3. Deducción de la expresión general de las matrices de constantes de fuerza

El grafeno pertenece al grupo de simetría D_{6h}, que es generado por $\{C_3, \sigma_v, \sigma_z\}$, siendo C_3 las rotaciones de 120º alrededor del eje z, σ_z la reflexión en el plano xy, y σ_v la reflexión en el plano xz (Falkovsky,2007; Kundu,2007; Nicholson y Bacon; 1971).
Así, se puede deducir las siguientes relaciones entre las matrices de constantes de fuerza $B_{1,2,3}$,$A_{4,..,9}$ debidas a C_3:

$$\Phi^{A0B2} = Q_{-120}\Phi^{A0B1}Q_{-120}^T \tag{11a}$$
$$\Phi^{A0B3} = Q_{120}\Phi^{A0B1}Q_{120}^T \tag{11b}$$
$$\Phi^{A0A6} = Q_{-120}\Phi^{A0A4}Q_{-120}^T \tag{11c}$$
$$\Phi^{A0A8} = Q_{120}\Phi^{A0A4}Q_{120}^T \tag{11d}$$
$$\Phi^{A0A7} = Q_{-120}\Phi^{A0A5}Q_{-120}^T \tag{11e}$$
$$\Phi^{A0A9} = Q_{120}\Phi^{A0A5}Q_{120}^T \tag{11f}$$

siendo Q_i las consabidas matrices de giro de i grados. Debidas a σ_z tendríamos 9 relaciones:

$$\Phi^{A0M} = Q_{z\to -z}\Phi^{A0M}Q_{z\to -z}^T \tag{12}$$

siendo $M = B0, B1, B2, A4, ...A9$, y debidas a σ_v tendríamos 5 relaciones:

$$\Phi^{A0B1} = Q_{y\to -y}\Phi^{A0B1}Q_{y\to -y}^T \tag{13a}$$
$$\Phi^{A0A8} = Q_{y\to -y}\Phi^{A0A9}Q_{y\to -y}^T \tag{13b}$$
$$\Phi^{A0B3} = Q_{y\to -y}\Phi^{A0B2}Q_{y\to -y}^T \tag{13c}$$
$$\Phi^{A0A7} = Q_{y\to -y}\Phi^{A0A4}Q_{y\to -y}^T \tag{13d}$$
$$\Phi^{A0A6} = Q_{y\to -y}\Phi^{A0A5}Q_{y\to -y}^T \tag{13e}$$

con las matrices de reflexión:

$$Q_{y\to -y} = I - 2nn^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{14a}$$

$$Q_{z\to -z} = I - 2nn^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{14b}$$

La expresión de las matrices de constantes de fuerza, una vez resueltas las ecuaciones, queda como sigue. Para los primeros vecinos,

$$\Phi^{A0B1} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{15a}$$

$$\Phi^{A0B2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(a+3b) & \frac{1}{4}\left(\sqrt{3}a-\sqrt{3}b\right) & 0 \\ \frac{1}{4}\left(\sqrt{3}a-\sqrt{3}b\right) & \frac{1}{4}(3a+b) & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{15b}$$

$$\Phi^{A0B3} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(a+3b) & \frac{1}{4}\left(-\sqrt{3}a+\sqrt{3}b\right) & 0 \\ \frac{1}{4}\left(-\sqrt{3}a+\sqrt{3}b\right) & \frac{1}{4}(3a+b) & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{15c}$$

y para los segundos vecinos:

$$\Phi^{A0A4} = \begin{pmatrix} d & e & 0 \\ -e & f & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \tag{16a}$$

$$\Phi^{A0A5} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}\left(\sqrt{3}d-4e-\sqrt{3}f\right) & 0 \\ \frac{1}{4}\left(\sqrt{3}d+4e-\sqrt{3}f\right) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \tag{16b}$$

$$\Phi^{A0A6} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}\left(-\sqrt{3}d+4e+\sqrt{3}f\right) & 0 \\ \frac{1}{4}\left(-\sqrt{3}d-4e+\sqrt{3}f\right) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \tag{16c}$$

$$\Phi^{A0A7} = \begin{pmatrix} d & -e & 0 \\ e & f & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \tag{16d}$$

$$\Phi^{A0A8} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}\left(\sqrt{3}d+4e-\sqrt{3}f\right) & 0 \\ \frac{1}{4}\left(\sqrt{3}d-4e-\sqrt{3}f\right) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \tag{16e}$$

$$\Phi^{A0A9} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}\left(-\sqrt{3}d-4e+\sqrt{3}f\right) & 0 \\ \frac{1}{4}\left(-\sqrt{3}d+4e+\sqrt{3}f\right) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \tag{16f}$$