Négyzetrács előfeszítetlen rugókkal, másodszomszéd kölcsönhatásokkal

A rendszer: négyzetrács a rácsállandóval, egyatomos bázissal, elsőszomszédok mentén k_1, másodszomszédok mentén k_2 rugóállandóval. Minden rugón $F_0 = 0$.

Mivel nincs előfeszítés, ezért vezető rendben a rugóerő két atom között

$$\vec{F}_{12} = \frac{k\left(\vec{r}_{12} \cdot \Delta\vec{u}\right)}{\left|\vec{r}_{12}\right|^2}\vec{r}_{12},$$

a gyakon elhangzott definíciókkal. Konkrét esetben a (j, l) rácsponton ülő atomra az ő nyolc szomszédja tud hatni. A fellépő erők a szomszédok mentén:

szomszéd	$\vec{r}_{12}$	erő (j,l)-re: $\vec{F}_{12} = \frac{k\left(\vec{r}_{12}\cdot\Delta\vec{u}\right)}{\left\|\vec{r}_{12}\right\|^2}\vec{r}_{12}$
jobbra/balra, $(j \pm 1, l)$	$\begin{bmatrix} \pm a \\ 0 \end{bmatrix}$	$\frac{k_1[\pm a(u_x(j\pm1,l)-u_x(j,l))]}{a^2}\begin{pmatrix} \pm a \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} k_1\left[(u_x(j\pm 1,l) - u_x(j,l))\right] \\ 0 \end{bmatrix}$
fel/le, $(j, l \pm 1)$	$\begin{bmatrix} 0 \\ \pm a \end{bmatrix}$	$\frac{k_1[\pm a(u_y(j,l\pm1)-u_y(j,l))]}{a^2}\begin{pmatrix} 0 \\ \pm a \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ k_1\left[(u_y(j,l\pm 1) - u_y(j,l))\right] \end{bmatrix}$
jobbra fel, $(j+1, l+1)$	$\begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix}$	$k_2\frac{\overbrace{a\left[u_x(j+1,l+1) - u_x(j,l) + u_y(j+1,l+1) - u_y(j,l)\right]}^{\vec{r}_{12}\cdot\Delta\vec{u}}}{\underbrace{2a^2}_{\left\|\vec{r}_{12}\right\|^2}}\begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix} =$ $= \begin{bmatrix} \frac{k_2}{2}\left[u_x(j+1,l+1) - u_x(j,l) + u_y(j+1,l+1) - u_y(j,l)\right] \\ \frac{k_2}{2}\left[u_x(j+1,l+1) - u_x(j,l) + u_y(j+1,l+1) - u_y(j,l)\right] \end{bmatrix}$
balra fel, $(j-1, l+1)$	$\begin{bmatrix} -a \\ a \end{bmatrix}$	$k_2\frac{-a[u_x(j-1,l+1)-u_x(j,l)]+a[u_y(j-1,l+1)-u_y(j,l)]}{2a^2}\begin{bmatrix} -a \\ a \end{bmatrix} =$ $= \begin{bmatrix} \frac{k_2}{2}\left[u_x(j-1,l+1) - u_x(j,l) - u_y(j-1,l+1) + u_y(j,l)\right] \\ \frac{k_2}{2}\left[-u_x(j-1,l+1) + u_x(j,l) + u_y(j-1,l+1) - u_y(j,l)\right] \end{bmatrix}$

Hasonlóan a maradék másodszomszédokra ami adódik:

szomszéd	$\overrightarrow{r}_{12}$	erő (j,l)-re: $\overrightarrow{F}_{12} = \frac{k(\overrightarrow{r}_{12}\cdot\Delta\overrightarrow{u})}{\left\|\overrightarrow{r}_{12}\right\|^2}\overrightarrow{r}_{12}$
balra le, $(j-1,l-1)$	$\begin{bmatrix}-a\\-a\end{bmatrix}$	$\ldots = \begin{bmatrix}\frac{k_2}{2}\left[u_x(j-1,l-1)-u_x(j,l)+u_y(j-1,l-1)-u_y(j,l)\right]\\ \frac{k_2}{2}\left[u_x(j-1,l-1)-u_x(j,l)+u_y(j-1,l-1)-u_y(j,l)\right]\end{bmatrix}$
jobbra le, $(j+1,l-1)$	$\begin{bmatrix}a\\-a\end{bmatrix}$	$\ldots = \begin{bmatrix}\frac{k_2}{2}\left[u_x(j+1,l-1)-u_x(j,l)-u_y(j+1,l-1)+u_y(j,l)\right]\\ \frac{k_2}{2}\left[-u_x(j+1,l-1)+u_x(j,l)+u_y(j+1,l-1)-u_y(j,l)\right]\end{bmatrix}.$

A mozgásegyenletben ennek a nyolc erőnek a vektori összege jelenik meg. Az elsőszomszédokból persze ugyanazok a járulékok adódnak, amik az elsőszomszéd feszítetlen rugós esetben voltak. Extra tagok a másodszomszédokból lesznek, ezek csatolják össze az egyenleteinket. Látható, hogy ezekben az átlós tagokban hol $u_x(j,l)$, hol $u_y(j,l)$ kiesik, attól függően, hogy melyik erőkomponensről beszélünk. Egyszerűen összeadva a négy átlós szomszéd által kifejtett eredő erőt ($\overrightarrow{F}_2$), az eredmény

$$
\begin{aligned}
F_{2x} &= \frac{k_2}{2}\left[u_x(j+1,l+1)+u_x(j-1,l+1)+u_x(j-1,l-1)+u_x(j+1,l-1)-4u_x(j,l)\right]\\
&+\frac{k_2}{2}\left[u_y(j+1,l+1)-u_y(j-1,l+1)+u_y(j-1,l-1)-u_y(j+1,l-1)\right]\\
F_{2y} &= \frac{k_2}{2}\left[u_y(j+1,l+1)+u_y(j-1,l+1)+u_y(j-1,l-1)+u_y(j+1,l-1)-4u_y(j,l)\right]\\
&+\frac{k_2}{2}\left[u_x(j+1,l+1)-u_x(j-1,l+1)+u_x(j-1,l-1)-u_x(j+1,l-1)\right].
\end{aligned}
$$

A két erőkomponens amúgy $x \leftrightarrow y$ cserére egymásba megy át, ami a rendszer szimmetriáinak köszönhető. Ezután már adódik a mozgásegyenlet végső formája:

$$
\begin{aligned}
m\ddot{u}_x(j,l) &= k_1\left[u_x(j+1,l)+u_x(j-1,l)-2u_x(j,l)\right]\\
&+\frac{k_2}{2}\left[u_x(j+1,l+1)+u_x(j-1,l+1)+u_x(j-1,l-1)+u_x(j+1,l-1)-4u_x(j,l)\right]\\
&+\frac{k_2}{2}\left[u_y(j+1,l+1)-u_y(j-1,l+1)+u_y(j-1,l-1)-u_y(j+1,l-1)\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
m\ddot{u}_y(j,l) &= k_1\left[u_y(j,l+1)+u_y(j,l-1)-2u_y(j,l)\right]\\
&+\frac{k_2}{2}\left[u_y(j+1,l+1)+u_y(j-1,l+1)+u_y(j-1,l-1)+u_y(j+1,l-1)-4u_y(j,l)\right]\\
&+\frac{k_2}{2}\left[u_x(j+1,l+1)-u_x(j-1,l+1)+u_x(j-1,l-1)-u_x(j+1,l-1)\right]
\end{aligned}
$$

Ebbe a próbafüggvényt behelyettesítve ($\rightarrow$Fourier), csak algebrázás a sajátértékprobléma felírása.