

GERSON BAZO COSTAMILAN

"SÓLITONS E POLARONS EM POLÍMEROS"

TESE

DE

MESTRADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO, 1988

DEDICATÓRIA

à minha família:

Sady, meu pai;

Laura, minha mãe;

Thaís e Tânia, minhas irmãs.

AGRADECIMENTOS

- A Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho, pela orientação de trabalho, pela amizade e pelo estímulo.
- A Cezar Bonatto e Maria Tereza Thomaz, pelos debates e sugestões;
- A Sergio José Barbosa Duarte, pelo apoio junto à CFC;
- A Myriam Simões Coutinho, pela excelente e rápida datilografia e pelo sempre pronto auxílio junto à secretaria da CFC;
- Aos colegas do CBPF e IME, pelo constante estímulo.

SUMÁRIO

	Pág.
Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Sumário	iv
Resumo	v
Introdução	vi
CAPÍTULO I: FENOMENOLOGIA E MODELOS DO POLIACETILENO	
1.1 - Introdução	1
1.2 - A Hibridização no Carbono	2
1.3 - Moléculas Conjugadas	7
1.4 - O Poliacetileno	9
1.5 - Defeitos no Poliacetileno	13
1.6 - Dopagem e Condutividade	16
1.7 - Outras Características	17
1.8 - Principais Modelos	20
CAPÍTULO II: OBTENÇÃO DAS SOLUÇÕES	
2.1 - Introdução	30
2.2 - Convenções e Aproximações	31
2.3 - O Estado Dimerizado	33
2.4 - O Sóliton	35
2.5 - O Polaron	40
CAPÍTULO III: ANÁLISE A PARTIR DE DADOS DE ESPALHAMENTO	
3.1 - Introdução	53
3.2 - O Lagrangeano Efetivo	54
3.3 - Os Dados de Espalhamento	55
CONCLUSÃO	64
APÊNDICE	67
BIBLIOGRAFIA	74

RESUMO

Apresentamos a fenomenologia básica do poliacetileno, o mais simples dos polímeros conjugados lineares.

Analisamos os modelos teóricos de Su, Schrieffer e Heeger e de Krive e Rozhavskii.

Resolvemos, com um método próprio, as equações de movimento resultantes do modelo de Krive e Rozhavskii. Obtemos as principais soluções: dimerizada, soliton e polaron e eventuais estados localizados fermiônicos correspondentes.

Concluimos o trabalho ressaltando as vantagens do nosso método, que consistem na obtenção de um potencial efetivo para os bosons (fonons), na observação da necessidade de estabelecermos uma relação entre as constantes de acoplamento do modelo e na constatação de que o modelo de Krive e Rozhavskii e o nosso, são os modelos mais simples que admitem soluções de solitons e polarons.

INTRODUÇÃO

O estudo das propriedades físicas dos polímeros conjugados lineares, notadamente o poliacetileno, tem crescido muito nos últimos anos.

A descoberta de que o poliacetileno, sob dopagem, torna-se um bom condutor elétrico, atraiu a atenção dos físicos teóricos. Alguns modelos foram propostos, tratando o sistema discreto original ou fazendo a aproximação do limite contínuo das teorias. Nesse caso, o sistema passa a ser descrito por uma teoria de campos e soluções analíticas simples, são possíveis.

A fenomenologia nos diz que o espectro eletrônico do poliacetileno apresenta estados discretos (ligados) no meio do gap entre as bandas de valência e condução. O aparecimento desses estados está ligado a deformações estruturais da rede. Dois tipos de defeitos podem ocorrer no caso do transpoliacetileno: os sólitons, que são estados de topologia não trivial e os polarons que possuem a mesma topologia do vácuo (estado fundamental). Os sólitons e polarons podem adquirir carga elétrica quando o polímero é dopado. Sua mobilidade ao longo da rede permite que se transformem em portadores de carga, alterando a condutividade elétrica do polímero. O fato do movimento ser numa única direção (a direção da cadeia linear) gera uma condutividade altamente anisotrópica numa amostra de polímero em que as cadeias estão alinhadas. Os sólitons e polarons mostram-se também importantes para explicar outras propriedades físicas como absorção óptica ele

trônica e susceptibilidade magnética.

No primeiro capítulo apresentamos os fatos básicos de fenomenologia de poliacetileno. Definimos moléculas conjugadas e as configurações cis e trans do enlace carbono-carbono em tais moléculas. Analisamos a ocorrência da instabilidade de Peierls que gera a dimerização da cadeia. Apresentamos os principais modelos teóricos existentes: o de Su, Schrieffer e Heeger, seu limite contínuo e o modelo de Krive e Rozhavskii.

No segundo capítulo resolvemos, com um método próprio, as equações de movimento resultantes do modelo de Krive e Rozhavskii. Obtemos os estados dimerizado, de sóliton e de polaron e os respectivos estados ligados normalizáveis.

No terceiro capítulo apresentamos, brevemente, o procedimento necessário à descrição dos modelos teóricos em termos de dados de espalhamento.

Na conclusão ressaltamos as vantagens do nosso método. Inicialmente, uma nova compreensão da condição de supersimetria ($\lambda = 2g^2$); que proporciona um desacoplamento espacial entre as componentes do espinor associado ao elétron. Em segundo lugar, mostramos que a interação com os férmions pode ser levada em conta, para efeito da obtenção dos defeitos, considerando-se um potencial bosônico com interação quártica e uma corrente externa constante. Salientamos que o modelo de Krive e Rozhavskii e o nosso, são os modelos mais simples dentre os modelos que admitem soluções de sólitons e polarons. Encerramos apresentando possíveis extensões do presente trabalho.

CAPITULO I

FENOMENOLOGIA E MODELOS DO POLIACETILENO

1.1 Introdução

Nesse capítulo apresentamos os fatos básicos da fenomenologia do poliacetileno e os principais modelos teóricos propostos para a sua descrição.

Iniciamos mostrando o mecanismo de hibridização no átomo de carbono, salientando as diferenças entre as ligações tipo σ e π . Definimos moléculas conjugadas e as configurações cis e trans do enlace carbono-carbono em tais moléculas. Prosseguimos apresentando: o poliacetileno, a ocorrência da instabilidade de Peierls (gerando a dimerização) e a existência de duas possibilidades para a formação do polímero; o transpoliacetileno e o cispoliacetileno.

Em seguida, analisamos a ocorrência de defeitos estruturais (solitons e polarons) e sua ligação, após o processo de dopagem, com a condutividade elétrica de polímero.

Comentamos a relação spin-carga anômala para o soliton e o surgimento de números quânticos fracionários.

Finalizamos o capítulo apresentando os dois principais modelos existentes:

- o modelo de Su, Schrieffer e Heeger, seu limite

contínuo e a relação com o modelo de Gross e Neveu.

- o modelo de Krive e Rozhavskii e suas equações de movimento, que constituirão o tema principal do capítulo dois.

1.2 A hibridização no carbono

Na formação de moléculas orgânicas, a estrutura eletrônica dos átomos de carbono não é a do estado fundamental (fig. 1a). Nesses casos, as funções de onda dos elétrons desemparelhados de um dos primeiros estados excitados do carbono (fig. 1b) combinam-se linearmente, formando novos orbitais. Tal mecanismo é chamado de hibridização das funções de onda.

A hibridização no carbono pode dar-se de três formas diferentes, dependendo da maneira de combinar as orbitais s , p_x , p_y e p_z , mostrados na fig. 2.



Fig. 1: a) Estado fundamental do carbono.
b) Um dos primeiros estados excitados.

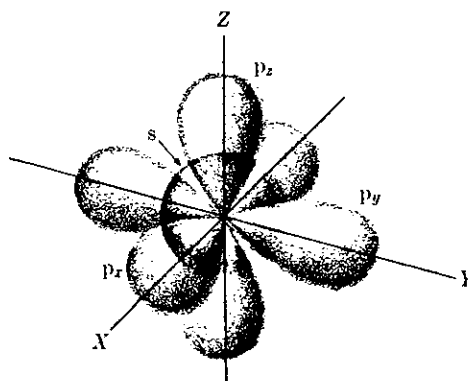


Fig. 2: Funções de onda s , p_x , p_y e p_z

i) Hibridização sp^3 :

Aqui, os orbitais combinam-se da seguinte maneira:

$$\psi_1 = \frac{1}{2} (s + p_x + p_y + p_z)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2} (s + p_x - p_y - p_z)$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2} (s - p_x + p_y - p_z)$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2} (s - p_x - p_y + p_z)$$

Cada orbital híbrido sp^3 , formado dessa maneira, está bastante concentrado numa única direção, o que explica sua capacidade de produzir uma ligação forte com um elétron de outro átomo (fig. 3). As moléculas de metano, CH_4 , e etano, C_2H_6 , são exemplos onde aparecem os orbitais híbridos sp^3 (fig. 4). A ligação carbono-carbono proveniente do enlace de dois orbitais híbridos, em geral é chamada de ligação σ (fig. 4).

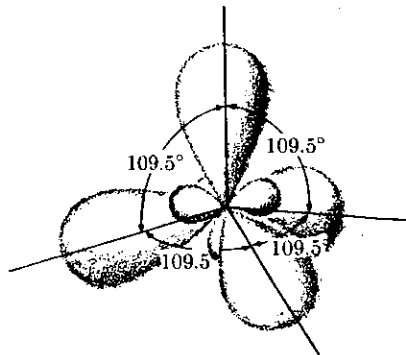


Fig. 3: Funções de onda híbridas sp^3

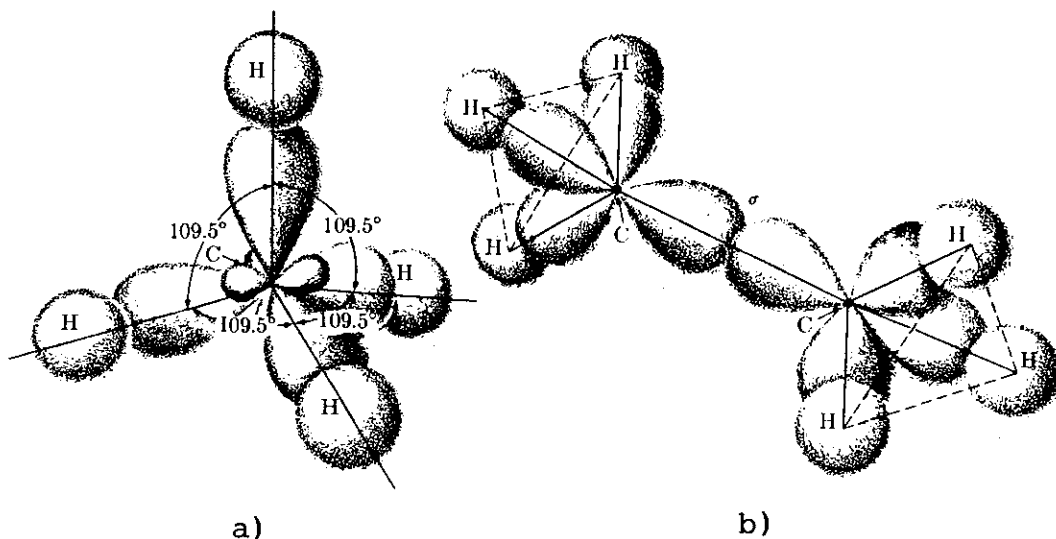


Fig. 4: Ligações com orbitais sp^3 no:
a) metano b) etano

ii) Hibridização sp^2 :

Nesse caso, um elétron permanece num orbital p pu ro e os outros três combinam-se da seguinte forma:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} (s + \sqrt{2} p_x)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} (s - \frac{1}{\sqrt{2}} p_x + \sqrt{\frac{3}{2}} p_y)$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} (s - \frac{1}{\sqrt{2}} p_x - \sqrt{\frac{3}{2}} p_y)$$

Os três orbitais híbridos encontram-se num plano perpendicular ao orbital puro restante e fazem entre si um ângulo de 120° (fig. 5).

A hibridização sp^2 é responsável, por exemplo, pela formação do etileno, C_2H_4 . A ligação carbono-carbono é dupla: uma provém da superposição dos orbitais sp^2 , sendo uma ligação σ ; a outra ligação ocorre com a superposição dos orbitais p_z pu

ros, constituindo o que chamamos de ligação π (figs. 6a e 6b).

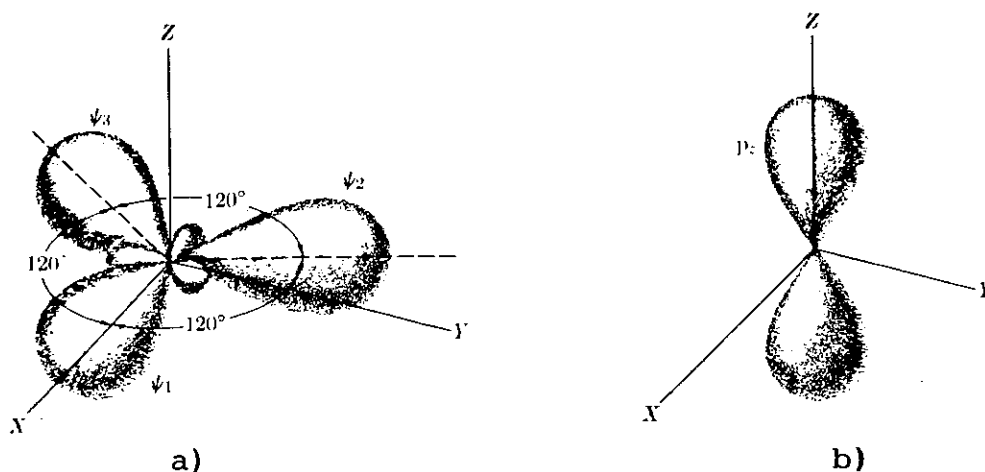


Fig. 5: a) Funções de onda híbridas sp^2 b) Função de onda p_z

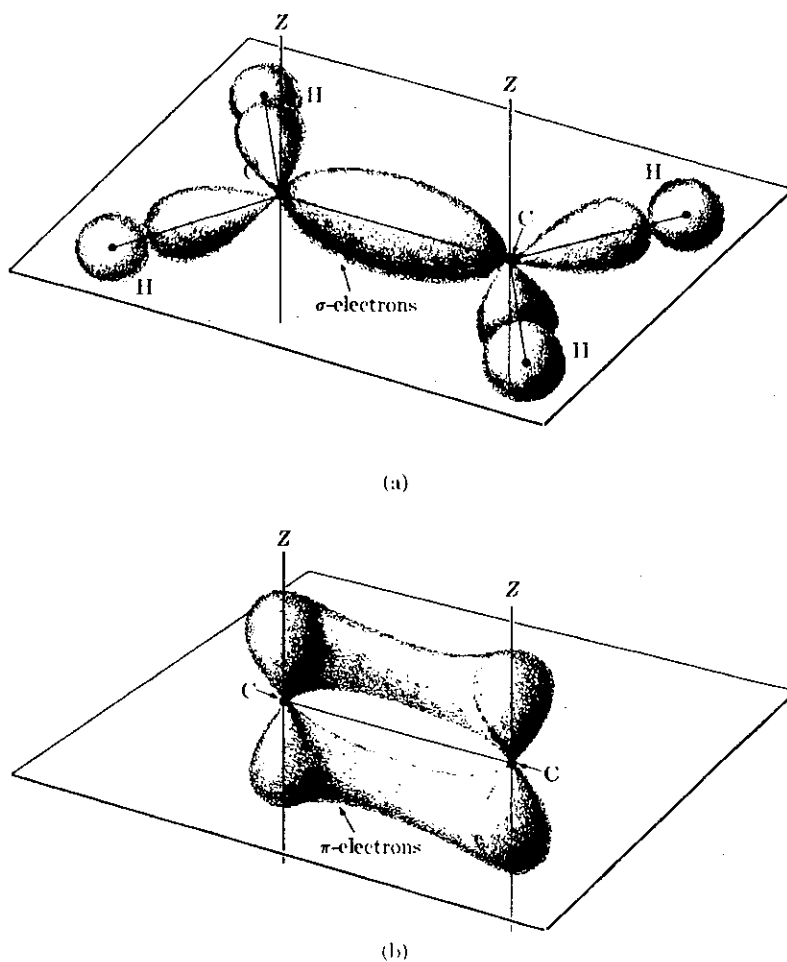


Fig. 6: Distribuição eletrônica no etileno apresentando hibridização sp^2 . a) Ligação σ b) Ligação π .

iii) Hibridização sp:

Aqui, dois orbitais p permanecem puros enquanto os dois orbitais restantes combinam-se de acordo com:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (s + p_z)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (s - p_z)$$

Os orbitais híbridos sp têm máximos pronunciados nas direções $\pm z$ (fig. 7).

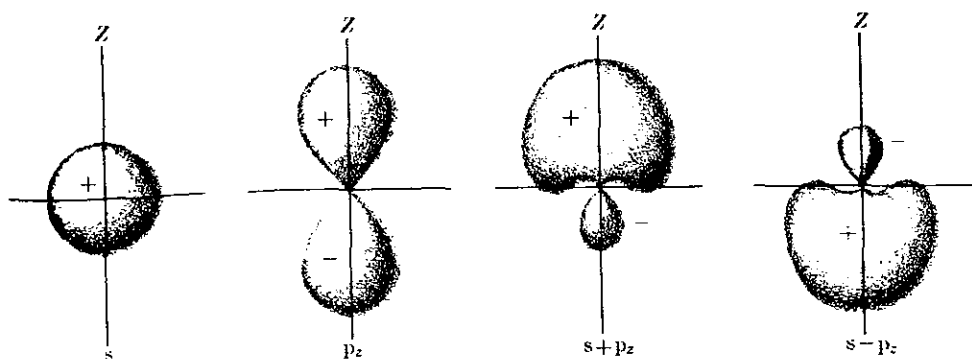


Fig. 7: Funções de onda resultantes da hibridização sp

Um exemplo da ocorrência de hibridização sp é fornecido pelo acetileno, C_2H_2 ($HC \equiv CH$). A ligação carbono-carbono é tripla; uma $\sigma(sp - sp)$ e duas π (fig. 8).

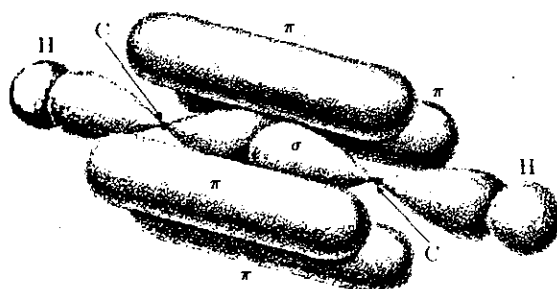


Fig. 8: Distribuição eletrônica no acetileno resultante da hibridização sp

Uma importante diferença entre as ligações σ e π é que nas ligações σ os elétrons estão mais localizados, enquanto que nas ligações π , os elétrons estão mais livres.

1.3 Moléculas conjugadas

Nas moléculas ditas conjugadas, os átomos de carbono apresentam hibridização sp^2 . Nesse caso, cada átomo de carbono possui um elétron desemparelhado num estado p puro. Esses elétrons formam ligações π e, assim, possuem uma certa liberdade para se moverem ao longo da cadeia carbônica.

Um exemplo de molécula conjugada é o butadieno (C_4H_6) (figs. 9a). Note-se o aspecto menos localizado das ligações π , ao longo de toda a molécula (fig. 9b).

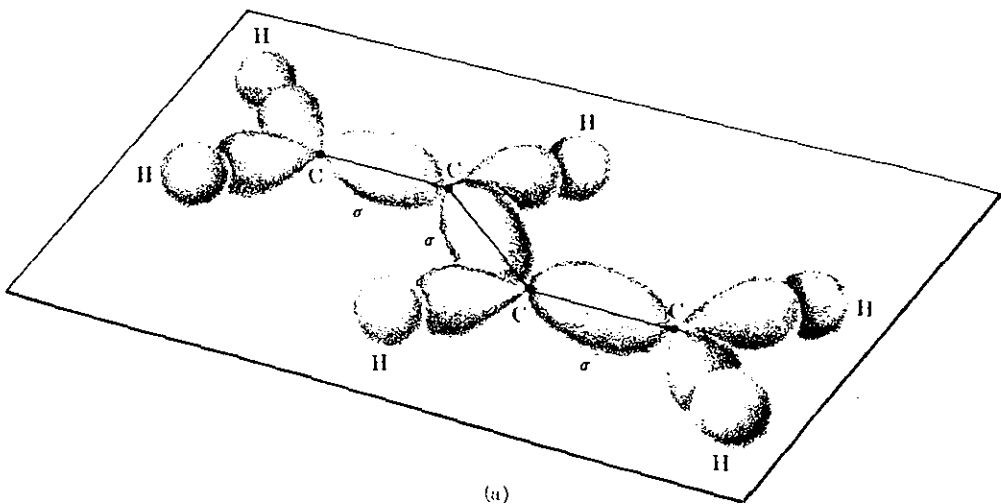
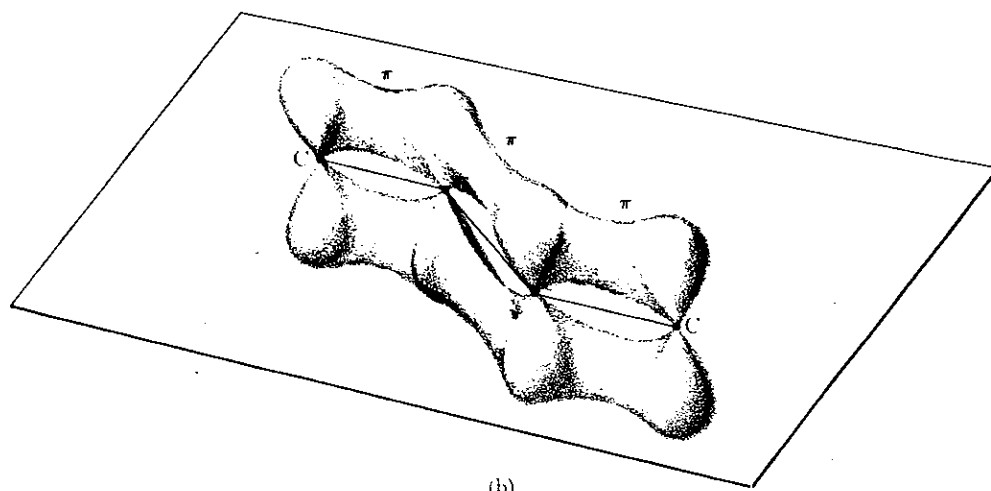


Fig. 9: Distribuição eletrônica no butadieno
a) ligações σ localizados

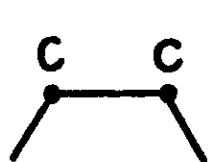


(b)

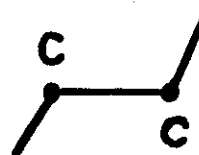
b) ligações π , mais livres

Existem duas possíveis configurações para a ligação carbono-carbono (C - C) na formação da cadeia de uma molécula conjugada.

- a configuração cis, na qual os dois átomos adjacentes ao dímero C - C estão situados no mesmo lado da ligação (fig. 10a);
- a configuração trans, na qual os dois átomos adjacentes ao dímero C - C estão situados em lados diferentes da ligação.



a) cis



b) trans

Fig. 10: Configurações cis e trans da ligação carbono-carbono nas moléculas conjugadas

Uma ligação cis muda a direção da cadeia carbônica em 60° enquanto que uma ligação trans não altera a direção da cadeia.

Uma configuração puramente cis leva a um circuito fechado após seis ligações, formando o anel benzênico.

As cadeias periódicas devem consistir de ligações trans, somente, ou de combinações regulares de ligações cis e trans. Dessa forma, serão formados o trans e o cispoliacetileno, como veremos adiante.

1.4 O poliacetileno

Partindo-se do gás acetileno, sob a ação de catalizadores, é possível obter um polímero conjugado, de cadeia linear: o poliacetileno, $(CH)_x$. Cada carbono liga-se a um hidrogênio e dois carbonos através de ligações σ (hibridização sp^2), restando um elétron por átomo de carbono num orbital p_z . Tais elétrons formam ligações π ao longo da cadeia.

Suponhamos, agora, que o polímero seja formado por um número grande, n , de carbonos. Temos, então, n elétrons π no sistema. A formação dos orbitais moleculares correspondentes aos elétrons π pode ser entendida através da técnica de combinação linear dos orbitais atômicos. Assim, os n orbitais p_z devem-se combinar linearmente, de maneira a formar orbitais moleculares com paridade definida em relação ao centro do polímero (devido à sua simetria). Existem n possibilidades de fazer isso, gerando n orbitais moleculares com capacidade para $2n$ elétrons.

Os elétrons π formariam, então, uma banda semipreenchida, dando ao poliacetileno as características de um condutor

unidimensional.

Entretanto, um teorema devido a Peierls^[1], mostra que um condutor unidimensional é instável, estando sujeito a transformações estruturais (instabilidade de Peierls). A redução na energia eletrônica compensa a energia elástica necessária para deformar a rede. O sistema sofre uma quebra espontânea de simetria, levando os elétrons π a se ligarem aos pares (fig. 11). Tal mecanismo é conhecido como dimerização da cadeia. Os átomos de carbono possuem, na configuração dimerizada, ligações duplas (menores) e simples (maiores) alternadas. Isso altera a periodicidade da cadeia, causando uma duplicação do parâmetro de rede, a. (há, na realidade, duas sub-redes de parâmetro 2a).

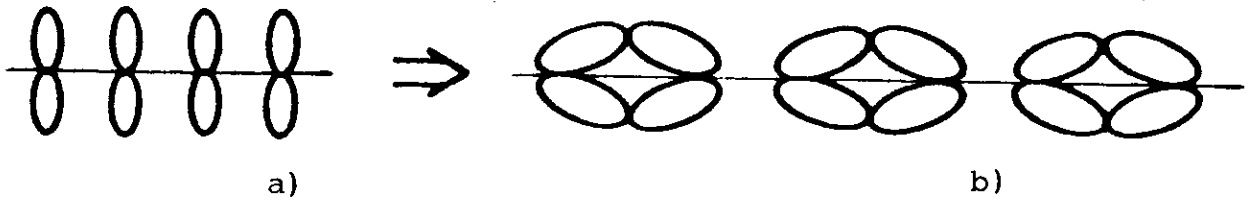


Fig. 11: Orbitais p_z de átomos de carbono

a) numa estrutura metálica

b) numa estrutura dimerizada

A diminuição da energia dos estados ocupados até a estabilização da distorção da cadeia abre um gap na superfície de Fermi da banda^[2]. A configuração dimerizada passa a apresentar as características de um semicondutor (fig. 12).

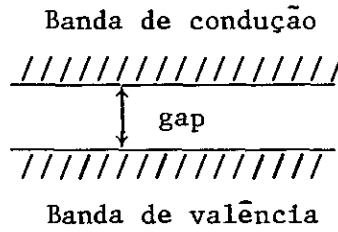


Fig. 12: Estrutura de bandas do poliacetileno na fase dimerizada. O gap encontra-se na superfície de Fermi deixando a banda de valência totalmente preenchida.

A disposição das ligações simples e duplas pode gerar diferentes tipos de poliacetileno:

i) O transpoliacetileno:

No transpoliacetileno todas as ligações são do tipo trans. Existem duas configurações possíveis para a dimerização, ambas com o mesmo valor para a energia do sistema. Na linguagem da teoria quântica de campos, dizemos que o estado de vácuo do sistema é degenerado (fig. 13).

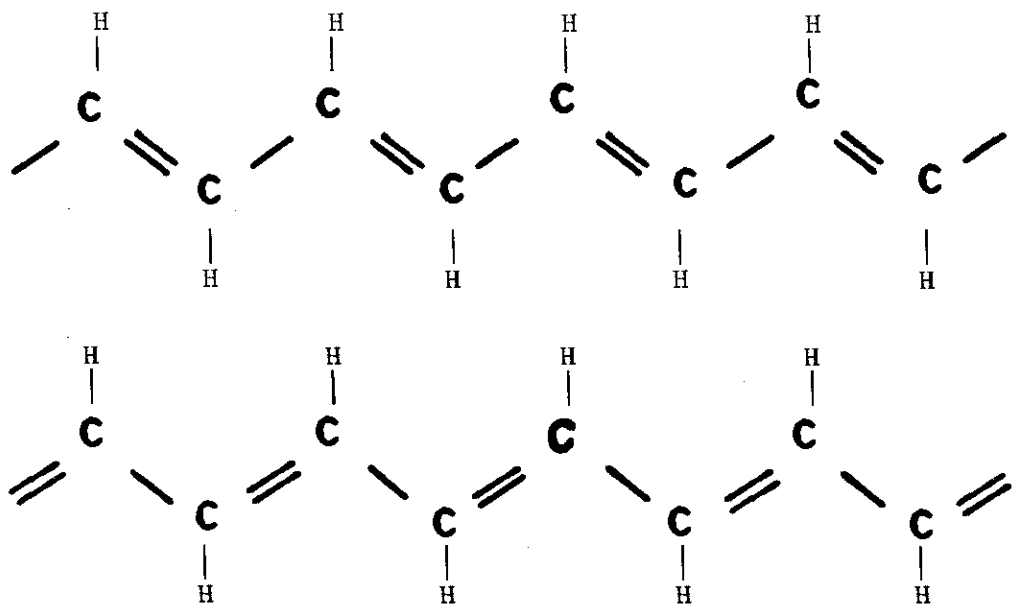


Fig. 13: Estados degenerados do transpoliacetileno

ii) O cispoliacetileno:

No cispoliacetileno as ligações são, alternadamente, do tipo cis e trans. Se as ligações duplas forem cis e as simples trans, teremos o poliacetileno cis-transóide. Se as ligações duplas forem trans e as simples cis, teremos o poliacetileno trans-cisóide. As duas possíveis configurações de cispoliacetileno possuem energias distintas. O cis-transóide possui a menor energia. Aqui, o vácuo do sistema não é degenerado (fig. 14).

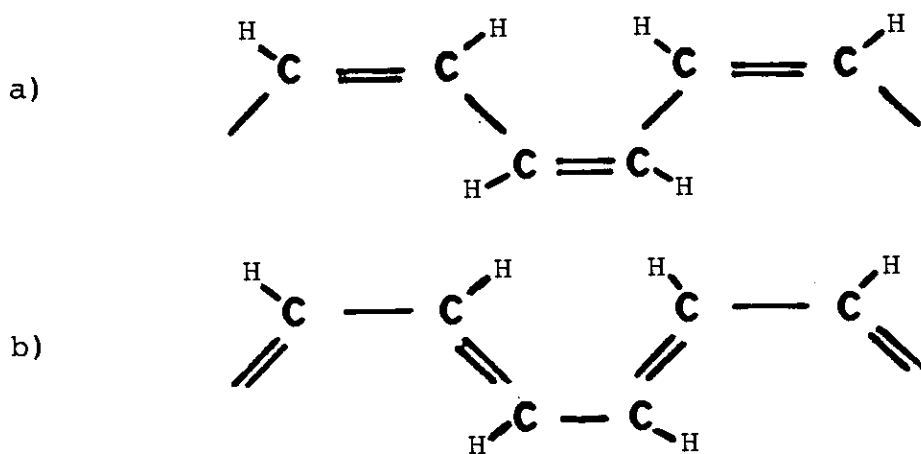


Fig. 14: a) Poliacetileno cis-transóide
b) Poliacetileno trans-cisóide

$$E_{(a)} < E_{(b)}$$

A dimerização do poliacetileno é observada, experimentalmente, através de medidas NMR e difração de raios x^[3, 4].

A polimerização costuma produzir, inicialmente, o cispoliacetileno. O transpoliacetileno pode ser obtido a partir do aquecimento, durante alguns minutos, de uma amostra cis, sen

do termodinamicamente mais estável.

1.5 Defeitos no poliacetileno

A existência de dois estados degenerados no transpoliacetileno cria a possibilidade de termos uma cadeia que se encontra em um dos estados, numa extremidade, e no outro estado, na extremidade oposta. A região de transição entre os dois estados degenerados constitui um defeito configuracional que é conhecido pelos nomes de parede de domínio (domain wall), kink ou sôliton. O termo sôliton não é totalmente adequado, pois os sôlitons têm a propriedade de se cruzarem mantendo sua forma, o que não acontece com esses defeitos do poliacetileno. Entretanto, adotaremos o termo sôliton no que segue por ser o termo usualmente utilizado na literatura. O sôliton estende-se por uma região de aproximadamente 15 parâmetros de rede.

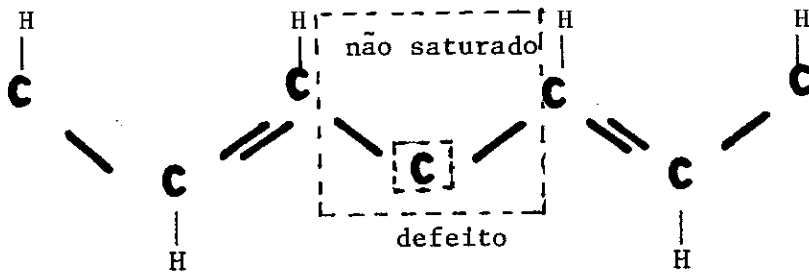


Fig. 15: Um defeito tipo sôliton, ligando os dois diferentes estados fundamentais do transpoliacetileno

Na formação do sôliton, um elétron do orbital p_z fica desemparelhado (fig. 16). Assim, o sôliton, no transpoliacetileno puro (sem dopagem), é neutro e possui spin $1/2$. A relação entre a carga e o spin dos defeitos será analisada adiante com mais detalhes.

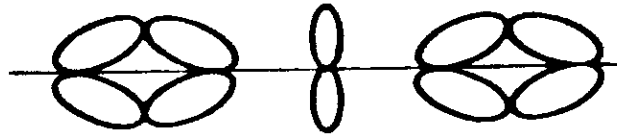


Fig. 16: Ilustração de aparecimento do sôliton, deixando um elétron desemparelhado

Além da modificação estrutural causada na rede, o sôliton altera o espectro eletrônico. Surge um estado no meio do gap quando o sôliton é criado (fig. 17). Isso demonstra, uma vez mais, o acoplamento entre as estruturas eletrônica e geométrica da cadeia, já anteriormente relacionado com a dimerização.

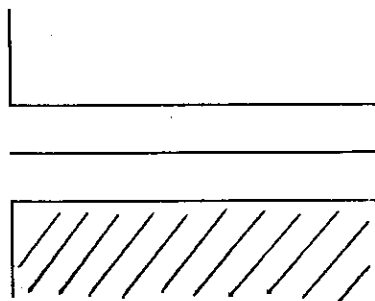


Fig. 17: O espectro eletrônico na presença de um sôliton. Note a presença do estado no meio do gap.

O sôliton pode ser criado no processo de isomerização (transição cis-trans), por fotoprodução ou no processo de dopagem^[5].

Como veremos, após a dopagem, o sôliton pode se tornar responsável pela condutividade elétrica do transpoliacetileno, funcionando como um portador de cargas.

Outro defeito estável no transpoliacetileno é o polaron. Aqui, ao contrário do sôliton, o sistema encontra-se no mesmo estado nas duas extremidades. O defeito configuracional encontra-se localizado e pode ser visto como sendo proveniente da união de um par sôliton-antisôliton (fig. 18).

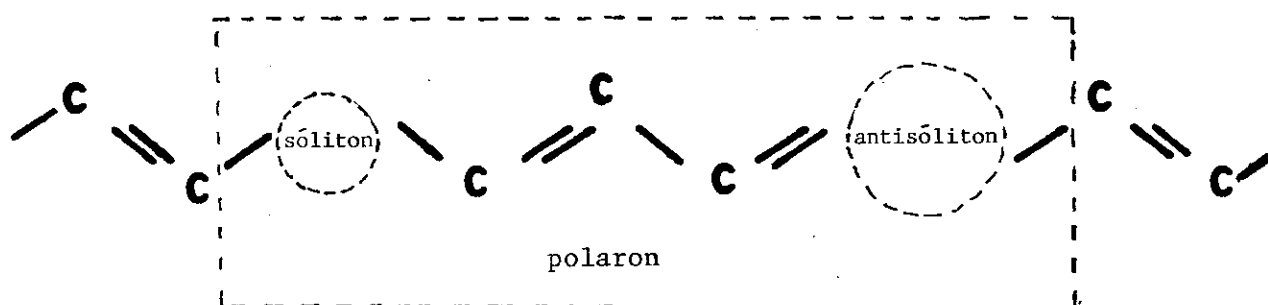


Fig. 18: O surgimento do polaron

A presença do polaron causa o aparecimento de dois estados eletrônicos entre as bandas de valência e condução, simétricos em relação ao centro do "gap". Essas duas possibilidades provêm das combinações "ligante" e "antiligante" dos estados do par sôliton-antisôliton.

Esses dois estados comportam um total de quatro elétrons (dois em cada estado). Como cada sôliton contribui com um elétron, o polaron neutro possui o estado inferior totalmente preenchido e o estado superior vazio.

Após a dopagem, o polaron também funcionará como um portador de cargas, influenciando na condutividade elétrica do transpoliacetileno.

No cispoliacetileno, as possibilidades de ocorrerem de feitos estruturais não são as mesmas do transpoliacetileno. O fato de o estado fundamental (vácuo) não ser degenerado impede

a formação de sólitons. Entretanto, defeitos tipo polaron podem ocorrer, pois esses defeitos conectam o mesmo estado nos extremos do polímero.

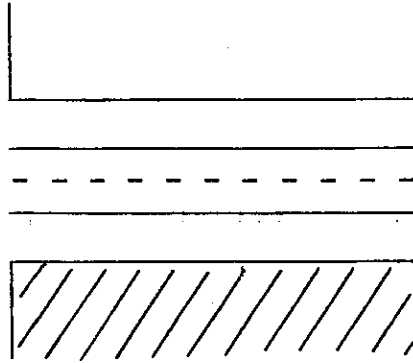


Fig. 19: Estados no meio do gap provenientes do surgimento do polaron

1.6 Dopagem e Condutividade

Embora seja um semiconductor quando puro, o poliacetileno apresenta um alto valor na condutividade elétrica quando submetido a dopagem. Tal fenômeno abre um imenso campo de aplicações tecnológicas. Pode substituir o cobre, pois consegue alcançar condutividade superior a este em volume e peso, assim como pode ser utilizado na construção de baterias recarregáveis e na produção de células solares de boa eficiência^[6].

O processo de dopagem do poliacetileno não é o mesmo que nos semicondutores usuais. A dopagem do silício, por exemplo, requer a substituição de alguns átomos de silício por outros átomos "doadores" ou "aceitadores" de elétron. Na dopagem do poliacetileno as moléculas do material dopante não substituem nenhuma molécula do polímero. Elas são intercaladas entre as cadeias por um processo de difusão. Como as in-

terações intracadeia são muito fortes comparadas com a interação intercadeia, a difusão do dopante mantém a integridade do polímero. Assim, o processo de dopagem é reversível e pode ser bem controlado. Isso é verificado através de diversas técnicas experimentais^[7].

A variação de nível de dopagem do poliacetileno altera sua condutividade num intervalo de até doze ordens de grandeza, levando-o de um comportamento semi-condutor até metálico.

Embora ainda haja alguma controvérsia sobre o mecanismo responsável pela condutividade, a hipótese de que os portadores de carga constituem-se de sólitons e polarons carregados é geralmente aceita. A grande concordância entre as previsões teóricas provenientes dessa hipótese e os valores experimentais fortalece esse ponto de vista. Citamos aqui a observação de linhas de absorção óptica que atestam a presença de estados localizados no meio da banda.

1.7 Outras características

Uma característica extremamente interessante é a relação anômala existente entre o spin e a carga de um sóliton. Observamos anteriormente que, na formação de um sóliton, um elétron de um orbital p_z permanece desemparelhado. O sóliton neutro possui, então, o spin desse elétron desemparelhado, ou seja, possui spin $1/2$.

Por outro lado, o estado localizado no meio do gap do espectro eletrônico é uma solução da equação de Schroedinger na presença do sóliton. Dessa forma, esse estado pode ser ocupado por 0, 1 ou 2 elétrons (no sóliton neutro esse estado é ocupado

por 1 elétron). Assim, quando o sôliton é carregado, ficando o estado no meio do gap com 0 ou 2 elétrons, seu spin torna-se ze ro e sua carga $\pm e$ (fig. 20).

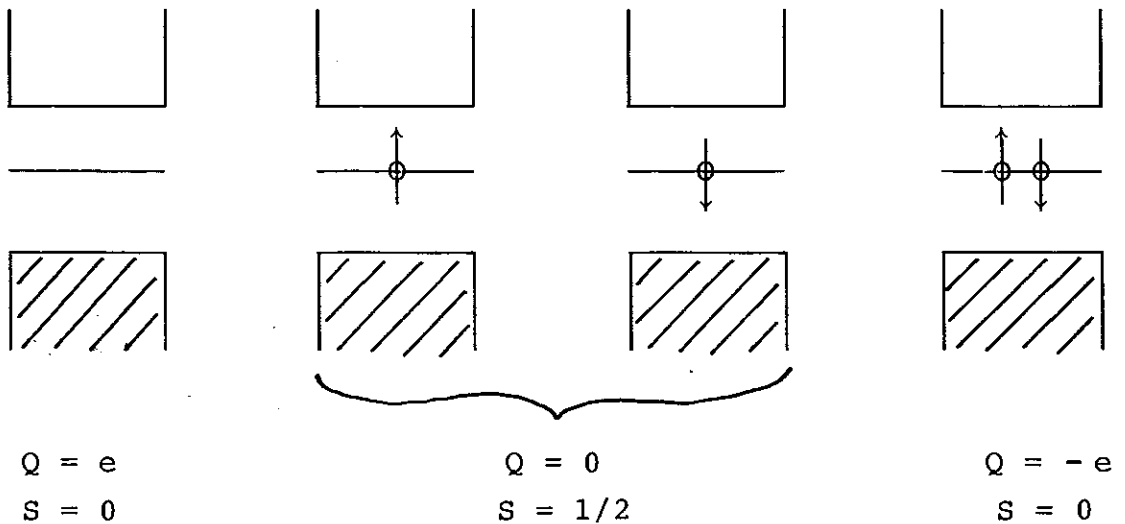


Fig. 20: Estrutura eletrônica dos vários estados de carga e spin de um sôliton

A existência de "objetos" móveis no poliacetileno com relação spin-carga anômala é confirmada experimentalmente. Na ref. 5 encontra-se uma extensa descrição dessas experiências.

Outro aspecto interessante dos sôlitons é que eles es tão ligados ao surgimento de números quânticos fracionários. A existência de excitações que transportam um número fermiônico fracionário foi descoberta por Jackiw e Rebbi estudando um campo de Dirac sem spin em interação com um campo bosônico tipo ϕ^4 em 1+1 dimensões [8]. Numa análise geral, mostra-se que o aparecimento de números quânticos fracionários está ligado à existência de excitações topológicas em sistemas com quebra de sime tria. Uma carga fracionária (número fermiônico fracionário) po de aparecer em sistemas com simetria frente a conjugação de carga.

Os modelos propostos para a descrição do poliacetileno possuem os requisitos necessários: quebra de simetria e soluções topológicas. Além disso, possuem invariância frente a conjugação de carga. Tais soluções topológicas carregam um número fermiônico fracionário. Elas são exatamente os sólitons que temos discutido até aqui. A ref. 9 faz uma análise mais detalhada dessa situação.

No caso do polaron, não ocorre a anomalia spin-carga. Os dois estados associados ao polaron têm capacidade para acomodar quatro elétrons. Como o polaron é formado a partir de dois sólitons, quando neutro tem dois elétrons nos estados ligados. Possui, portanto, o estado de energia mais baixa totalmente preenchido e o estado de energia mais alta, vazio. Seu spin nesse caso é zero. Adicionando-se um elétron ao polaron resulta num objeto de carga $-e$ e spin $1/2$. Dessa forma o polaron possui a relação spin-carga usual.

Um polaron com carga $\pm 2e$, que aparece quando adicionamos ou retiramos dois elétrons dos estados localizados do polaron neutro é chamado, na literatura, de bipolaron. O bipolaron no transpoliacetileno é instável, decaindo num par sóliton-anti-sóliton carregado. Para o cispoliacetileno, como não existe a possibilidade de formação de sólitons, o bipolaron permanece estável.

Não existe, associado ao polaron, um número fermiônico fracionário. Isso ocorre porque o polaron possui a mesma topologia do vácuo, não sendo, portanto, uma excitação topológica (lembramos que o polaron tende ao mesmo estado nas extremidades do polímero).

Um campo ainda totalmente aberto no estudo da condutividade elétrica do poliacetileno é a explicação do mecanismo de condutividade entre cadeias. Uma única cadeia não tem comprimento suficiente para ligar extremidades de uma amostra real de polímero. Assim, os portadores de carga devem, de alguma forma, passar de uma cadeia a outra até atingir o extremo oposto da amostra. Tal mecanismo ainda está a espera de uma explicação teórica.

Uma outra observação deve ser feita: as experiências com o poliacetileno demonstram haver uma grande anisotropia na sua condutividade elétrica. A condutividade ao longo da cadeia é superior, por um fator acima de 10^3 , em relação à condutividade transversal. Essa característica é que permite que o poliacetileno possa ser tratado, em termos da sua condutividade elétrica, como um sistema espacialmente unidimensional.

1.8 Principais modelos

Apresentamos aqui os principais modelos propostos para a descrição da física do poliacetileno.

Primeiramente consideramos, sucintamente, o modelo de Su, Schrieffer e Heeger (SSH) [10]. Nessa teoria, somente é considerada, para cada grupo CH, a coordenada " U_n " que descreve a translação do grupo ao longo do eixo do polímero. Isso é feito porque somente essa coordenada está ligada à estrutura de dimerização. As demais cinco coordenadas do grupo CH são desprezadas.

A coordenada U_n é medida em relação à posição de equilíbrio do grupo CH quando consideramos o estado não dimerizado

(fig. 21). Assim, como mostrado na fig. 21a, $U_n < 0$ enquanto temos U_{n+1} e $U_{n-1} > 0$, levando a uma ligação menor (dupla) entre os grupos "n-1" e "n" e a uma ligação maior (simples) entre "n" e "n+1".

Esses deslocamentos têm o sinal trocado se as ligações duplas e simples forem permutadas, como ilustrado na fig. 21b.

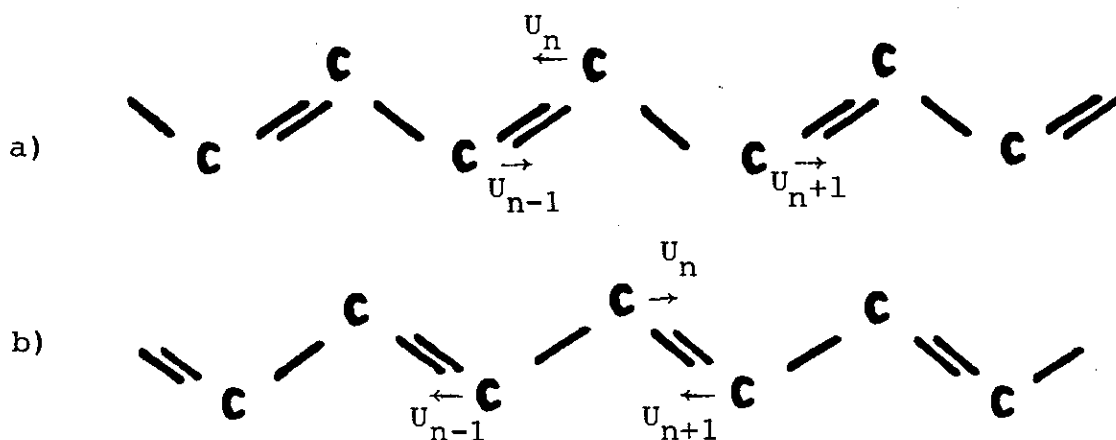


Fig. 21: Estrutura perfeitamente dimerizada do transpoliacetileno, mostrando a coordenada de dimerização, " U_n ", para os dois estados fundamentais degenerados.

A presença das ligações σ , no sistema, leva a uma interação entre os grupos adjacentes, cuja energia supõe-se da forma:

$$E_{\sigma} = \frac{1}{2} \sum_n K (U_{n+1} - U_n)^2$$

onde K é uma constante de "mola" efetiva da ligação σ .

Os elétrons π são tratados através do parâmetro de "salto" (hopping), o qual é expandido em primeira ordem sobre o estado não dimerizado:

$$t_{n+1, n} = t_0 - \alpha(U_{n+1} - U_n)$$

onde t_0 é a chamada integral de "salto"^[11] do estado não dimerizado e α é a constante de acoplamento elétron-fonon (deslocamento da rede).

O parâmetro de "salto" controla a transferência de elétrons π entre os sítios.

A energia cinética do movimento dos grupos é dada por:

$$E_K = \frac{1}{2} \sum_n M \dot{U}_n^2$$

onde M é a massa total do grupo CH.

O hamiltoniano torna-se, então:

$$H = \frac{1}{2} \sum_n M \dot{U}_n^2 + \frac{1}{2} \sum_n K(U_{n+1} - U_n)^2 - \sum_n t_{n+1, n} (C_{n+1}^+ C_n + C_n^+ C_{n+1})$$

Aqui, C_n^+ e C_n são, respectivamente, os operadores de criação e destruição de elétrons π no n -ésimo grupo CH.

Os operadores C^+ e C satisfazem relações de anticomutação (fermions) enquanto U_n e $p_n \equiv M \dot{U}_n$ satisfazem relações de comutação (bosons).

Chamamos " U_n " de parâmetro de dimerização. Na configuração perfeitamente dimerizada temos:

$$U_n = (-1)^n U$$

A energia do estado dimerizado pode ser calculada em

função de \underline{U} . Minimizando essa energia é possível obter o valor de \underline{U} para o estado fundamental, " U_0 ". Mas, se $U = U_0$ minimiza a energia, também o fará $U = -U_0$, pela simetria do hamiltoniano.

Aparece, assim, a degenerescência dupla do estado fundamental da configuração dimerizada já mostrada na fig. 21.

Considerando que o tamanho dos sólitons e polarons é muito maior que o parâmetro de rede \underline{a} , podemos supor que tais defeitos são insensíveis aos detalhes da rede. Assim, uma aproximação fornecida pelo limite do contínuo da teoria é justificável.

As vantagens de tratarmos o problema no contínuo está no fato de, nessa circunstância, ser possível obter soluções analíticas das equações de movimento.

Para calcular o limite do contínuo, define-se:

$$a_j \equiv (-1)^{j/2} \sqrt{2a} U(j a)$$

$$a_\ell \equiv (-1)^{\ell/2} \sqrt{2a} V(j a)$$

$$U_n \equiv (-1)^n \phi(n a)$$

onde " j " é um número ímpar, " ℓ " é um número par e " a " é o parâmetro de rede do estado não dimerizado.

Considera-se, agora, valores médios para definir os campos em pontos alternados e diferenças finitas para definir derivadas:

$$U(2na) \equiv \frac{U[(2n+1)a] + U[(2n-1)a]}{2}$$

$$V[(2n+1)a] \equiv \frac{V[(2n+2)a] + V[2na]}{2}$$

$$U'(2na) \equiv \frac{U[(2n+1)a] - U[(2n-1)a]}{2a}$$

$$V'[(2n+1)a] \equiv \frac{V[(2n+2)a] - V[2na]}{2a}$$

Ao tomar-se o limite do contínuo, $a \rightarrow 0$, fazem-se as seguintes identificações:

$$na \rightarrow x$$

$$a \sum_n \rightarrow \int dx$$

$$U(na) \rightarrow U(x) ; V(na) \rightarrow V(x)$$

$$U'(na) \rightarrow \frac{\partial U}{\partial x} ; V'(na) \rightarrow \frac{\partial V}{\partial x}$$

Mantendo apenas os termos dominantes em a e definindo-se:

$$\tilde{\psi}(x) \equiv \begin{bmatrix} U(x) \\ V(x) \end{bmatrix} \quad e$$

$$\psi(x) \equiv \frac{1}{2} [1 + i\sigma_3] \tilde{\psi}(x)$$

obtem-se, após um longo cálculo^[9, 11]:

$H = H_f + H_e + H_{e-f}$, onde:

$$H_f \equiv \int \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} K \phi^2 \right] dx ,$$

$$H_e \equiv -2a t_0 \int \left[\psi^\dagger \sigma_2 \frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx$$

$$H_{e-f} \equiv -4\alpha \int \left[\psi^\dagger \sigma_1 \psi \phi \right] dx$$

Redefinem-se os campos, para absorver algumas constantes:

$$\psi_{\text{novo}} \equiv \sqrt{-2at_0} \psi_{\text{velho}}$$

$$\phi_{\text{novo}} \equiv \frac{4\alpha}{2at_0} \phi_{\text{velho}}$$

O hamiltoniano reescrito com os novos campo torna-se:

$$H = \int \left[\psi^\dagger \sigma_2 \frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx + \int \left[\psi^\dagger \psi \phi \right] dx + \int \left[\frac{M'}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} K' \phi^2 \right] dx$$

onde $M' \equiv \left(\frac{2at_0}{4\alpha} \right)^2 M$ e $K' \equiv \left(\frac{2at_0}{4\alpha} \right)^2 K$

Obtivemos, assim, um hamiltoniano de Dirac acoplado a um campo escalar.

O sistema passa a ser um sistema de Teoria de Campos em 1+1 dimensões. Sua "extensão" espacial, aqui, é infinita. Isso fornecerá uma teoria aceitável, para a descrição dos polímeros, se as distâncias de correlação e o tamanho dos defeitos no polímero forem muito menores que o comprimento deste. Tal

condição é satisfeita no caso do poliacetileno.

Aqui, fazemos mais uma aproximação: consideramos o campo ϕ como sendo independente do tempo (estático). Isso é válido porque está verificado, fenomenologicamente, que o tempo de relaxação dos elétrons é muito menor que o tempo de relaxação dos fonons (defeitos).

Tal aproximação é conhecida como aproximação adiabática.

A equação para o campo ϕ torna-se, nesse caso:

$$K'\phi = \sum_n \psi_n^\dagger \sigma_1 \psi_n$$

onde a soma estende-se sobre os elétrons da banda de valência.

O modelo apresentado acima, após a aproximação adiabática, apresenta uma grande semelhança com um modelo em Teoria de Campos proposto por Gross e Neveu^[12]. Na verdade, foi mostrado por Campbell e Bishop^[13] que existe uma completa equivalência entre o modelo exposto acima e o modelo de Gross-Neveu, quando considerado numa aproximação semiclassica e estática.

As equações de movimento para esse caso são:

$$[i \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - g_{GN} \phi(x)] \psi(x) = 0$$

e

$$\phi(x) = - g_{GN} \psi^\dagger \gamma_0 \psi$$

onde γ_μ são as matrizes de Dirac em 1+1 dimensões (matrizes

de Pauli).

O interessante a salientar aqui, é que esse modelo não apresenta quebra espontânea de simetria na aproximação de campo médio (soluções clássicas das equações de movimento).

Somente quando consideramos a presença do mar de Dirac de energia negativa aparece a quebra espontânea de simetria. Tal situação é chamada de quebra dinâmica de simetria. Isso gera, dinamicamente, uma massa para o férmion, abrindo um gap entre os estados positivos e negativos de energia.

O paralelo com o poliacetileno é o seguinte:

Levar em conta a presença do mar de Dirac significa, para o poliacetileno, considerar a interação dos fonons com os elétrons da banda de valência. Tal interação é que provoca a dimerização da cadeia, ou seja, a quebra espontânea da simetria.

A banda de valência é, então, o análogo do mar de Dirac de energia negativa.

Como o mar de Dirac tem profundidade infinita, e como entre esse mar e os estados de energia positiva existe um gap, vemos que uma condição a mais deve ser satisfeita para que o limite da teoria de campos possa ser aplicado à descrição dos polímeros. Essa condição é que a largura da banda de valência deve ser muito maior que o gap entre as bandas de valência e condução.

Para completar a exposição desse modelo de Gross e Neveu, salientamos que aqui, também aparecem como soluções estáticas das equações de movimento, os estados de sólitons e polarons.

O trabalho de Campbell e Bishop^[13] faz uma análise

detalhada dessas soluções e suas relações com o modelo de Su, Schrieffer e Heeger.

O modelo de Krive e Rozhavskii

Apresentamos, agora, outro modelo para a descrição de poliacetileno, proposto por Krive e Rozhavskii^[14].

Esse modelo é proposto diretamente no contínuo. Seu hamiltoniano considera um campo escalar com autointeração tipo ϕ^4 , apresentando quebra espontânea de simetria e a interação desse campo escalar com um campo fermiônico, através de um acoplamento de Yukawa.

Não apresentaremos aqui o hamiltoniano como foi proposto originalmente. Apresentaremos a densidade de lagrangeano equivalente com algumas mudanças de constantes, deixando-o mais ao gosto da teoria de campos.

Tal lagrangeano é:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 + \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - g\phi) \psi$$

Aqui, γ^μ são as matrizes de Dirac em 1+1 dimensões (sendo como no modelo anterior, matrizes de Pauli). A constante "g" é a constante de acoplamento de Yukawa. Além disso, $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma_0$.

O campo bosônico apresenta um potencial da forma

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2$$

que, diferentemente do modelo anterior, já apresenta quebra espontânea de simetria ao nível clássico. Dessa forma, podemos

dizer que a presença da interação quártica no potencial bosônico está funcionando como um potencial efetivo da interação dos fonons (bosons) com os elétrons π da banda de valência.

As equações de movimento são derivadas a partir de um princípio variacional que leva às equações de Euler-Lagrange:

$$\partial_{\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_{\mu} \phi_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_i} = 0$$

No caso presente, tomando ϕ_i como ϕ e $\bar{\psi}$ chegamos às seguintes equações:

$$[i \gamma^{\mu} \partial_{\mu} - g \phi] \bar{\psi} = 0$$

$$\partial_{\mu} \partial^{\mu} \phi + \lambda \phi (\phi^2 - \phi_0^2) = -g \bar{\psi} \psi$$

A primeira equação é uma equação de um campo de Dirac acoplado a um campo escalar, ϕ . A segunda equação é uma equação para o campo ϕ , com uma corrente externa.

No próximo capítulo desenvolveremos um método para a obtenção das soluções do sistema de equações acopladas obtido acima, considerando-se a aproximação adiabática.

CAPITULO II

OBTENÇÃO DAS SOLUÇÕES

2.1 Introdução

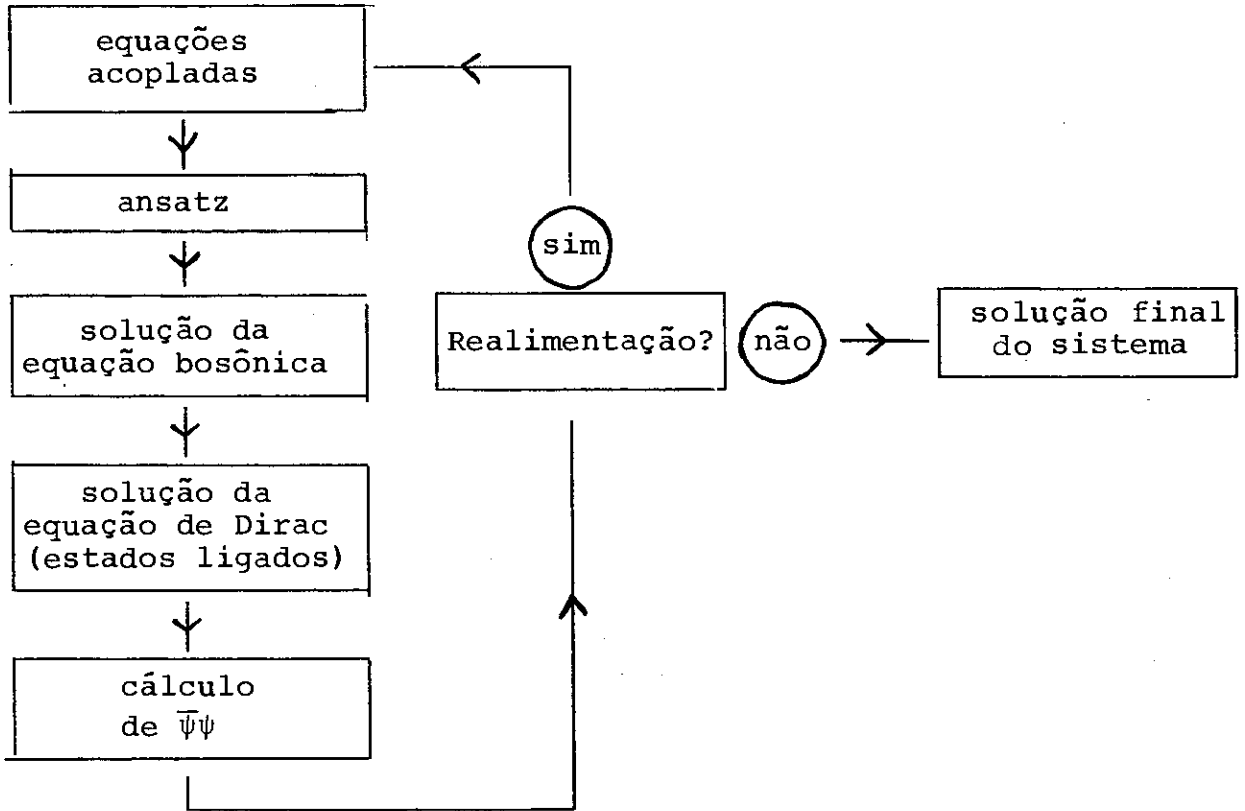
Nesse capítulo resolvemos o sistema de equações acopladas resultante do modelo de Krive e Rozhavskii.

Nosso método de obtenção das soluções é o seguinte:

Inicialmente tomamos um ansatz na equação bosônica, fazendo hipóteses sobre a forma de $\phi(x)$ e o valor de $\bar{\psi}\psi$. Resolvemos, a seguir, esta equação. Levamos o valor de $\phi(x)$ encontrado para a equação de Dirac. Encontramos as soluções normalizáveis (estados ligados) desta equação e calculamos o valor de $\bar{\psi}\psi$.

Finalmente verificamos se o valor encontrado para $\bar{\psi}\psi$ coincide com a nossa hipótese inicial ou se há realimentação na equação bosônica. Quando o ciclo se completa, temos em mãos as soluções do sistema acoplado.

Esquemáticamente temos:



Na seção 2.2 definimos as convenções utilizadas e as aproximações feitas. Na seção 2.3, obtemos os estados dimerizados degenerados. Na seção 2.4, obtemos o sóliton e o estado no meio do gap. Na seção 2.5, obtemos o polaron, os dois estados no gap e observamos a necessidade de impor uma relação entre as constantes de acoplamento "g" e "λ".

2.2 Convenções e aproximações

Partimos do par de equações acopladas obtido no capítulo anterior:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - g\phi)\tilde{\psi} = 0 \tag{2.1}$$

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi + \lambda\phi(\phi^2 - \phi_0^2) = -g\bar{\tilde{\psi}}\tilde{\psi} \tag{2.2}$$

Utilizamos a métrica (1, -1) e adotamos a convenção de Weyl para as matrizes de Dirac em 1+1 dimensões, ou seja:

$$\gamma^0 = \sigma_1$$

$$\gamma^1 = -i\sigma_3$$

As matrizes σ são as matrizes de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Com essas convenções a equação (2.1) torna-se:

$$\left[i\sigma_1 \frac{\partial}{\partial t} - \sigma_3 \frac{\partial}{\partial x} - g\phi \right] \tilde{\psi} = 0 \quad (2.3)$$

Multiplicando (2.3) à esquerda por σ_1 , obtemos:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + i\sigma_2 \frac{\partial}{\partial x} - g\phi\sigma_1 \right] \tilde{\psi} = 0 \quad (2.4)$$

Consideramos, agora, apenas as soluções estacionárias para o campo $\tilde{\psi}$, na forma:

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{-i\omega t} \psi(x)$$

No caso do campo ϕ , faremos a aproximação adiabática que consiste em torná-lo independente do tempo.

Devido às convenções e aproximações apresentadas acima, as equações acopladas (2.1) e (2.2) tornam-se:

$$[i \sigma_2 \frac{\partial}{\partial x} - g \phi(x) \sigma_1] \psi(x) = -\omega \psi(x) \quad (2.5)$$

$$-\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \lambda \phi (\phi^2 - \phi_0^2) = -g \bar{\psi} \psi \quad (2.6)$$

Lembramos que:

$$\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \sigma_1$$

2.3 O estado dimerizado

Nossa primeira busca por soluções das equações acopladas dar-se-á supondo que o campo ϕ não dependa da posição e que a corrente externa da equação para os bosons se anule:

$$\phi(x) = \text{constante}$$

$$\bar{\psi} \psi = 0$$

A equação (2.6). nessas condições, torna-se:

$$\lambda \phi (\phi^2 - \phi_0^2) = 0 \quad (2.7)$$

São três as soluções possíveis:

$$\phi = 0 \quad \text{e} \quad \phi = \pm \phi_0$$

É bom lembrar, para a interpretação e identificação das soluções, que o campo $\phi(x)$ é considerada como o parâmetro de dimerização (sua origem deu-se via: $U_n = (-1)^n \phi(na)$).

A solução $\phi = 0$ corresponde, então, ao estado não dimerizado. É uma situação instável, como vimos no primeiro capítulo, correspondendo à instabilidade de Peierls. Essa instabilidade pode ser notada no contexto do modelo adotado por nós, observando que a solução $\phi = 0$ é um máximo local do potencial $V(\phi)$ mencionado no capítulo 1.

As soluções $\phi = \pm \phi_0$ correspondem aos dois possíveis estados dimerizados do transpoliacetileno.

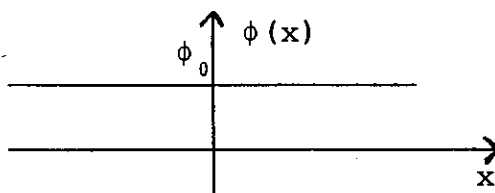


Fig. 22: Parâmetro de ordem, $\phi(x)$, para um dos estados dimerizados de transpoliacetileno

A equação para os férmions no caso dimerizado torna-se uma equação de Dirac para férmions livres de massa $g\phi_0$. O espectro, nesse caso, é dado por^[15]:

$$E = \pm \sqrt{K^2 + (g\phi_0)^2}$$

onde K é o momento linear da quase-partícula associada ao elétron.

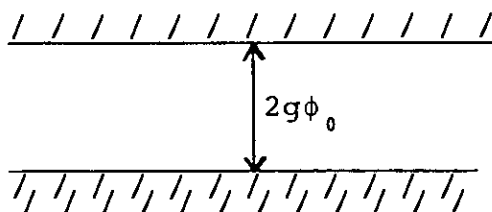


Fig. 23: Espectro fermiônico no estado dimerizado

A condição $\bar{\psi}\psi = 0$ é satisfeita aqui, garantindo a solução do sistema de equações acopladas (2.5) e (2.6).

2.4 O sóliton

Na seção anterior analisamos a solução proveniente das hipóteses $\phi(x) = \text{cte}$ e $\bar{\psi}\psi = 0$. Agora, vamos considerar $\phi(x)$ variando com "x" e, novamente, $\bar{\psi}\psi = 0$.

A equação para o campo ϕ , nesse caso, é:

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + \lambda\phi(\phi^2 - \phi_0^2) = 0 \quad (2.8)$$

Multiplicando a equação acima por $\frac{d\phi}{dx}$ e rearranjando os termos, obtém-se:

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 \right] = 0$$

Dessa forma, o termo entre colchetes deve ser igual a uma constante, E:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 = \text{const.} = E \quad (2.9)$$

Se, agora, fizermos a seguinte associação:

$\phi \rightarrow r$ (coordenada espacial)

$x \rightarrow t$ (coordenada temporal)

a equação (2.9) torna-se a equação de conservação da energia para uma partícula clássica, de massa unitária, movendo-se num potencial:

$$V(r) = -\frac{\lambda}{4} (r^2 - r_0^2)^2$$

A eq. (2.8), nas novas coordenadas, torna-se a eq. de movimento da partícula.

Fixar a constante em (2.9) é o análogo a fixarmos a e nergia total da partícula clássica.

$$\frac{1}{2} \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + V(r) = E \quad (2.10)$$

Observe que se tomarmos $E > 0$ o movimento será ilimitado e teremos $r \rightarrow \infty$ para $t \rightarrow \infty$ (fig. 24).

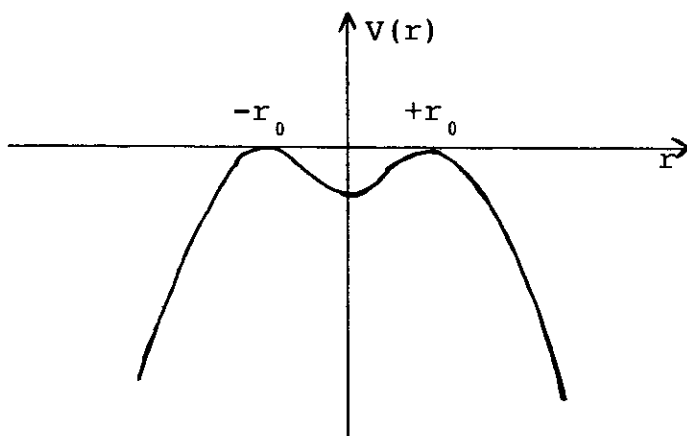


Fig. 24: Ilustração do potencial $V(r)$

Isso implicaria em $\phi \rightarrow \infty$ para $x \rightarrow \infty$, o que não nos interessa, pois ϕ é o nosso parâmetro de dimerização e não pode ser infinito.

Restam as possibilidades $E < 0$ e $E = 0$.

A condição $E < 0$ leva a um parâmetro de dimerização oscilando indefinidamente e não corresponde aos nossos casos de interesse, sólitons e polarons.

No caso $E = 0$, a partícula clássica sai de $r = -r_0$ em $t = -\infty$ e atinge $r = +r_0$ em $t = +\infty$, ou vice-versa.

Tal solução implica em $\phi = -\phi_0$ em $x = -\infty$ e $\phi = +\phi_0$ em $x = +\infty$, ou vice-versa.

Isso corresponde ao sóliton, pois o polímero encontra-se nos distintos estados de dimerização nos seus extremos.

Fixamos, portanto, para a obtenção do sóliton, a constante como sendo igual a zero.

Assim:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 = 0 \quad (2.11)$$

Isolando $\frac{d\phi}{dx}$, obtemos:

$$\frac{d\phi}{dx} = \pm \sqrt{\frac{\lambda}{2}} (\phi^2 - \phi_0^2) \quad (2.12)$$

Supondo o sóliton centrado em $x = \bar{x}$, ou seja, $\phi(\bar{x}) = 0$ e integrando (2.12), vem:

$$\int_0^\phi \frac{d\phi'}{\phi'^2 - \phi_0^2} = \pm \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \int_{\bar{x}}^x dx'$$

ou:

$$-\frac{1}{\phi_0} \operatorname{arcth} \left(\frac{\phi}{\phi_0} \right) + \frac{1}{\phi_0} \operatorname{arcth} (0) = \pm \sqrt{\frac{\lambda}{2}} (x - \bar{x})$$

Isolando ϕ obtemos:

$$\phi = \pm \phi_0 \operatorname{th} \left[\sqrt{\frac{\lambda}{2}} \phi_0 (x - \bar{x}) \right] \quad (2.13)$$

Convencionamos chamar a solução com sinal "+" de sôliton e a solução com sinal "-" de antisôliton.

Passamos, agora, à análise da parte fermiônica.

Inicialmente, definimos os operadores D e D^\dagger , da seguinte forma:

$$D \equiv - \frac{d}{dx} - g\phi(x) \quad (2.14)$$

$$D^\dagger = \frac{d}{dx} - g\phi(x) \quad (2.15)$$

A equação para os férmions (2.5) pode ser escrita como:

$$\begin{bmatrix} 0 & D^\dagger \\ D & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = -\omega \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$$

onde fizemos $\psi(x) \equiv \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$

De acordo com o teorema de Atiyah-Singer^[16], devemos ter um modo zero fermiônico, pois o campo $\phi(x)$ apresenta uma topologia não trivial.

Fazendo $\omega = 0$ em (2.16), obtemos:

$$D^\dagger \psi_2 = \left[\frac{d}{dx} - g\phi_0 \operatorname{th} \left[\sqrt{\frac{\lambda}{2}} \phi_0 (x - \bar{x}) \right] \right] \psi_2 = 0 \quad (2.17)$$

$$D \psi_1 = \left[-\frac{d}{dx} - g\phi_0 \operatorname{th} \left[\sqrt{\frac{\lambda}{2}} \phi_0 (x - \bar{x}) \right] \right] \psi_1 = 0 \quad (2.18)$$

Vamos considerar que as constantes λ e g não são independentes, mantendo a relação:

$$\lambda = 2g^2 \quad (2.19)$$

Essa relação será necessária, na próxima seção, para que possamos encontrar a solução tipo polaron. Para manter a uniformidade, vamos considerá-la desde já.

Podemos, agora, encontrar imediatamente uma solução para as equações (2.17) e (2.18).

Basta considerarmos:

$$\psi_2 = 0 \quad (2.20)$$

e

$$\psi_1 = N \operatorname{sech} [g \phi_0 (x - \bar{x})] \quad (2.21)$$

onde N é uma constante de normalização.

O espinor $\psi(x)$ fica, então:

$$\psi(x) = N \operatorname{sech} [g \phi_0 (x - \bar{x})] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Segue, imediatamente, que $\bar{\psi}\psi = 0$, de acordo com nossa hipótese inicial, garantindo a solução do sistema de equações a copladas (2.5) e (2.6).

O parâmetro de dimerização $\phi(x)$ e a densidade de probabilidade eletrônica $\psi^\dagger\psi$ são ilustrados nas figuras 25 e 26.

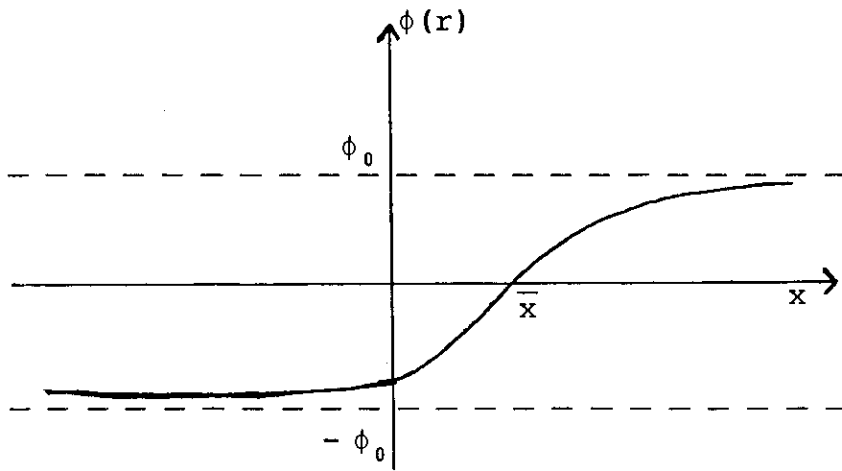


Fig. 26: Parâmetro de dimerização $\phi(x)$ para o caso de um sôliton

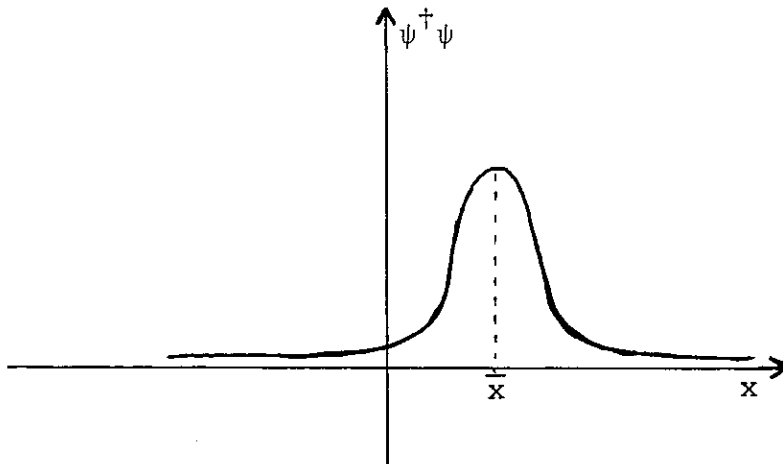


Fig. 27: Densidade de probabilidade eletrônica na presença de um sôliton centrado em \bar{x}

2.5 0 polaron

Consideramos, agora, uma nova situação onde o campo ϕ depende de \underline{x} e a corrente externa na equação bosônica é constante.

$$\phi = \phi(x) \tag{2.23}$$

$$\bar{\psi}\psi = \text{constante} \equiv \frac{j}{g} \tag{2.24}$$

A equação bosônica (2.6) torna-se:

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + \lambda\phi(\phi^2 - \phi_0^2) = -j \tag{2.25}$$

Estamos frente a uma equação não linear e não homogênea, mas que possui soluções analíticas exatas. A obtenção das soluções desta equação, é feita no apêndice.

O potencial bosônico associado à equação (2.25) tem a forma:

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 + j\phi \tag{2.26}$$

Na figura 28, ϕ_2 é um mínimo local do potencial $V(\phi)$.

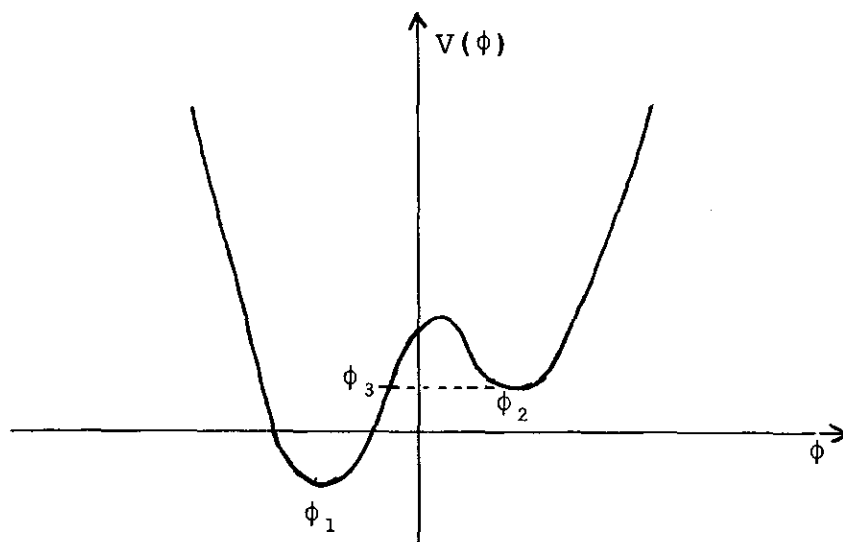


Fig. 28: Forma do potencial $V(\phi)$ da equação (2.26).
 ϕ_1 e ϕ_2 são mínimos locais de $V(\phi)$

A solução de (2.25) que nos interessa, o polaron, é dada por:

$$\phi = \phi_2 - \sqrt{\frac{3}{2} \phi_2^2 - \frac{\phi_0^2}{2}} [\text{th}(\frac{v}{2} + x_0) - \text{th}(\frac{v}{2} - x_0)] \quad (2.27)$$

onde $x_0 \equiv \frac{1}{2} \text{arcosh} \frac{\sqrt{2} \phi_2}{\sqrt{\phi_0^2 - \phi_2^2}} \quad (2.28)$

e

$$v \equiv \sqrt{3\lambda\phi_2^2 - \lambda\phi_0^2}(x - \beta); \beta \text{ é uma constante arbitrária.} \quad (2.29)$$

Para simplificar as expressões futuras, definimos:

$$a \equiv \sqrt{\frac{3}{2} \phi_2^2 - \frac{\phi_0^2}{2}} \quad (2.30)$$

$$b \equiv \frac{1}{2} \sqrt{3\lambda\phi_2^2 - \lambda\phi_0^2} = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} a \quad (2.31)$$

Assim, reescrevemos ϕ de (2.27) como:

$$\phi = \phi_2 - a[\text{th}[b(x - \beta) + x_0] - \text{th}[b(x - \beta) - x_0]] \quad (2.32)$$

Quando o argumento das tangentes hiperbólicas não for importante, escreveremos:

$$\text{th}[b(x - \beta) + x_0] \rightarrow \text{th}(+) \quad (2.33a)$$

$$\text{th}[b(x - \beta) - x_0] \rightarrow \text{th}(-) \quad (2.33b)$$

e, analogamente, para outras funções hiperbólicas, por exemplo:

$$\operatorname{sech}[b(x - \beta) + x_0] \rightarrow \operatorname{sech}(+) \quad (2.33c)$$

A equação para a parte fermiônica \hat{e} , seguindo as definições dos operadores D e D^+ da seção anterior:

$$\begin{bmatrix} 0 & D^+ \\ D & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = -\omega \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

Tomando o quadrado do operador em (2.34), obtemos:

$$\begin{bmatrix} D^+D & 0 \\ 0 & DD^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \omega^2 \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

Isso nos leva a um par de equações:

$$D^+D \psi_1 = \omega^2 \psi_1 \quad (2.36)$$

$$DD^+ \psi_2 = \omega^2 \psi_2 \quad (2.37)$$

Calculando D^+D e DD^+ , obtemos:

$$D^+D = -\frac{d^2}{dx^2} - g \frac{d\phi}{dx} + g^2 \phi^2 \quad (2.38)$$

$$DD^+ = -\frac{d^2}{dx^2} + g \frac{d\phi}{dx} + g^2 \phi^2 \quad (2.39)$$

Levando em (2.38) e (2.39) o campo ϕ do polaron, dado pela equação (2.32), vemos que as equações (2.36) e (2.37) tor-

nam-se:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + g^2\phi_2^2 - 2g^2a^2 + (g - \sqrt{\frac{\lambda}{2}})ga^2 \operatorname{th}^2(+) + (g + \sqrt{\frac{\lambda}{2}})ga^2 \operatorname{th}^2(-) \right] \psi_1 = \\ = \omega^2\psi_1 \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + g^2\phi_2^2 - 2g^2a^2 + (g + \sqrt{\frac{\lambda}{2}})ga^2 \operatorname{th}^2(+) + (g - \sqrt{\frac{\lambda}{2}})ga^2 \operatorname{th}^2(-) \right] \psi_2 = \\ = \omega^2\psi_2 \end{aligned} \quad (2.41)$$

A equação (2.34) gerou, assim, um par de equações de Schrödinger. Não somos capazes de resolver estas equações na forma em que se encontram. Entretanto, seremos capazes de resolvê-las se impusermos uma relação entre as constantes de acoplamento "g" e "λ". A escolha conveniente é:

$$\lambda = 2g^2 \quad (2.42)$$

Nesse caso, nota-se que ocorre um desacoplamento espacial entre os problemas em $(+x_0)$ e $(-x_0)$. A equação para ψ_1 passa a depender apenas de $\operatorname{th}(-)$ enquanto que a equação para ψ_2 passa a depender apenas de $\operatorname{th}(+)$.

Dessa forma, as equações (2.40) e (2.41) tornam-se:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + g^2\phi_2^2 - 2g^2a^2 \operatorname{sech}^2(-) \right] \psi_1 = \omega^2\psi_1 \quad (2.43)$$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + g^2\phi_2^2 - 2g^2a^2 \operatorname{sech}^2(+) \right] \psi_2 = \omega^2\psi_2 \quad (2.44)$$

É interessante observar que a condição (2.42) é aquela que torna o presente modelo supersimétrico. O modelo resultante passa a ser o modelo de Wess-Zumino supersimétrico [17, 18 e 19].

As soluções normalizáveis das equações (2.43) e (2.44) podem ser obtidas consultando-se o livro de Morse e Feshbach [20]. Sua forma é:

$$\psi_1 = N \operatorname{sech}(-) \quad (2.45)$$

$$\psi_2 = N' \operatorname{sech}(+) \quad (2.46)$$

N e N' acima, são constantes de normalização (obs.: os estados que aparecem no meio do gap, associados aos sólitons e polarons, são sempre normalizáveis).

Com as soluções acima, obtemos:

$$\omega^2 = \frac{g}{2} (\phi_0^2 - \phi_2^2) \quad (2.47)$$

Definimos:

$$\omega = + \frac{g}{\sqrt{2}} \sqrt{\phi_0^2 - \phi_2^2} \quad (2.48)$$

Devemos ter cuidado ao montarmos, com (2.45) e (2.46), o espinor que é solução da equação (2.34).

Quando passamos da equação (2.34) para a (2.35), a fase relativa entre as componentes do espinor se perde. Para recuperarmos esta fase podemos fazer o seguinte:

Fixamos ψ_1 e calculamos ψ_2 via equação (2.34):

$$\psi_2 = \frac{1}{-\omega} D \psi_1 \quad (2.49)$$

Calculando $D \psi_1$ obtemos:

$$D\psi_1 = [-g \phi_2 + g a \operatorname{th}(+)] N \operatorname{sech}(-) \quad (2.50)$$

Usando, agora, a identidade:

$$\begin{aligned} \operatorname{ch}(-) &\equiv \operatorname{ch}[b(x - \beta) - x_0] = \operatorname{ch}[b(x - \beta) + x_0 - 2x_0] = \\ &= \operatorname{ch}(+) \operatorname{ch}(2x_0) - \operatorname{sh}(+) \operatorname{sh}(2x_0) \end{aligned} \quad (2.51)$$

e lembrando que, de acordo com (2.28):

$$\cosh(2x_0) = \frac{\sqrt{2} \phi_2}{\sqrt{\phi_0^2 - \phi_2^2}} \quad (2.52)$$

a equação (2.50) pode ser reescrita como:

$$D\psi_1 = -\omega N' \operatorname{sech}(+) \quad (2.53)$$

Dessa forma, se tomarmos $N' = N$, obtemos o estado de energia positiva.

$$\psi_+(x) = N \begin{bmatrix} \operatorname{sech}(-) \\ \operatorname{sech}(+) \end{bmatrix} \quad (2.54a)$$

$$E = + \omega \tag{2.54b}$$

Se, por outro lado tomarmos $N' = -N$, obteremos o estado de energia negativa:

$$\psi_+(x) = N \begin{bmatrix} \operatorname{sech}(-) \\ - \operatorname{sech}(+) \end{bmatrix} \tag{2.55a}$$

$$E = - \omega \tag{2.55b}$$

O valor de N pode ser fixado via:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^+ \psi = 1$$

resultando:

$$N = \frac{\sqrt{b}}{2} \tag{2.56}$$

Calculando, agora, $\bar{\psi}\psi$ para o estado de energia positiva, ψ_+ , obtemos:

$$\bar{\psi}_+ \psi_+ = \frac{b}{2} \operatorname{sech}(+) \operatorname{sech}(-) \tag{2.57}$$

Omitiremos os cálculos relativos a $\bar{\psi}_- \psi_-$ porque levam ao mesmo resultado final.

Vemos que o valor de $\bar{\psi}\psi$ em (2.57) não é constante, contrariando nossa hipótese inicial.

Entretanto, podemos reescrever (2.57) como:

$$\bar{\psi}\psi = \frac{ga}{2\text{sh}(2x_0)} [\text{th}(+) - \text{th}(-)] \quad (2.58)$$

Podemos, uma vez mais, reescrever $\bar{\psi}\psi$ envolvendo, agora, o campo ϕ associado ao polaron (2.27).

Assim,

$$\bar{\psi}\psi = \frac{-g}{2\text{sh}(2x_0)} (\phi - \phi_2) \quad (2.59)$$

Obtivemos $\bar{\psi}\psi$ que é igual a uma constante, mais um termo proporcional a ϕ .

A equação de movimento para ϕ é (2.6):

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + 2g^2\phi(\phi^2 - \phi_0^2) = -g\bar{\psi}\psi \quad (2.60)$$

Podemos, agora, fazer a seguinte interpretação:

O termo proporcional a ϕ existente em $\bar{\psi}\psi$ representa, em (2.60), uma realimentação à massa dos bósons ($g\phi_0$). Visto dessa forma, podemos dizer que devemos ter uma nova solução (realimentada) para ϕ que, entretanto, preserva a mesma forma de (2.32). Mudam os parâmetros que envolvem a massa (ϕ_2, x_0, a, b), mas não mudam as relações entre os parâmetros, quando estas não envolvem a massa.

Assim, temos uma redefinição de parâmetros:

$$\begin{aligned} a &\rightarrow \tilde{a} & \phi_2 &\rightarrow \tilde{\phi}_2 \\ b &\rightarrow \tilde{b} & x_0 &\rightarrow \tilde{x}_0 \end{aligned}$$

$$b = ga \rightarrow \tilde{b} = g\tilde{a}$$

A nova forma do ϕ associado ao polaron, torna-se:

$$\phi = \tilde{\phi}_2 - \tilde{a}[\text{th}[\tilde{b}(x - \beta) + \tilde{x}_0] - \text{th}[\tilde{b}(x - \beta) - \tilde{x}_0]] \quad (2.61)$$

Queremos que este ϕ seja solução da equação (2.60) com $\bar{\psi}\psi$ dado por (2.59).

Substituímos, então, (2.61) em (2.60) e, após certa quantidade de cálculos, obtemos:

$$\begin{aligned} & 2g^2\tilde{\phi}_2^3 - 2g^2\tilde{\phi}_2\phi_0^2 + \\ & + (2g^2\tilde{a})(\phi_0^2 - 3\tilde{\phi}_2^2 + 2\tilde{a} + \frac{1}{4\text{sh}(2\tilde{x}_0)})[\text{th}(+) - \text{th}(-)] + \\ & + (6g^2\tilde{a}^2)(\tilde{\phi}_2 - \frac{\tilde{a}}{\text{th}(2\tilde{x}_0)})[\text{th}(+) - \text{th}(-)]^2 = 0 \quad (2.62) \end{aligned}$$

Para que o ϕ escolhido seja solução de (2.60) devemos ter a equação acima identicamente nula para qualquer valor de \underline{x} .

Ficamos com três condições:

$$2g^2\tilde{\phi}_2^3 - 2g^2\tilde{\phi}_2\phi_0^2 = 0 \quad (2.63a)$$

$$\phi_0^2 - 3\tilde{\phi}_2^2 + 2\tilde{a}^2 + \frac{1}{4\text{sh}(2\tilde{x}_0)} = 0 \quad (2.63b)$$

$$\tilde{\phi}_2 - \frac{\tilde{a}}{\text{th}(2\tilde{x}_0)} = 0 \quad (2.63c)$$

Temos três incógnitas que são $\tilde{\phi}_2$, \tilde{a} e \tilde{x}_0 .

De (2.63a) segue que:

$$\tilde{\phi}_2 = \pm \phi_0$$

A solução com sinal "+" corresponde ao polaron e a com sinal "-" corresponde ao antipolaron. Seguiremos, apenas, com o polaron.

Seja, então:

$$\tilde{\phi}_2 = + \phi_0 \tag{2.64}$$

Temos duas possibilidades para \tilde{a} e \tilde{x}_0 :

$$\tilde{a} = \sqrt{\frac{1}{2} (\phi_0^2 + \sqrt{\phi_0^4 - 1/16})} \tag{2.65a}$$

$$\tilde{x}_0 = \frac{1}{2} \operatorname{arcosh} [4\phi_0^2 + \sqrt{16\phi_0^4 - 1}] \tag{2.65b}$$

ou:

$$\tilde{a} = \sqrt{\frac{1}{2} (\phi_0^2 - \sqrt{\phi_0^4 - 1/16})} \tag{2.66a}$$

$$\tilde{x}_0 = \frac{1}{2} \operatorname{arcosh} [4\phi_0^2 - \sqrt{16\phi_0^4 - 1}] \tag{2.66b}$$

Levando esses resultados nas equações dos férmions, (2.43) e (2.44), obtemos, para a energia do fermion:

$$\omega^2 = \frac{g^2}{2} [\phi_0^2 - \sqrt{\phi_0^4 - 1/16}] \tag{2.67}$$

para \tilde{a} e \tilde{x}_0 de (2.65) e:

$$\omega^2 = \frac{g^2}{2} [\phi_0^2 + \sqrt{\phi_0^4 - 1/16}] \quad (2.68)$$

para \tilde{a} e \tilde{x} de (2.66).

É importante salientar que soluções semelhantes às en-
contradas aqui, porém equivalentes, foram obtidas por Campbell e
Liao^[19] num contexto completamente diferente. Estes autores
estudavam a estrutura nuclear utilizando-se do modelo σ bidimen-
sional. As equações acopladas de movimento foram resolvidas a-
través do método de espalhamento inverso. Eles mostraram que
o polaron de raio menor (dado pelas nossas relações (2.66)) é
instável, decaindo num par sôliton-antisôliton.

Descartamos, portanto, esta solução.

Resumindo, obtivemos as seguintes soluções associadas
de polaron:

$$\phi = \phi_0 - \tilde{a} [\text{th} [g\tilde{a}(x - \beta) + \tilde{x}_0] - \text{th} [g\tilde{a}(x - \beta) - \tilde{x}_0]]$$

e os estados fermiônicos:

$$\psi_- = \frac{\sqrt{g\tilde{a}}}{2} \begin{bmatrix} \text{sech}[g\tilde{a}(x - \beta) - \tilde{x}_0] \\ \text{sech}[g\tilde{a}(x - \beta) + \tilde{x}_0] \end{bmatrix} ; \quad E = -\omega$$

$$\psi_+ = \frac{\sqrt{g\tilde{a}}}{2} \begin{bmatrix} \text{sech}[g\tilde{a}(x - \beta) - \tilde{x}_0] \\ -\text{sech}[g\tilde{a}(x - \beta) + \tilde{x}_0] \end{bmatrix} ; \quad E = +\omega$$

onde

$$\omega = \frac{g}{\sqrt{2}} \sqrt{\phi_0^2 - \sqrt{\phi_0^4 - 1/16}}$$

$$\tilde{a} = \sqrt{\frac{1}{2} (\phi_0^2 + \sqrt{\phi_0^4 - 1/16})}$$

$$\tilde{x}_0 = \frac{1}{2} \operatorname{arcosh} [4\phi_0^2 + \sqrt{16\phi_0^4 - 1}]$$

β = constante arbitrária

Representamos, a seguir, a forma do parâmetro de dimerização $\phi(x)$ e a forma da densidade fermiônica $\psi^\dagger\psi$, relativas ao polaron.

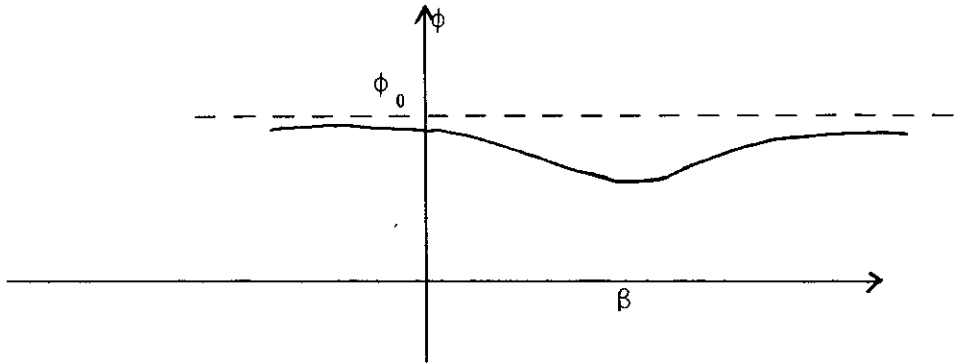


Fig. 29: Parâmetro de dimerização $\phi(x)$ para o polaron

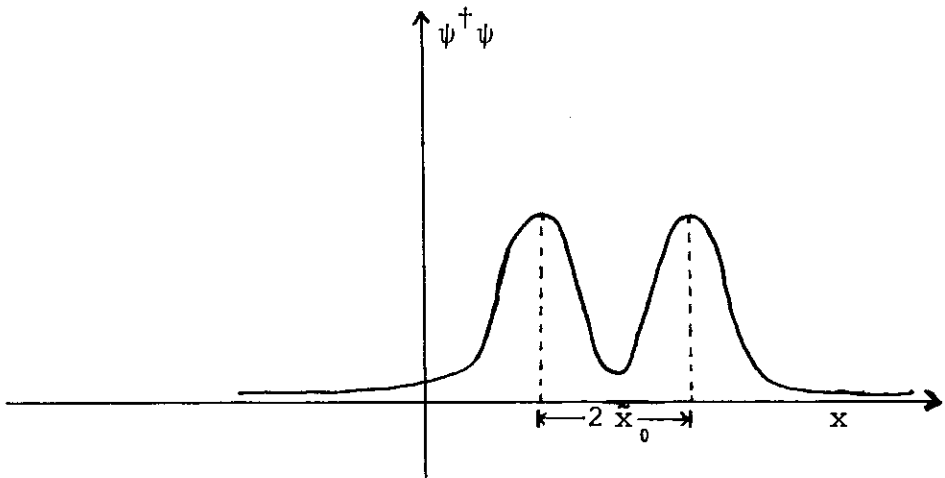


Fig. 30: Densidade de probabilidade eletrônica na presença de um polaron

CAPITULO III

ANÁLISE A PARTIR DE DADOS DE ESPALHAMENTO

3.1 Introdução

Desenvolvemos nesse capítulo, de forma sucinta, o procedimento necessário à descrição dos modelos apresentados anteriormente em termos de dados de espalhamento. Em alguns momentos, não apresentamos as demonstrações das relações utilizadas. Aconselhamos ao leitor interessado em maiores detalhes, consultar as referências [19], [22], [23], [24] e [25].

Na seção 3.2 descrevemos a forma do Lagrangeano efetivo para os bosons, obtida pela integração sobre campos fermiônicos que aparecem quadraticamente nos modelos analisados.

Na seção 3.3 introduzimos o conjunto de dados de espalhamento. Apresentamos uma maneira de escrever os modelos teóricos em termos desses dados. Nesse processo, reobtemos a condição entre as constantes de acoplamento do modelo de Krive e Rozhavskii ($\lambda = 2g^2$), agora num contexto análogo ao de Campbell e Liao.

Obtemos a condição de extremização da ação para o nosso modelo (com $j\phi$) e para o modelo de Krive e Rozhavskii.

Citamos, finalmente, a possibilidade de haver infinitos modelos teóricos que admitem soluções de sólitons e polarons.

3.2 O Lagrangeano efetivo

Dashen, Hasslacher e Neveu^[22] e Campbell e Liao^[19] mostram que, quando partimos de um Lagrangeano quadrático no campo fermiônico, o Lagrangeano efetivo para os bosons, incluindo a contribuição dos fermions, é dado por:

$$L_{\text{ef}} = \int dx \mathcal{L}_B(\phi) - N \sum_{\omega_i < 0} \omega_i[\phi] - \sum_{\omega_i > 0} n_i \omega_i[\phi] \quad (3.1)$$

onde os ω_i são os auto-valores de energia da equação de Dirac na presença do campo $\phi(x)$ (equação 2.5); n_i é o número de ocupação do estado caracterizado por ω_i e \mathcal{L}_B é a densidade de Lagrangeano correspondente à parte bosônica.

O primeiro somatório em (3.1) representa a contribuição do mar de Dirac de energia negativa, enquanto que o segundo somatório representa a contribuição dos estados ligados.

No caso do modelo de Krive e Rozhavskii, consideraremos apenas a contribuição dos estados ligados, desprezando o primeiro somatório em (3.1). Campbell e Liao denominam esse procedimento de aproximação clássica.

Como tratamos com apenas um estado ligado tal que $\omega_i > 0$ e supomos o campo ϕ independente do tempo, ficamos com:

$$L_{\text{ef}}^{\text{KR}} = - \int dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 \right] - n_0 \omega_0 \quad (3.2)$$

É importante observar que ω_0 é um funcional do campo $\phi(x)$ conforme pode ser visto a partir da equação de Dirac (2.5). Fazendo-se teoria de perturbação de primeira ordem em (2.5), obtemos:

$$\frac{\delta \omega}{\delta \phi(x)} = g \bar{\psi}(x) \psi(x) \quad (3.3)$$

Partindo-se de (3.2) e considerando (3.3) é possível reobter a equação clássica de movimento para o campo $\phi(x)$.

3.3 Os dados de espalhamento

Como vimos anteriormente na seção 2.5, a equação de Dirac, em presença de um campo $\phi(x)$, pode ser transformada num par de equações de Schrödinger da forma:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + g^2 \phi^2 - g \frac{d\phi}{dx} \right] \psi_- = \omega^2 \psi_- \quad (3.4a)$$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + g^2 \phi^2 + g \frac{d\phi}{dx} \right] \psi_+ = \omega^2 \psi_+ \quad (3.4b)$$

Definindo o potencial V_{\pm} através de

$$V_{\pm} \equiv \pm g \frac{d\phi}{dx} + g^2 (\phi^2 - \phi_0^2) \quad (3.5)$$

as equações (3.4) podem ser reescritas como:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + V_{\pm} \right] \psi_{\pm} = k^2 \psi_{\pm} \quad (3.6)$$

$$\text{onde } k^2 \equiv \omega^2 - g^2 \phi_0^2 \quad (3.7)$$

Note que, se:

$$\phi(x) \rightarrow \pm \phi_0 \quad \text{para } x \rightarrow \pm \infty$$

$$\text{teremos } V_{\pm} \rightarrow 0 \quad \text{para } x \rightarrow \pm \infty$$

Para cada equação de Schrödinger acima, podemos associar dados de espalhamento, os quais têm uma relação biunívoca com V . O conjunto de dados necessários para estabelecer essa relação é formado por:

$$\{S_{\pm}\} \equiv \{r^{\pm}(k), \{\omega_n^{\pm}\}, \{c_n^{\pm}\}\}$$

onde $r^{\pm}(k)$ é o coeficiente de reflexão do potencial da equação de Schrödinger, $\{\omega_n^{\pm}\}$ são as energias dos estados ligados desse potencial e $\{c_n^{\pm}\}$ são as constantes de normalização desses estados.

O conhecimento de S_{\pm} é equivalente ao conhecimento de V_{\pm} , o que nos leva ao conhecimento de $\phi(x)$. A reconstrução de $\phi(x)$ a partir dos dados de espalhamento é feita através da equação de Gelfand-Levitan^[26]-Marchenko^[27].

É possível mostrar^[22] que o coeficiente de transmissão $t(k)$ associado à equação (3.6) admite uma representação integral, em termos dos dados de espalhamento, na forma:

$$\ln[t(k)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\ln(1 - |r(q)|^2)}{q - r} + \ln\left[\frac{k + iK_0}{k - iK_0}\right] \quad (3.8)$$

onde

$$K_0^2 = g^2 \phi^2 - \omega_0^2 \quad (3.9)$$

$\omega_0 \rightarrow$ energia do estado ligado

Devemos considerar o valor principal na integral acima.

O coeficiente de transmissão também admite uma expansão assintótica para grandes valores de "k" do tipo:

$$\ln[t(k)] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n}{k^n} \quad (3.10)$$

Os C_n podem ser obtidos a partir de (3.8) dando, para j inteiro:

$$C_{2j} = 0 \quad (3.11)$$

$$C_{2j+1} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dq q^2 \ln(1 - |r(q)|^2) - \frac{2}{2j+1} (iK)^{2j+1} \quad (3.12)$$

Podemos obter os C_n por outro caminho. Definimos:

$$\mathcal{L}(x, k) = \frac{d}{dx} \ln f(x, k) - ik \quad (3.13)$$

onde $f(x, k)$ é uma solução da equação de Schrödinger (3.6) que satisfaz:

$$f(x, k) = e^{ikx} + O(1) \quad \text{quando } x \rightarrow \infty \quad (3.14)$$

A função $\mathcal{L}(x, k)$ definida em (3.13) satisfaz a equação de Ricatti:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} + \mathcal{L}^2 - V + 2ik\mathcal{L} = 0 \quad (3.15)$$

Por outro lado, o comportamento assintótico de $f(x, k)$

implica em:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}(x, k) dx = \ln[t(k)] \quad (3.16)$$

Expandimos agora $\mathcal{L}(x, k)$ em potências de k :

$$\mathcal{L}(x, k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathcal{L}_n(x)}{(2ik)^n} \quad (3.17)$$

Através de (3.15) e (3.17) chegamos às seguintes relações:

$$\mathcal{L}_1(x) = V(x) \quad (3.18a)$$

$$\mathcal{L}_n(x) = -\frac{d\mathcal{L}_{n-1}}{dx} - \sum_{m=1}^{n-1} \mathcal{L}_{n-m-1}(x) \mathcal{L}_m(x); \quad n > 1 \quad (3.18b)$$

no somatório acima devemos considerar $\mathcal{L}(x) = 0$.

Os \mathcal{L}_n , com n sendo par, são derivadas totais. Das equações (3.10), (3.16) e (3.17), obtemos:

$$C_{2j+1} = -\left(\frac{1}{2i}\right)^{2j+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}_{2j+1}(x) dx \quad (3.19)$$

Comparando (3.18) com (3.12), resulta:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \mathcal{L}_{2j+1}(x) = (-1)^{j+1} \frac{2^{2j}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq q^{2j} \ln(1-|r(q)|^2) +$$

$$- \frac{2^{2(j+1)}}{2j+1} K_0^{2j+1}$$

Fica claro, observando as equações (3.18 a e b) que os

$\mathcal{L}_n(x)$ são completamente definidos por $V(x)$. Entretanto $V(x)$ é definido por $\phi(x)$. Dessa forma, existe um número infinito de densidades $\mathcal{L}_n(x)$ definidas a partir de $\phi(x)$. A equação (3.20), nos mostra que as integrais dos $\mathcal{L}_n(x)$ podem ser completamente escritas em termos dos dados de espalhamento.

Para diferenciar as $\mathcal{L}_n(x)$ geradas por V_+ e V_- usamos a notação $\mathcal{L}_n^+(x)$ e $\mathcal{L}_n^-(x)$.

De (3.18b) segue que:

$$\mathcal{L}_3^+(x) = \frac{d^2 V_+}{dx^2} - V_+^2 ; \quad \mathcal{L}_3^-(x) = \frac{d^2 V_-}{dx^2} - V_-^2 \quad (3.21)$$

A integral sobre a soma de $\mathcal{L}_3^+(x)$ com $\mathcal{L}_3^-(x)$ nos fornece, lembrando que derivadas totais podem ser ignoradas devido ao comportamento de V_{\pm} , em $x \rightarrow \pm \infty$:

$$\int dx [\mathcal{L}_3^+(x) + \mathcal{L}_3^-(x)] = -2 \int dx [g^2 \left(\frac{d\phi}{dx}\right)^2 + g^4 (\phi^2 - \phi_0^2)^2] \quad (3.22)$$

Utilizaremos essa relação mais adiante.

Por outro lado, se tomarmos $\mathcal{L}(x,k)$ como sendo:

$$\mathcal{L}^+(x,k) = g(\phi - \phi_0) ; \quad k = -ig\phi_0 ; \quad V = V_+ \quad (3.23a)$$

$$\mathcal{L}^-(x,k) = -g(\phi - \phi_0) ; \quad k = +ig\phi_0 ; \quad V = V_- \quad (3.23b)$$

vemos que $\mathcal{L}^{\pm}(x,k)$ são soluções da equação de Ricatti (3.15).

De (3.16) segue que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx [\mathcal{L}^+(x, -ig\phi_0) - \mathcal{L}^-(x, +ig\phi_0)] = \ln \left[\frac{t^+(-ig\phi_0)}{t^-(+ig\phi_0)} \right] \quad (3.24)$$

Comparando (3.23) e (3.24), obtemos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx [\phi - \phi_0] = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{t^+(-ig\phi_0)}{t^- (+ig\phi_0)} \right] \quad (3.25)$$

Podemos agora escrever (3.22) e (3.25) em termos de dados de espalhamento, invocando respectivamente as equações (3.20) e (3.8). Obtemos:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx g^2 \left[\left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + g^2 (\phi^2 - \phi_0^2)^2 \right] &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq q^2 \ln(1 + |r^+(q)|^2) \\ &- \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq q^2 \ln(1 - |r^-(q)|^2) + \frac{16}{3} K_0^3 \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx [\phi - \phi_0] &= \frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\ln(1 - |r^+(q)|^2)}{q + ig\phi_0} + \\ &- \frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\ln(1 - |r^-(q)|^2)}{q - ig\phi_0} + \ln \left[\frac{g\phi_0 - K_0}{g\phi_0 + K_0} \right] \end{aligned} \quad (3.27)$$

É importante observar, nesse momento, que as densidades $\mathcal{L}_n(x)$ podem fazer o papel de densidades de Lagrangeano. Podem, portanto, gerar diferentes modelos teóricos. Tais modelos podem ser reescritos totalmente em termos dos dados de espalhamento.

Consideremos o modelo de Krive e Rozhavskii estático. Seu Lagrangeano efetivo é, como em (3.2),

$$L_{\text{ef}} = - \int dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 \right] - n_0 \omega_0 \quad (3.28)$$

Comparemos agora, o Lagrangeano acima com a equação (3.26). Notamos imediatamente que o modelo de Krive e Rozhavskii

pode ser escrito totalmente em termos de dados de espalhamento se impusermos a condição:

$$\lambda = 2g^2 \tag{3.29}$$

Essa condição é a mesma encontrada no capítulo II. Aqui ela aparece num contexto diferente. É ela que permite passarmos das variáveis de campo para os dados de espalhamento. Essa forma de obter a condição (3.29) é análoga à forma de Campbell e Liao^[19].

O nosso modelo efetivo, obtido no capítulo II, tem como lagrangeano:

$$L = \int dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + \frac{g^2}{2} (\phi^2 - \tilde{\phi}_0^2)^2 + j\phi \right] \tag{3.30}$$

De (3.26) e (3.27) vemos que também o nosso modelo pode ser expresso totalmente em termos de dados de espalhamento.

A condição do extremo (ponto de fase estacionária) se obtém no método do espalhamento inverso, variando a ação em relação aos dados de espalhamento. A condição para a obtenção dos extremos é:

$$\frac{\delta S_{ef}}{\delta r^+(k)} = \frac{\delta S_{ef}}{\delta r^-(k)} = 0 \tag{3.31}$$

$$\frac{\delta S_{ef}}{\delta K_0} = 0 \tag{3.32}$$

A condição (3.32) fornece uma relação para a energia dos sistemas.

A condição (3.31) aplicada aos modelos descritos acima implica em:

$$\boxed{r^+(k) = r^-(k) = 0} \quad (3.33)$$

O mesmo desenvolvimento feito até aqui para o nosso modelo e o de Krive e Rozhavskii pode ser aplicado ao modelo de Su, Schriffier e Heeger. O cálculo é um pouco mais complexo porque a necessidade de levar em conta o mar de Dirac, que gera uma contribuição divergente, implica na introdução de contratermos na teoria. O resultado final para o coeficiente de reflexão é o mesmo que nos modelos apresentados aqui, ou seja $r^+(k) = r^-(k) = 0$. O mesmo acontece se tomarmos outros modelos gerados pelos $\mathcal{L}_n(x)$ de (3.18).

É possível agora fazer-se a reconstrução do campo $\phi(x)$ a partir dos valores dos dados de espalhamento, obtidos através das equações (3.31) e (3.32). Tal procedimento consiste na solução da equação de Gelfand-Levitan^[26]-Marchenko^[27]. Campbell e Liao apresentam em seu trabalho, a maneira de obter as soluções^[19]. O importante a salientar é que as soluções obtidas, na forma de sólitons e polarons, dependem apenas do fato de ser $r^+(k) = r^-(k) = 0$

Fica entendido, então, porque todos os modelos analisados por nós, possuem soluções de sólitons e polarons, pois todos levam à condição (3.33) ($r^+(k) = r^-(k) = 0$).

Além disso, analisando a maneira pela qual o coeficiente de reflexão aparece nas integrais dos $\mathcal{L}_n(x)$, equação (3.20), podemos concluir que todos os modelos construídos a partir des-

ses $\mathcal{L}_n(x)$ admitem a condição (3.33) como extremo da ação. Consequentemente, temos uma família infinita de teorias que admitem soluções de sólitons e polarons. Em geral, os membros dessa família podem levar a equação de movimento com derivadas de ordem superior à segunda. Os modelos mais simples dessa família são o de Krive e Rozhavskii e o nosso, pois levam a equações de movimento de segunda ordem e não apresentam divergências, não necessitando portanto, sofrer o processo de renormalização.

CONCLUSÃO

Certos modelos em teoria de campos têm-se mostrado valiosos na descrição da física de polímeros. Embora tendo a desvantagem de não levar em conta a natureza discreta dos polímeros, tais modelos têm a vantagem de fornecer soluções analíticas. Essas soluções levam a bons resultados quando as dimensões envolvidas no problema são muito maiores que o parâmetro de rede.

Concentramo-nos no caso específico do transpoliacetileno, por ser o mais simples polímero conjugado linear e por possuir um estado fundamental degenerado.

O estado dimerizado foi analisado, levando a um espectro de férmions livres de massa $g\phi_0$.

Os estados localizados no meio do gap, observados experimentalmente, foram obtidos analiticamente. Tais estados, que aparecem quando surgem soluções de sólitons e polarons, desempenham um papel fundamental na condutividade elétrica do poliacetileno para baixos níveis de dopagem. Para dopagem alta, a importância dos defeitos estruturais (sólitons e polarons) e dos estados localizados que os acompanham é controversa. É possível que o próprio estado dimerizado não seja o estado fundamental quando a dopagem é alta.

Nosso método de obtenção das soluções das equações acopladas fornecidas pelo modelo de Krive e Rozhavskii difere dos métodos usuais. Campbell e Liao obtiveram uma solução equiva-

lente à nossa, estudando um problema completamente diferente: a estrutura nuclear no modelo σ . Eles utilizaram para a obtenção das soluções, o método do espalhamento inverso.

No nosso caso, o problema das equações acopladas foi reduzido a equações de Schrödinger exatamente solúveis e resolvidas separadamente, através do nosso ansatz.

Obtivemos, nesse processo, outra interpretação para o surgimento da condição de supersimetria ($\lambda = 2g^2$). É ela que garante o desacoplamento espacial das componentes do espinor associado aos elétrons, como referido na seção 2.5. Tal observação não decorre se usarmos o método de espalhamento inverso, onde a condição ($\lambda = 2g^2$) é necessária para que o sistema possa ser reescrito em termos de dados de espalhamento.

O método também fornece uma maneira de obter um potencial efetivo para os bosons. Na passagem do modelo de Su, Schrieffer e Heeger (limite contínuo) para o modelo de Krive e Rozhavskii, a contribuição dos estados da banda de valência traduz-se numa interação quártica entre os bosons. Restam, acoplados aos bosons, os elétrons dos estados ligados. Nosso método de solução permite ver que uma nova redução de problema pode ser feita. A interação com os elétrons dos estados ligados é equivalente, para os bosons, à introdução de um termo $j\phi$ no potencial ($j = 0$ para o soliton e $j = \text{constante}$ para o polaron). Dessa forma, a nível clássico, toda a contribuição fermiônica é levada em conta ao considerarmos em potencial efetivo bosônico da forma :

$$V(\phi) = \frac{g^2}{2} (\phi^2 - \phi_0^2) + j\phi$$

O sistema inicial, com equações acopladas, passa a ser

visto como um sistema de campo escalar massivo com autointeração tipo ϕ^4 e uma corrente externa constante.

Concluimos também que, dentre os infinitos modelos possíveis que admitem soluções de sólitons e polarons, o modelo de Krive e Rozhavskii e o nosso, são os mais simples porque apresentam equações de movimento de segunda ordem e não necessitam, para a obtenção das soluções desejadas, sofrer o processo de renormalização.

Como possíveis extensões do presente trabalho, apresentamos:

- o estudo da possibilidade de que a condição de supersimetria $\lambda = 2g^2$ forneça relações entre as funções de correlação bosônicas e fermiônicas;
- a aplicação do nosso método de solução ao estudo, mais complexo, do cispoliacetileno, o qual possui um estado fundamental não degenerado;
- o estudo da interação entre sólitons, com a possível presença de um termo Coulombiano nas equações de movimento;
- o ajuste dos parâmetros de nossas soluções com os dados experimentais disponíveis.

APÊNDICE

Desenvolvemos, a seguir, um procedimento para a obtenção das soluções da equação bosônica apresentada na seção 2.5.

A equação é:

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + \lambda\phi(\phi^2 - \phi_0^2) = -j \quad (\text{A.1})$$

Multiplicando (A.1) por $\frac{d\phi}{dx} \equiv \dot{\phi}$ e rearranjando os termos, obtemos:

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2} \dot{\phi}^2 - \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 - j\phi \right] = 0 \quad (\text{A.2})$$

Segue de (A.2) que:

$$\frac{1}{2} \dot{\phi}^2 - \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2)^2 - j\phi = \text{constante} \equiv E \quad (\text{A.3})$$

Da mesma forma que na seção 2.4 essa equação pode ser vista como a equação de conservação da energia para uma partícula clássica, de massa unitária, movendo-se num potencial:

$$V(r) = -\frac{\lambda}{4} (r^2 - r_0^2)^2 - jr \quad (\text{A.4})$$

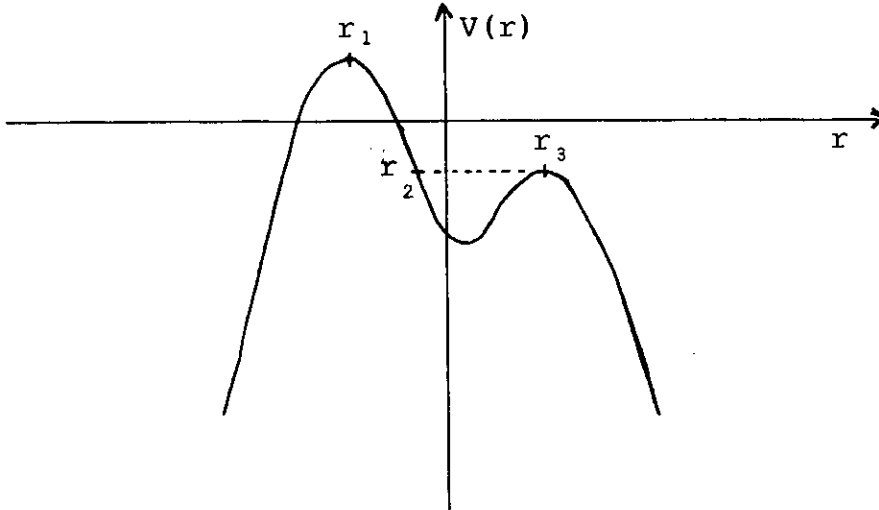


Fig. A.1: Forma do potencial para a partícula clássica, de acordo com a eq. (A.4)

Para obtermos uma solução finita, o movimento deve realizar-se entre os pontos r_2 e r_3 .

Para o campo ϕ , o equivalente é considerarmos soluções que variam entre ϕ_2 e ϕ_3 no potencial bosônico da forma:

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \phi_0^2) + j\phi \tag{A.5}$$

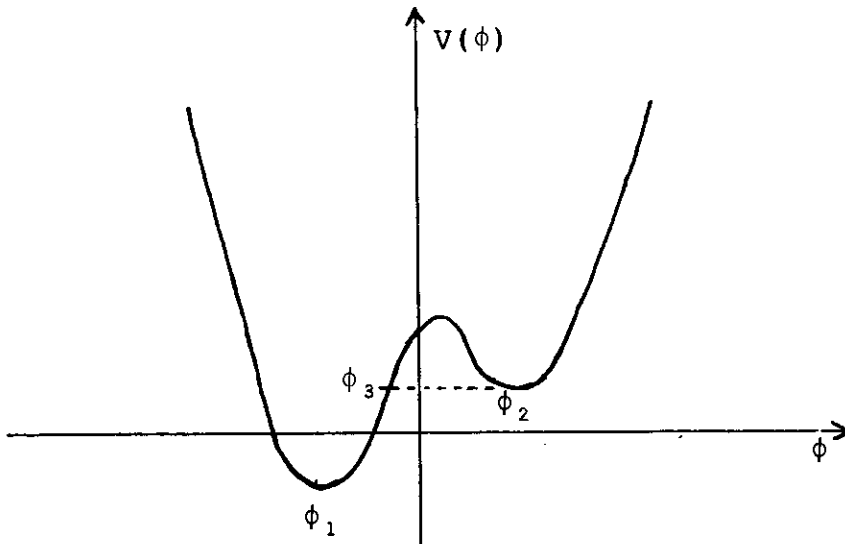


Fig. A.2: Potencial bosônico proveniente da hipótese $\bar{\psi}\psi = j/g$, definido pela eq. (A.5)

A solução que nos interessa é aquela em que o campo ϕ está em ϕ_2 , em $s = \pm \infty$, dando origem ao polaron.

Temos como condições de contorno:

$$\phi = \phi_2 \quad \text{em} \quad x = \pm \infty \quad (\text{A.6a})$$

$$\dot{\phi} = 0 \quad \text{em} \quad x = \pm \infty \quad (\text{A.6b})$$

Fazendo $\dot{\phi} = 0$ e $\phi = \phi_2$ em A.3 resulta:

$$E = -\frac{\lambda}{4} (\phi_2^2 - \phi_0^2)^2 - j\phi_2 \quad (\text{A.7})$$

Levando esse resultado em (A.3), a equação diferencial torna-se:

$$\dot{\phi}^2 = \frac{\lambda}{2} (\phi^4 - \phi_2^4) - \lambda\phi_0^2 (\phi^2 - \phi_2^2) + 2j(\phi - \phi_2) \quad (\text{A.8})$$

Lembrando que ϕ_2 é mínimo local de $V(\phi)$, ou seja,

$V'(\phi_2) = 0$, obtemos

$$\lambda\phi_2 (\phi_2^2 - \phi_0^2) + j = 0 \quad (\text{A.9})$$

Utilizando (A.9) podemos reescrever (A.8) como:

$$\dot{\phi}^2 = (\phi - \phi_2)^2 \left(\frac{\lambda}{2} \phi^2 + \lambda\phi_2\phi + \frac{3}{2}\lambda\phi_2^2 - \lambda\phi_0^2 \right) \quad (\text{A.10})$$

Isolando $\dot{\phi}$, definindo a mudança de variável:

$$u = \phi - \phi_2 \quad (\text{A.11})$$

e integrando, obtemos:

$$\int_{\alpha}^u \frac{du}{|u| \sqrt{\frac{\lambda}{2} u^2 + 2\lambda\phi_2 u + 3\lambda\phi_2^2 - \lambda\phi_0^2}} = \int_{\beta}^x dx \quad (\text{A.12})$$

Na integral acima, podemos fazer $|u| = -u$ pois nos interessa somente a solução com $\phi \leq \phi_2$. Note que o sinal de j na equação (A.1) determina a forma do polaron. Quando $j > 0$ temos $\phi \leq \phi_2$ (ϕ_2 ~) e quando $j < 0$ temos $\phi \geq \phi_1$ (~ ϕ_1).

O resultado da integral é [21]:

$$\left[\frac{1}{\sqrt{p}} \ln \left| \frac{2p + qu + \sqrt{pR(u)}}{u} \right| \right]_{\alpha}^{\phi - \phi_2} = x - \beta \quad (\text{A.13})$$

onde

$$R(u) \equiv p + qu + ru^2$$

$$p \equiv 3\lambda\phi_2^2 - \lambda\phi_0^2$$

$$q \equiv 2\lambda\phi_2$$

$$r \equiv \frac{\lambda}{2}$$

Definimos

$$\gamma \equiv \frac{2p + q\alpha + 2\sqrt{p} \sqrt{R(\alpha)}}{\alpha} \quad (\text{A.14})$$

Voltando para a variável ϕ e eliminando o logarítmo e o módulo, resulta:

$$\frac{2p + q(\phi - \phi_2) + 2\sqrt{p} \sqrt{R(\phi - \phi_2)}}{\gamma(\phi_2 - \phi)} = e^{\sqrt{p}(x - \beta)} \quad (\text{A.15})$$

Como estamos interessados na solução $\phi = \phi(x)$, devemos isolar ϕ , partindo da expressão acima.

Definimos:

$$v \equiv \sqrt{p}(x - \beta) \quad (\text{A.16})$$

Reescrevemos (A.15) como:

$$2\sqrt{p} \sqrt{R(\phi - \phi_2)} = \gamma(\phi_2 - \phi)e^v - 2p - q(\phi - \phi_2) \quad (\text{A.17})$$

Tomando-se o quadrado de (A.17), obteremos um polinômio de 2ª ordem em ϕ (lembrar que $R(\phi - \phi_2)$ é um polinômio de 2ª ordem em ϕ).

Substituindo os valores das constantes "p", "q" e "r" e, fazendo as simplificações possíveis, obtemos:

$$\begin{aligned} & [\gamma^2 e^{2v} + 4\lambda\phi_2 e^v + 2\lambda^2(\phi_0^2 - \phi_2^2)]\phi^2 + \\ & + [-2\gamma^2\phi_2 e^{2v} + 4\lambda(\phi_0^2 - \phi_2^2)\gamma e^v + 4\lambda^2\phi_2(\phi_0^2 - \phi_2^2)]\lambda\phi + \\ & + [\phi_2^2\gamma^2 e^{2v} + 4\lambda\phi_2(\phi_0^2 - 2\phi_2^2)\gamma e^v + 2\lambda^2\phi_2^2(\phi_0^2 - \phi_2^2)] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

As raízes do polinômio acima são dadas por:

$$\phi_{\pm} = \frac{2\gamma^2\phi_2 e^{2\nu} + 4\lambda(\phi_0^2 - \phi_2^2)\gamma e^{\nu} + 4\lambda^2\phi_2(\phi_0^2 - \phi_2^2) \pm (12\lambda\phi_2^2 - 4\lambda\phi_0^2)\gamma e^{\nu}}{2\gamma^2 e^{2\nu} + 8\lambda\phi_2\gamma e^{\nu} + 4\lambda^2(\phi_0^2 - \phi_2^2)} \quad (\text{A.19})$$

A primeira raiz, ϕ_+ , dá como resultado, um campo constante:

$$\phi_+ = \phi_2$$

Esta solução é análoga à solução dimerizada, pois $\phi_2 \rightarrow \phi_0$ quando $j \rightarrow 0$. Tal solução aparece aqui porque $\phi = \phi_2$ satisfaz às condições de contorno impostas em (A.6).

A segunda raiz, ϕ_- , é a solução que nos interessa e que chamaremos, simplesmente, de ϕ . Sua forma simplificada é:

$$\phi = \phi_2 - \frac{8\lambda(3\phi_2^2 - \phi_0^2)\gamma e^{\nu}}{2\gamma^2 e^{2\nu} + 8\lambda\phi_2 e^{\nu}\gamma + 4\lambda^2(\phi_0^2 - \phi_2^2)} \quad (\text{A.20})$$

Devemos definir a constante γ . A escolhemos de tal forma que quando $\nu = 0$ tenhamos $\phi = \phi_3$ (ver fig. A.2).

Dessa forma ϕ sairá de ϕ_2 em $\nu = -\infty$, atingirá ϕ_3 em $\nu = 0$ e retornará a ϕ_2 em $\nu = +\infty$.

Como ϕ_3 é o "ponto de retorno" da solução, vemos que ϕ_3 deve ser solução da equação (A.10) quando fazemos $\dot{\phi} = 0$.

Encontramos:

$$\phi_3 = -\phi_2 + \sqrt{2(\phi_0^2 - \phi_2^2)} \quad (\text{A.21})$$

Podemos agora encontrar γ fazendo $\phi = \phi_3$ e $\nu = 0$ em

(A.17).

Resulta:

$$\gamma = \sqrt{2\lambda^2(\phi_0^2 - \phi_2^2)} \quad (\text{A.22})$$

Com o valor de γ obtido acima, podemos reescrever o campo em (A.20), como:

$$\phi = \phi_2 - \frac{8\lambda(3\phi_2^2 - \phi_0^2)\gamma e^{\nu}}{2\gamma^2 e^{2\nu} + 8\lambda\phi_2\gamma e^{\nu} + 2\gamma^2} \quad (\text{A.23})$$

Obtivemos um campo ϕ que não aparenta, à primeira vista, ter a forma requerida para um polaron. O polaron deveria parecer-se com um par sóliton-antisóliton. Entretanto, existe outra forma bastante diferente, porém equivalente, de escrevermos a função obtida acima. Essa forma é, como pode ser verificado diretamente:

$$\phi = \phi_2 - \sqrt{\frac{3}{2}\phi_2^2 - \frac{\lambda\phi_0^2}{2}} \left[\text{th}\left(\frac{\nu}{2} + x_0\right) - \text{th}\left(\frac{\nu}{2} - x_0\right) \right] \quad (\text{A.24})$$

onde:

$$x_0 \equiv \frac{1}{2} \text{arcosh} \left[\frac{\sqrt{2}\phi_2}{\sqrt{\phi_0^2 - \phi_2^2}} \right]$$

$$\nu \equiv \sqrt{3\lambda\phi_2^2 - \lambda\phi_0^2} (x - \beta)$$

A constante β permanece arbitrária, definindo a posição do centro do polaron.

BIBLIOGRAFIA

- [1] PEIERLS, R.E. Quantum Theory of Solids (Clarendon, Oxford), 1955.
- [2] STREITWOLF, H.W., Phys. Stat. Sol. (b) 127,11 (1985).
- [3] FINCHER, C.R.; C.E. Chen; A.J. Heeger; A.G. Mac Diarmid e J.B. Hastings. Phys. Rev. Lett. 48, 100, 1982.
- [4] YANNONI, C.S. & T.C. Clarke. Phys. Rev. Lett. 51, 1191, 1983.
- [5] HEEGER, A.J.; S.Kivelson; J.R. Schrieffer & W.P. Su. Rev. Mod. Phys. 60, 781, 1988.
- [6] KANER, R.B. & A.G. MacDiarmid. Scientific American, fev. 1988.
- [7] FELDBLUN, A.; J.H. Kaufman; S.Etread, A.J. Heeger; T.C. Chung & A.G. MacDiarmid. Phys. Rev. B, 26, 815, 1982.
- [8] MOON, Y.B.; M. Winokur, A.J. Heeger, J. Baker & D.C. Bott. Macromolecules, 20, 2457, 1987.
- [9] JACKIW, R. & C. Rebbi. Phys. Rev. D 13, 3398, 1976.
- [10] ARAGÃO DE CARVALHO, C.A. "Uma aplicação da teoria de campos na física da matéria condensada. 1ª Escola de Pós-Graduação em Física do Nordeste, UBPb, 1987.
- [11] SU, W.P.; J.R. Schrieffer & A. Heeger. Phys. Rev. Lett. 42, 1688 (1979).
- [12] VOLCHAN, S.B.. "Número fermiônico, polímeros e determinantes" (Dissertação de mestrado), PUC-RJ, 1988.
- [13] GROSS, D.J. & A. Neveu. Phys. Rev. D 10, 3235, 1974.
- [14] DASHEN, R.F.; B. Hasslacher & A. Neveu. Phys. Rev. D 12, 2443, 1975.

- [13] CAMPBELL, D.K. & A.R. Bishop. Nucl. Phys. B 200, 297, 1982.
- [14] KRIVE, I.V. & A.S. Rozhavskii. JETP Lett. 31, 11, 611, 1980.
- [15] BOGOLIUBOV, N.N.; D.V. Shirkov. "Introduction to the theory of quantized fields." John Wiley & Sons, 1980.
- LANDAU L.; E. Lifschitz, L. Pitayevski. "Théorie Quantique Relativiste". Ed. Mir, 1972.
- [16] ATIYAH, M.F.; V.K. Patodi; M. Singer. Proc. Cambridge Philos. Soc. 77, 43, 1975.
- [17] WESS, J.; B. Zumino. Phys. Lett. 498, 52, 1974.
- [18] ARAGÃO DE CARVALHO, C.A. "From polymers to supersymmetry" PUC-RJ, Nota Científica 01/88, 1988.
- [19] CAMPBELL, D.K. & Y.T. Liao. Phys. Rev. D 14, 2093, 1976.
- [20] MORSE, P.M. & H. Feshbach. "Methods of Theoretical Physics" McGraw Hill Inc., N. York, 1953.
- [21] GRADSHTEYN, I.S.; I.M. RYZHIK. "Table of integrals, series and Products". 2nd. ed., Academic Press, Inc; New York, 1980.
- [22] DASHEN R.F.; B. Hasslacher and A. Neveu. Phys. Rev. D 12, 2443, 1975.
- [23] ZAKHAROV V.E. and L.D. Faddeev. Funct. Anal. and its Applic. 5, 280, 1972.
- [24] FROLOV I.S.; Sov. Math. Dokl., 13, 1468, 1972.
- [25] ARAGÃO DE CARVALHO, C.A., "Solitons and Polarons in Continuum Polymer Models". PUC/RJ, Nota Científica, 42, 1988.
- [26] GELFAND I.M. and B.M. Levitan. Am. Math. Soc. Trans., 1, 253, 1953.
- [27] MARCHENKO, V.A.; Dokl. Akad. Nauk. 55R, 72, 457, 1950; 104, 695, 1955.

"SOLITONS E POLARONS EM POLÍMEROS"

GERSON BAZO COSTAMILAN

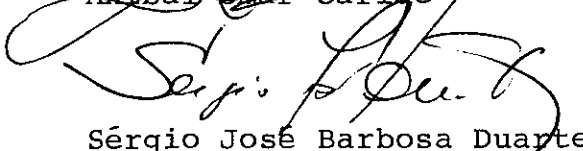
Tese de Mestrado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho
Presidente



Anibal Omar Caride



Sérgio José Barbosa Duarte