Dinâmica de quase-partículas supersônicas em um polímero do tipo Poly(Phenylene Vinylene) (PPV)

Fábio L. de O. Paula ^{1,*}(PG), Leonardo L. Castro ¹(PG), Pedro H. de O. Neto ¹ (PG)

¹ Instituto de Física, Universidade de Brasília - UnB, Brasília, Brasil

Palavras-chave: GAP, Pólaron, Polímero.

*fabioluis@fis.unb.br

Introdução

Investigamos a dinâmica de portadores de carga em polímeros do tipo Poly(Phenylene Vinylene) (PPV) sob influência de campos elétricos externos. Especificamente, focamos a força crítica de campo necessária para a transição de subsônico para supersônico. O regime foi determinado para pólarons em PPV. A colisão entre quase-partícula e impurezas, em regime supersônico, foi investigada. Para tanto, realizamos uma dinâmica molecular de Ehrenfest através de um modelo hamiltoniano de Su-Schrieffer-Heeger.

Metodologia

A metodologia aqui adotada é uma simulação dinâmica de Ehrenfest baseada em um modelo molecular. Uma aproximação de primeira ordem de uma abordagem *tight-binding* com relaxação foi usada em conjunto com um hamiltoniano do tipo SSH, modificado para incluir os efeitos das impurezas e de um campo elétrico externo. Nas simulações numéricas realizadas, os elétrons são levados em conta resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo, enquanto a rede é descrita classicamente num modelo massa-mola.

Resultados e discussão

Os resultados fornecem informações úteis sobre o comportamento da condutividade de polímeros condutores medidos para diferentes campos elétricos. Para caracterizar a transição do subsônico para o supersônico, o polímero é sujeito a diferentes regimes de campo elétrico e a velocidade terminal do pólaron é calculada. Assim, fizemos um gráfico de velocidade em função do campo elétrico aplicado e identificamos o valor do campo necessário para a transição sônico-supersônico.

Conclusões

Estudamos a dinâmica dos portadores de carga no regime supersônico em polímeros conjugados portadores de impurezas. Determinamos a força de campo crítica necessária para a transição do regime subsônico para supersônico em pólarons.

Agradecimentos

Este trabalho foi apoiado pelas agências brasileiras CNPq, CAPES e FAPDF.

Referência

L. A. Ribeiro, et al. *The Journal of Chemical Physical* 146, 144903 (2017)