

## 8 Conclusões e Perspectivas Futuras

Neste trabalho se estudou as propriedades eletrônicas de transporte de carga de cadeias de polianilina considerando que a desordem estrutural na formação destes sistemas é essencial na transição metal – isolante da polianilina. Utilizando um modelo de Hückel simples, que descreve um Hamiltoniano do tipo *tight-binding*, e com ajuda de uma ferramenta poderosa como são as funções de Green, que permite obter grandezas como a densidade de estados e a condutância, foi possível estudar de uma maneira relativamente confiável, as propriedades de transporte das polianilinas: o caráter isolante da leucoesmeraldina, o caráter semiconductor da esmeraldina bem como o caráter condutor da esmeraldina submetida a dopagem protônica.

Foram estudadas as propriedades de transporte de carga dos sistemas formados com as configurações A, B, C e D mostradas na Figura 19 com a metodologia das funções de Green para o cálculo da curva de densidades local de estados LDOS e usando as funções de Green de não-equilíbrio no formalismo de Keldysh para o estudo da condutância da PAN. Vemos, conforme observado nas figuras apresentadas para as diferentes conformações de polímeros PAN, que o modelo considerando a formação da rede de bipolarons é capaz de descrever o aumento dramático da condutividade elétrica (do tipo p) observado no material sob oxidação e protonação. Se os efeitos de desordem são convenientemente levados em consideração, deslocando o nível de Fermi para dentro da banda de valência a uma região de estados estendidos onde a condutância é finita.

Cálculos realizados onde consideramos a presença de polarons isolados ou ainda de polarons e bipolarons mostraram que na ausência destes últimos o afundamento da energia de Fermi dentro da banda de valência ocorre numa taxa muito menor. A criação desses defeitos modifica de forma significativa as propriedades eletrônicas do polímero, que podem ser observadas através de medidas de absorção óptica. Estes defeitos estão também ativamente envolvidos nas propriedades de transporte destes sistemas.

Desta forma os resultados obtidos neste trabalho servem como apoio e sustento aos resultados de trabalhos experimentais relatados no capítulo 6, verificando que a desordem na conformação destas estruturas tem um papel fundamental, assim como a introdução de defeitos tipo bipolaron, caracterizando o material como um condutor metálico. Possíveis extensões do estudo deste sistema compreendem uma análise de outras unidades para conformações da PAN, com o propósito de obter cadeias com *gap* zero e condutividade alta. Cabe salientar o estudo destas estruturas usando o modelo de Hückel estendido, que embora mais complexo possa ser considerado mais confiável. O efeito da interação inter-eletrônica poderá cumprir um papel importante nas propriedades destes sistemas. Uma análise mais detalhada dos efeitos da desordem, sobre tudo no processo de protonação mudando de forma contínua a concentração da configuração C, permitiria estudar o processo da transição metal – isolante e fazer uma comparação mais próxima com os resultados experimentais como os que aparecem na figura 17. Estas propostas poderiam ser objeto de uma extensão deste estudo, no futuro.