действием внеш. сил или в результате теплового движения могут смещаться относительно своих положений равновесия — узлов кристаллич. решётки. Наличие межатомного взаимодействия делает невозможными независимые смещения отд. атомов, и их коллективное движение приобретает характер колебат. процесса, распространяющегося в виде волн по кристаллу. Если смещения атомов малы, то силы межатомного взаимодействия оказываются пропорциональными смещениям и моделью колеблющегося кристалла может служить система частиц, связанных упругими пружинками. Предположение об упругом характере сил, удерживающих атомы в положении равновесия, наз. **гармоническим приближением**. Оно приводит к ур-ниям колебаний вида:

$$m\ddot{u}(\boldsymbol{n}) = -\sum_{n'} \alpha(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{n}')\,u(\boldsymbol{n}'), \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{n}$ — радиус-вектор узла кристаллич. решётки, занятого атомом в равновесии, $u(\boldsymbol{n})$ — смещение атома из $\boldsymbol{n}$-го узла, m — масса атома, α — матрица упругих коэффициентов (**динамическая матрица кристалла**, см. *Модули упругости*). Предполагается, что $u \ll a$, где a — межатомное расстояние (период решётки).

Собственными ф-циями ур-ния (1) являются *нормальные колебания* (моды) типа:

$$u(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{e}(s)\exp[i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}(\boldsymbol{n}) - i\omega t]. \qquad (2)$$

Здесь $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{n})$ — координата $\boldsymbol{n}$-го кристаллич. узла, $\boldsymbol{e}$ — вектор поляризации, определяющий направление индивидуального движения атома, $\boldsymbol{k}$ — квазиволновой вектор ($|\boldsymbol{k}| = 2\pi/\lambda$, где λ — длина волны колебания), ω — частота. В процессе нормальных колебаний все атомы кристалла колеблются около своих положений равновесия по гармонич. закону с одинаковой частотой ω. Независимые колебания отличаются разл. векторами $\boldsymbol{k}$, лежащими внутри первой *Бриллюэна зоны*, а также целочисленным параметром, определяющим ветвь закона дисперсии, связывающего величины ω и $\boldsymbol{k}$:

$$\omega^2 = \omega_s^2(\boldsymbol{k}), \quad s = 1, 2, \ldots, 3\nu. \qquad (3)$$

Здесь ν — число атомов в элементарной ячейке кристалла. Закон дисперсии (3) описывается периодич. ф-цией вектора $\boldsymbol{k}$ с периодами обратной решётки, равными по порядку величины π/a. Число мод равно числу степеней

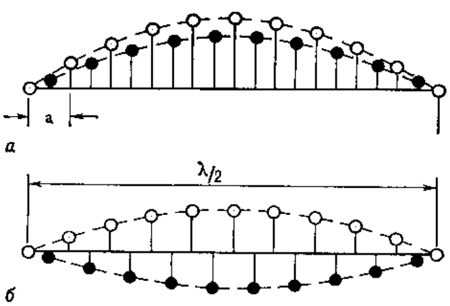

Рис. 1. Схема длинноволновых колебаний одномерного кристалла: *а* — акустические колебания; *б* — оптические колебания (а — период решётки).

свободы всех частиц кристалла. В гармонич. приближении любое движение атомов кристалла может быть представлено в виде суперпозиции нормальных колебаний.

Всегда существуют три ветви колебаний (т. н. **акустические колебания**), при к-рых в длинноволновом приближении ($\lambda \gg a$) все атомы в элементарной ячейке колеблются в одной фазе (рис. 1, *а*) и закон дисперсии к-рых линеен: $\omega_s = c_s k$, $s = 1, 2, 3$. При $\lambda \gg a$ это обычные звуковые волны в твёрдом теле (c — фазовая скорость их распространения) и описывающие их ур-ния (1) превращаются в динамич. ур-ния теории упругости. Если $\boldsymbol{k}$ совпадает с высокосимметричным кристаллографич. направлением (см. *Симметрия кристаллов*), акустич. колебания разделяются на одно продольное и два поперечных. Акустич. колебания охватывают диапазон частот от 0 до $\omega \ll \omega_m \sim \pi c/a \sim 10^{13}$ с$^{-1}$. При более высоких частотах ($\omega \sim \omega_m$) закон дисперсии акустич. колебаний отличается от звукового — он перестаёт быть линейным (рис. 2).

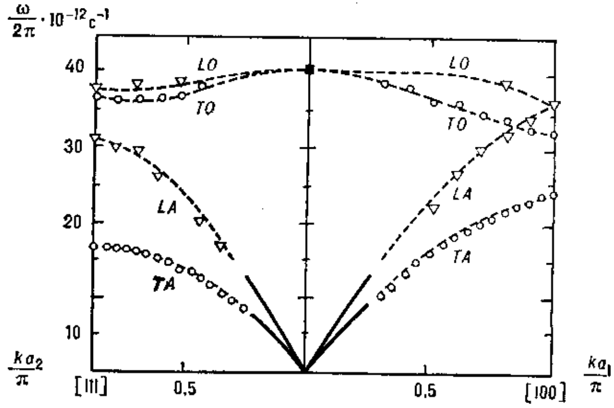

Рис. 2. Законы дисперсии акустических (*А*) и оптических (*О*) колебаний с продольной (*L*) и поперечной (*Т*) поляризацией для алмаза в двух кристаллографических направлениях, восстановленные нейтронографическим методом.

В простой кристаллич. решётке ($\nu = 1$) существуют только акустич. колебания. В сложной кристаллич. решётке ($\nu > 1$) возможны также $3\nu - 3$ ветвей колебаний (т. н. **оптические колебания**), характеризующиеся тем, что при $\lambda \gg a$ центр масс элементарной ячейки покоится и происходят относительные смещения разных атомов внутри элементарной ячейки (рис. 1, *б*).

В *ионных кристаллах*, элементарная ячейка к-рых состоит из ионов противоположных знаков, оптич. колебания сопровождаются колебаниями электрич. поляризации и потому связаны с эл.-магн. колебаниями в ИК-области частот. Название «оптич. колебания» связано с резонансным поглощением эл.-магн. излучения соответствующей частоты.

Частоты оптич. колебаний лежат выше частот акустич. колебаний (рис. 2). Полосы частот акустич. и оптич. колебаний могут перекрываться, но могут быть разделёнными запрещёнными зонами частот.

Часто при качественном описании колебаний кристаллич. решётки и при оценке их вклада в разл. физ. явления (а иногда при теоретич. расчётах) используется теория Дебая. Эта теория основана на предположении, что каждая акустич. ветвь колебаний имеет линейный закон дисперсии при всех частотах в интервале $0 - \omega_{\text{д}}$, где дебаевская частота $\omega_{\text{д}}$ находится из условия равенства числа колебаний в каждой ветви числу атомов в кристалле. Оказывается, что $\omega_{\text{д}} \sim \omega_m$ (см. *Дебая теория* твёрдого тела).

Важнейшей характеристикой спектра колебаний кристалла является ф-ция распределения частот $g(\omega)$, определяющая спектральную плотность колебаний. Ф-ция $g(\omega)$ однозначно связана с законом дисперсии. При низких частотах ($\omega \ll \omega_m$) она не отличается от плотности акустич. колебаний и совпадает с ней: $g(\omega) \sim \omega^2$. В интервале $0 < \omega \leqslant \omega_m$ ф-ция $g(\omega)$ обладает сингулярностями: при нек-рых частотах её производная обращается в бесконечность (см. *Ван Хова особенности*). Такая особенность, в частности, имеется на краю спектра частот при $\omega = \omega_m$, где $g(\omega) \sim \sqrt{\omega_m - \omega}$ (рис. 3). Плотность колебаний чувствительна к наличию дефектов в кристалле. Знание ф-ции $g(\omega)$ необходимо