

Solitones fuera del equilibrio en poliacetileno

- Leandro Manuel Arancibia,^{1,2} Alejandro Martín Lobos^{1,2}

¹Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de Cuyo

²Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Nacional de Cuyo- CONICET

Los polímeros conductores han acaparado la atención de la comunidad físico-química desde su descubrimiento en la década del 70 hasta la fecha [1]. Importantes contribuciones teóricas (excitaciones topológicas no lineales, tales como solitones, polarones, y bipolarones), experimentales (síntesis de polímeros en soluciones y superficies) e industriales (celdas foto-voltaicas, LED's orgánicos, etc.) han contribuido a generar una verdadera revolución en los campos de la física y la química. En este trabajo, exploramos el modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) [2] sometido a la acción de un campo eléctrico externo, y estudiamos la estabilidad de solitones fuera de equilibrio en una molécula de poliacetileno. Para ello, resolvemos autoconsistentemente las ecuaciones dinámicas del sistema acoplado de electrones e iones, y obtenemos diferentes observables (tales como la densidad electrónica y el perfil de deformaciones a lo largo de la cadena), como función de los parámetros microscópicos del modelo.

Referencias:

- [1] Heeger, A. J. *Nobel lecture: Semiconducting and metallic polymers: The fourth generation of polymeric materials*, Rev. Mod. Phys. **73**, 681 (2001).
- [2] Heeger, A. J., Kivelson, S., Schrieffer, J. R., and Su, W. P. *Solitons in conducting polymers*, Rev. Mod. Phys. **60**, 781 (1988).