

184

**MODELO MULTIMODAL PARA FULERIDOS ALCALINOS K<sub>3</sub>C<sub>60</sub> e Rb<sub>3</sub>C<sub>60</sub>.** Saulo S. Schuh, Gerardo Martínez (Departamento de Física, Instituto de Física – UFRGS).

A partir do modelo utilizado por Degiorgi (Adv. Phys., vol. 47, no. 2, pp. 207-316 (1998)), simulamos a função espectral do Fulerido de Potássio (K<sub>3</sub>C<sub>60</sub>) com um modelo de 2 e 3 lorentzianas truncadas. Pela teoria de Eliashberg para acoplamento forte na teoria BCS, é possível obter a intensidade da interação elétron-fônon calculando o primeiro momento inverso da função espectral. Isso é feito integrando a função dividida pela frequência em todo o espectro. Para o modelo proposto, avaliamos a integral analiticamente através do programa MAPLE V. Além disso, utilizando uma rotina de integração numérica escrita em FORTRAN77 (por nós desenvolvida), a qual utiliza o método de Gauss-Legendre de ordem 7, calculamos a frequência média logarítmica para o nosso modelo. De posse destes valores, e atribuindo à constante de interação coulombiana efetiva um valor de ~0.15 (típico), podemos determinar a temperatura crítica da transição supercondutora e o coeficiente isotópico, o que nos permitiu comparar com valores experimentais. Sendo cada lorentziana normalizada, é possível, através da variação de seus pesos relativos, determinar quais modos são mais relevantes para produzir a fase supercondutora, cuidando para isso a relação dos pesos que produzem temperatura crítica de cerca de 19K (valor experimental para K<sub>3</sub>C<sub>60</sub>) e coeficiente isotópico próximo de 0.5. Até aqui, realizamos simulações considerando dois e três modos, variando além de seus pesos relativos, as suas posições. Nossos resultados preliminares indicam que a temperatura é maximizada (~13K) com a preponderância de um modo apenas, correspondente às vibrações intermoleculares (CNPq-PIBIC/UFRGS).