

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 2

MATRIZ DINÁMICA

CURSO DE VERANO 2014

Resumen de la teoría

Comencemos por definir la energía de la red, W , como la suma sobre todas las interacciones entre pares de átomos¹:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{jl; j'l'} \varphi(jl; j'l') \quad (1)$$

donde jl etiqueta al átomo j -ésimo en la l -ésima celda unidad y la energía de interacción φ es la correspondiente al par (jl) y $(j'l')$. La energía de vibración, en la aproximación armónica esta dada por:

$$E^{harm} = \frac{1}{2} \sum_{jl; j'l'} \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha}(jl) \Phi_{\alpha\beta} u_{\beta}(j'l'), \quad (2)$$

donde definimos el desplazamiento $\mathbf{u}(jl)$ del átomo (jl) , α y β son los índices cartesianos x, y, z y Φ es la matriz de constantes de fuerza, con elementos:

$$\Phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = \frac{\partial^2 W}{\partial u_{\alpha}(jl) \partial u_{\beta}(j'l')} \quad (3)$$

En esta expresión es necesario obtener previamente (1) para calcular Φ . Aunque válido, normalmente es más sencillo trabajar con las interacciones entre pares φ directamente. Se puede mostrar que la matriz de constantes de fuerza puede escribirse alternativamente como:

$$\boxed{\Phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = -\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') + \delta_{jj'} \delta_{ll'} \sum_{j''l''} \phi_{\alpha\beta}(jl; j''l'')} \quad (4)$$

donde $\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l')$ se escribe en función de los pares de interacción:

$$\boxed{\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = \frac{\partial^2 \varphi(jl; j'l')}{\partial u_{\alpha}(jl) \partial u_{\beta}(j'l')}} \quad (5)$$

Proponiendo una solución escrita en modos normales, la ecuación de movimiento del modo se reduce a:

$$\boxed{\mathbf{D}(\mathbf{k})\mathbf{e}(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k})\mathbf{e}(\mathbf{k})} \quad (6)$$

una ecuación de autovalores y autovectores. La matriz dinámica \mathbf{D} esta dada por:

$$D_{\alpha\beta}(jj', \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(j0, j'l') \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}(j'l') - \mathbf{r}(j0))] \quad (7)$$

donde $l = 0$ refiere a una celda unidad de referencia, $\mathbf{e}(\mathbf{k})$ es el vector de polarización y ω las frecuencias de los modos normales. Respecto de los $\mathbf{r}(jl)$, hay dos elecciones equivalentes para ellos: pueden tomarse

¹Esta sección esta basada en el libro "Introduction to Lattice Dynamics" de Martin T. Dove.

como las posiciones de las celdas \mathbf{R}_l ó como las posiciones de equilibrio de los átomos. En ambos casos las frecuencias de oscilación son las mismas y solo aparece una diferencia en la fase del vector de desplazamiento. Por coherencia con las clases, tomaremos los vectores de la red de Bravais, o sea:

$$D_{\alpha\beta}(jj', \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(j0, j'l') \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{l'} - \mathbf{R}_0)] \quad (8)$$

Energía de interacción de pares

Utilizando el formalismo desarrollado en el punto anterior, cualquier ejercicio de matriz dinámica se reduce a obtener las constantes $\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l')$ utilizando (5) y reemplazarlas en (4) y (8) para obtener (6). Todo ello es bastante mecánico salvo quizás, el primer ítem: calcular $\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l')$ en el caso más general. Consideremos entonces dos “átomos” A y B interactuando con una fuerza elástica de constante C y que oscilan alrededor de sus posiciones de equilibrio $\mathbf{0} = (0, 0, 0)$ y $\mathbf{d}_0 = (d_0^x, d_0^y, d_0^z)$. La energía de interacción $\phi(B;A)$ es exactamente $\phi(B;A) = \frac{C}{2} (d - d_0)^2$ donde $d = |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|$ es la separación entre los átomos y $d_0 = |\mathbf{d}_0|$ la separación en equilibrio. La primera derivada es:

$$\frac{\partial \phi}{\partial r_\beta^A} = C (|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| - d_0) \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\beta^A}$$

La segunda derivada:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_\alpha^B \partial r_\beta^A} &= C \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha^B} \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\beta^A} + C |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| \frac{\partial^2 |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha \partial r_\beta^A} - C d_0 \frac{\partial^2 |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha \partial r_\beta^A} = \\ &= C \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha^B} \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\beta^A} + C (|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| - d_0) \frac{\partial^2 |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha \partial r_\beta^A} \end{aligned}$$

El segundo término se anula al evaluar la derivada en la posición de equilibrio, por lo que lo descartaremos. Siguiendo con la derivación:

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_\alpha^B \partial r_\beta^A} \right|_{d=d_0} = C \left. \frac{r_\alpha^B - r_\alpha^A}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|} \frac{r_\beta^B - r_\beta^A}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|} \right|_{d=d_0} \quad (9)$$

Por ejemplo, si la interacción es enteramente en \hat{x} , $\phi(B;A) = \frac{C}{2} (|x_B - x_A| - d_0)^2$ y la matriz de constantes de fuerza será:

$$\phi(B;A) = \begin{pmatrix} C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Para \hat{y} y \hat{z} es análogo. Si la interacción está en el primer cuadrante $\phi(B;A) = \frac{C}{2} \left(\sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2} - d_0 \right)^2$, entonces:

$$\phi(B;A) = C \begin{pmatrix} \left(\frac{d_0^x}{d_0} \right)^2 & \frac{d_0^x d_0^y}{d_0 d_0} & 0 \\ \frac{d_0^x d_0^y}{d_0 d_0} & \left(\frac{d_0^y}{d_0} \right)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Para el tercer cuadrante es resultado es igual. Para el segundo y cuarto cuadrante aparece un signo menos en los términos extra-diagonales.

Algunos ejercicios de la Guía 2

A continuación va un esbozo de la resolución de algunos ejercicios de matriz dinámica.

Ejercicio 5

Este es un ejemplo sencillo y haremos solo el ítem a): encontrar la matriz dinámica. En este ejercicio tenemos una red monoatómica y por lo tanto no necesitamos una base. Las energías de interacción de pares son $\varphi(0; \pm a\hat{x})$ y $\varphi(0; \pm b\hat{y})$. Revisando la definición (7) podemos ver que la matriz de constantes de fuerza, en este caso se simplifica:

$$\Phi_{\alpha\beta}(0; l') = -\phi_{\alpha\beta}(0; l') + \delta_{0l'} \sum_{l''} \phi_{\alpha\beta}(0; l'') \quad (10)$$

dado que todos los índices j son irrelevantes (no hay base). Comencemos con $l' = 0$:

$$\Phi_{\alpha\beta}(0; 0) = -\phi_{\alpha\beta}(0; 0) + \sum_{l''} \phi_{\alpha\beta}(0; l'')$$

que, expandiéndolo en $l'' = \pm a\hat{x}, \pm b\hat{y}$ (el resto de los términos es cero porque solo hay interacciones a primeros vecinos) queda:

$$\Phi(0; 0) = \begin{pmatrix} 2C_1 & 0 \\ 0 & 2C_2 \end{pmatrix}.$$

El siguiente caso a considerar es $l' = \pm a\hat{x}, \pm b\hat{y}$. Aquí el segundo término de (10) se anula porque la delta es cero. Así:

$$\Phi(0; \pm a\hat{x}) = \begin{pmatrix} -C_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \Phi(0; \pm b\hat{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -C_2 \end{pmatrix}.$$

La matriz dinámica es entonces:

$$D(\mathbf{k}) = \frac{1}{m} \left\{ \Phi(0; 0) + \Phi(0; a\hat{x})e^{ik_x a} + \Phi(0; -a\hat{x})e^{ik_x a} + \Phi(0; b\hat{y})e^{ik_y b} + \Phi(0; -b\hat{y})e^{-ik_y b} \right\}$$

o, en formato matricial:

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{2C_1}{m} (1 - \cos(k_x a)) & 0 \\ 0 & \frac{2C_2}{m} (1 - \cos(k_y b)) \end{pmatrix}.$$

Ejercicio 6

Un poco más complicado, hay dos átomos en la base y el problema es bidimensional, así que la matriz dinámica es de 4×4 . En este caso los índices j serán A ó B . Comencemos por el sector AA :

$$\Phi_{\alpha\beta}(A0; Al') = -\phi_{\alpha\beta}(A0; Al') + \delta_{0l'} \sum_{j''l''} \phi_{\alpha\beta}(A0; j''l'') \quad (11)$$

Los términos que aparecen son:

$$\begin{aligned} \Phi(A0; A0) &= \phi(A0; A, a\hat{x}) + \phi(A0; A, -a\hat{x}) + \phi(A0; B0) + \phi(A0; B, -2a\hat{y}) \\ &\quad + \phi(A0; B, a\hat{x}) + \phi(A0; B, -a\hat{x}) + \phi(A0; B, a\hat{x} - 2a\hat{y}) + \phi(A0; B, -a\hat{x} - 2a\hat{y}) \\ &= \begin{pmatrix} 2C_{AA} + 2C_4 & 0 \\ 0 & 2C_{AB} + 2C_4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\Phi(A0; A, a\hat{x}) = \Phi(A0; A, -a\hat{x}) = \begin{pmatrix} -C_{AA} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

El sector AA de la matriz dinámica es entonces:

$$D(AA, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{2(C_{AA}+C_4)}{m_A} & 0 \\ 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_A} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{2C_{AA}}{m_A} \cos(k_x a) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2C_{AA}}{m_A} (1 - \cos(k_x a)) + \frac{2C_4}{m_A} & 0 \\ 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_A} \end{pmatrix}$$

El sector BB es completamente análogo:

$$D(BB, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{2(C_{BB}+C_4)}{m_B} & 0 \\ 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_B} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{2C_{BB}}{m_B} \cos(k_x a) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2C_{BB}}{m_B} (1 - \cos(k_x a)) + \frac{2C_4}{m_B} & 0 \\ 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_B} \end{pmatrix}$$

Por último, para el sector AB :

$$\Phi_{\alpha\beta}(A0; B1') = -\phi_{\alpha\beta}(A0; B1') \quad (12)$$

solo hay tres tipos de casos posibles:

$$\Phi(A0; B0) = \Phi(A0; B, -2a\hat{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -C_{AB} \end{pmatrix}$$

$$\Phi(A0; B, a\hat{x}) = \Phi(A0; B, -a\hat{x} - 2a\hat{y}) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_4 & C_4 \\ C_4 & C_4 \end{pmatrix}$$

$$\Phi(A0; B, -a\hat{x}) = \Phi(A0; B, a\hat{x} - 2a\hat{y}) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_4 & -C_4 \\ -C_4 & C_4 \end{pmatrix}$$

por lo que:

$$\begin{aligned} D(AB, \mathbf{k}) &= -\frac{2C_{AB}}{\sqrt{m_A m_B}} e^{-ik_y a} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \cos(k_y a) \end{pmatrix} - \\ &\quad - \frac{C_4}{\sqrt{m_A m_B}} \begin{pmatrix} \cos(k_x a) (1 + e^{-i2k_y a}) & i \sin(k_x a) (1 - e^{-i2k_y a}) \\ i \sin(k_x a) (1 - e^{-i2k_y a}) & \cos(k_x a) (1 + e^{-i2k_y a}) \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{2e^{-ik_y a}}{\sqrt{m_A m_B}} \begin{pmatrix} C_4 \cos(k_x a) \cos(k_y a) & C_4 \sin(k_x a) \sin(k_y a) \\ C_4 \sin(k_x a) \sin(k_y a) & C_4 \cos(k_x a) \cos(k_y a) + C_{AB} \cos(k_y a) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

El sector BA se obtiene por hermiticidad y así la matriz completa es:

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} D(AA, \mathbf{k}) & D(AB, \mathbf{k}) \\ D(AB, \mathbf{k})^\dagger & D(BB, \mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

Para el caso $k_x = 0$, la matriz es:

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{2C_4}{m_A} & 0 & -\frac{2C_4 e^{-ik_y a}}{\sqrt{m_A m_B}} \cos(k_y a) & 0 \\ 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_A} & 0 & -\frac{2(C_{AB}+C_4) e^{-ik_y a}}{\sqrt{m_A m_B}} \cos(k_y a) \\ -\frac{2C_4 e^{ik_y a}}{\sqrt{m_A m_B}} \cos(k_y a) & 0 & \frac{2C_4}{m_B} & 0 \\ 0 & -\frac{2(C_{AB}+C_4) e^{ik_y a}}{\sqrt{m_A m_B}} \cos(k_y a) & 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_B} \end{pmatrix}$$

Para el caso $k_y = 0$, la matriz es:

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{4C_{AA}}{m_A} \sin^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \frac{2C_4}{m_A} & 0 & -\frac{2C_4}{\sqrt{m_A m_B}} \cos(k_x a) & 0 \\ 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_A} & 0 & -\frac{2C_4}{\sqrt{m_A m_B}} \left(\cos(k_x a) + \frac{C_{AB}}{C_4} \right) \\ -\frac{2C_4}{\sqrt{m_A m_B}} \cos(k_x a) & 0 & \frac{4C_{BB}}{m_B} \sin^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \frac{2C_4}{m_B} & 0 \\ 0 & -\frac{2C_4}{\sqrt{m_A m_B}} \left(\cos(k_x a) + \frac{C_{AB}}{C_4} \right) & 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_B} \end{pmatrix}$$

Ejercicio 8 Un tanto complicado porque las interacciones elásticas no coinciden con los ejes cartesianos.

En este caso nuevamente tenemos una red de Bravais sin base y por lo tanto esperamos que la matriz dinámica sea de 3×3 . El problema es que hay 12 primeros vecinos al sitio 0 ubicados en:

$$\frac{a}{2}(\pm\hat{x} \pm \hat{y}); \frac{a}{2}(\pm\hat{y} \pm \hat{z}); \frac{a}{2}(\pm\hat{z} \pm \hat{x})$$

La matriz de constantes de fuerza es:

$$\Phi_{\alpha\beta}(0;l') = -\phi_{\alpha\beta}(0;l') + \delta_{0l'} \sum_{l''} \phi_{\alpha\beta}(0;l'')$$

La complicación extra es que ahora el término de interacción de pares es más general como el visto en (9) y entonces hay que tener cuidado cuando se evalúan las derivadas. Empecemos con $l' = 0$:

$$\Phi_{\alpha\beta}(0;0) = -\phi_{\alpha\beta}(0;0) + \sum_{l''} \phi_{\alpha\beta}(0;l'')$$

Tomemos el plano xy , aquí los cuatro vecinos están en posiciones que forman un ángulo de 45° y por lo tanto las constantes de fuerza son $C \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} = C/2 \equiv C'$ a menos del signo correspondiente según el cuadrante. Como todos los otros planos son equivalentes, usaremos C' para la constante de fuerza efectiva. Así:

$$\Phi(0,0) = 4 \begin{pmatrix} C' & 0 & 0 \\ 0 & C' & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 4 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & C' & 0 \\ 0 & 0 & C' \end{pmatrix} + 4 \begin{pmatrix} C' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C' \end{pmatrix} = 8C' \mathbb{I}$$

donde las matrices corresponden al plano xy , yz y zx respectivamente. Para $l' \neq 0$ debemos considerar los doce vecinos al sitio $\mathbf{0}$:

$$\Phi\left(0, \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})\right) = \Phi\left(0, -\frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})\right) = - \begin{pmatrix} C' & C' & 0 \\ C' & C' & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ etc.}$$

$$\Phi\left(0, \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y})\right) = \Phi\left(0, -\frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y})\right) = - \begin{pmatrix} C' & -C' & 0 \\ -C' & C' & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ etc.}$$

La matriz dinámica es entonces:

$$\begin{aligned} D(\mathbf{k}) = & \frac{4}{m} \begin{pmatrix} C & 0 & 0 \\ 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix} \\ & - \frac{1}{m} \begin{pmatrix} C & C & 0 \\ C & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cos\left(\frac{k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2}\right) - \frac{1}{m} \begin{pmatrix} C & -C & 0 \\ -C & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cos\left(\frac{k_x a}{2} - \frac{k_y a}{2}\right) \\ & - \frac{1}{m} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & C & C \\ 0 & C & C \end{pmatrix} \cos\left(\frac{k_y a}{2} + \frac{k_z a}{2}\right) - \frac{1}{m} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & C & -C \\ 0 & -C & C \end{pmatrix} \cos\left(\frac{k_y a}{2} - \frac{k_z a}{2}\right) \\ & - \frac{1}{m} \begin{pmatrix} C & 0 & C \\ 0 & 0 & 0 \\ C & 0 & C \end{pmatrix} \cos\left(\frac{k_z a}{2} + \frac{k_x a}{2}\right) - \frac{1}{m} \begin{pmatrix} C & 0 & -C \\ 0 & 0 & 0 \\ -C & 0 & C \end{pmatrix} \cos\left(\frac{k_z a}{2} - \frac{k_x a}{2}\right) \end{aligned}$$

Usando las identidades $\cos u + \cos v = 2 \cos\left(\frac{u+v}{2}\right) \cos\left(\frac{u-v}{2}\right)$ y $\cos u - \cos v = -2 \sin\left(\frac{u+v}{2}\right) \sin\left(\frac{u-v}{2}\right)$:

$$\begin{aligned}
 D(\mathbf{k}) = & \frac{4}{m} \begin{pmatrix} C & 0 & 0 \\ 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix} - \frac{2C}{m} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) & -\sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) & 0 \\ -\sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) & \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \\
 & - \frac{2C}{m} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) & -\sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_z a}{2}\right) \\ 0 & -\sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_z a}{2}\right) & \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \end{pmatrix} - \\
 & - \frac{2C}{m} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) & 0 & -\sin\left(\frac{k_z a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \\ 0 & 0 & 0 \\ -\sin\left(\frac{k_z a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) & 0 & \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

En la dirección $(1, 0, 0)$ la matriz se simplifica:

$$\begin{aligned}
 D(\mathbf{k}) = & \frac{4}{m} \begin{pmatrix} C & 0 & 0 \\ 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix} - \frac{2C}{m} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{2C}{m} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \end{pmatrix} = \\
 = & \frac{2C}{m} \begin{pmatrix} 2 - 2\cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 2 - \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 2 - \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$