$$M_\alpha \ddot{\vec u}_{n,\alpha}(t) = -\sum_{n',\alpha'} \Phi_{\alpha,\alpha'}(\vec R_n - \vec R_{n'}) \cdot \vec u_{n',\alpha'}(t)$$

$n = 1, \dots N$: nº de celdillas

$\alpha = 1, \dots 2$: nº de átomos de la celdilla

· Por simetría la reescribimos como:

$$\sqrt{M_\alpha}\, \ddot{\vec u}_{n,\alpha} = -\frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha'}}} \sum_{n',\alpha'} \Phi_{\alpha,\alpha'}(\vec R_n - \vec R_{n'}) \cdot \vec u_{n',\alpha'}(t)$$

· Debido a la periodicidad de la red:

$$\sqrt{M_\alpha}\, \vec u_{n,\alpha} = \vec e_\alpha(\vec q)\, e^{i(\vec q \cdot \vec r_\alpha - \omega t)}$$

$$\vec r^{\,0}_{n,\alpha} = \vec R_n + \vec d_n$$

$$-\sqrt{M_\alpha}\, \ddot{\vec u}_{n,\alpha} = \omega^2 \sqrt{M_\alpha}\, \vec u_{n,\alpha} = \omega^2 \vec e_\alpha\, e^{i(\vec q \cdot \vec r_\alpha - \omega t)}$$

· Teniendo en cuenta que debemos evaluar para $n,\alpha = 0,\alpha \Rightarrow$

$$\omega^2(\vec q)\, \vec e_\alpha(\vec q) = \sum_{\alpha'} \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}} \sum_n \Phi_{\alpha,\alpha'}(\vec R_n)\, e^{-i\vec q \cdot \vec R_n}\, \vec e_{\alpha'}(\vec q)$$

MATRIZ DINÁMICA:

$$D_{\alpha,\alpha'}(\vec q) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}} \sum_n \Phi_{\alpha\alpha'}(\vec R_n)\, e^{-i\vec q \cdot \vec R_n}$$

PROBLEMA DE AUTOVALORES

$$\boxed{\sum_{\alpha'} D_{\alpha\alpha'}(\vec q) \cdot \vec e_{\alpha'}(\vec q) = \omega(\vec q)^2 \cdot \vec e_\alpha(\vec q)}$$

$$-m_{\nu'} \ddot{\vec u}_{\nu',\vec 0} = \sum_{\nu,\vec\ell} \alpha_{\nu',\nu,\vec\ell}(\hat R_{\nu',\nu,\ell} \otimes \hat R_{\nu',\nu,\ell}) \cdot (\vec u_{\nu,\vec\ell} - \vec u_{\nu',\vec 0})$$

$\vec\ell = 1, \dots N$: nº de celdillas

$\nu = 1, \dots 2$: nº de átomos en la celdilla

· La fuerza que ejerce el átomo $\nu,\vec\ell$ sobre el átomo $\nu',\vec 0$ tiene aproximadamente la dirección determinada por las posiciones de equilibrio de estos átomos, que es la del vector

$$\vec R_{\nu',\nu,\vec\ell} = \vec R_{\vec\ell} + \vec R^{\,0}_\nu - \vec R^{\,0}_{\nu'}$$

$$m_{\nu'} \ddot{\vec u}_{\nu',0} = \dots$$

$$\vec u_{\nu,\vec\ell} = \vec A_\nu(\vec q)\, e^{i(\vec q \cdot \vec R_\ell - \omega t)}$$

$$m_{\nu'} \omega^2 \vec A_{\nu'} = \sum_{\nu,\vec\ell} \alpha_{\nu',\nu,\ell}(\hat R_{\nu',\nu,\vec\ell} \otimes \hat R_{\nu',\nu,\vec\ell}) \cdot [\vec A_\nu \cdot e^{-i\vec q \cdot \vec R_\ell} - \vec A_{\nu'}]$$

escribo esta ecuación y luego la reescribo de forma:

$$~~m_{\nu'}\omega^2 \vec A_{\nu'} = \sum M_{\nu'\nu}~~ \quad m_{\nu'} \omega^2 \vec A_{\nu'} = \sum_\nu M_{\nu';\nu}\, \vec A_\nu$$

$\longleftrightarrow$ FORMALMENTE SON IDÉNTICAS

$$\boxed{\omega^2 \sqrt{m_{\nu'}}\, \vec A_{\nu'} = \frac{1}{\sqrt{m_{\nu'}}\sqrt{m_\nu}} \sum_\nu M_{\nu',\nu} \sqrt{m_\nu}\, \vec A_\nu}$$

$$D_{\nu';\nu}(\vec q) = \frac{1}{\sqrt{m_{\nu'}}\sqrt{m_\nu}} M_{\nu',\nu}$$

$$\vec e_\nu(\vec q) = \sqrt{m_\nu}\, \vec A_\nu(\vec q)$$