

Métodos Matemáticos Para o Transporte de Elétrons em Dispositivos Moleculares.

José Fernando P. Leal

Universidade Federal do Pará

66075-110, Belém, PA

E-mail: jfpleal@yahoo.com.br

Jordan Del Nero

Departamento de Física, UFPA

66075-110, Belém, PA

E-mail: jordan@ufpa.br

RESUMO

A capacidade de processamento dos microprocessadores está relacionada à densidade superficial de transistores e a quantidade de energia que dissipa na forma de calor. Essa densidade se relaciona diretamente com a energia dissipada, sendo assim, um acréscimo de transistores, acarretará num aumento da energia dissipada. Uma alternativa viável para contornar esse problema é de se montar estruturas lógicas baseadas na eletrônica molecular, capazes de serem armazenadas em escala nanométrica, se comparadas aos dispositivos semicondutores (transistores) à base de silício. Para caracterizar sistemas promissores (que possam vir a ser utilizados como dispositivos em escala nanométrica) é necessário aprofundar o estudo do transporte de elétrons sob o efeito de um campo elétrico externo. O sistema investigado é composto por anéis aromáticos conectados por ponte tipo azo e suas extremidades ligadas a eletrodos. A grande vantagem de seu uso está no conjunto de orbitais moleculares π , que estão estendidos sobre todo o sistema, apresentado densidade eletrônica nula no plano nuclear. A metodologia esta baseada em mecânica quântica, mais especificamente em cálculos de estrutura eletrônica utilizando aproximação Hartree-Fock com parametrização semi-empírica (PM3), para otimização das geometrias da molécula. A proposta é resolver uma equação de autovalor (Equação de Schrödinger) através de aproximações para sistemas multieletrônicos (muitos elétrons). Em meio ao desenvolvimento, a aplicação do princípio variacional é necessária à determinação do valor esperado da energia e

culminando na equação de Roothaan-Hall na forma matricial. Esta equação apresenta características importantes que permitem aplicar técnicas numéricas eficientes para determinar como, por exemplo, as energias dos orbitais moleculares. Através desse método puderam-se predizer alguns resultados importantes que se refere às características da molécula em dispositivos eletrônicos ($I \times V$ e $C \times V$). Nossos resultados mostram que sob efeito de um campo elétrico externo facilita o transporte de elétrons em uma molécula, já que os orbitais moleculares π , parcialmente ocupados ou desocupados, formam os ‘canais de condução’.

Referências

- [1] A. Aviram, and M.A. Ratner, Chem. Phys. Lett. 29, 277 (1974).
- [2] W.A. Schoonveld, J. Wildeman, D. Fichou, P.A. Bobbert, B.J. van Wees, and T.M. Klapwijk, Nature, 404, 977 (2000).
- [3] C. A. B. Silva Jr., “Investigação das Características $I \times V$ e $C \times V$ de NCPS Puro, com Nitrogênio Substitucional Carregado (-1 e +1) Com Grupos Doadores (No2)–Aceitador (NH2) Através de Métodos Derivados de Hartree-Fock”, Dissertação de Mestrado, PPGF – UFPA, 2006.
- [4] L. Wang, M.-H. Yoon, G. Lu, Y. Yang, A. Fchetti, and T.J. Marks, Corrigendum, Nature Materials, 6, 317 (2007).