

Estudo sobre comportamento estrutural em redes moleculares, usando método de simetria para uma analogia com a teoria eletromagnética de Maxwell

Lorival Bento de Andrade Junior

DOI: <https://doi.org/10.5196/physicae.proceedings.XEJP.25>

Resumo

O conceito de estrutura molecular é a base fundamental da química e de interesse imediato para a física, principalmente para área da física atômica e molecular, que possui um campo vasto de teorias e hipóteses, e uma gama variada de possibilidade de abordagens. Esta pesquisa insere-se dentro do contexto da física teórica (atômica e molecular), enfocando teorias e leis relativas a estrutura molecular que abrangem efeitos de simetria e de campos. Mas, ao mesmo tempo procura-se por meio da experimentação verificar a hipótese que aqui será abordada por meios teóricos-experimentais. Nosso objetivo, ou, nossa hipótese será a propor uma abordagem que privilegie o estudo do campo eletromagnético e da simetria molecular no comportamento estrutural molecular. Nossa metodologia consiste em estudar como ocorrem os comportamentos em estruturas de moléculas tetraédricas. Sendo que neste estudo especificamente, abordaremos os cromatos $(CrO_4)_2$ e a disposição de sua rede molecular, ou rede cristalina. Preferimos o termo não tão usual de "rede molecular", por remeter ao conceito de simetria, que é objeto central aqui. Verificaremos se existe(m) possibilidade(s) de manipular a forma espacial a fim de conseguir-se graus de estabilidades diferentes para a mesma estrutura, visando trabalhar a resistividade/condutividade. Para tanto parte-se da composição estrutural de um composto tetraédrico e sua isomeria e valendo-se aqui da conseqüência da hipótese acima aventada que infere que a disposição angular poderá definir a forma da estabilidade química por meio de distribuição de cargas eletrônicas e que também ao mesmo tempo, essa carga equaliza (simetricamente) a capacidade de diversificação espacial, originando, portanto a equalização e a possibilidade de interpor/intercalar suas fases elétricas. Essa redefinição estrutural e de características remete-nos a teoria eletromagnética de Maxwell, (em que forças elétricas e magnética, por terem a mesma natureza, de acordo com uma análise específica, podem converter-se uma em outra, observando-se determinado referencial). Aplicando esse fator de redimensionamento à geometria molecular, observa-se, a nova formação adaptada no tocante a sua extensão, e tendo-se também em conta em primeiro lugar as cavidades

estruturais que são existentes nas citadas estruturas moleculares, e que são determinadas pelo trânsito de energias de equilíbrio, e também valendo-se da proposição de Bosen-Einstein para partículas arrefecidas, ou de condensação, mas transpondo tal conceito (o de que qualquer sistema só pode adquirir energia em quantidades discretas), aqui para o que refere-se a esta reorganização estrutural e geométrica (ou de simetria), que proporciona certo entendimento das distribuição das partícula para as distribuições eletrônicas nas redes cristalinas, devido ao condicionamento dimensional que é proporcionado pela reorganização estrutural do composto estudado e de seus compósitos. Esta adaptação levou-nos a considerar a condutividade iônica como sendo, aqui, as defasagens de resistividade (origem de semicondutores tipo p e n), o que para podermos trabalhar em nível macroscópico (possivelmente) nos remete às funções de onda para a determinação de sistemas de ondas e do momento de energia orbital, (distribuição de Bohr), admitindo e restringindo essas condições para o qual este momento é quantizado em módulo e espacialmente, então, optou-se por, ao invés de seguir neste momento as conseqüentes regras matemáticas para tensores, e para campos tensoriais, utilizar-se então das resultantes simétricas posicionais (tese de Curie), que estuda a posição no espaço tridimensional cartesiano. Este processo ou metodologia de abordagem terá como aplicação imediata a determinação das distribuições das bandagens eletrônicas (ciclos de fases de resistividade/condutividade do material). Ou seja, estudou-se as condições para as conformidades de resistividade e/ou condutividade sob condições de simetria e distribuição atômica e molecular. Para efeito de ilustrar todo o exposto acima, demonstraremos o espalhamento e condicionamento estrutural, para redes complexas daquele composto tetraédrico, obtido por magnetização, ionização e eletrodeposição, utilizando-se de técnicas da nanotecnologia. A espectroscopia das fases moleculares auxiliará na comparação dos resultados obtidos acima para o estudo das origens da conformação de resistores e semicondutores em materiais com funções eletromagnéticas e radioativos. Este estudo em andamento, demonstra que a abordagem proposta é viável o que justifica o prosseguimento desta em um nível superior com uma abordagem mais específica.