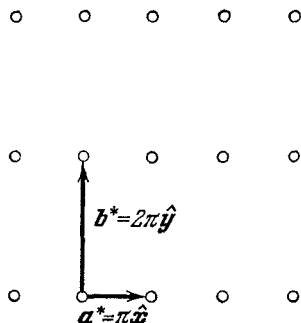


Рис. 2.42. Обратная решетка, для которой $\mathbf{a}^* = \pi\hat{x}$ и $\mathbf{b}^* = 2\pi\hat{y}$. Масштаб отличается от масштаба рис. 2.41.

понятия об обратной решетке. Векторы элементарных трансляций обратной решетки $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ выражаются через примитивные векторы элементарных трансляций прямой решетки посредством следующих уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}^* &= 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, & \mathbf{b}^* &= 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \\ \mathbf{c}^* &= 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}. \end{aligned} \right\} \quad (86)$$

В это определение вводится удобный коэффициент 2π , которого нет в обычном кристаллографическом определении, даваемом в элементарных руководствах.

П р и м е ч а н и е. Единицы абсолютной величины векторов элементарных трансляций обратной решетки — это не единицы длины. Если длина векторов \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} измеряется в сантиметрах, то величина векторов \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* измеряется в обратных сантиметрах (см^{-1}).

а) Показать, что $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} = 2\pi$, $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c} = 0$.

б) Пусть для двумерной кристаллической решетки в соответствующих единицах

$$\mathbf{a} = 4\hat{x}, \quad \mathbf{b} = \hat{y},$$

где \hat{x} и \hat{y} — единичные векторы осей прямоугольных декартовых координат. Изобразите часть решетки. Найдите \mathbf{a}^* и \mathbf{b}^* и изобразите часть обратной решетки. (У к а з а н и е: пусть $\mathbf{c} = \mathbf{z}$, если это облегчит вам соответствующие определения для двумерной решетки.)

в) Для другой двумерной решетки

$$\mathbf{a} = \hat{x}, \quad \mathbf{b} = \hat{x} \cos \frac{\pi}{3} + \hat{y} \sin \frac{\pi}{3}.$$

Изобразите часть решетки; найдите векторы элементарных трансляций обратной решетки и изобразите обратную решетку.

г) Показать, что

$$V^* = \frac{(2\pi)^3}{V},$$

где V — это объем $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$ элементарной ячейки прямой решетки, а V^* — объем $\mathbf{a}^* \cdot (\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*)$ элементарной ячейки обратной решетки. Для вывода этой формулы потребуется произвести довольно кропотливые выкладки.

Математическое дополнение I. Равенство векторов в сферическом пространстве

Наше определение равенства двух векторов исходит из предположения, что пространство является евклидовым. В пространстве, обладающем кривизной, нельзя однозначно произвести сравнение двух векторов, если эти векторы имеют различные точки приложения. В качестве примера рассмотрим двумерное искривленное пространство, образованное поверхностью обыкновенного трехмерного шара. В этом пространстве мы должны считать «прямыми» линиями дуги больших кругов шара, потому что они представляют собой кратчайшие расстояния между точками *).

Если в таком двумерном пространстве нам надо сравнить два вектора \mathbf{A} и \mathbf{B} , то мы должны передвинуть вектор \mathbf{B} , не меняя его направления, таким образом, чтобы совместить его начальную точку с начальной точкой вектора \mathbf{A} . Но что означает «не меняя его направления»? Следуя методу построения, применявшемуся в неискривленном пространстве, мы проводим «прямую» линию через O_A и O_B . Затем мы перемещаем вектор \mathbf{B} так, чтобы его начальная точка перемещалась по этой «прямой» по направлению к начальной точке вектора \mathbf{A} , и делаем это таким образом, чтобы не менялся угол между вектором \mathbf{B} и «прямой» линией $O_A O_B$ (рис. 2.43).

После этого мы можем проверить наш способ сравнения, сначала переместив начало вектора \mathbf{B} в точку O_C , сравнив его там с вектором \mathbf{C} , а затем перемещая \mathbf{B} вдоль «прямой» $O_C O_A$, чтобы сравнить его потом с \mathbf{A} (рис. 2.44). Но эти два способа сравнения \mathbf{B} с \mathbf{A} дают различные ответы. Пусть в данном частном случае оба вектора

*) Линия, каждый отрезок которой MN является кратчайшим расстоянием между точками M и N , называется в математике геодезической линией. Только в евклидовом пространстве геодезические линии всегда являются прямыми. (Прим. ред.)