ESTRUCTURA DE LA MATERIA 2

MATRIZ DINÁMICA

PRIMER CUATRIMESTRE DE 2015

Resumen de la teoría

Comencemos por definir la energía de la red, W, como la suma sobre todas las interacciones entre pares de átomos[1]:

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

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:

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

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:

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

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:

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

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

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

La energía en este caso se escribe:

$$E^{harm} = \frac{1}{4} \sum_{jl;j'l'} \sum_{\alpha\beta} \left[u_\alpha(jl) - u_\alpha(j'l')\right] \phi_{\alpha\beta}(jl;j'l') \left[u_\beta(jl) - u_\beta(j'l')\right]. \tag{6}$$

Es fácil ver que reemplazando (4) en (2) se obtiene (6).

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

$$\boxed{\mathbf{D}(\mathbf{k})\mathbf{e}(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k})\mathbf{e}(\mathbf{k})} \tag{7}$$

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

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

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

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 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:

$$\boxed{D_{\alpha\beta}(jj',\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(j0, j'l') \exp\left[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{l'} - \mathbf{R}_0)\right]} \tag{9}$$

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 (9) para obtener (7). Todo ello es bastante mecánico salvo quizás, el primer item: 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 $\varphi(B;A)$ es exactamente $\varphi(B;A) = \frac{C}{2}(d - d_0)^2$ 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:

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

La segunda derivada:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\varphi}{\partial r_\alpha^B \partial r_\beta^A} &= C\frac{\partial\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha^B}\frac{\partial\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\beta^A} + C\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|\frac{\partial^2\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha^B \partial r_\beta^A} - Cd_0\frac{\partial^2\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha^B \partial r_\beta^A} = \\ &\qquad C\frac{\partial\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha^B}\frac{\partial\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\beta^A} + C\left(|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| - d_0\right)\frac{\partial^2\,|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_\alpha^B \partial r_\beta^A}\end{aligned}$$

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

$$\boxed{\left.\frac{\partial^2\varphi}{\partial r_\alpha^B \partial r_\beta^A}\right|_{d=d_0} = C\left.\frac{r_\alpha^B - r_\alpha^A}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}\frac{r_\beta^B - r_\beta^A}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}\right|_{d=d_0}}. \tag{10}$$

Por ejemplo, si la interacción es enteramente en $\hat{x}$, $\varphi(B;A) = \frac{C}{2}\left(|x_B - x_A| - d_0\right)^2$ 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 $\varphi(B;A) = \frac{C}{2}\left(\sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2} - d_0\right)^2$, entonces:

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

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 item 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 (4) podemos ver que la matriz de constantes de fuerza, en este caso se simplifica:

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

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 (11) se anula porque la delta es cero. Así:

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

La matriz dinámica es entonces:

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

o, en formato matricial:

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

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:

$$\Phi_{\alpha\beta}(A0;Al') = -\phi_{\alpha\beta}(A0;Al') + \delta_{0l'}\sum_{j''l''}\phi_{\alpha\beta}(A0;j''l'') \tag{12}$$

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:

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

El sector BB es completamente análogo:

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

Por último, para el sector AB:

$$\Phi_{\alpha\beta}(A0;Bl') = -\phi_{\alpha\beta}(A0;Bl') \tag{13}$$

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:

$$\begin{aligned} D(AB,\mathbf{k}) = &-\frac{2C_{AB}}{\sqrt{m_Am_B}}e^{-ik_ya}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \cos(k_ya) \end{pmatrix} - \\ &-\frac{C_4}{\sqrt{m_Am_B}}\begin{pmatrix} \cos(k_xa)\left(1+e^{-i2k_ya}\right) & i\sin(k_xa)\left(1-e^{-i2k_ya}\right) \\ i\sin(k_xa)\left(1-e^{-i2k_ya}\right) & \cos(k_xa)\left(1+e^{-i2k_ya}\right) \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{2e^{-ik_ya}}{\sqrt{m_Am_B}}\begin{pmatrix} C_4\cos(k_xa)\cos(k_ya) & C_4\sin(k_xa)\sin(k_ya) \\ C_4\sin(k_xa)\sin(k_ya) & C_4\cos(k_xa)\cos(k_ya)+C_{AB}\cos(k_ya) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

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:

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{2C_4}{m_A} & 0 & -\frac{2C_4e^{-ik_ya}}{\sqrt{m_Am_B}}\cos(k_ya) & 0 \\ 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_A} & 0 & -\frac{2(C_{AB}+C_4)e^{-ik_ya}}{\sqrt{m_Am_B}}\cos(k_ya) \\ -\frac{2C_4e^{ik_ya}}{\sqrt{m_Am_B}}\cos(k_ya) & 0 & \frac{2C_4}{m_B} & 0 \\ 0 & -\frac{2(C_{AB}+C_4)e^{ik_ya}}{\sqrt{m_Am_B}}\cos(k_ya) & 0 & \frac{2(C_{AB}+C_4)}{m_B} \end{pmatrix}.$$

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

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

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 constates 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 (10) 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 $\cos u-\cos v=-2\sin\left(\frac{u+v}{2}\right)\sin\left(\frac{u-v}{2}\right)$:

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

$$-\frac{2C}{m}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & \cos\left(\frac{k_ya}{2}\right)\cos\left(\frac{k_za}{2}\right) & -\sin\left(\frac{k_ya}{2}\right)\sin\left(\frac{k_za}{2}\right)\\ 0 & -\sin\left(\frac{k_ya}{2}\right)\sin\left(\frac{k_za}{2}\right) & \cos\left(\frac{k_ya}{2}\right)\cos\left(\frac{k_za}{2}\right)\end{pmatrix}-$$

$$-\frac{2C}{m}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{k_za}{2}\right)\cos\left(\frac{k_xa}{2}\right) & 0 & -\sin\left(\frac{k_za}{2}\right)\sin\left(\frac{k_xa}{2}\right)\\ 0 & 0 & 0\\ -\sin\left(\frac{k_za}{2}\right)\sin\left(\frac{k_xa}{2}\right) & 0 & \cos\left(\frac{k_za}{2}\right)\cos\left(\frac{k_xa}{2}\right)\end{pmatrix}$$

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

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

$$=\frac{2C}{m}\begin{pmatrix}2-2\cos\left(\frac{k_xa}{2}\right) & 0 & 0\\ 0 & 2-\cos\left(\frac{k_xa}{2}\right) & 0\\ 0 & 0 & 2-\cos\left(\frac{k_xa}{2}\right)\end{pmatrix}$$