

Difusão de Pólarons em Polímeros Condutores

Gabrielle Gomes da Silva^a (IC), Pedro Henrique de Oliveira Neto^b (PQ)

Instituto de Física, Universidade de Brasília, C.P. 04455, DF, 70919-70, Brasil.

^a *gabriellegomes.s@gmail.com*

^b *Pedrohenrique@unb.br*

Palavras-chave: Polímeros condutores, Pólarons, Comprimento de difusão, Portador de carga.

INTRODUÇÃO

Polímeros condutores são utilizados na fabricação de OLED's (Organic Light Emission Diode), de OFET'S (Organic Field Effect Transistors) e dos OPV's (Organic Photovoltaic Cells). A tecnologia baseada em materiais orgânicos destaca-se devido ao baixo custo de processamento, a flexibilidade e leveza destes materiais, além do baixo impacto ambiental na sua produção em detrimento dos concorrentes inorgânicos. Para o desenvolvimento das novas tecnologias com base nestes materiais orgânicos é essencial que se conheça os mecanismos de transporte de carga dentro desses polímeros. Especificamente, saber quais os fatores que mais influenciam na condução de carga. Assim pode-se melhorar a eficiência destes materiais. Estudaremos efeitos de temperatura em macromoléculas de cis-poliacetileno sobre os portadores de carga, os pólarons. Vamos observar também o comportamento da quasi-partícula em diferentes regimes de densidade. Analisaremos a difusividade destes pólarons.

METODOLOGIA

Utilizamos o modelo SSH (Su-Schrieffer-Heeger) modificado. Especificamente foram incluídos efeitos de temperatura e o termo de quebra de simetria de Brazovskii-Kirova. A temperatura foi incluída a partir de uma equação de Langevin. Os estados iniciais foram obtidos a partir da resolução conjunta da equação de Schrödinger independente do tempo e das equações de Euler estacionárias. Para a determinação dos comportamentos difusivos simulamos a trajetória dos portadores de carga em vários regimes de densidade. Para a avaliação estatística fizemos aproximadamente 300 realizações para cada regime de densidade. Estudamos a distribuição das posições em função do tempo. O comportamento difusivo foi determinado a partir da análise da variância dessas distribuições em função do tempo.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As simulações foram feitas em cadeias de cis-poliacetileno contendo 120 sítios para cada regime de densidade. A temperatura utilizada foi de 200 K. As trajetórias foram determinadas a partir da evolução temporal da densidade de carga. O comportamento da distribuição foi analisado em relação aos coeficientes de linearidade da variância em função do tempo. Tratando-se de uma distribuição normal, obtivemos dados a respeito da difusividade dos pólarons. Para 2 pólarons na cadeia, por exemplo, obtivemos o coeficiente linear da variância em função do tempo igual a 0,99.

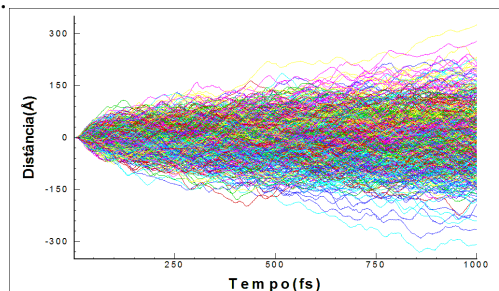


Figura 1. Posição (Å) de 2 pólarons em função do tempo (fs) a uma temperatura de 200K.

CONCLUSÕES

Através do coeficiente de linearidade encontrado para o caso de 2 pólarons, identificamos o regime de difusão normal e determinamos o coeficiente de difusividade. Percebemos ainda que o aumento na densidade de portadores de carga gera uma mudança de fase no transporte de carga passando de um regime subdifusivo para densidades menores que 2 pólarons por 120 sítios para superdifusivo partir de 3 pólarons por 120 sítios.

AGRADECIMENTOS

CNPq, CAPES e FAP-DF

¹ New Journal of Chemistry (1987), v. 37, p. 2829, 2013.

² Computational and Theoretical Chemistry, v. 1018, p. 91-94, 2013.

³ Chemical Physics Letters (Print), v. 580, p. 108-114, 2013.