

ECUACIONES

February 8, 2013

$$\mathcal{H}_l = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j$$

Es la interacción entre los iones (lattice) donde S_i es el espín.

$J > 0$ Ferro

$J < 0$ Antiferro

$$\mathcal{H}_m = - \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} s_i \cdot s_j$$

Es la interacción entre los electrones (itinerant).

K_{ij} depende de la distancia entre los dos espines.

$$\mathcal{H}_r = - \sum_{\langle i,j \rangle} I_{ij} s_i \cdot S_j$$

Es la interacción entre electrones e iones, donde

s_i es electrón

S_j es ión

I_{ij} depende de la distancia entre los dos espines.

Es decir,

$$K_{ij} = K_0 \exp(-r_{ij}) = K_0 \exp(-|r_i - r_j|)$$

$$I_{ij} = I_0 \exp(-r_{ij}) = I_0 \exp(-|r_i - r_j|)$$

con K_0 e I_0 constantes.

La dinámica de los electrones está gobernada por:

- Un campo eléctrico E el cual es aplicado en la dirección x $(1, 0, 0)$. Su energía está dada por:

$$\mathcal{H}_E = -eE \cdot r_i$$

donde r_i es la distancia viajada por un electrón en un MCS y e su carga.

- El efecto de gradiente de concentración:

$$\mathcal{H}_c = Dn(r)$$

donde $n(r)$ es la concentración de electrones en una esfera de radio D_2 y centrada en r .

SE NECESITA D_1 Y D_2 , DONDE:

D_1 ES EL RADIO PARA LAS INTERACCIONES ELECTRÓN-IÓN

D_2 ES EL RADIO PARA LAS INTERACCIONES ELECTRÓN-ELECTRÓN