



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

DINÂMICA DA PARTE ELETRÔNICA DA PARTE SEMI-CHEIA DE SAIS ORGÂNICOS CONDUTORES (TCNQ) COM TRANSFERÊNCIA DE CARGA SOB A INTERAÇÃO DE UM CAMPO ELÉTRICO MONOCROMÁTICO

Adalto Hiroshi Miyai¹; Antonio Cesar Aguiar Pinto²

¹ Adalto Hiroshi Miyai (bolsista) estudante do curso de Engenharia Física da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: adalto_miyai@hotmail.com

² Antonio Cesar Aguiar Pinto professor do curso de Engenharia Física da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: acap@uems.br

RESUMO

Sistemas fermiônicos com poucos graus de liberdade são muito estudados na literatura pois a dinâmica dos modelos desses sistemas pode ser calculada exatamente para quais quer conjuntos de condições iniciais. Nesse projeto, escreveremos a representação matricial da hamiltoniana que descreve a parte eletrônica de sais orgânicos condutores (TCNQ) com transferência de carga sob a interação de um campo magnético monocromático com frequência angular constante ω_0 . Calcularemos seus autovalores (energia) e seus autovetores (autoestados instantâneos) para o caso do campo magnético externo aplicado ser $\vec{B}(t) = B_0 \cos(\omega_0 t + \delta) \hat{k}$ na qual ω_0 é a frequência angular constante e δ é uma fase inicial constante, montaremos o vetor de estado físico na qual possui todas as informações do sistema (energia, momento etc) para aplicarmos posteriormente na equação de Schrödinger.

Palavras-Chave Férmions. Sal orgânico. Autovalor e Autovetor.

INTRODUÇÃO

Além de ter solução exata, sistema fermiônicos de dois sítios espaciais vem sendo largamente estudados como modelos que descrevem a parte eletrônica de alguns sais



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

orgânicos. Por ser um modelo fermiônico, obedece ao princípio de exclusão de Pauli, o que garante uma base finita para o sistema, tornando mais fácil a obtenção de resultados algébricos.

Nesse projeto de Iniciação científica, podemos observar e calcular a dinâmica exata da parte eletrônica de sais orgânicos condutores (TCNQ) com transferência de carga sob a interação de um campo magnético monocromático com frequência angular constante ω_0 .

MATERIAL E MÉTODOS

Para obter a dinâmica exata desse modelo fermiônico que representa a parte eletrônica do sal orgânico de monômero TCNQ sob a interação de um campo magnético externo, inicialmente, escrevemos a representação matricial da hamiltoniana na base completa do sub-espaço de Fock $N = 1$ que é a base dos autoestados dos operadores $n_{i\sigma}$.

$$|1,0; 0,0\rangle, |0,1; 0,0\rangle, |0,0; 1,0\rangle, |0,0; 0,1\rangle_{(1)}$$

Para escrever os autoestados anteriores, usando a convenção:

$$\begin{aligned} |1,0; 0,0\rangle &= a_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, & |0,1; 0,0\rangle &= a_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle \\ |0,0; 1,0\rangle &= a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, & |0,0; 0,1\rangle &= a_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle \end{aligned}_{(2)}$$

onde $|0\rangle$ representa o vácuo do sistema fermiônico, ou seja, ausência de partícula com spin $\frac{1}{2}$.

Com a representação matricial da hamiltoniana nesta base, que é uma matriz quadrada 4×4 , podemos calcular seus autovalores (energias) e seus respectivos autoestados. Ao obter os autoestados instantâneos da hamiltoniana, podemos escrever a representação de um vetor de estado físico $|\Psi(t)\rangle$ na base completa desses autoestados (Berry 1984; Dittrich & Reuter 1994):



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^4 c_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int dt' \epsilon_j(t')} |u_j; t\rangle \quad (3)$$

onde $|u_j; t\rangle$ é um autoestado da hamiltoniana com energia $\epsilon_j(t)$. Os coeficientes $c_j(t)$ representam a amplitude de probabilidade de, ao realizar uma medida de energia, encontrar o sistema com energia $\epsilon_j(t)$. e são determinados pela condição de que o vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$, que descreve esse sistema quântico, satisfaz a equação de Schrodinger:

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (4)$$

Ao substituir a equação (3) na equação (4), após alguma álgebra, podemos encontrar as equações diferenciais acopladas ou não para cada coeficiente $c_j(t)$, $j=1, \dots, 4$.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Após os estudos da formulação de operadores de criação e de destruição de partículas; e do modelo do sal orgânico de monômero TCNQ, foi possível aplicar a hamiltoniana em cada base finita, junto com as constantes e as demais informações, de forma que foi possível escrever a sua representação matricial:

$$\begin{bmatrix} \bar{E} - \lambda B_z & 0 & t & 0 \\ 0 & \bar{E} + \lambda B_z & 0 & t \\ t & 0 & \bar{E} - \lambda B_z & 0 \\ 0 & t & 0 & \bar{E} + \lambda B_z \end{bmatrix} \quad (5)$$



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

onde $B_z = B_0 \cos(\omega_0 t + \delta)$. Com a matriz 4 x 4 pronta, o cálculo dos autovalores (energias) foi possível com o auxílio do software mapple 5, obtendo os seguintes valores:

$$1^\circ) \bar{E} - t + \lambda B_z$$

$$2^\circ) \bar{E} + t + \lambda B_z$$

$$3^\circ) \bar{E} - t - \lambda B_z$$

$$4^\circ) \bar{E} + t - \lambda B_z \quad (6)$$

Analisando esses resultados vemos que se $t = \lambda B_z$ teremos que a primeira e a quarta energia serão iguais, ou seja, teremos um sistema degenerado. Iremos considerar apenas o caso do modelo não sendo degenerado. Com os autovalores calculados podemos começar os cálculos para encontrar quatro equações de seus respectivos autoestados com o auxílio da matriz 4 x 4, porém essas equações formam um conjunto linearmente dependente, impossibilitando encontrar seus autoestados. A única maneira de calcular os autoestados é tendo um conjunto linearmente independente que só é possível com a seguinte equação de normalização:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + |c_4|^2 = 1 \quad (7)$$

Com a substituição da equação de normalização por uma das quatro equações encontradas no cálculo do autoestado, é possível encontrar os respectivos autoestado para cada valor de energia encontrado:



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

$$|u_1; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|0,1; 0,0\rangle - |0,0; 0,1\rangle\}$$

$$|u_2; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|0,1; 0,0\rangle + |0,0; 0,1\rangle\}$$

$$|u_3; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|1,0; 0,0\rangle - |0,0; 1,0\rangle\}$$

$$|u_4; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|1,0; 0,0\rangle + |0,0; 1,0\rangle\}$$

(8)

CONCLUSÃO

Obtivemos a representação matricial e calculamos os autovalores e seus respectivos autoestados para a hamiltoniana sob estudo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a UEMS pela bolsa concedida e à FUNDECT-MS, pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Berry, M. V. 1984. Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. Proceedings Of Royal Society A, v. 392, n. 1802, p. 45-57.

Bulut, N.; Matsueda, H.; Tohyama, T.; Maekawa, S. 2006. Anomalous temperature dependence of the single-particle spectrum in the organic conductor TTF TCNQ. Physical Review B, v. 74, n. 11, p. 113106-1-4.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

Dittrich, W. & Reuter, M. 1994. Classical and Quantum Dynamics- from Classical Paths to Path Integrals, Berlin-Alemanha, Ed. Springer-Verlag, 385p. Liebsch, A.; Ishida, H. & Merino, J. 2009. Mott transition in twodimensional frustrated compounds. Physical Review B, v. 79, n. 19, p. 195108- 1-4.

Merino, J.; Dumm, M.; Drichko, N.; Dressel, M. & Mckenzie, R.H. 2008. Quasiparticles at the Verge of Localization near the Mott Metal-Insulator Transition in a Two-Dimensional Material. Physical Review Letters, v. 100, n. 8, p. 086404-1-4.

Rice, M. J. 1979. Towards the experimental determination of the fundamental microscopic parameters of organic ion-radical compounds. Solid State Communications v. 31, n. 2, p. 93-98.