



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

INTERAÇÃO DE UM CAMPO MAGNÉTICO E DE UM CAMPO ELÉTRICO COM O SAL CONDUTOR TTF-TCNQ

Renan Semensato Carloni¹; Antônio Cesar Aguiar Pinto²

¹Renan Semensato Carloni (bolsista) estudante do curso de Engenharia Física da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: renan_winan@hotmail.com

²Antonio 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

É sempre possível calcular a dinâmica exata de sistemas fermiônicos com poucos graus de liberdade sob qualquer condição inicial, pois os férmions, tais como o elétron, obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, tornando finita a dimensão de sua base. O objetivo deste trabalho foi calcular a dinâmica exata desse modelo que representa a parte eletrônica do sal TCNQ quando um campo magnético externo aplicado possui amplitude constante e direção fixa no espaço, isto é, $\vec{B}(t) = B\hat{k}$ no caso de apenas um elétron orbitando entre os sítios espaciais ($N=1$). Inicialmente escrevemos a representação matricial da hamiltoniana na base completa dos sub-espço de Fock $N=1$ que é a base dos autoestados dos operadores; com a representação matricial, que é uma matriz quadrada 4×4 , podemos calcular seus autovalores (energia) e seus respectivos autoestados. Ao obter os autoestados instantâneos da hamiltoniana, podemos escrever a representação de um vetor de estado físico que deve satisfazer a equação de Schrodinger. Após todos os cálculos, foi possível encontrar todos os coeficientes que representam a amplitude de probabilidade de, ao realizar uma medida de energia, encontrar o sistema com energia igual aos autovalores e expressar o vetor polarização média.

Palavras-chave: Férmions. Sal orgânico. Autovalor e Autovetor.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

INTRODUÇÃO

A hamiltoniana que descreve o modelo férmionico com dois sítios espaciais que representa a parte eletrônica dos sais orgânicos (**Bulut et. al. 2006**) com um elétron na presença de um campo magnético externo dependente do tempo $\vec{B}(t)$ e de um campo elétrico clássico, na presença de dipolo elétrico, é:

$$H(t) = \sum_{i=1}^2 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \bar{E}_i a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + \bar{t} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (a_{1\sigma}^\dagger a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^\dagger a_{1\sigma}) + U \sum_{i=1}^2 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \lambda \sum_{i=1}^2 [B_x(t)(a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow} + a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}) + iB_y(t)(a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow} - a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}) + B_z(t)(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})] - \sum_{i=1}^2 e(\vec{E}_{clas}(t)) \cdot \vec{r}_i \quad (1)$$

sendo $a_{i\sigma}^\dagger$ e $a_{i\sigma}$ ($i=1,2$) são, respectivamente, os operadores de criação e de destruição de uma partícula de spin σ ($\sigma=\uparrow,\downarrow$) no sítio espacial i . Os operadores de criação e destruição férmionicos satisfazem as regras de anticomutação:

$$\{a_{i\sigma}, a_{j\sigma'}\} = 0, \{a_{i\sigma}^\dagger, a_{j\sigma'}^\dagger\} = 0 \text{ e } \{a_{i\sigma}, a_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ij} 1 \quad (2)$$

Sendo $\delta_{\alpha\beta}$ a delta de Kronecker, 1 o operador identidade e $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ representa o operador número de férmions com componentes de spin σ no sítio espacial i , $i=1,2$.

Na hamiltoniana (1) observa-se que, nos termos do l.d., o número total de férmions, N , é conservado. Isto porque o número de operadores de destruição e de criação em cada produto, cada termo, é sempre o mesmo. O operador número total de partículas é, então, uma constante de movimento e comuta com o operador hamiltoniano:

$$[H(t), N] = 0, \quad (3)$$

Com

$$N = \sum_{i=1}^2 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} n_{i\sigma} \quad (4)$$

Como consequência da eq. (3), a dinâmica de cada sub-setor do espaço de Fock do sistema pode ser tratado independentemente um do outro.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

Sendo assim, o objetivo deste trabalho é trabalhar a hamiltoniana (1) quando um campo magnético externo é aplicado com amplitude constante e direção fixa no espaço, isto é, $\vec{B}(t) = B\hat{k}$ no caso de apenas um elétron orbitando entre os sítios espaciais ($N=1$).

MATERIAIS 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 elétrico e de um campo magnético externos, inicialmente, escrevemos a representação matricial da hamiltoniana (1) na base completa do sub-espaço de Fock $N=1$ que é a base dos autoestados dos operadores $n_{i\sigma}$:

$$|1,0; 0,0\rangle, |0,1; 0,0\rangle, |0,0; 1,0\rangle, |0,0; 0,1\rangle$$

Para escrever os estados anteriores, usamos a convenção:

$$|1,0; 0,0\rangle = a_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, |0,1; 0,0\rangle = a_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle$$

$$|0,0; 1,0\rangle = a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, |0,0; 0,1\rangle = a_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle$$

Sendo que $|0\rangle$ representa o vácuo do sistema fermiônico, ou seja, ausência de partícula com spin $1/2$.

Com a representação matricial da hamiltoniana (1) nesta base, que é uma matriz 4×4 , podemos calcular seus autovalores (energias) e seus respectivos autoestados.

Ao obter os autoestados instantâneos da hamiltoniana (1), podemos escrever a representação de um vetor de estado físico $|\psi(t)\rangle$ na qual possui todas as informações do sistema fermiônico como momento, posição, energia etc.

Com o vetor de estado físico satisfazendo a equação de Schrodinger, podemos calcular as equações diferenciais acopladas ou não e obter o valor para cada coeficiente que representa a amplitude de probabilidade de ao realizar uma medida de energia, encontrar o sistema com energia igual aos autovalores e expressar o vetor polarização média.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com a formulação dos operadores de criação e de destruição de partículas foi possível aplicar a hamiltoniana em cada base finita, junto com as constantes e as demais informações, de forma a escrever a sua representação matricial:

$$\begin{bmatrix} E - \lambda B_z(t) & \lambda[B_x(t) + iB_y(t) - e(E_1 \cdot r_1)] & t & 0 \\ \lambda[B_x(t) - iB_y(t)] - e(E_1 \cdot r_1) * & E + \lambda B_z(t) & 0 & t \\ t & 0 & E - \lambda B_z(t) & \lambda[B_x(t) + iB_y(t)] - e(E_2 \cdot r_2) \\ 0 & t & \lambda[B_x(t) - iB_y(t)] - e(E_2 \cdot r_2) * & E + \lambda B_z(t) \end{bmatrix}$$

Com a matriz 4 x 4 pronta, o cálculo dos autovalores (energias) foi possível com o auxílio do software maple 12 obtendo os seguintes valores, para um caso particular em que o acoplamento de dipolo elétrico é o mesmo nos dois sítios espaciais:

$$1^0) E - t + \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2},$$

$$2^0) E - t - \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2},$$

$$3^0) t + E + \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2},$$

$$4^0) t + E - \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2},$$

Com os autovalores calculados podemos começar os cálculos para encontrar quatro equações de seus respectivos autoestados com o auxílio da matriz 4 x 4, porem 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:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + |c_4|^2 = 1$$



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

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 e com isso escrever o seguinte vetor de estado físico:

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)e^{-\frac{i}{\hbar}[Et - \frac{t^2}{2} + t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}|u_1; t\rangle + c_2(t)e^{-\frac{i}{\hbar}[Et - \frac{t^2}{2} - t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}|u_2; t\rangle \\ + c_3(t)e^{-\frac{i}{\hbar}[\frac{t^2}{2} + Et + t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}|u_3; t\rangle + c_4(t)e^{-\frac{i}{\hbar}[\frac{t^2}{2} + Et - t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}|u_4; t\rangle$$

Ao aplicar o vetor de estado físico descrito acima na equação de Schrodinger, encontramos 4 equações diferenciais acopladas (equações acopladas aos pares), sendo elas:

$$\dot{C}_1 = \frac{P^2 i \omega_0 C_1}{2[\lambda^2 B_z^2 + \lambda B_z \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2} + P^2]} + \frac{P i \omega_0 C_2 e^{-\frac{i}{\hbar}[-2t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}}{2\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}}$$

$$\dot{C}_2 = \frac{P^2 i \omega_0 C_2}{2[\lambda^2 B_z^2 - \lambda B_z \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2} + P^2]} + \frac{P i \omega_0 C_1 e^{-\frac{i}{\hbar}[2t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}}{2\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}}$$

$$\dot{C}_3 = \frac{P^2 i \omega_0 C_3}{2[\lambda^2 B_z^2 - \lambda B_z \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2} + P^2]} + \frac{P i \omega_0 C_4 e^{-\frac{i}{\hbar}[2t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}}{2\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}}$$

$$\dot{C}_4 = \frac{P^2 i \omega_0 C_4}{2[\lambda^2 B_z^2 + \lambda B_z \sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2} + P^2]} + \frac{P i \omega_0 C_3 e^{-\frac{i}{\hbar}[-2t\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}]}}{2\sqrt{P^2 + \lambda^2 B_z^2}}$$

Sendo que $\dot{C}_1 = \dot{C}_4$ e $\dot{C}_2 = \dot{C}_3$.

Para o cálculo do vetor Polarização media temos:

$$\langle \psi | \vec{P} | \psi \rangle = 0$$

Portanto, temos que os centros dos dois monômeros estão alinhados.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

AGRADECIMENTOS

Ao orientador que sempre me apoiou e a FUNDECT-MS, pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

Berry, M. V. 1984. Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. Proceedings Of Royal Society A, v. 392, n. 1802, p. 45-57. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B. & Laloë, F. 1977. Quantum Mechanics. New York-EUA, Ed. John Wiley, v. I, 914p.

Costa Jr., A. T. & Thomaz, M. T. 1997. Dynamics of the Electronic States of Organic Charge-Transfer Salts in in-Phase Mode. Modern Physics Letters B, v. 11, n. 20, p. 877-888.

Dittrich, W. & Reuter, M. 1994. Classical and Quantum Dynamics- from Classical Paths to Path Integrals, Berlin-Alemanha, Ed. Springer-Verlag, 385p.

Girardeau, M. D. 1980. FockTani representation for composite particles in a soluble model. Journal of Mathematical Physics, v. 21, n. 9, p. 2365-2375.

Liebsch, A.; Ishida, H. & Merino, J. 2009. Mott transition in two-dimensional frustrated compounds. Physical Review B, v. 79, n. 19, p. 195108-1-4.

Merino, J.; Dumm, M.; Dričko, 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.

Rice, M. J.; Yartsey, V. M. & Jacobsen, C. S. 1980. Investigation of the nature of the unpaired electron states in the organic semiconductor N-methyl- ethylmorpholinium-tetracyanoquinodimethane. Physical Review B, v. 21, n. 8, p. 3437-3446.