5. Deducción de las constantes de fuerza

Identificando términos con los términos de la energía del apartado de Introducción deducimos las matrices de constantes de fuerza entre aristas, sumando las contribuciones de todas las aristas. Para hallar las constantes de fuerza entre átomos, hemos utilizado la secuencia:

$$\hat{\Psi}\begin{pmatrix} & \theta & \\ \alpha & & \beta \end{pmatrix} = \sum_{l} \Psi \begin{pmatrix} & l & \\ \alpha & & \beta \end{pmatrix} e^{-i\theta l} \tag{22}$$

$$Q_1 \hat{\Psi} Q_1^{T*} \rightarrow \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_{AA} & \hat{\Phi}_{AB} \\ \hat{\Phi}_{BA} & \hat{\Phi}_{BB} \end{pmatrix} \tag{23}$$

$$\Phi\left(l\right) = \frac{1}{\left(2\pi\right)^2} \int\limits_{[-\pi,\pi]} \hat{\Phi}_{AA} e^{i\theta l} d\theta \tag{24}$$

si el átomo en la posición (l) es del mismo tipo que el $e_0(l,1)$;

$$\Phi\left(l\right) = \frac{1}{\left(2\pi\right)^2} \int\limits_{[-\pi,\pi]} \hat{\Phi}_{AB} e^{i\theta l} d\theta \tag{25}$$

si el átomo en la posición (l) es del mismo tipo que el $e_0(l,2)$ (BA si queremos hallar la fuerza vista desde el segundo átomo);

$$\Phi\left(l\right) = \frac{1}{\left(2\pi\right)^2} \int\limits_{[-\pi,\pi]} \hat{\Phi}_{BB} e^{i\theta l} d\theta \tag{26}$$

si queremos hallar la relación entre átomos del tipo $e_0(l,2)$;