векторами поляризации e и частотами. Вектор k и индекс s однозначно определяют нормальное колебание, т. е. $\omega_s(k)$ и $e(k)$. Если $e \| k$, то мода наз. продольной (L), если $e \perp k$ — поперечной (T).

В любом кристалле существуют 3 ветви колебаний, к-рые при $\lambda \gg a$ (a — межатомное расстояние) превращаются в обычные звуковые волны в твёрдом теле с линейным законом дисперсии $\omega = c_s k$ ($s=1, 2, 3$), когда все атомы в элементарной ячейке кристалла колеблются в одной фазе (акустич. колебания). При более высоких частотах закон дисперсии акустич. колебаний перестаёт быть линейным. Акустич. колебания охватывают полосу частот от 0 до $\omega_{\text{макс}} \sim \pi c/a \sim 10^{13}$ с$^{-1}$. В дебаевской модели твёрдого тела принимается, что акустич. колебания обладают линейным законом дисперсии при всех частотах в интервале $0 < \omega < \omega_D$, где ω_D — т. н. дебаевская частота, к-рая по порядку величины равна макс. частоте (10^{13} с$^{-1}$) и служит важнейшим параметром спектра К. к. р. (см. *Дебая теория*).

В сложной кристаллич. решётке ($\nu > 1$) существует также ($3\nu - 3$) ветвей оптич. колебаний, отличающихся тем, что при $\lambda \gg a$ ($k=0$) центр масс элементарной ячейки покоится и движение кристалла сводится к относит. смещению атомов внутри элементарной ячейки. При $k=0$ частоты оптич. колебаний $\omega \neq 0$ (рис. 1). Как правило, полосы частот оптич. колебаний расположены выше частот акустич. колебаний, и тогда в спектре К. к. р. возникает запрещённая зона (но возможны перекрытия акустич. и оптич. полос частот). Частным случаем оптич. колебаний являются внутр. моды колебаний сильно связанных атомов в молекулярных кристаллах, частоты к-рых значительно превышают частоты акустич. колебаний.

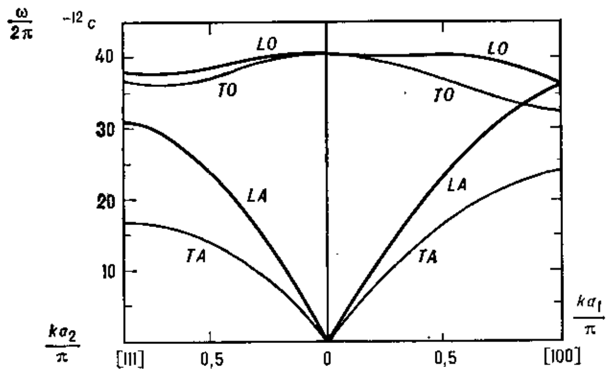

Рис. 1. Законы дисперсии акустических (A) и оптических (O) колебаний с продольной (L) и поперечной (T) поляризацией для алмаза в кристаллографических направлениях [111] и [100], a_1, a_2 — периоды решётки.

Существуют кристаллы, у к-рых нек-рые оптич. частоты сильно зависят от внеш. условий (темп-ры, давления, магн. поля и др.) и при определ. значениях этих параметров могут обращаться в 0. В результате возникает статич. деформация, т. е. перестройка элементарной ячейки, проявляющаяся в структурном фазовом переходе. Оптич. колебания *ионных кристаллов* сильно взаимодействуют с эл.-магн. полем, что приводит к появлению связанных колебаний поляризации кристаллич. решётки и эл.-магн. поля (см. *Поляритон*). Это позволяет возбуждать оптич. колебания ионных кристаллов переменным эл.-магн. полем, напр. световой волной ИК-диапазона (отсюда назв. оптич. колебаний).

Т. к. в гармонич. приближении нормальные колебания независимы, то в кристалле одновременно может быть возбуждено много мод с разными интенсивностями (амплитудами). Полное число независимых К. к. р. равно числу механич. степеней свободы всех атомов в кристалле, а их распределение между разл. частотами даёт ф-ция распределения частот $g(\omega)$. По определению $g(\omega)d\omega$ — число колебаний с частотами, лежащими в интервале от ω до $(\omega + d\omega)$, а $\int g(\omega)d\omega = 3N$, где N — число атомов в кристалле. Вид ф-ции $g(\omega)$ зависит от размерности кристалла. В трёхмерной кристаллич. решётке при низких частотах ($\omega < \omega_D$) для каждой ветви акустич. колебаний $g(\omega) \sim N\omega^2/\omega_D^3$.

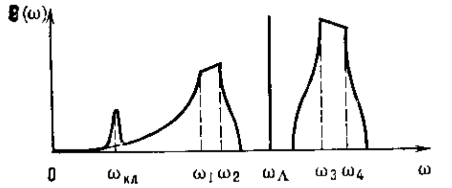

Рис. 2. Схематический вид функции распределения частот акустических и оптических ветвей; ω_1, ω_2, ω_3, ω_4 — частоты особенностей Ван Хова, $\omega_{\text{л}}$ и $\omega_{\text{кл}}$ — частоты локального и квазилокального колебаний.

С ростом ω поведение ф-ции $g(\omega)$ изменяется: она обращается в 0 на краях разрешённых полос, оставаясь равной 0 в запрещённых зонах, а внутри полос обладает *Ван Хова особенностями* (рис. 2). Полная плотность К. к. р. получается суммированием ф-ций $g(\omega)$ для отд. ветвей.

В двумерном кристалле для акустич. ветви (при $\omega \ll \omega_D$) $g(\omega) \sim N\omega/\omega_D^2$, а при $\omega = \omega_m$ и на краях полос оптич. частот $g = \text{const}$. В одномерной кристаллич. цепочке для акустич. ветви при $\omega \ll \omega_D$ $g(\omega) \sim N/\omega_D$, а вблизи $\omega_{\text{макс}}$ $g(\omega) \to \infty$ при $\omega \to \omega_{\text{макс}}$; $g(\omega) \sim N(\omega_{\text{макс}}^2 - \omega^2)^{-1/2}$.

На характер К. к. р. существенное влияние оказывают дефекты в кристаллах. Точечный дефект приводит к локальному искажению решётки и может вызвать локальные колебания, частоты к-рых попадают в запрещённые зоны бездефектного кристалла. Нормальные колебания кристалла с точечным дефектом не являются плоскими волнами: они имеют вид либо сходящихся к дефекту или расходящихся от него колебаний типа сферич. волн с центром в точке расположения дефекта (сплошной спектр частот), либо полностью локализованных у дефекта колебаний (локальные частоты). Тяжёлая примесь в кристалле порождает квазилокальное колебание, частота к-рого попадает в низкочастотную часть акустич. полосы частот.

Появление локальных и квазилокальных колебаний трансформирует $g(\omega)$: кроме плавного изменения в осн. области сплошного спектра, возникают узкие пики плотности колебаний в запрещённых зонах вблизи локальных частот $\omega_{\text{л}}$ и менее выраженные пики, отвечающие квазилокальным частотам $\omega_{\text{кл}}$ (рис. 2). Специфич. локализованные колебания могут возникать при наличии протяжённых дефектов. Вдоль дислокации может распространяться колебание типа изгибной волны натянутой струны. Вдоль плоского дефекта упаковки может распространяться поверхностная волна типа волны Рэлея.

Каждой волне нормального колебания с частотой ω и волновым вектором k сопоставляется совокупность квазичастиц — фононов с энергией $\mathcal{E} = \hbar\omega$ и квазиимпульсом $p = \hbar k$, число к-рых определяется интенсивностью волны. При достаточно низких темп-рах, когда кристалл механически слабо возбуждён, его термодинамич. свойства эквивалентны свойствам газов всех элементарных возбуждений; в частности, решёточная часть энергии кристалла совпадает с энергией газа *фононов*.

Квантовая природа К. к. р. проявляется в наличии т. н. нулевых колебаний атомов при $T=0$ К. Амплитуда нулевых колебаний обычно значительно