

DINÂMICA DA PARTE ELETRÔNICA DE SAIS ORGÂNICOS (BEDT-TTF) COM TRANSFERÊNCIA DE CARGA SOB INTERAÇÃO DE UM CAMPO ELÉTRICO

Alisson Carvalho de Oliveira¹; Antonio Cesar Aguiar Pinto²;

¹Aluno (bolsista UEMS) do curso de Engenharia Física da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Unidade Universitária de Dourados, E-mail: alissoncarvalhodeoliveira@gmail.com

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

Ciência Exatas e da Terra – Física – Física Clássica e Física Quântica; Mecânica e campos

RESUMO

Os modelos fermiônicos com três sítios espaciais são usados para descrever as propriedades eletrônicas e/ou ópticas de alguns sais orgânicos que possuem transferência de carga elétrica. No caso do presente projeto de IC, o sal orgânico de monômero BEDT-TTF (*bis-ethylenedithio tetrathiafulvalene*). Para descrever este evento, foi utilizado o modelo fermiônico com três sítios espaciais, considerando diferentes campos elétricos nos diferentes sítios e a possibilidade do elétron saltar entre os sítios. Modelos fermiônicos com poucos graus de liberdade, geralmente, podem ser solucionados algebricamente, escrevendo a representação matricial da hamiltoniana na base dos estados. Tentamos calcular as autoenergias (autovalores), o que não foi possível mesmo com auxílio computacional. Então alteramos os parâmetros dos campos elétricos, igualando-os nos diferentes sítios, calculamos as autoenergias do sistema; entretanto, o cálculo dos autoestados (autovetores) do modelo não foi possível, devido ao surgimento de sistemas não solucionáveis algebricamente. A não obtenção dos autoestados do sistema impossibilitou a continuidade do projeto, que seria calcular o vetor de estado físico, e, com ele, satisfazer a equação de Schrödinger. Obtendo posteriormente, através da álgebra, os coeficientes que representam a amplitude de probabilidade de, ao realizar uma medida de energia encontrar um dos valores das autoenergias. Alterações nos parâmetros do modelo fermiônico foram realizadas, porém até o presente momento não encontramos nenhuma modificação plausível que tornasse possível o cálculo algébrico dos autoestados.