

167

**MODELO MULTIMODAL PARA O FULLERIDO SUPERCONDUTOR K(3)C(60).** *Saulo Saraiva Schuh, Gerardo Guido M. Pino*, Instituto de Física, UFRGS.

Devido ao possível uso industrial ou tecnológico dos fullerenos intercalados com metais alcalinos tem havido um interesse crescente nestes novos materiais nos últimos anos. Neste trabalho apresentamos um modelo multimodal para obter propriedades físicas do fullerido supercondutor K(3)C(60). Este modelo consiste em representar as vibrações moleculares deste composto por um conjunto de quatro ou cinco lorentzianas e que caracterizam, em ordem crescente na frequência, os modos de vibração libracionais, intermoleculares, ópticos e intramoleculares, respectivamente. O método de obtenção dos parâmetros físicos consiste em resolver a fórmula de McMillan, da teoria BCS de acoplamento forte, usando técnicas numéricas de ajuste de parâmetros com dados experimentais obtidos independentemente por outros grupos de pesquisa. O objetivo desta pesquisa consiste em determinar o grau de influência dos diferentes modos normais de vibrações moleculares na temperatura de transição da fase supercondutora. Estimativas anteriores usando apenas dois modos de vibração da rede (I. I. Mazin et al., Phys. Rev. B 47 (1993) 538) não foram conclusivas a respeito dessa questão e por isso nos propomos a realizar este trabalho. Usando nosso modelo multimodal mostramos que os 174 modos normais de vibração obtidos pela técnica de espalhamento inelástico de nêutrons podem ser muito bem simulados por um número bastante reduzido de lorentzianas. As constantes de acoplamento elétron-fonon que obtemos não diferem muito de outros procedimentos mais refinados. O objetivo final desta pesquisa, num contexto mais amplo, consiste em determinar a influência de diversos fatores, tais como a correlação eletrônica e a desordem orientacional, nas propriedades supercondutoras destes novos materiais. (Propesq/UFRGS, FAPERGS, CNPq).