UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

"Resolução Numérica de Equações de Transporte de Cargas Elétricas através de Isolantes"

Mariangela Tassinari de Figueiredo

Tese apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, para obtenção do título de Doutor em Ciências (Física Aplicada)

USP / IFQSC / SBI
8-2-000791

Orientador: Prof. Dr. René Armando Moreno Alfaro

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

São Carlos - 1988

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE _____

Mariangela Tassinari de Figueiredo **APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO,**

EM 06 **DE** outubro **DE** 1988

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Renê Armando Moreno Alfaro (orientador)

Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Prof. Dr. Luiz Marco Brescansin

Prof. Dr. Antonio Fernandes Izé

Prof. Dr. Antonio Fernando Ribeiro de Toledo Piza

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

"De boas palavras transborda o meu coração:
ao Rei consagro o que compus..."

Salmo 45:1(a)

AGRADECIMENTOS

Embora todas as pessoas mencionadas aqui provavelmente já saibam da minha gratidão, quero expressá-la por escrito. A ordem em que elas aparecem não representa, de modo algum, o grau do meu reconhecimento: cada uma delas tem para mim um significado único. Porém mais do que a todas estas pessoas, sou grata a Deus, que me permitiu concretizar este trabalho.

Agradeço sinceramente:

- aos profs. René A. Moreno Alfaro, meu orientador, e Guilherme F. Leal Ferreira, que me orientou no início, por serem sempre atenciosos e prontos a ajudar com suas idéias e opiniões tão valiosas; o uso da primeira pessoa do plural nesta tese, refere-se ao fato de que ela foi desenvolvida em conjunto com eles. Também pelo incentivo que deles recebi para superar algumas dificuldades pessoais;

- ao meu marido Jasson, por sua dedicação e companheirismo e ao meu filho Davi que, embora ainda pequeno, soube ser paciente e compreensivo. Também ao meu pai, a quem devo a minha formação básica, sem a qual eu não poderia ter chegado a este termo;

- à Yvone A. Biason Lopes e, novamente, ao Jasson pelo esmero com que datilografaram este trabalho;

- a todos os colegas do Grupo de Eletretos e aos responsáveis pelo computador do DFCM.

LISTA DE SÍMBOLOS

A área

C capacitância

E campo elétrico

i_C densidade de corrente de condução

j densidade de corrente total

J corrente total (J = Aj)

k constante de Boltzmann (8.617×10^{-5} eV/K)

K rótulo de linha no método das características ou índice para a coordenada espacial no método das diferenças finitas

l espessura

ME último rótulo das linhas características emitidas de x = 0 em t = 0 (ver apêndice B)

q, Q carga

t tempo

T temperatura

u $u = \frac{1}{\rho}$

V voltagem ou diferença de potencial

x variável espacial

α ver Capítulo IV, pág. 95 ou Capítulo V, pág. 117

Δt incremento do tempo

Δx distância entre as coordenadas espaciais dos pontos da rede retangular, usada nos métodos das diferenças finitas

ε permissividade dielétrica

μ mobilidade dos portadores

ν frequência de tentativa de escape das armadilhas

ρ densidade volumétrica de cargas livres

ρ_t densidade volumétrica de cargas presas nas armadilhas

σ densidade superficial de cargas

τ_t tempo de captura ou, melhor, inverso da probabilidade de captura

τ_d tempo de liberação ou, melhor, inverso da probabilidade de liberação das cargas das armadilhas

ϕ energia de ativação das armadilhas

RESUMO

Apresentamos alguns métodos numéricos para a resolução das equações hiperbólicas que regem problemas de transporte de cargas elétricas em isolantes, aplicando-os a quatro problemas específicos: injeção de corrente por um contato ôhmico em uma amostra com voltagem constante aplicada; transporte de um pulso de cargas através de uma amostra em circuito aberto; transporte de um pulso de cargas através de uma amostra submetida a uma diferença de potencial constante (tempo de vôo); e, finalmente, descarga termo-estimulada em circuito aberto. Empregamos, basicamente, dois tipos de métodos: características e diferenças finitas. Concluimos que, quando as descontinuidades são importantes, é mais conveniente usar o método das características; porém, quando não houver descontinuidades ou se estas não forem importantes, alguns métodos de diferenças finitas podem ser utilizados com boa precisão e menores tempos de computação do que aqueles gastos pelos métodos das características.

ABSTRACT

Numerical methods for solving partial differential equations of the hiperbolic type, governing some problems of transport of electric charge in dielectrics are presented and then applied to four specific problems: injection of charge via an ohmic contact into a sample with a constant applied voltage; transport of a pulse of charge through a sample in the open circuit mode; transport of a pulse of charge through a sample subjected to a constant voltage; and finally, thermally stimulated discharge in open circuit. Essentially two kinds of methods are employed: the method of characteristics and finite-difference methods. It is concluded that when discontinuities are important, the method of characteristics is the most convenient; otherwise, appropriate finite-difference schemes can be used with sufficient precision and less time expenses in computers.

ÍNDICE

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

1.1. Introdução Geral 1

1.2. Equações 3

CAPÍTULO II - SOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS HIPERBÓLICAS

2.1. Classificação das equações 7

2.2. Métodos para as Integrações Numéricas 18

2.2.1. Método das Diferenças Finitas 19

2.2.2. Método das Características 24

CAPÍTULO III - INJEÇÃO DE CORRENTE POR UM CONTATO ÔHMICO EM UM ISOLANTE SUBMETIDO A UMA D. D. P. CONSTANTE

3.1. Introdução 32

3.2. Colocação do Problema 33

3.3. Isolante Perfeito 36

3.3.1. Equações 36

3.3.2. Resultados das Integrações Numéricas com o Método das Características 37

3.3.3. Resultados das Integrações Numéricas com Métodos das Diferenças Finitas 53

3.3.3.1. Método das Diferenças Finitas Explícito - Euler 54

3.3.3.2. Método das Diferenças Finitas Explícito - Runge-Kutta Quarta Ordem para a Variável Tempo 61

3.3.3.3. Métodos das Diferenças Finitas Implícito 64

3.4. Isolante com Armadilhas 70

3.4.1. Equações 70

3.4.2. Integração Numérica com o Método das Características 73

3.4.3. Integração Numérica com o Método das Diferenças Finitas 90

3.5. Conclusão 94

3.6. Observação 94

CAPÍTULO IV - TRANSPORTE DE UM PULSO DE CARGA ATRAVÉS DE UM ISOLANTE EM CIRCUITO ABERTO

4.1. Colocação do Problema 96

4.2. Resultados 101

[illegible]

CAPÍTULO V - MOVIMENTO DE UM PULSO DE CARGA EM UM ISOLANTE SUBMETIDO A UMA D. D. P. CONSTANTE

5.1. Introdução 113

5.2. Condução Através de um Único Canal de Mobilidade Constante 114

5.2.1. Colocação do Problema 114

5.2.2. Resultados 116

5.3. Condução Através de Dois "Canais" 121

CAPÍTULO VI - DESCARGA TERMO-ESTIMILADA EM CIRCUITO ABERTO

6.1. Introdução 130

6.2. Colocação de Problema 131

6.3. Resultados 134

CONCLUSÃO 143

APÊNDICE A 145

APÊNDICE B 148

BIBLIOGRAFIA 151

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1. *Introdução Geral*

No estudo do transporte de cargas elétricas em meios isolantes procura-se sempre realizar as experiências usando a geometria mais simples possível. Em particular, quando as amostras são filmes, a geometria plana é a escolha ideal, pois simplificam a análise intuitiva dos resultados e também simplificam ao máximo as equações que descrevem os fenômenos de transporte elétrico. Mesmo assim, estas equações são, na sua grande maioria, de resolução difícil ou impossível em termos de solução analítica. Face a este problema, faz-se necessário recorrer à elaboração de modelos simplificados que refletem a engenhosidade e a compreensão dos aspectos importantes da física envolvida nos fenômenos por parte de seus autores. Não há dúvida de que esta mecânica de trabalho é de grande importância para a compreensão do problema; entretanto tem-se, às vezes, dúvidas quanto ao fato de o modelo proposto se aproximar daquilo que realmente está acontecendo no interior da amostra, ou se há uma compensação de fatores dando um resultado final que se assemelha muito à fenomenologia observada. Outras vezes um modelo simplificado descreve bem o comportamento observado, mas apenas num leque muito limitado de experiências, havendo necessidade de modificações para estendê-lo a outros fenômenos. Face a esta situação é desejável conhecer a solução exata, mesmo que seja numérica, das equações do problema.

Neste trabalho fazemos um estudo de algumas técnicas numéricas para a resolução dos sistemas de equações a derivadas

parciais que aparecem nos problemas de transporte de cargas elétricas nos isolantes, para dar apoio ao trabalho do grupo de Eletretos na análise teórica de resultados experimentais. Estes são sistemas hiperbólicos e, por isso, qualquer descontinuidade nas condições iniciais se propaga como descontinuidade ao longo das direções características [1], [2]. Muitos dos problemas de transporte de cargas nos isolantes têm condições iniciais descontínuas. São exemplos: uma densidade de carga colocada na superfície de uma amostra por descarga corona ou no interior desta por um feixe eletrônico e experiências de tempo de vôo em que, numa amostra submetida a uma d.d.p. constante, pares elétrons-buracos são criados por um flash de luz ou por iluminação contínua. Os métodos numéricos que tradicionalmente têm sido empregados na resolução destes problemas - Métodos de Diferenças Finitas - não mantêm estas descontinuidades, pelo contrário, introduzem um efeito artificial de difusão. Por este motivo desenvolvemos o emprego numérico do método das Características (que é o método natural para se resolver equações hiperbólicas) nestes problemas de transporte nos isolantes, de uma maneira simples mas que ainda não vimos na literatura e que, em todos os testes que fizemos com problemas que têm solução exata, mostrou-se muito bom. Este método se constitui, portanto, numa poderosa ferramenta para as soluções numéricas.

Queremos salientar que procuramos apresentar o assunto de forma que este trabalho possa ser útil às pessoas que, porventura, se iniciarem nos métodos de solução deste tipo de equação.

1.2. *Equações*

Trataremos somente de problemas de transporte de excesso de cargas em isolantes com simetria planar usando o modelo de bandas, nos quais se aplicam as equações de Poisson e da continuidade. Se considerarmos os defeitos do material, ou armadilhas, precisaremos, também, de equações que descrevam a cinética de troca de cargas entre a banda de condução e estas. Como o objetivo desta tese é trabalhar com as técnicas numéricas, só trataremos do caso mais simples de um nível de armadilhas não saturáveis; é claro que, no tratamento de problemas reais, mais níveis podem ser necesssários e, às vezes, até distribuições destas em energia e/ou espaciais; além disso é comum a necessidade de considerar a saturação das armadilhas. Discussões das equações usadas aqui, dos conceitos envolvidos e de casos mais gerais, podem ser encontrados, por exemplo, nas referências [3] e [4].

No caso de só um tipo de portadores móveis (consideraremos os positivos) e só um nível de armadilhas de volume, estas equações se escrevem:

Equação de Poisson: $$\epsilon\frac{\partial E}{\partial x} = \rho + \rho_t \qquad (1.2.1)$$

Equação da Continuidade: $$\frac{\partial i_c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho + \rho_t) = 0 \qquad (1.2.2)$$

Cinética de troca: $$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{\rho}{\tau_t} - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (1.2.3)$$

Corrente de condução: $$i_c = \mu\rho E \qquad (1.2.4)$$

onde E representa o campo elétrico, ρ a densidade volumétrica de carga livre, ρ_t a densidade volumétrica de carga nas armadilhas, i_c a corrente de condução, μ a mobilidade dos portadores, ϵ a permissividade do material, τ_t o tempo de captura e τ_d o de soltura, sendo que E, ρ, ρ_t e i_c são funções da coordenada espacial, x, e do tempo, t, isto é, E = E(x,t),

$\rho = \rho(x,t)$, $\rho_t = \rho_t(x,t)$ e $i_c = i_c(x,t)$.

Devemos observar que, ao escrever a equação (1.2.4), já desprezamos a corrente de difusão, o que é comum fazer quando se trabalha com isolantes sendo esta aproximação boa quando a voltagem aplicada é maior do que muitos kT/e, onde k é a constante de Boltzmann, T a temperatura e e a carga eletrônica (ver, por exemplo, [4], pág. 150 e referências lá indicadas, as referências de nºs 7 e 8 de [5] e [6]).

Neste trabalho, como é feito comumente, em vez de usar a equação da continuidade usamos a equação da corrente total que pode ser obtida da seguinte maneira: substitui-se $(\rho+\rho_t)$ da equação de Poisson, eq. (1.2.1), na equação da continuidade, eq. (1.2.2) o que dá

$$\frac{\partial i_c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}\left(\epsilon\frac{\partial E}{\partial x}\right) = 0 \qquad (1.2.5)$$

Inverte-se a ordem de derivação do segundo termo e integra-se a equação inteira com relação a x, obtendo-se, então, a equação desejada

$$j(t) = i_c + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} \qquad (1.2.6)$$

Quando se trabalha com estas equações é comum usar unidades adimensionais ou reduzidas, as quais permitem escrevê-las de maneira simplificada, isto é, sem usar ϵ e μ. A transformação das grandezas em unidades normais para as reduzidas é feita de forma que as equações anteriores se escrevam:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \rho + \rho_t \qquad (1.2.1')$$

$$\frac{\partial i_c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho+\rho_t) = 0 \qquad (1.2.2')$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{\rho}{\tau_t} - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (1.2.3')$$

$$j(t) = i_c + \frac{\partial E}{\partial t} \qquad (1.2.6')$$

$$i_c = \rho E \qquad (1.2.4')$$

As relações entre as grandezas com dimensão e aquelas adimensionais, serão apresentadas na colocação de cada problema pois, embora muito parecidas, dependem das condições de contorno.

É possível eliminar a densidade de carga livre das equações anteriores, obtendo, nas unidades reais, as equações

$$j = \mu E\left(\epsilon\frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t\right) + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} \qquad (1.2.7)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t}\left(\epsilon\frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (1.2.8)$$

ou

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t \mu E}\left(j - \epsilon\frac{\partial E}{\partial t}\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (1.2.9)$$

e, nas unidades adimensionais,

$$j = E\left(\frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t\right) + \frac{\partial E}{\partial t} \qquad (1.2.7')$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t}\left(\frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (1.2.8')$$

ou

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t E}\left(j - \frac{\partial E}{\partial t}\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (1.2.9')$$

Nos problemas cuja condição de contorno é a de circuito aberto a corrente externa, e consequentemente a densidade de corrente j, é nula. Naqueles em circuito fechado, com voltagem externa aplicada ou em curto circuito, j(t) é calculada integrando-se os dois membros da equação da corrente total sobre a espessura do isolante

$$\int_0^l j(t)dx = \int_0^l \mu\rho E dx + \epsilon\frac{d}{dt}\int_0^l E dx \qquad (1.2.10)$$

Como $\int_0^l E dx$ é a voltagem externa que, nos problemas que trataremos é constante, o segundo termo do segundo membro é nulo. Então

$$j(t) = \frac{1}{l}\int_0^l \mu\rho E dx \qquad (1.2.11)$$

Quando se elimina ρ do sistema de equações é preciso usar

$$j(t) = \frac{\mu\varepsilon}{2l}\left(E^2(l,t)-E^2(0,t)\right) - \frac{\mu}{l}\int_0^l \rho_t E dx \qquad (1.2.12)$$

Nas unidades reduzidas estas equações se escrevem

$$j(t) = \int_0^1 \rho E dx \qquad (1.2.11')$$

e

$$j(t) = \frac{E^2(1,t)-E^2(0,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx \qquad (1.2.12')$$

Como já foi dito, estas são as equações para os casos mais simples. Alguns problemas relatados neste trabalho têm algumas complicações adicionais que envolvem, no entanto, apenas complementações a estas equações. Por isso, na descrição dos métodos numéricos que faremos no Capítulo II, usaremos as equações acima, deixando as particularidades de cada problema para o capítulo correspondente.

Todos os cálculos numéricos deste trabalho foram feitos no computador VAX 11/780 do Departamento de Física e Ciência dos Materiais.

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

CAPÍTULO II

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS HIPERBÓLICAS

2.1. *Classificação das Equações*

Para resolver numericamente as equações apresentadas na seção 1.2, usamos os métodos de diferenças finitas (explícito e implícito) e das características. Em todos eles é importante o fato de as equações serem hiperbólicas; por isso, antes de falar sobre os métodos, apresentamos um resumo introduzindo a classificação das equações e o conceito de características, para o que usamos as referências [1], [2], [7], [8], [9], [10]. Isto pode ser feito para uma única equação diferencial parcial de ordem maior do que um ou para um sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem - equações diferenciais, ordinárias e parciais de ordem superior sempre podem ser transformadas em sistemas equivalentes de equações de primeira ordem; o inverso nem sempre é possível para equações parciais, só para ordinárias ([1], pág. 6 e 7).

No caso de equações de ordem maior do que dois, e mesmo em integrações numéricas das equações de segunda ordem, é mais fácil trabalhar com o sistema de equações de primeira ordem correspondente do que com a equação única. As referências [1] e [11] tratam de sistemas de n equações a várias variáveis independentes; nós nos limitaremos ao caso de apenas duas variáveis independentes.

Seja o sistema de equações diferenciais parciais a duas variáveis do tipo

$$\sum_{i=1}^{n} (a^{\nu i} u_x^i + b^{\nu i} u_y^i) + d^{\nu} = 0, \quad \nu = 1, 2, \ldots, n \qquad (2.1.1)$$

onde os coeficientes $a^{\nu i}$, $b^{\nu i}$ e d^{ν} podem ser funções de x, y e qualquer u^i, mas não das suas derivadas. Um sistema deste tipo é chamado quase-linear. Se os coeficientes não forem funções nem de u^i, o sistema é linear - a hipótese de quase-linearidade não é uma restrição geral, pois sistemas não lineares podem ser transformados em quase-lineares com um número maior de equações e incógnitas ([7] pág. 171, [11] pág. 43).

Em notação matricial este sistema se escreve

$$Au_x + Bu_y + d = 0 \qquad (2.1.2)$$

onde $A = [a^{\nu i}]$, $B = [b^{\nu i}]$, $d = [d^{\nu}]$, $u = [u^i]$.

Submete-se o sistema a uma transformação linear tal que, em cada equação só apareçam derivadas ao longo de uma única direção, isto é, tal que todas as funções u^i, $i = 1, 2, \ldots, n$, de uma mesma equação, sejam derivadas ao longo da mesma direção[1] (que serão as direções características). Diz-se, então, que o sistema está na forma normal. Seja $T = [t^{\nu i}]$ a matriz de transformações, de maneira que o sistema fica

$$TAu_x + TBu_y + Td = 0 \qquad (2.1.3)$$

Para que todas as funções u^i, $i = 1, \ldots, n$, de uma mesma equação (ν fixo) sejam derivadas ao longo da mesma direção, precisamos ter

$$TA = \Lambda TB \qquad (2.1.4)$$

onde Λ é uma matriz diagonal cujos elementos λ^{ν}, $\nu = 1, \ldots, n$,

---

[1] *A combinação linear $af_x + bf_y$ das duas derivadas de uma função $f(x,y)$, significa derivação de f numa direção dada por $dx/dt = a/b$, que é a direção do vetor de componentes (a,b). Se $x(\sigma)$ e $y(\sigma)$ representam uma curva com $\frac{dx/d\sigma}{dy/d\sigma} = a/b$, então $af_x + bf_y$ é uma derivada de f ao longo desta curva* ([8] pág.40).

são as características das equações. Isto pode ser visto substituindo (2.1.4) em (2.1.3) e chamando $B^* = TB$ e $d^* = Td$, com o que a ν-ésima equação deste sistema se escreve

$$\sum_{i=1}^{n} b^{*\nu i}(\lambda^{\nu} u_x^i + u_y^i) + d^{*\nu} = 0 \qquad (2.1.5)$$

e, portanto, em cada equação todas as funções são derivadas ao longo da direção $dx/dt = \lambda^{\nu}$, que são as direções características ou, simplesmente, as características do sistema. Estas são os elementos λ^{ν} de Λ que são calculadas observando que a ν-ésima linha da equação (2.1.4) se escreve

$$\sum_{\mu=1}^{n} t^{\nu\mu} a^{\mu i} = \sum_{\mu=1}^{n} \lambda^{\nu} t^{\nu\mu} b^{\mu i} \qquad i = 1, \ldots, n \qquad (2.1.6)$$

ou

$$\sum_{\mu=1}^{n} t^{\nu\mu}(a^{\mu i} - \lambda^{\nu} b^{\mu i}) = 0 \qquad i = 1, \ldots, n. \qquad (2.1.7)$$

Este é um sistema linear e homogêneo de n equações algébricas para $t^{\nu 1}$, $t^{\nu 2}$, ..., $t^{\nu n}$ de maneira que devemos ter

$$\det(A - \lambda^{\nu} B) = 0 \qquad (2.1.8)$$

se esta equação tiver n raízes reais e distintas, o sistema é chamado de totalmente hiperbólico ou, simplesmente, hiperbólico. Se todas as soluções são imaginárias, o sistema é elíptico. Se as raízes são reais mas algumas coincidem o sistema pode ser parabólico ou hiperbólico ([11] pág. 423).

O sistema (2.1.5) está, como se desejava, na forma normal, sendo λ^{ν} calculados da eq. (2.1.8) e os elementos $b^{*\nu i}$ e d^* das matrizes $B^* = TB$ e $d^* = Td$, respectivamente, obtidos a partir da resolução do sistema algébrico (2.1.7) para os elementos da matriz de transformação T.

Quando o número de equações é pequeno (como no nosso caso em que n = 2 ou 3), este processo de encontrar as direções características e escrever o sistema na forma normal pode ser feito mais simplesmente sem usar notação matricial, se bem que

o que se faz é, obviamente, a mesma coisa: uma transformação linear no sistema. Posteriormente, ilustraremos este procedimento aplicando-o às nossas equações.

Se det B = 0, a equação acima terá menos do que n raízes mas, em alguns casos é possível reescrever o sistema de maneira que det B ≠ 0, o que também será ilustrado a seguir com as nossas equações .

Embora um pouco cansativo e aparentemente repetitivo, o que se segue é uma ilustração interessante do procedimento descrito anteriormente para transformar um sistema hiperbólico para a forma normal. Veremos que, trabalhando com variações do sistema de três equações - para E, ρ e ρ_t - que foram apresentadas no capítulo anterior, obtém-se diferentes formas normais, talvez porque temos somente duas direções características. Já no caso em que usamos apenas duas equações - para E e ρ_t - esta ambiguidade não aparece. Para maior clareza separaremos em ítens, um para cada uma das variações citadas acima. Em todos eles $x \to x$, $y \to t$, $u^1 \to E$, $u^2 \to \rho$, $u^3 \to \rho_t$, com exceção do último no qual $u^1 \to E$, $u^2 \to \rho_t$.

a) Usando as equações na forma:

$$\epsilon \frac{\partial E}{\partial x} - \rho - \rho_t = 0 \qquad (2.1.9)$$

$$\mu E \frac{\partial \rho}{\partial x} + \mu \rho \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho_t}{\partial t} = 0 \qquad (2.1.10)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} - \frac{\rho}{\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d} = 0 \qquad (2.1.11)$$

temos

$$A = \begin{bmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ \mu\rho & \mu E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad d = \begin{bmatrix} -\rho - \rho_t \\ 0 \\ -\rho/\tau_t + \rho_t/\tau_d \end{bmatrix}$$

det B = 0 e det $(A - \lambda B) = -\lambda\epsilon(\mu E - \lambda) = 0$ tem apenas duas raízes: $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = \mu E$, embora tenhamos três equações (decorrência do

fato de det B = 0).

b) Por outro lado se no lugar da primeira equação do sistema acima usarmos

$$\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j - \mu E\rho_t = 0 \qquad (2.1.12)$$

obtida daquela pela substituição:

$$\rho = \frac{1}{\mu E}\left(j - \epsilon\frac{\partial E}{\partial t}\right)$$

teremos

$$A = \begin{bmatrix} \epsilon\mu E & 0 & 0 \\ \mu\rho & \mu E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad d = \begin{bmatrix} -j - \mu E\rho_t \\ 0 \\ -\rho/\tau_t + \rho_t/\tau_d \end{bmatrix}$$

Agora det B $\neq$ 0 e a equação det $(A-\lambda B) = -\epsilon\lambda(\mu E-\lambda)^2 = 0$ tem três raízes, embora duas sejam iguais: $\lambda_1 = \lambda_2 = \mu E$, $\lambda_3 = 0$.

Usando o procedimento descrito anteriormente para encontrar a matriz de transformação, eq. (2.1.7), e assim escrever o sistema na forma normal, obtém-se

$$T = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{bmatrix}$$

onde α, β e γ são arbitrários. Aplicando esta transformação ao sistema, obtém-se:

$$\alpha\left(\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j - \mu E\rho_t\right) = 0$$

$$\beta\left(\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j - \mu E\rho_t\right) = 0$$

$$\gamma\left(\frac{\partial\rho_t}{\partial t} - \frac{\rho}{\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d}\right) = 0$$

Como α, β e γ são arbitrários, são as expressões dentro das chaves que devem se anular. Assim, as duas primeiras equações são idênticas e a combinação das derivadas que nelas aparecem representa a derivada de E na direção dx/dt = μE. A terceira equação é a própria equação de cinética entre a banda de

condução e as armadilhas, e a derivada está na direção x = cte., ou dx/dt = 0. Observe-se que não se obtém nenhuma equação para calcular ρ.

c) Ainda, se no lugar da eq. (2.1.9) usássemos

$$\epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j + \mu\rho E = 0, \qquad (2.1.13)$$

teríamos

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \mu\rho & \mu E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad d = \begin{bmatrix} -j+\mu\rho E \\ 0 \\ -\rho/\tau_t+\rho_t/\tau_d \end{bmatrix}$$

Novamente, $\det(B) \neq 0$ e a equação $\det(A-\lambda B) = \epsilon\lambda^2(\mu E-\lambda) = 0$ tem três raízes mas as raízes iguais são, agora, $\lambda = 0$ ao contrário da forma anterior em que eram $\lambda = \mu E$.

Usando as eq. (2.1.7) obtém-se:

$$T = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & \delta \\ \beta & 0 & \psi \\ \gamma & \frac{\gamma\epsilon E}{\rho} & 0 \end{bmatrix}$$

com α, β, γ, e ψ arbitrários. A transformação T aplicada ao sistema resulta em:

$$\alpha\left\{\epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j + \mu\rho E\right\} + \delta\left\{\frac{\partial \rho_t}{\partial t} - \frac{\rho}{\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d}\right\} = 0$$

$$\beta\left\{\epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j + \mu\rho E\right\} + \psi\left\{\frac{\partial \rho_t}{\partial t} - \frac{\rho}{\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d}\right\} = 0$$

$$\gamma\left\{\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j + \mu\rho E + \frac{\epsilon E}{\rho}\left(\mu E\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho}{\tau_t} - \frac{\rho_t}{\tau_d}\right)\right\} = 0$$

Analogamente ao caso anterior, são os termos dentro das chaves que devem se anular. Obtém-se, assim, o sistema:

$$\epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j + \mu\rho E = 0 \qquad (2.1.14)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} - \frac{\rho}{\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d} = 0 \qquad (2.1.15)$$

$$\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - j + \mu\rho E + \frac{\epsilon E}{\rho}\left(\mu E\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho}{\tau_t} - \frac{\rho_t}{\tau_d}\right) = 0 \qquad (2.1.16)$$

onde as derivadas das duas primeiras equações estão na direção

x = cte. e a terceira contém as derivadas de E e de ρ na direção $dx/dt = \mu E$.

d) Usando as equações (2.1.12) e (2.1.11) e uma variação da eq. (2.1.10) onde substituímos $\partial E/\partial x$ por $(\rho+\rho_t)/\varepsilon$, obtém-se

$$A = \begin{bmatrix} \mu E & 0 & 0 \\ 0 & \mu E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad d = \begin{bmatrix} -j/\varepsilon - \mu E\rho_t/\varepsilon \\ \mu\rho(\rho+\rho_t)/\varepsilon \\ -\rho/\tau_t + \rho_t/\tau_d \end{bmatrix}$$

$$\det(A-\lambda B) = -\lambda(\mu E-\lambda)^2 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \mu E,\ \lambda_3 = 0,$$

$$T = \begin{bmatrix} \alpha & \beta & -\beta \\ \gamma & \delta & -\delta \\ 0 & 0 & \psi \end{bmatrix}$$

com α, β, γ, δ e ψ arbitrários.

A aplicação de T ao sistema dá:

$$\alpha\left(\mu E\frac{\partial E}{\partial x}+\frac{\partial E}{\partial t}-\frac{j}{\varepsilon}-\frac{\mu E\rho_t}{\varepsilon}\right)+\beta\left(\mu E\frac{\partial \rho}{\partial x}+\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\mu\rho}{\varepsilon}(\rho+\rho_t)+\frac{\rho}{\tau_t}-\frac{\rho_t}{\tau_d}\right)=0$$

$$\gamma\left(\mu E\frac{\partial E}{\partial x}+\frac{\partial E}{\partial t}-\frac{j}{\varepsilon}-\frac{\mu E\rho_t}{\varepsilon}\right)+\delta\left(\mu E\frac{\partial \rho}{\partial x}+\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\mu\rho}{\varepsilon}(\rho+\rho_t)+\frac{\rho}{\tau_t}-\frac{\rho_t}{\tau_d}\right)=0$$

$$\psi\left(\frac{\partial \rho_t}{\partial t}-\frac{\rho}{\tau_t}+\frac{\rho_t}{\tau_d}\right)=0$$

que, pelo fato de α, β, γ, δ e ψ serem arbitrários resulta em:

$$\mu E\frac{\partial E}{\partial x}+\frac{\partial E}{\partial t}-\frac{j}{\varepsilon}-\frac{\mu E\rho_t}{\varepsilon}=0 \qquad (2.1.17)$$

$$\mu E\frac{\partial \rho}{\partial x}+\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\mu\rho}{\varepsilon}(\rho+\rho_t)+\frac{\rho}{\tau_t}-\frac{\rho_t}{\tau_d}=0 \qquad (2.1.18)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t}-\frac{\rho}{\tau_t}+\frac{\rho_t}{\tau_d}=0 \qquad (2.1.19)$$

A primeira destas equações só tem derivadas do campo elétrico E, a segunda só da densidade de carga livre ρ, ambas na direção $dx/dt = \mu E$; a terceira equação é a que apareceu em todos os casos e que já estava no sistema original, eq. (2.1.11), e só contém a derivada de ρ_t na direção $dx/dt = 0$. Esta é a forma mais adequada para as integrações numéricas quando se quer usar as três funções E, ρ e ρ_t . É comum

escrever este sistema da seguinte maneira:

$$\frac{d}{dt}E(x(t),t) - \frac{j(t)}{\varepsilon} - \frac{\mu}{\varepsilon}E(x(t),t)\rho_t(x(t),t) = 0 \quad (2.1.20)$$

$$\frac{d}{dt}\rho(x(t),t) + \frac{\mu}{\varepsilon}\rho(x(t),t)[\rho(x(t),t)+\rho_t(x(t),t)] +$$

$$+ \frac{\rho(x(t),t)}{\tau_t} - \frac{\rho_t(x(t),t)}{\tau_d} = 0 \quad (2.1.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_t(x,t) - \frac{\rho(x,t)}{\tau_t} + \frac{\rho_t(x,t)}{\tau_d} = 0 \quad (2.1.22)$$

$$\frac{d}{dt}x(t) = \mu E(x(t),t) \quad (2.1.23)$$

Há ainda outras variações possíveis como usar $(\rho/\tau_t - \rho_t/\tau_d)$ no lugar de $\partial\rho_t/\partial t$ da eq. (2.1.10), ou usar $\varepsilon\partial E/\partial x - \rho_t$ ou $(j - \varepsilon\partial E/\partial t)/\mu E$ no lugar do ρ que aparece na eq. (2.1.11), mas as que fizemos são suficientes para o fim a que nos propusemos: ilustrar o método.

e) Quando não usamos ρ nosso sistema é somente de duas equações: as equações (1.2.7) e (1.2.8) ou (1.2.7) e (1.2.9), que repetimos aqui:

$$\varepsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \varepsilon\frac{\partial E}{\partial t} - \mu\rho_t E - j = 0$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} - \frac{\varepsilon}{\tau_t}\frac{\partial E}{\partial x} + \rho_t\left(\frac{1}{\tau_t} + \frac{1}{\tau_d}\right) = 0$$

ou

$$\varepsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \varepsilon\frac{\partial E}{\partial t} - \mu\rho_t E - j = 0$$

$$\frac{\partial\rho_t}{\partial t} + \frac{\varepsilon}{\mu E\tau_t}\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{j}{\mu E\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d} = 0$$

O segundo sistema já está na forma normal com as características $\lambda_1 = \mu E$ e $\lambda_2 = 0$. Ao primeiro podemos aplicar o procedimento matricial:

Com $u^1 \to E$, $u^2 \to \rho_t$, temos

$$A = \begin{bmatrix} \varepsilon\mu E & 0 \\ -\varepsilon/\tau_t & 0 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad d = \begin{bmatrix} -\mu\rho_t E - j \\ -j/\mu E\tau_t + \rho_t/\tau_d \end{bmatrix}$$

As raízes da equação $\det(A-\lambda B) = \epsilon(\mu E-\lambda)\lambda = 0$ são $\lambda_1 = \mu E$ e $\lambda_2 = 0$. A matriz de transformação, com α e β arbitrários, é:

$$T = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \beta & \beta\mu E\tau_t \end{bmatrix}$$

a qual, aplicada ao sistema resulta em

$$\alpha\left\{\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - \mu\rho_t E - j\right\} = 0$$

$$\beta\left\{\epsilon\frac{\partial E}{\partial t} + \mu E\tau_t\frac{\partial \rho_t}{\partial t} - j + \mu E\rho_t\frac{\tau_t}{\tau_d}\right\} = 0$$

Novamente, porque α e β são arbitrários, devemos ter

$$\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - \mu\rho_t E - j = 0 \qquad (2.1.24)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \frac{\epsilon}{\mu E\tau_t}\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{j}{\mu E\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d} = 0 \qquad (2.1.25)$$

que é idêntico ao segundo sistema eq. (1.2.7) e (1.2.9). Neste caso em que usamos somente duas funções e duas equações, não temos a ambiguidade do caso com três.

Como dissemos no ítem anterior, é comum escrever a derivada na direção $dx/dt = \mu E$ na forma de uma derivada total. Com isto, este sistema seria escrito da seguinte maneira:

$$\epsilon\frac{d}{dt}E(x(t),t) - j(t) - \mu E(x(t),t)\rho_t(x(t),t) = 0 \qquad (2.1.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_t(x,t) - \frac{1}{\mu\tau_t E(x,t)}\left(j(t)-\epsilon\frac{\partial}{\partial t}E(x,t)\right) + \frac{\rho_t(x,t)}{\tau_d} = 0 \qquad (2.1.27)$$

Muitas vezes o objetivo da integração numérica é calcular somente a corrente ou a voltagem, pois estas são as grandezas experimentalmente mensuráveis. Nestes casos esta é a forma mais indicada para o sistema, já que estas duas grandezas podem ser calculadas usando apenas E e ρ_t e, evidentemente, é mais rápido integrar duas equações no computador do que três. Quando se deseja o perfil de cargas, ρ vs.x, temos três alternativas:

1 - integrar o sistema de eq.(2.1.17), (2.1.18), (2.1.19), obtido no ítem (d) acima;

2 - integrar o sistema de eq. (2.1.24) e (2.1.25) obtido neste ítem para obter E e ρ_t e a eq. (2.1.18) para obter ρ;

3 - análogo ao anterior mas em vez de integrar a eq. (2.1.18) para ρ, calculá-lo da equação de Poisson

$$\rho = \epsilon\frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t$$

ou da equação da corrente total

$$\rho = \frac{1}{\mu E}\left(j - \epsilon\frac{\partial E}{\partial t}\right)$$

fazendo derivação numérica.

Como já dissemos, todas estas transformações podem ser feitas sem usar matrizes, sendo até mais simples no nosso caso.

Embora já esteja demonstrado que nosso sistema de equações é hiperbólico com características x = constante e dx/dt = μE, repetiremos esta demonstração trabalhando com uma única equação diferencial parcial de segunda ordem. A razão disto é que, no caso de equações de segunda ordem, alguns autores trabalham com a equação de ordem superior e não com o sistema equivalente (por exemplo [2] e [9]). Para aqueles que preferem fazer assim, pode-se mostrar o caráter hiperbólico das equações que usamos, através de uma equação diferencial de segunda ordem para o campo elétrico, obtida do sistema de equações para ρ, ρ_t e E:

$$\epsilon\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \epsilon\mu E\frac{\partial^2 E}{\partial t\partial x} - \frac{\epsilon}{E}\left(\frac{\partial E}{\partial t}\right)^2 + \epsilon\left(\frac{1}{\tau_t}+\frac{1}{\tau_d}\right)\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{j}{E}\frac{\partial E}{\partial t} + \mu\frac{\epsilon}{\tau_d}E\frac{\partial E}{\partial x} -$$

$$- \frac{dj}{dt} - \left(\frac{1}{\tau_t}+\frac{1}{\tau_d}\right)j = 0 \qquad (2.1.28)$$

Consideremos equações parciais de segunda ordem com duas variáveis independentes, do tipo

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y} + c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + e = 0 \qquad (2.1.29)$$

Se os coeficientes a, b, c e e forem funções de x, y, u, du/dx e du/dy, mas não de $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$ e $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, tal equação é chamada de quase-linear; se forem constantes, linear; e se forem funções também das derivadas segundas, não linear. O que é feito a seguir se refere apenas a equações lineares ou quase-lineares.

Consideremos a integração desta equação ao longo de uma curva Γ no plano x-y. Seja ds um elemento de arco desta curva e d/ds a representação de uma derivada ao longo de Γ. Então

$$d\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \left\{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\frac{dx}{ds} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\frac{dy}{ds}\right\}ds \qquad (2.1.30)$$

$$d\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \left\{\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\frac{dx}{ds} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\frac{dy}{ds}\right\}ds \qquad (2.1.31)$$

e

$$a\frac{dy}{ds}d\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) + c\frac{dx}{ds}d\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \left\{\left(a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)\frac{dx}{ds}\frac{dy}{ds} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\left(a\left(\frac{dy}{ds}\right)^2 + c\left(\frac{dx}{ds}\right)^2\right)\right\}ds \qquad (2.1.32)$$

Substituindo $a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ da equação diferencial e dividindo a equação assim obtida por $(dx/ds)^2$ supondo, obviamente, que $dx/ds \neq 0$ obtém-se

$$a\frac{dy}{dx}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) + c\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) + e\frac{dy}{dx} = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\left\{a\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - b\frac{dy}{dx} + c\right\} \qquad (2.1.33)$$

Escolhendo a curva Γ de maneira que o segundo membro desta equação se anule teremos

$$a\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - b\frac{dy}{dx} + c = 0 \qquad (2.1.34)$$

$$a\frac{dy}{dx}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) + c\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) + e\frac{dy}{dx} = 0 \qquad (2.1.35)$$

A equação original, eq. (2.1.29) é chamada hiperbólica se as duas raízes da eq. (2.1.34) são reais, isto é, se $(b^2-4ac)>0$; parabólica se são iguais, $(b^2-4ac) = 0$; e elíptica se são complexas, $(b^2-4ac) < 0$. No caso de equações hiperbólicas, portanto, em cada ponto do plano x-y há duas direções nas quais a integração da equação diferencial se reduz à integração de duas equações envolvendo só derivadas ordinárias,

eq.(2.1.35) para as duas raízes dy/dx da eq.(2.1.34) a duas incógnitas: ∂u/∂x e ∂u/∂y.

De acordo com estas definições e fazendo as equivalências u→E, x→t, y→x, nossa equação de segunda ordem para o campo elétrico eq.(2.1.28) e' quase linear, com a = ε, b = $\varepsilon\mu$E e c=0. Portanto $(b^2-4ac) = (\varepsilon\mu E)^2$, que é sempre positivo o que significa que a equação é sempre hiperbólica com características dadas por

$$\frac{dx}{dt} = 0 \Rightarrow x = \text{constante}$$

e

$$\frac{dx}{dt} = \mu E$$

que, naturalmente, são as mesmas que obtivemos quando trabalhamos com o sistema.

Vamos terminar esta parte com duas observações, ou informações, adicionais:

1- Equações elípticas estão, geralmente, associadas com problemas de equilíbrio ou estado estacionário. Problemas que envolvem o tempo como uma das variáveis independentes dão origem, geralmente, a equações hiperbólicas ou parabólicas.

2- As soluções de equações elípticas e parabólicas são analíticas mesmo quando as condições de contorno ou iniciais são descontínuas. Entretanto, nas equações hiperbólicas descontinuidades nas condições iniciais são propagadas como descontinuidades no domínio de soluções, a propagação sendo feita ao longo das características.

2.2. *Métodos Para as Integrações Numéricas*

Na apresentação dos métodos numéricos, feita a seguir, já

teremos em mente o fato de que nosso sistema de equações é hiperbólico e, como é o nosso caso, usaremos x e t como variáveis independentes e E(x,t) e $\rho_t(x,t)$ como as dependentes. As referências usadas aqui foram [1], [2], [7], [10] e [12].

2.2.1. *Método das Diferenças Finitas*

Nos métodos de diferenças finitas, o plano x-t é coberto por uma rede retangular formada por dois conjuntos de linhas igualmente espaçadas: um paralelo ao eixo dos x com espaçamentos Δt e o outro paralelo ao eixo dos t com espaçamentos Δx, encontrando-se então, soluções aproximadas para as equações diferenciais nos pontos de intersecção destas linhas, chamados pontos da rede. Usaremos os índices K e J para designar os pontos da rede com coordenadas $x_K = K\Delta x$ e $t_J = J\Delta t$ de maneira que E(K,J), ρ(K,J) e ρ_t(K,J) representarão os valores destas funções num ponto com coordenadas x_K, t_J. As soluções aproximadas são obtidas pela substituição de cada derivada da equação diferencial, num ponto da rede, por quocientes entre diferenças envolvendo os valores das funções neste ponto e em pontos vizinhos. Este processo resulta em equações algébricas para as funções nos pontos da rede, que propagam a solução de uma linha do tempo para a próxima. Usando espaçamentos suficientemente pequenos e obedecendo a certas condições obtém-se uma boa aproximação para a solução das equações diferenciais nos pontos da rede.

Para exemplificar usaremos as equações apresentadas anteriormente, já na forma adimensional, eq. (1.2.6') com (1.2.4') e a eq. (1.2.3')

$$\frac{\partial}{\partial t}E(x,t) = j(t) - \rho(x,t)E(x,t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_t(x,t) = \frac{\rho(x,t)}{\tau_t} - \frac{\rho_t(x,t)}{\tau_d}$$

Nestas equações $\rho(x,t)$ será obtida da equação de Poisson, eq. (1.2.1')

$$\rho(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}E(x,t) - \rho_t(x,t)$$

Queremos, agora, escrever estas equações sob a forma de diferenças finitas. Para isto desenhamos a rede da maneira descrita anteriormente, Fig. 2.1, e escrevemos as derivadas como razões entre duas diferenças finitas em vez de infinitesimais, o que resulta nas equações de diferenças, que são algébricas, no lugar das equações diferenciais.

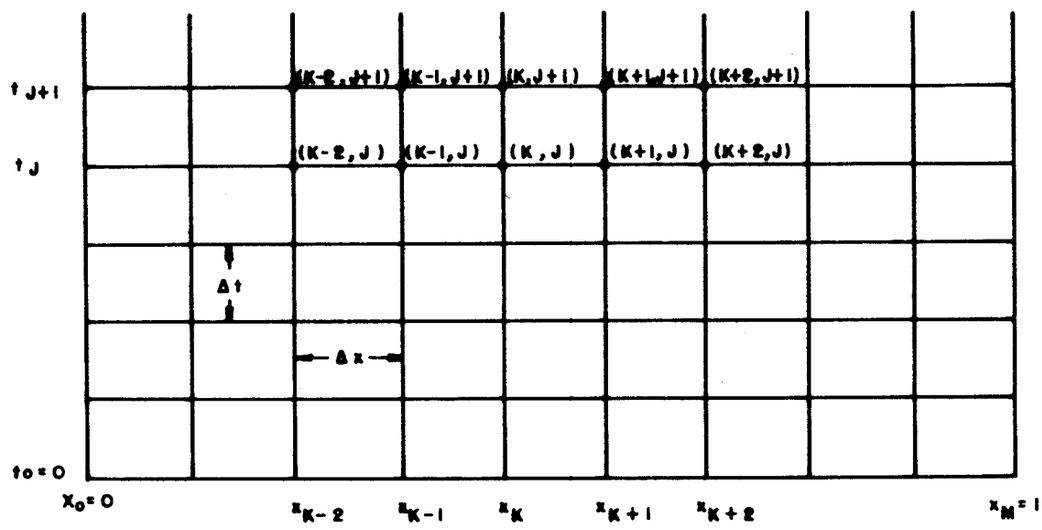

Figura 2.1. Rede de Pontos Usada nos Métodos de Diferenças Finitas.

Como exemplo, vamos escrever estas equações sob a forma explícita que consiste em usar somente valores já conhecidos para as funções que aparecem no segundo membro das equações:

$$\frac{E(K,J+1)-E(K,J)}{\Delta t} = j(J) - \rho(K,J)E(K,J);\ K=0,M \qquad (2.2.1)$$

$$\frac{\rho_t(K,J+1)-\rho_t(K,J)}{\Delta t} = \frac{\rho(K,J)}{\tau_t} - \frac{\rho_t(K,J)}{\tau_d};\ K=0,M \qquad (2.2.2)$$

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

onde $\rho(K,J)$ pode, em princípio, ser escrita em uma das três formas seguintes para os pontos centrais ($1 \leq K \leq M-1$):

$$\rho(K,J) = \frac{E(K,J)-E(K-1,J)}{\Delta x} - \rho_t(K,J) \quad \text{(diferença para trás)} \qquad (2.2.3)$$

$$\rho(K,J) = \frac{E(K+1,J)-E(K-1,J)}{2\Delta x} - \rho_t(K,J) \quad \text{(diferença central)} \qquad (2.2.4)$$

$$\rho(K,J) = \frac{E(K+1,J)-E(K,J)}{\Delta x} - \rho_t(K,J) \quad \text{(diferença para frente)} \qquad (2.2.5)$$

Para $K = M$ só dá para usar a diferença para trás e para $K = 0$ só a diferença para a frente. Como será visto depois, as características vão determinar qual forma deve ser usada.

Sendo conhecidos E e ρ_t em todos os pontos $0 \leq K \leq M$ da linha J, estas equações permitem sua determinação na linha J+1.

A densidade de corrente, j, é obtida da eq. (1.2.11') ou da (1.2.12'), sendo que as integrais são calculadas usando a regra de Simpson "extendida" (apêndice A, eq. (A.2.)).

Observe-se que a solução do problema é, agora obtida da resolução deste sistema algébrico de equações, não acopladas. Outra maneira de escrever as equações de diferenças, chamada de diferenças finitas implícito, seria colocar no segundo membro das equações, as funções no instante t_{J+1}, em vez de t_J como no explícito; isto resulta num sistema algébrico de equações acopladas, mais complicado de resolver do que o outro mas com uma vantagem: os métodos implícitos são incondicionalmente estáveis enquanto os explícitos não. Isto significa que a relação $\Delta t/\Delta x$ é arbitrária nos metódos implícitos mas não nos explícitos. No final desta seção falaremos a respeito da condição $\Delta t/\Delta x$ nos métodos explícitos.

Para mostrar que, nos metódos explícitos, não é indiferente usar diferenças "para trás", "central" ou "para a frente", pelo contrário, que há uma direção preferencial, usaremos o argumento dado em ([1] pág. 49-53).

Consideremos os pontos mostrados na Fig. (2.2). P, Q, Q' e Q" são pontos da rede e Q_1 e Q_2 os pontos onde as características λ_1 e λ_2, respectivamente, que passam por P, cruzam a linha de Q. Conforme já dissemos na nota de rodapé da página 8, a relação

$$\lambda_\nu(P)u_x(P) + u_t(P), \quad \nu = 1 \text{ ou } 2,$$

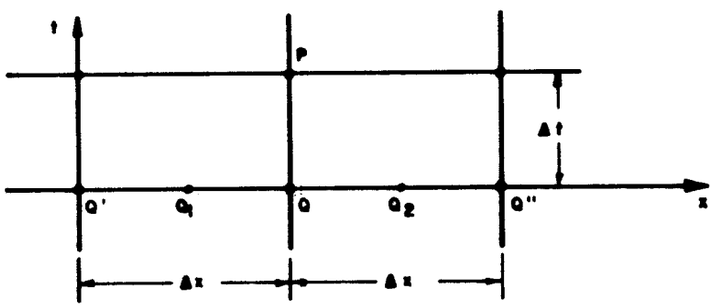

Figura 2.2

que aparece na forma normal do sistema, representa a derivada da função u na direção característica definida pelo vetor de componentes $(\lambda_\nu, 1)$.

Seja:

$$D_\nu u(P) = \frac{\lambda_\nu(P)u_x(P) + u_t(P)}{\sqrt{1+\lambda_\nu^2}} \qquad (2.2.6)$$

Então,

$$\lambda_\nu(P)u_x(P) + u_t(P) = \sqrt{1+\lambda_\nu^2}\, D_\nu u(P) \qquad (2.2.7)$$

Da Fig. (2.2) vê-se que

$$\lambda_\nu(P) \simeq \frac{1}{\overline{PQ}/\overline{Q_\nu Q}} = \frac{\overline{Q_\nu Q}}{\Delta t} \qquad \nu=1,2 \qquad (2.2.8)$$

e

$$\sqrt{1+\lambda_\nu^2} \simeq \frac{\overline{PQ_\nu}}{\Delta t} \qquad (2.2.9)$$

Usando (2.2.9) e escrevendo $D_\nu u(P)$ na forma de diferenças finitas, isto é,

$$D_\nu u(P) = \frac{u(P)-u(Q_\nu)}{\overline{PQ_\nu}} \qquad (2.2.10)$$

obtém-se

$$\sqrt{1+\lambda_\nu^2}\; D_\nu u(P) = \frac{u(P)-u(Q_\nu)}{\Delta t} \qquad (2.2.11)$$

Assim, a igualdade (2.2.7) só será satisfeita, na forma de diferenças finitas, se u_x e u_t forem escritos como

$$u_x(P) = \frac{u(Q)-u(Q_\nu)}{\overline{Q_\nu Q}} \qquad (2.2.12)$$

$$u_t(P) = \frac{u(P)-u(Q)}{\overline{PQ}} \qquad (2.2.13)$$

u_t é, geralmente, escrito assim mesmo. O problema está com u_x: no método das diferenças finitas só podemos usar os pontos da rede; como Q_ν não é necessariamente um ponto da rede, precisamos, então, substituí-lo por um destes. No caso de Q_1 o erro é menor se escolhemos o ponto Q', e no caso de Q_2 , o ponto Q". Em outras palavras, se a característica for positiva precisamos usar diferenças "para trás" e se for negativa, "para a frente".

Vejamos, agora, que restrição deve ser imposta à razão $\Delta t/\Delta x$ nos métodos explícitos. Para isto precisamos, antes, definir o que é intervalo de dependência: a solução do problema diferencial num ponto (x_0,t_0) depende somente dos valores iniciais no segmento do eixo dos x limitado pelas características que passam por (x_0,t_0) - este segmento é chamado de intervalo de dependência. Em outras palavras, o intervalo de dependência de um ponto (x_0,t_0) é o conjunto dos valores iniciais que influenciam a solução em (x_0,t_0).

É preciso garantir que o intervalo de dependência da

equação das diferenças não seja menor do que aquele da equação diferencial. Senão, uma mudança nas condições iniciais em regiões próximas aos extremos do intervalo de dependência da equação diferencial mudaria a solução desta, mas não a da equação das diferenças. Isto significa que

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{1}{\text{Máx } |\lambda^{\nu}|} \qquad (2.2.14)$$

Observe-se que esta condição depende da solução, desconhecida, do problema diferencial. Uma maneira de enfrentar esta situação é testar o critério de maneira aproximada, depois que o cálculo numérico for feito, usando a solução da equação das diferenças em vez da solução da equação diferencial.

2.2.2. *Método das Características*

Diferenciação numérica, usada no método de diferenças finitas, é um processo que deve ser evitado sempre que possível. Na resolução numérica de equações hiperbólicas isto pode ser feito integrando-se as equações diferenciais ao longo das características obtendo-se, geralmente, resultados mais precisos do que com os métodos de diferenças finitas. Porém, a grande vantagem das características sobre as diferenças finitas é que descontinuidades nos valores iniciais propagam-se ao longo das características enquanto os métodos de diferenças finitas introduzem efeitos artificiais de difusão arredondando, ou suavizando, as descontinuidades. Em problemas onde tais descontinuidades são importantes é essencial calcular a solução pelas características.

Para o caso de equações de segunda ordem ou, equivalentemente, sistemas de duas equações, com duas variáveis independentes, duas características se cruzam em cada ponto do

plano x-t. Em geral elas são curvas mas, como características da mesma família não se interceptam, elas podem ser usadas como uma base para se construir uma rede de coordenadas (ver Fig. 2.3). No caso de equações lineares, as características não dependem da solução do problema e a rede pode ser construída desde o princípio; mas no caso de equações não lineares as características dependem da solução e a rede só pode ser construída à medida que o cálculo é feito.

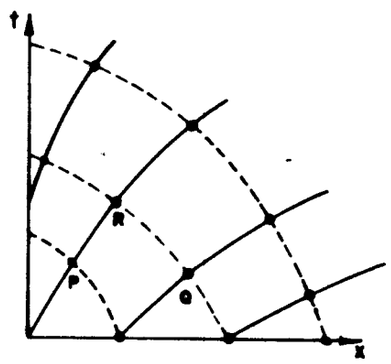

Figura 2.3. Rede de Características

O procedimento para usar este método é o seguinte: suponhamos que a solução seja conhecida em dois pontos tais como P e Q (Fig.2.3). A intersecção da característica de uma das famílias, que passa por P, com a da outra família, que passa por Q, determina o ponto R onde será calculada a solução. Cada equação do sistema na forma normal só contém derivadas ao longo de uma das direções características e, quando cada equação é integrada ao longo desta, obtém-se a solução no ponto R.

Embora preciso e sem restrições para garantir estabilidade e convergência, este método tem também uma grande desvantagem: a rede é muito irregular o que faz com que (a) o problema geométrico de acompanhar as linhas seja complicado e (b) seja necessário fazer muitas interpolações para obter os resultados nos valores de t desejados.

Para evitar este problema, Hartree ([9] e [7]), sugeriu usar as características numa rede regular como a das diferenças finitas, procedendo da seguinte maneira (Fig. 2.4): suponhamos que a solução seja conhecida nos pontos da rede regular até a linha $t = t_j$. A solução num novo ponto (R), cujas coordenadas (x_k, t_{j+1}) são conhecidas (pois a rede é regular), é calculada traçando as duas características que passam por R, as quais cruzam a linha t_j nos pontos P e Q. Se as equações são lineares as características não dependem da solução e estes pontos P e Q são facilmente obtidos. Porém, se as equações não são lineares, as características que se cruzam em R não são conhecidas, sendo necessário aproximá-las pelos valores no ponto S, por exemplo, ou usar algum processo iterativo para determiná-las juntamente com a solução. Quando se usa este método, as incógnitas são x(P), x(Q) e as funções (solução) no ponto R. As funções nos pontos P e Q são obtidas por interpolação, usando os valores já conhecidos nos pontos da rede (tipo S, S' e S").

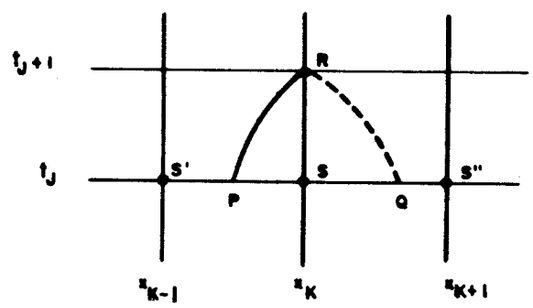

Figura 2.4

A vantagem deste método sobre o anterior, cuja rede de pontos é determinada exclusivamente pelas características, é que a solução é obtida diretamente em pontos escolhidos por quem faz o cálculo enquanto que no outro são as características que "escolhem" os pontos da rede. No entanto, assim como nos métodos de Diferenças Finitas, as descontinuidades não são

mantidas.

Cabe aqui observar que o nome dado por Hartree para este método, que ele descreve no seu livro "Numerical Analysis" [9] é "Uso de Intervalos Fixos em uma das Variáveis Independentes", mas na verdade ele trabalha com intervalos fixos nas duas variáveis independentes. Ames [7] e Walsh [10] também entendem e descrevem o método de Hartree com a rede fixa nas duas variáveis.

O "Método das Características" que usamos na resolução dos problemas deste trabalho é intermediário entre os dois métodos descritos anteriormente: o de integração na rede das características e o de Hartree que usa as características numa rede fixa. Fixamos a rede somente em uma das variáveis, o tempo, e avançamos o cálculo acompanhando uma das famílias de características. Com isso evitamos as dificuldades e ficamos com as vantagens dos dois métodos, pois:

a) fixando a rede na variável tempo, os resultados são obtidos a intervalos de tempo que estão completamente sob nosso controle;

b) como a rede é parcialmente determinada pelas características, se acompanharmos a família de características que contém aquela ao longo da qual ocorre a descontinuidade, esta é mantida.

Para usar qualquer um dos métodos descritos acima o sistema de equações a ser integrado deve estar na forma normal que, como já vimos, é a forma em que cada equação só contém derivadas ao longo da mesma direção, que é a direção (característica daquela equação) ao longo da qual ela deve ser integrada. Isto ficou bem claro no método que usava a rede determinada unicamente pelas características. Mas, também nos

métodos de Hartree e naquele usado neste trabalho (que será descrito com mais detalhes a seguir) também se integra ao longo das características. A diferença entre os três é a rede usada.

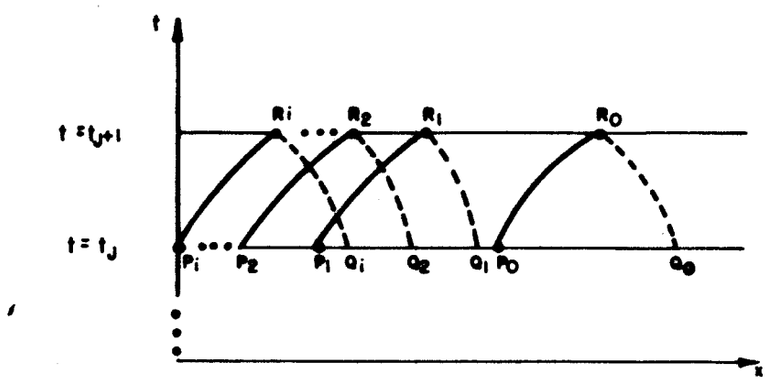

Figura 2.5

O método que usamos consiste no seguinte: suponhamos que a solução seja conhecida até o instante $t = t_j$ nos pontos P_0, P_1, P_2,...,P_i (Fig. 2.5). Levantamos as características da família indicada pelas linhas contínuas, partindo destes pontos até que elas encontrem a linha $t_{j+1}=t_j+\Delta t$. Estas intersecções determinam os pontos onde será calculada a solução no instante t_{j+1}. Uma das equações será integrada ao longo destas características, para o que usamos os pontos P_i e R_i. A outra, ao longo das características indicadas por linhas pontilhadas e, para ela, usamos os pontos Q_i e R_i.

No caso em que as duas famílias de características dependem das funções procuradas, isto é, da solução do problema, elas vão sendo calculadas juntamente com estas funções. O primeiro passo (levar as características com linhas contínuas até o tempo t_{j+1}) tanto pode ser feito usando os valores já conhecidos no tempo t_j , como usando uma média entre os valores em t_j e t_{j+1} , para o que é preciso usar algum processo iterativo. Para o segundo passo (descer, pelas características pontilhadas, dos pontos R_i até os Q_i) o uso de

processo iterativo pode não ser optativo mas necesssário.

Nas equações que usaremos as características são dadas por $\frac{dx}{dt} = \mu E$ e $\frac{dx}{dt} = 0$ (x constante) e as descontinuidades propagadas ao longo das características $\frac{dx}{dt} = \mu E$. Por isso escolhemos esta família para determinar os pontos tipo R. Sendo a outra família dada por x = constante, o processo de encontrar os pontos tipo Q é, obviamente, grandemente simplificada e preciso pois $x(Q_i) = x(R_i)$ (ver Fig. 2.6).

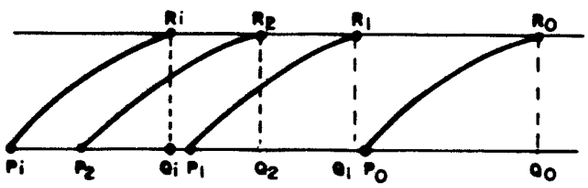

Figura 2.6

Por exemplo as equações (2.1.24) e (2.1.25), que reescrevemos:

$$\epsilon\mu E\frac{\partial E}{\partial x} + \epsilon\frac{\partial E}{\partial t} - \mu\rho_t E - j = 0$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \frac{\epsilon}{\mu E\tau_t}\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{j}{\mu E\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d} = 0$$

estão na forma normal pois $\frac{\partial E}{\partial t} + \mu E\frac{\partial E}{\partial x}$ é a derivada de E na direção $\frac{dx}{dt} = \mu E$, indicada por dE/dt. Precisamos, então, integrar numericamente as equações

$$\frac{dx}{dt} = \mu E \qquad (2.2.15)$$

$$\epsilon\frac{dE}{dt} - \mu\rho_t E - j = 0 \qquad (2.2.16)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \frac{\epsilon}{\mu E\tau_t}\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{j}{\mu E\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d} = 0 \qquad (2.2.17)$$

lembrando que as derivadas das eq. (2.2.15) e (2.2.16) são na direção $\frac{dx}{dt} = \mu E$ e as da eq. (2.2.17) na direção x = constante.

A forma mais simples para a integração numérica é usar o método de Euler (ver Fig. 2.6 para identificar os pontos):

$$\epsilon\frac{E(R_i)-E(P_i)}{\Delta t} - \mu\rho_t(P_i)E(P_i) - j(t_j) = 0 \qquad (2.2.18)$$

$$\frac{\rho_t(R_i)-\rho_t(Q_i)}{\Delta t} + \frac{\epsilon}{\mu\tau_t E(Q_i)}\frac{E(R_i)-E(Q_i)}{\Delta t} - \frac{j(t_j)}{\mu\tau_t E(Q_i)} + \frac{\rho_t(Q_i)}{\tau_d} = 0 \qquad (2.2.19)$$

$$\frac{x(R_i)-x(P_i)}{\Delta t} = \mu E(P_i) \qquad (2.2.20)$$

sendo $E(Q_i)$ e $\rho_t(Q_i)$ obtidos por interpolação usando os valores conhecidos de E e ρ_t nos pontos tipo P. Como os pontos precisam estar próximos, pois eles serão usados para fazer as integrais numéricas que calcularão j e V, é suficiente usar interpolação linear: verificamos isto usando interpolação lagrangeana com cinco, sete e nove pontos em um dos problemas (o mesmo do Capítulo 3) mas os resultados são os mesmos que com a interpolação linear que, por sua vez, é mais rápido no computador.

Pode-se melhorar a solução, mesmo sem usar processos iterativos da seguinte maneira:

1- calcula-se $E(R_i)$ pela eq. (2.2.18);

2- usa-se $\frac{E(P_i)+E(R_i)}{2}$ em vez de $E(P_i)$ na eq. (2.2.20) para calcular $x(R_i)$;

3- usa-se $\frac{E(Q_i)+E(R_i)}{2}$ no lugar dos $E(Q_i)$ que aparecem nos denominadores da eq. (2.2.19) para calcular $\rho_t(R_i)$. Pode-se, ainda, usar $\frac{\rho_t(Q_i)+\rho_t(R_i)}{2}$ no lugar do $\rho_t(Q_i)$ do último termo desta equação.

Observe-se que estes métodos que temos chamado de métodos das características, aproximam as derivadas por quocientes entre diferenças finitas, de forma que também são "métodos de diferenças finitas". Estas diferenças, porém, são tomadas ao longo das direções características, enquanto que nos métodos

chamados simplesmente de métodos de diferenças finitas, elas são tomadas ao longo das direções fixas de uma rede retangular. Continuaremos a usar esta terminologia, isto é, chamaremos de métodos de diferenças finitas àqueles que usam as diferenças finitas nas direções determinadas por uma rede retangular, e de métodos das características àqueles que usam as diferenças finitas ao longo das direções características.

CAPÍTULO III

INJEÇÃO DE CORRENTE POR UM CONTATO ÔHMICO EM UM ISOLANTE SUBMETIDO A UMA D.D.P. CONSTANTE

3.1. *Introdução*

Este problema foi resolvido pela primeira vez em 1962 por A. Many e G. Rakavy [5] com solução analítica usando o método das características para o caso de isolante perfeito, isto é, sem armadilhas, e solução numérica usando o método das diferenças finitas, para o caso de isolante com armadilhas. Posteriormente (1975), L. Nunes Oliveira e G. F. Leal Ferreira [13] apresentaram expressões explícitas para a densidade volumétrica de cargas como função do tempo e da posição, o que o primeiro artigo não tem. Na verdade a solução analítica só existe até o instante $t = 1.514$ (nas unidades adimensionais que serão apresentadas posteriormente), após o que a solução é numérica, consistindo na resolução de um sistema de equações diferenciais ordinárias, a qual também é limitada até $t = 2.847$.

Nossa intenção original, ao resolver este problema, era somente testar os métodos numéricos, mas resultou em mais do que isso: no caso de isolante com armadilhas, nossa solução é melhor do que aquela apresentada na referência [5] pois usamos o método das características enquanto lá se emprega o das diferenças finitas (a referência [13] só trata do caso de isolante perfeito).

Sendo este o primeiro dos quatro problemas resolvidos nesta tese, pretendemos apresentar os cálculos com bastante cuidado pressupondo que, se este for bem entendido, os outros

poderão ser menos minuciosos.

3.2. *Colocação do Problema*

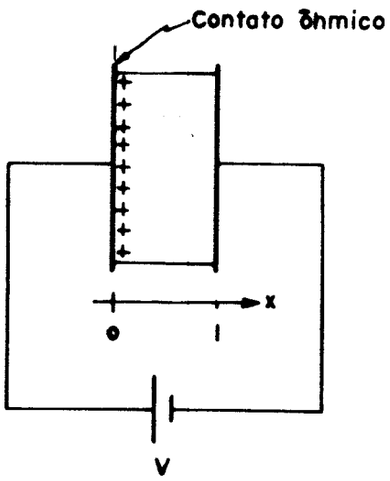

Figura 3.1

A situação física considerada neste problema está esquematizada na figura 3.1: uma amostra de isolante com um contato injetor ôhmico em $x = 0$ (o que significa que $x = 0$ é um reservatório infinito de portadores disponíveis para injeção) está submetida a uma d.d.p. constante V, o que impõe as seguintes condições de contorno:

$$\rho'(0,t') = \infty \quad \text{ou} \quad E'(0,t') = 0, \quad t' \geq 0$$

$$\int_0^l E'(x',t')dx' = V = \text{cte.}, \quad t' \geq 0 \qquad (3.2.1)$$

$$\rho'_{t'}(0,0) = 0 \qquad (3.2.2)$$

(o campo elétrico se anula em $x = 0$ pois, mesmo com a densidade de cargas infinitas, a corrente de condução é finita).

O isolante está inicialmente descarregado e a voltagem é aplicada no instante $t' = 0$ quando, então, a carga em $x' = 0$ começa a ser injetada. Neste instante, embora a voltagem já esteja aplicada, nenhuma carga entrou ainda no isolante, de maneira que podemos escrever

$$E'(x',0) = \frac{V}{l}, \quad x'>0 \tag{3.2.3}$$

$$\rho'(x',0) = \rho'_t(x',0) = 0, \quad x'>0 \tag{3.2.4}$$

Lembrando que $E'(0,0) = 0$ vê-se que, no instante inicial, há um plano de cargas com densidade superficial $\varepsilon V/l$ em $x' = 0$, o qual é responsável pela descontinuidade do campo elétrico. Esta carga superficial dá origem a uma distribuição de carga livre (tipo "caixa", isto é, uniforme, no caso de isolante perfeito) que sempre precede a nuvem de carga espacial formada pelas cargas que são emitidas pelo eletrodo em tempos posteriores.

Para calcular a corrente inicial,

$$j'(0) = \frac{1}{l}\int_0^l \mu\rho'(x',0)E'(x',0)dx',$$

escrevemos a densidade volumétrica de carga em $t = 0$ como

$$\rho'(x',0) = \frac{\varepsilon V}{l}\delta(x'), \tag{3.2.5}$$

onde $\delta(x)$ é a função delta. Precisaremos, então, do campo elétrico sobre o plano de cargas, que pode ser obtido tirando-se a média entre os valores na frente (V/l) e atrás (zero) deste. Então

$$j'(0) = \frac{1}{l}\mu\left(\frac{\varepsilon V}{l}\right)\left(\frac{1}{2}\frac{V}{l}\right) = \frac{\mu\varepsilon V^2}{2l^3} \tag{3.2.6}$$

Como o potencial é constante, as grandezas em unidades reduzidas ou adimensionais mais adequadas para este problema são as que se relacionam com aquelas em unidades reais (as grandezas com linha estão em unidades reais e aquelas sem linha

em unidades adimensionais) por:

$$x = \frac{x'}{l}\,, \quad E = \frac{E'}{Vl}\,, \quad t = \frac{t'}{l^2/\mu V}\,, \quad \rho = \frac{\rho'}{\varepsilon V/l^2}\,, \quad j = \frac{j'}{\mu\varepsilon V^2/l^3} \qquad (3.2.4)$$

onde V é o potencial aplicado e l a espessura da amostra, ambos em unidades reais. De agora em diante, neste capítulo, usaremos todas as equações na forma adimensional.

Nestas unidades, as condições de contorno e iniciais ficam:

$$\rho(0,t) = \infty \quad \text{ou} \quad E(0,t) = 0, \quad t \geq 0$$

$$\int_0^1 E(x,t)dx = 1, \quad t \geq 0 \qquad (3.2.1')$$

$$\rho_t(0,0) = 0 \qquad (3.2.2')$$

$$E(x,0) = 1, \quad x > 0 \qquad (3.2.3')$$

$$\rho_t(x,0) = \rho(x,0) = 0, \quad x > 0 \qquad (3.2.4')$$

$$j(0) = \frac{1}{2} \qquad (3.2.6')$$

A condição $\int_0^1 E dx = 1$ (ou $\int_0^l E'dx' = V$) é garantida nos programas, calculando-se a cada passo (incremento Δt) esta integral e dividindo os valores de E por este resultado. Tanto esta integral quanto a da corrente (quando necessária) foi calculada usando a regra do trapézio nos cálculos com o método das características e a regra de Simpson naqueles com diferenças finitas (apêndice A, eq. (A.1) e (A.2), respectivamente).

Como na referência [5], consideraremos os casos de isolante perfeito, isto é, sem armadilhas, e isolante com um nível discreto de armadilhas.

3.3. *Isolante Perfeito*

3.3.1. *Equações*

Sendo $\rho_t = 0$, as equações (1.2.1'), (1.2.2'), (1.2.6') e (1.2.4') se simplificam para:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \rho \tag{3.3.1}$$

$$\frac{\partial i_c}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{3.3.2}$$

$$j(t) = i_c + \frac{\partial E}{\partial t} \tag{3.3.3}$$

$$i_c = \rho E \tag{3.3.4}$$

A expressão para a corrente, eq. (1.2.12'), neste caso em que $\rho_t = 0$ e $E(0,t) = 0$, dá simplesmente

$$j = \frac{E^2(1,t)}{2} \tag{3.3.5}$$

Assim, para calcular a corrente, precisamos apenas do campo elétrico; como já vimos é fácil eliminar ρ do sistema de equações acima, trabalhando apenas com E:

$$E(x,t)\frac{\partial}{\partial x}E(x,t) + \frac{\partial}{\partial t}E(x,t) = j(t) \tag{3.3.6}$$

Esta equação para E(x,t) já está na forma normal. Podemos escrevê-la como:

$$\frac{d}{dt}E(x(t),t) = j(t); \quad j(t) = \frac{E^2(1,t)}{2} \tag{3.3.7}$$

com

$$\frac{d}{dt}x(t) = E(x(t),t) \tag{3.3.8}$$

A forma normal para o sistema, sem eliminar ρ, é

$$\frac{d}{dt}E(x(t),t) = j(t) \tag{3.3.9}$$

$$\frac{d}{dt}\rho(x(t),t) = -\rho^2(x(t),t) \tag{3.3.10}$$

$$\frac{d}{dt}x(t) = E(x(t),t) \qquad (3.3.11)$$

Estes dois sistemas, eq. (3.3.7) e (3.3.8) e eq. (3.3.9), (3.3.10) e (3.3.11) são ordinários, pois todas as derivadas que aparecem neles estão ao longo da mesma direção (dada por dx/dt = E), de modo que podemos empregar os métodos usuais de integração de sistemas de equações diferenciais ordinárias.

Devido ao fato de $\rho(0,t)$ ser infinita, não é possível integrar a eq. (3.3.10) na forma como está. Usamos, então, uma função auxiliar $u(x,t) = 1/\rho(x,t)$, com o que a eq. (3.3.10) é substituída por

$$\frac{du}{dt} = 1 \qquad (3.3.12)$$

cuja condição de contorno é

$$u(0,t) = 0 \qquad (3.3.13)$$

De agora em diante, neste capítulo, sempre que nos referirmos à integração de ρ estará implícito que, para isso, foi usada a função $u(x,t)$ a partir da qual ρ é calculada por $\rho = 1/u$.

3.3.2. *Resultados das Integrações Numéricas com o Método das Características*

Podemos separar as linhas características, ou linhas de corrente, em dois grupos: as que foram emitidas de x = 0 no instante inicial (que constituem a distribuição de carga espacial tipo "caixa" a que nos referimos antes) e as que foram emitidas, também de x = 0, em tempos posteriores (que constituem a "nuvem" de carga espacial). Rigorosamente, deveríamos também falar de um terceiro tipo: o das linhas que nascem em x>0 no instante inicial; porém elas não são usadas pois não levam consigo nenhuma carga, ou seja, $\rho = 0$ sobre

elas. Estes três conjuntos de linhas cobrem totalmente o plano x-t na região $x>0$ e $t\geq 0$, mas para o cálculo numérico este "contínuo" precisa ser discretizado: acompanhamos apenas algumas das linhas emitidas de $x = 0$ em $t = 0$, cujos campos no instante da emissão variam de 1 (ou V/l em unidades reais) até 0, e as linhas que nascem em $x = 0$ a cada incremento do tempo usado na integração numérica.

Para que pudéssemos acompanhar as linhas, elas receberam rótulos numéricos: a linha de número zero representa a primeira linha da "caixa" de carga espacial, isto é, aquela que foi emitida de $x = 0$ em $t = 0$ com campo unitário; a linha de número ME (ver apêndice B) representa a última da "caixa" de carga espacial, isto é, aquela que foi emitida de $x = 0$ em $t = 0$ com campo nulo; entre elas estão as linhas emitidas com campos entre 1 e 0: o campo com que a linha de rótulo K foi emitida é escrito como

$$E_K = 1 - \frac{K}{ME} \qquad (3.3.14)$$

Depois destas, vêm aquelas linhas emitidas de $x = 0$ em $t>0$: a linha de número $M = ME + J$ é a que foi emitida no instante $t_j = J\Delta t$ (Δt é o incremento). Observe-se que, tanto a última linha da "caixa" de carga espacial quanto estas, são emitidas com campo nulo e, consequentemente, com velocidade nula já que $\frac{dx}{dt} = \mu E$. Mas, porque tem corrente, a aceleração não se anula:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{d}{dt}x(t)\right) = \frac{d}{dt}\left(\mu E(x(t),t)\right) = \mu\frac{d}{dt}E(x(t),t) = \mu j(t) \qquad (3.3.15)$$

A figura 3.2 mostra algumas das linhas que foram usadas na integração numérica do sistema de eq. (3.3.7) e (3.3.8) (usando o método explicado posteriormente ao qual chamamos de RK quarta ordem). Para a construção desta figura usamos, na verdade, 201

linhas da "caixa" de carga espacial (ME = 200) e Δt = 0.005, o que significa que, entre cada linha marcada pelo campo de emissão, que aparece na figura, usamos 40 outras linhas e, entre cada uma rotulada pelo tempo de emissão, 50 outras linhas. Isto é, as linhas marcadas com E = 1.0, 0.8, 0.6, 0.4, 0.2 e 0.0 têm K = 0, 40, 80, 120, 160 e 200, respectivamente, e aquelas marcadas por t = 0.25, 0.50, 0.75,...,3.0 têm K = 250, 300, 350, ..., 800, respectivamente.

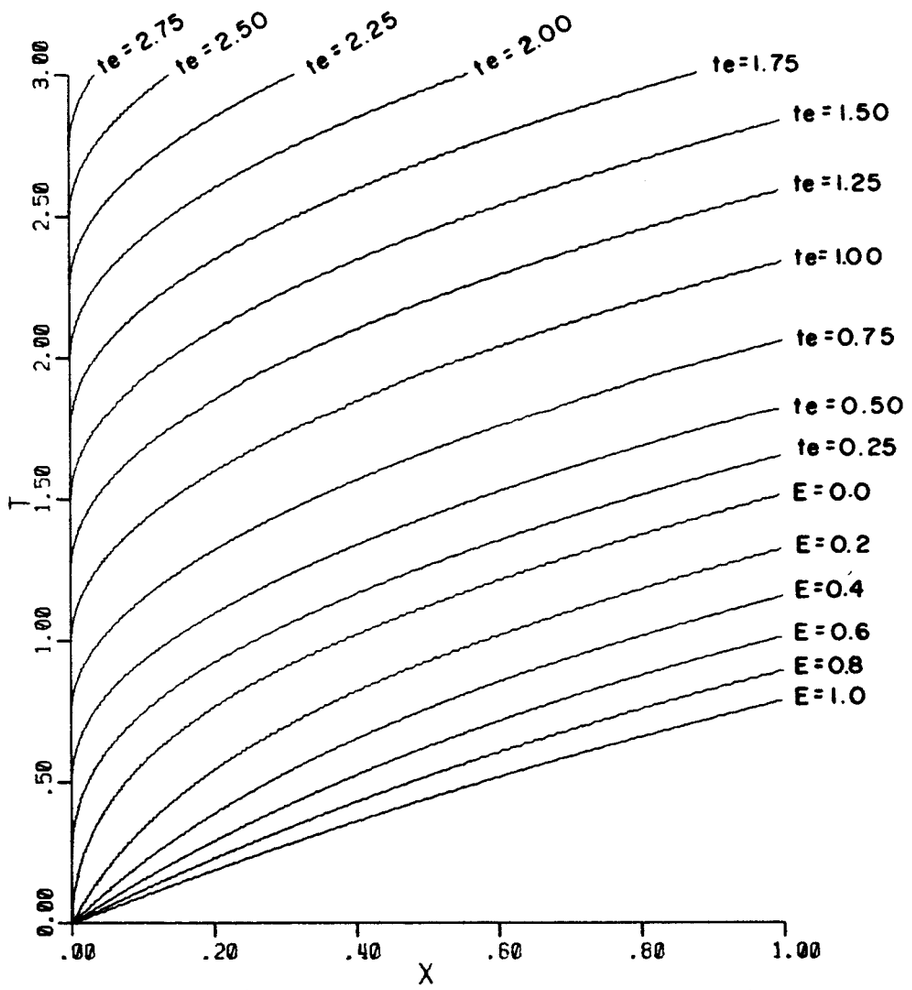

Figura 3.2. Linhas características para o caso de isolante sem armadilhas. E: campo elétrico, que rotula as linhas emitidas no instante inicial, t = 0. t_e: tempo de emissão, que rotula as linhas emitidas em t>0 com E = 0. Método RK quarta ordem, $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$, Δt = 0.005, ME = 200.

Para fazer a integração numérica com o método das características (lembrando sempre que as derivadas estão ao longo das linhas características dadas por dx/dt = E) usamos:

a) o procedimento indicado na seção 2.2.2, eq. (2.2.18) e (2.2.20) que é o método de Euler, e que corresponde a fazer:

$$\frac{E_{novo} - E_{velho}}{\Delta t} = j_{velha} \qquad (3.3.16)$$

$$\frac{x_{novo} - x_{velho}}{\Delta t} = E_{velho} \qquad (3.3.17)$$

b) o mesmo procedimento com o melhoramento sugerido no final desta mesma seção, isto é, o campo calculado como em (a) mas, aproveitando este resultado, x_{novo} é calculado por

$$\frac{x_{novo} - x_{velho}}{\Delta t} = \frac{E_{velho} + E_{novo}}{2} \qquad (3.3.18)$$

c) fórmulas de Runge-Kutta de quarta ordem (apêndice A, eq. A.4);

d) uma subrotina da biblioteca de programa da IMSL (International Mathematical and Statistical Libraries), chamada DVERK, que usa fórmulas de Runge-Kutta de quinta ou sexta ordem, dependendo da precisão requerida.

Para identificar cada um destes procedimentos, chamaremos o primeiro de Euler, o segundo de "Euler" (com aspas), o terceiro de RK quarta ordem e o quarto de RK DVERK.

Para cada um destes procedimentos temos ainda duas opções: calcular a corrente usando $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$ e o sistema de eq.(3.3.7) e (3.3.8) para calcular x e E, ou usar $j = \int_0^1 \rho E dx$ em cujo caso precisamos, necessariamente, integrar a equação para ρ, isto é, a eq. (3.3.10) ou, equivalentemente, a eq. (3.3.12). Quando se usa poucas linhas no cálculo numérico (ME pequeno ou Δt grande ou ambos), esta segunda maneira, apesar de mais demorada, dá resultados melhores. Isto acontece pelo seguinte

motivo: até o instante t_1, em que a linha de rótulo zero (que é a linha emitida de x = 0 em t = 0 com campo máximo) chega no eletrodo de saída, E(1,t) é igual ao campo desta linha. Mas para tempos posteriores, $t>t_1$, precisamos fazer extrapolação para calculá-lo pois, das linhas que estamos acompanhando e, por conseguinte, calculando o campo, não ocorre necessariamente que uma delas esteja exatamente em x = 1 no instante em que queremos a corrente; e a extrapolação só é boa quando os pontos estão próximos. Fizemos o cálculo tanto com extrapolação linear (usando as duas linhas mais próximas de x = 1), quanto com parabólica (usando as três linhas mais próximas de x = 1), os resultados tendo sido muito parecidos. Quando usamos $j = \int_0^1 \rho E dx$, a integral precisa ser calculada numericamente e embora o cálculo numérico da integral também seja melhor quando se tem mais pontos, este efeito não é tão acentuado quanto na extrapolação.

Todas as figuras a seguir contêm a curva exata como referência para as numéricas. Ela foi obtida de expressões analíticas até o instante $t_2 = 1.514$ (que é o instante em que a última linha da "caixa" de carga espacial chega em x = 1) e da integração de um sistema de equações diferenciais ordinárias de t = 1.514 até t = 2.847 ([5] e [13]). Para tempos maiores do que este não é possível calcular a corrente exatamente.

Pode-se explicar a forma da curva de corrente em função do tempo com base em argumentações físicas [5]: já foi colocado (seção 3.2, eq. 3.2.6) que a corrente inicial é dada por $\frac{\mu\varepsilon V^2}{2l^3}$ (a qual, nas unidades reduzidas que estamos usando dá $\frac{1}{2}$). Este valor resulta do fato de que, no instante inicial, a carga injetada na amostra pelo contato ôhmico é apenas aquela necessária para manter nulo o campo elétrico em x=0 após a aplicação da voltagem. Para t>0, mais carga é injetada,

penetrando na amostra, e a corrente aumenta. Este processo continua até que a frente de cargas atinge o eletrodo em $x=1$, quando, então, a amostra contém mais carga do que no estado estacionário, devido ao centróide de cargas estar mais próximo de $x=1$ em $t=t_1$ do que no estado estacionário (a carga total na amostra pode ser obtida da integração da equação de Poisson usando a condição $\int_0^l E dx = V$: $Q(t) = V\left[\frac{1}{\varepsilon A}\left(1 - \frac{\langle x(t)\rangle}{l}\right)\right]^{-1}$, onde $\langle x(t)\rangle = \frac{\int_0^l x\rho dx}{\int_0^l \rho dx}$ é o centróide de cargas). Como em $t=t_1$ a amostra contém carga demais, para tempos maiores do que este a distribuição de cargas relaxa para seu valor estacionário saindo mais carga por $x=1$ do que entrando em $x=0$ e a corrente decai abaixo do seu valor estacionário ($j_{est} = 9/8 = 1.125$) fazendo com que em $t \approx 2t_1$ haja um pouco menos de carga na amostra do que no estado estacionário. A corrente tem um comportamento oscilatório com amplitude fortemente amortecida. Schilling e Schachter [14] fizeram um estudo quantitativo destas oscilações usando um esquema de perturbação aplicada à solução do estado estacionário.

As figuras 3.3 e 3.4 mostram a corrente calculada com $\frac{E^2(1,t)}{2}$ com $\Delta t = 0.01$, 0.05 e 0.1 e ME = 200, a 3.3 usando "Euler" e a 3.4 usando RK quarta ordem (preferimos usar este do que o RK DVERK pois nesta subrotina o incremento para a integração numérica do sistema não fica sob o controle do usuário, embora ainda controlemos as linhas que nascem). A figura 3.5 mostra a corrente calculada com $\int_0^1 \rho E dx$ para $\Delta t = 0.1$ (que no caso anterior já estava ruim) para o "Euler" e o RK quarta ordem, confirmando o que foi dito no parágrafo anterior. Finalmente, a figura 3.6 mostra um exemplo em que o número de linhas da "caixa" de carga espacial é pequeno (ME = 10): temos, nela, a corrente calculada das duas formas e os procedimentos "Euler" e RK quarta ordem. Novamente a corrente calculada com a

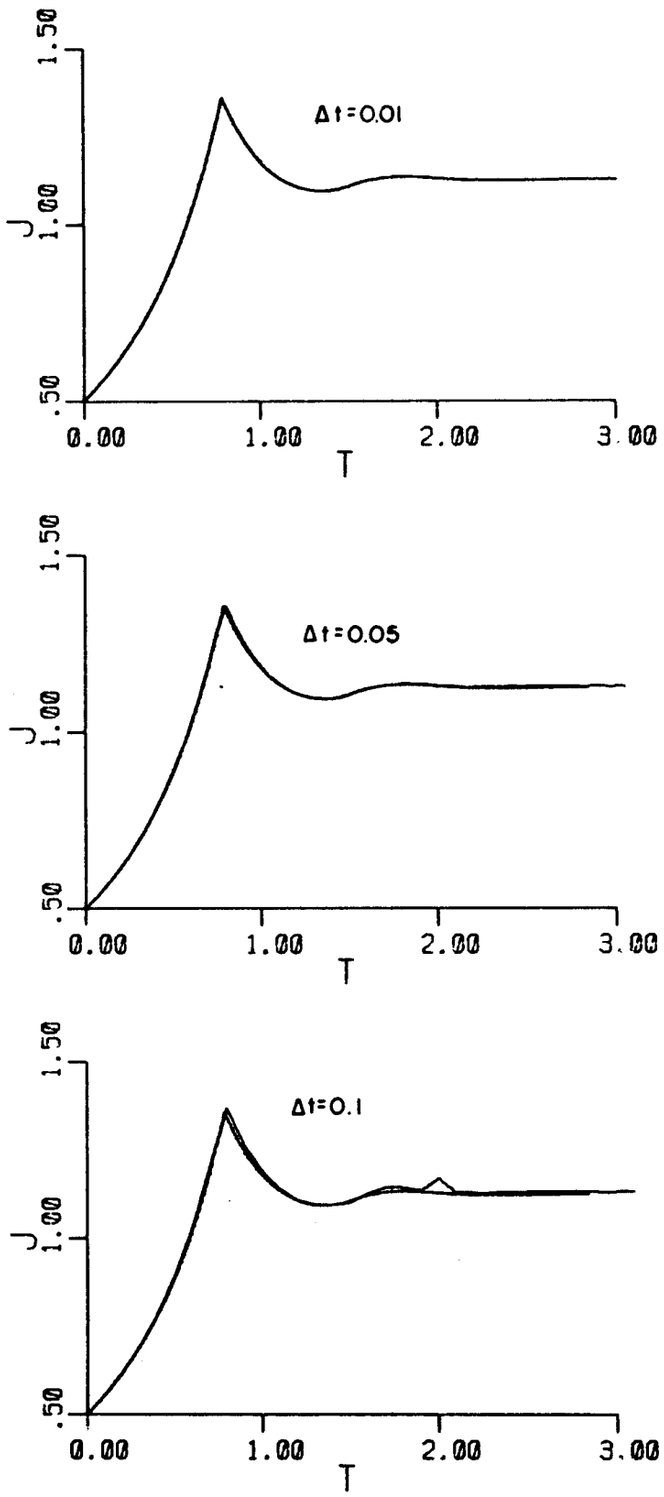

Figura 3.3. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das características - "Euler". $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$, ME = 200.

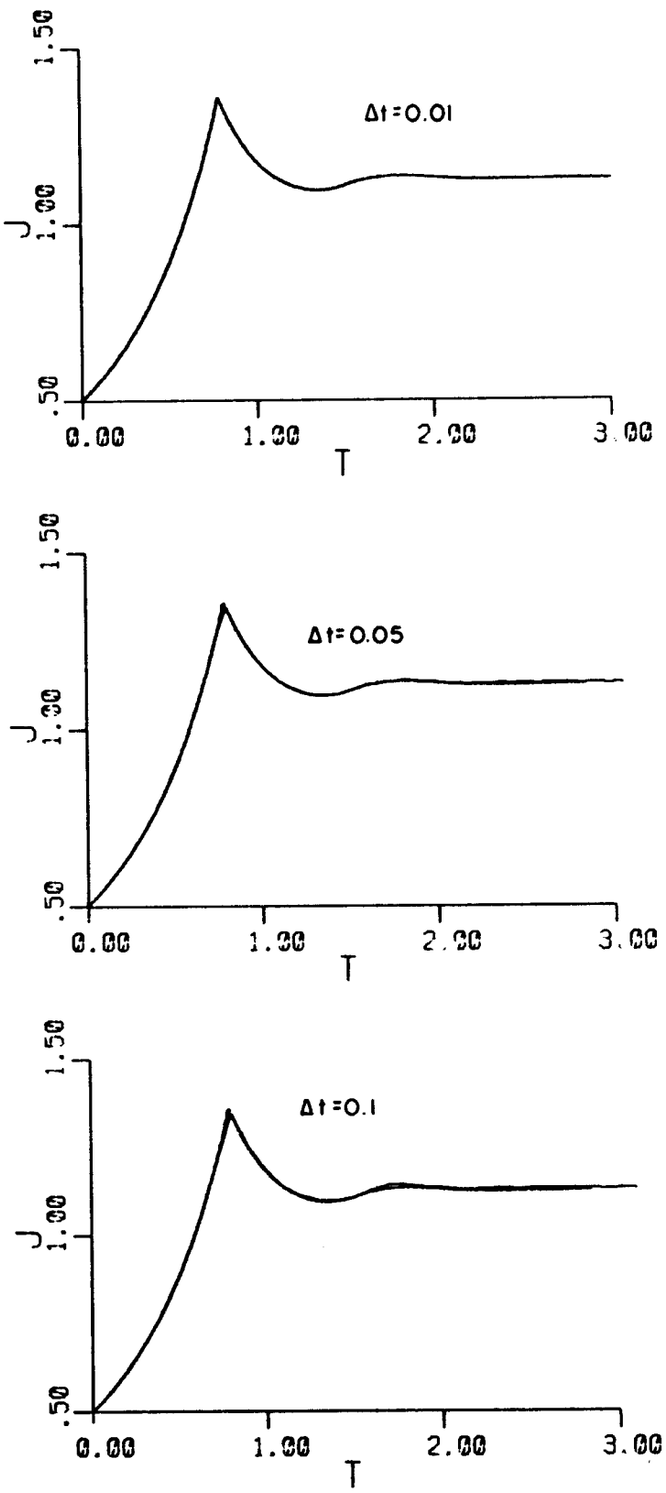

Figura 3.4. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das características - RK quarta ordem. $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$, ME = 200.

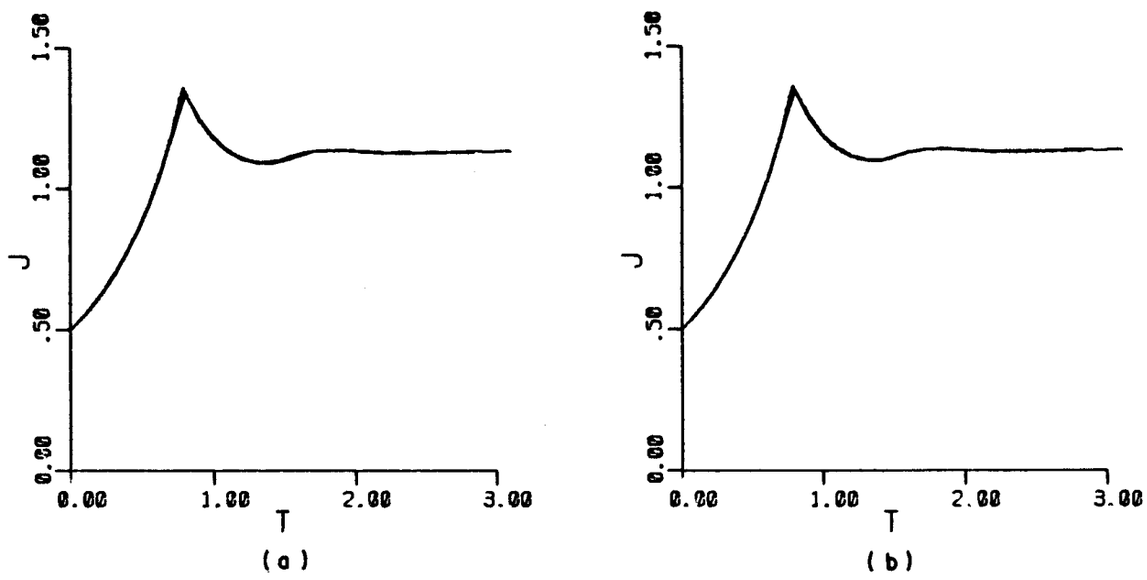

Figura 3.5. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das características - (a) "Euler", (b) RK quarta ordem. $j = \int_0^i \rho E dx$, $\Delta t = 0.1$, $ME = 200$.

integral dá os melhores resultados.

Obviamente pode-se usar incrementos maiores com Runge-Kutta do que com Euler. Vê-se nas figuras 3.3 e 3.4, feitas com ME = 200 e diferentes Δt, que, aproximadamente até o tempo de trânsito da última linha da "caixa" de carga espacial, $t_2 = 1.514$, o Runge-Kutta ainda dá bons resultados com $\Delta t = 0.1$ (a diferença que se vê entre a curva exata e a dos Runge-Kutta não é devida a erro de cálculo mas sim ao fato de que o pico exato ocorre em $t_1 \simeq 0.787$ mas com o incremento de 0.1 só o podemos ver em $t = 0.8$), enquanto que no "Euler", o maior incremento que ainda deu bem foi $\Delta t = 0.01$. Como nestas figuras usamos $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$, mesmo o Runge-Kutta fica ruim depois de t_2 quando o Δt é grande, pelo motivo já explicado anteriormente.

Quando, porém, o número de linhas é grande é praticamente indiferente usar qualquer das duas formas, como se nota nas figuras 3.7.b, 3.8 e tabela I (falaremos sobre a figura 3.7.a

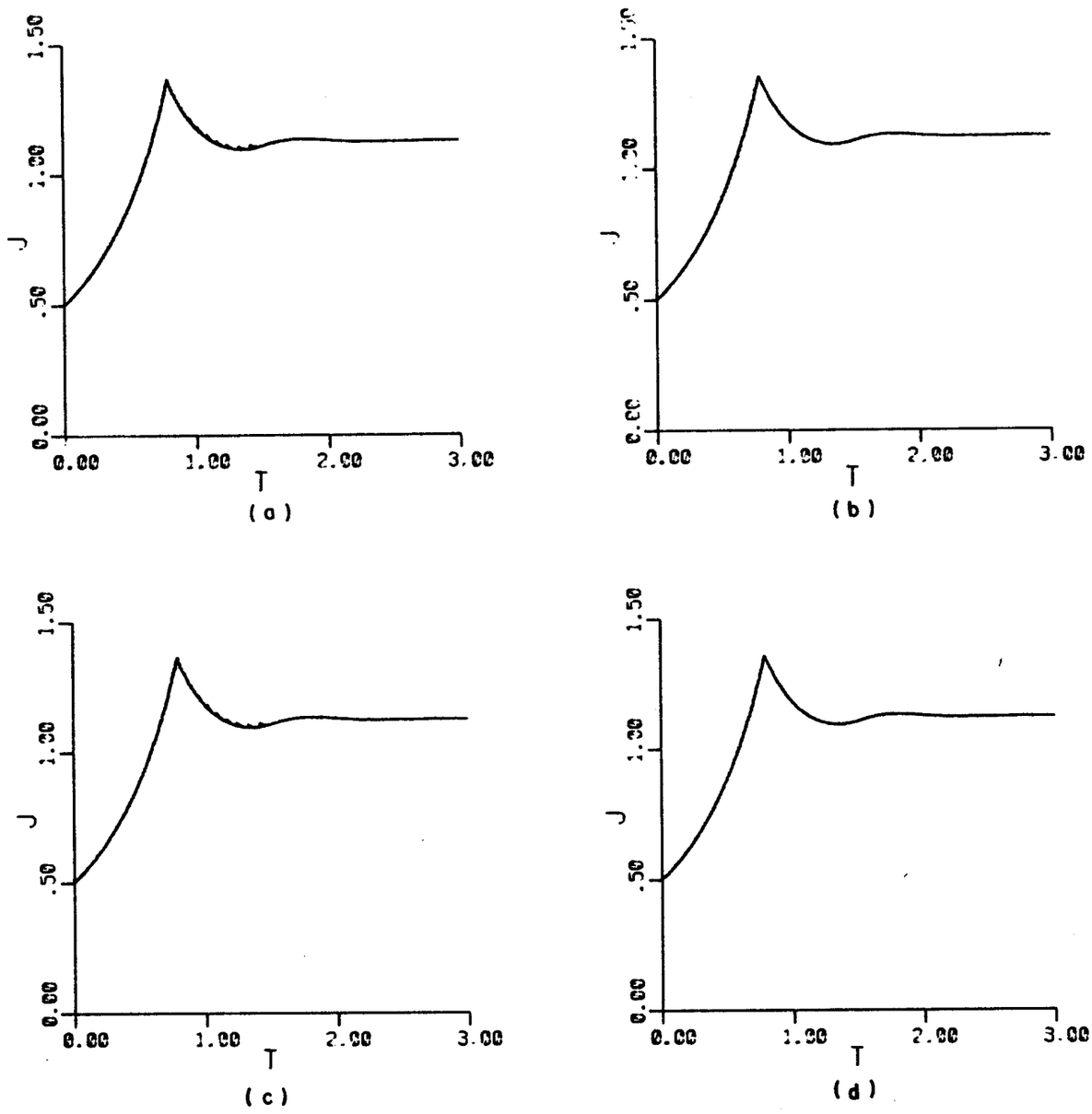

Figura 3.6. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das características - (a) "Euler" com $j=\frac{E^2(1,t)}{2}$, (b) "Euler" com $j=\int_0^1 \sigma E dx$, (c) RK quarta ordem com $j=\frac{E^2(1,t)}{2}$, (d) RK quarta ordem com $j=\int_0^1 \sigma E dx$. $\Delta t = 0.005$, ME = 10.

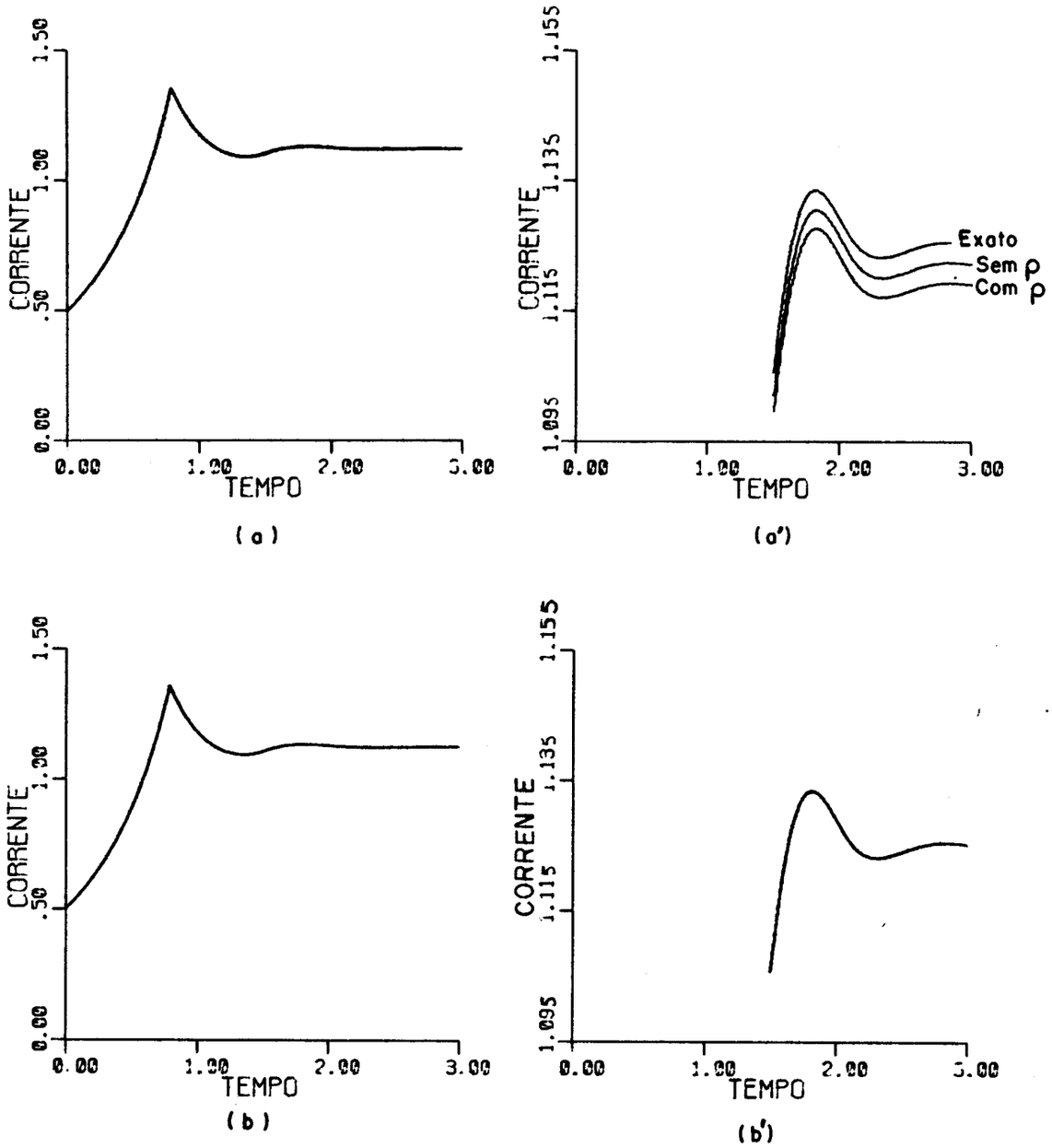

Figura 3.7. Comparação entre a corrente exata e aquelas calculadas numericamente com o método das características usando $j = \int_0^1 \rho E dx$ (com ρ) e $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$ (sem ρ). (a) Euler, (b) "Euler". Nas figuras (a') e (b') a escala da corrente foi aumentada de 25 vezes. $\Delta t = 0.005$, ME = 200.

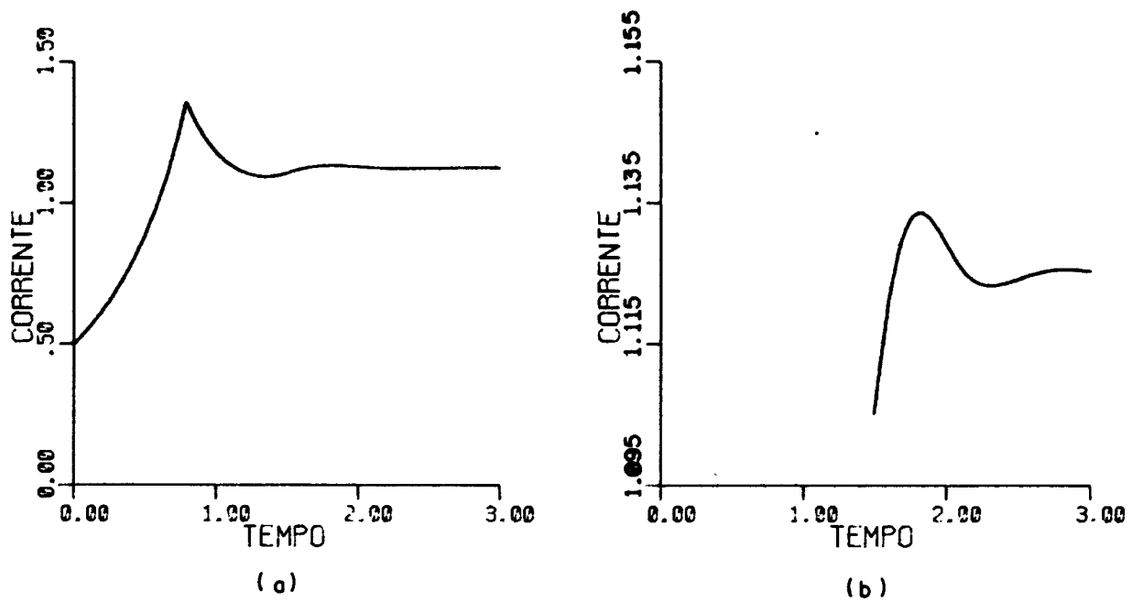

Figura 3.8. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das características - RK quarta ordem - usando $j = \int_0^1 \rho E dx$ e $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$. Na (b) a escala da corrente foi aumentada de 25 vezes em relação à (a).

posteriormente).

A tabela I mostra os valores do tempo e da corrente correspondentes ao pico para os procedimentos descritos anteriormente e vários valores do incremento Δt. O valor exato do tempo em que ocorre o pico é $t_1 = 2(1-e^{-1/2}) \simeq 0.78694$ e a corrente correspondente é $j(t_1) = e/2 \simeq 1.35914$ ([5] e [13]) mas, de acordo com o Δt usado, o valor de t_1 é arredondado. Para que se possa fazer comparações, a legenda da tabela contém os valores da corrente exata nestes valores arredondados.

Vê-se que os melhores resultados são aqueles com Runge-Kutta e $j = \int_0^1 \rho E dx$, e que com o número de linhas grande (ME = 200 e Δt = 0.001 ou 0.005) a diferença no valor da corrente no pico com $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$ ou $j = \int_0^1 \rho E dx$ está na quinta casa decimal para o Runge-Kutta e na terceira para o Euler, o que é imperceptível nos gráficos nas escalas que estamos usando. A tabela mostra também os tempos de CPU para rodar cada programa de t = 0 até t = 3.

TABELA I

Tempo e corrente no pico, corrente em t = 3.0 e tempo de CPU para diferentes procedimentos com o método das características (ME = 200)

Valores exatos nos tempos arredondados:

j(0.787) = 1.359044, j(0.79) = 1.355425, j(0.8) = 1.343644

MÉTODO	Δt	t_{pico}	j_{pico}	j(3.0)	t_{CPU}
Euler	0.001	0.787	1.358162	1.124588	3'50.3"
	0.005	0.790	1.355079	1.122121	0'13.2"
	0.01	0.79	1.354747	1.119033	0'05.1"
$j=\frac{E^2(1,t)}{2}$	0.05	0.80	1.334597	1.099080	0'01.5"
	0.1	0.8	1.288372	1.073995	0'01.2"
"Euler"	0.001	0.787	1.359350	1.125224	4'08.4"
	0.005	0.790	1.356753	1.125245	0'14.0"
	0.01	0.79	1.358077	1.125274	0'05.2"
$j=\frac{E^2(1,t)}{2}$	0.05	0.80	1.357143	1.128929	0'01.5"
	0.1	0.8	1.372059	1.131573	0'01.2"
"Euler"	0.001	0.787	1.358975	1.125228	4'34.4"
	0.005	0.790	1.354929	1.125229	0'15.2"
	0.01	0.79	1.354414	1.125242	0'05.7"
$j=\int_0^1 \rho E dx$	0.05	0.80	1.338632	1.127466	0'01.6"
	0.1	0.8	1.334060	1.129587	0'01.2"
RK quarta ordem	0.001	0.787	1.359096	1.125223	8'41.9"
	0.005	0.790	1.355469	1.125239	0'27.9"
	0.01	0.79	1.355507	1.125256	0'09.7"
$j=\frac{E^2(1,t)}{2}$	0.05	0.80	1.344723	1.128791	0'02.1"
	0.1	0.8	1.346350	1.131322	0'01.5"
RK quarta ordem	0.001	0.787	1.359069	1.125218	15'38.2"
	0.005	0.790	1.355448	1.125239	0'47.7"
	0.01	0.79	1.355449	1.125285	0'15.9"
$j=\int_0^1 \rho E dx$	0.05	0.80	1.343639	1.127632	0'02.9"
	0.1	0.8	1.343685	1.129709	0'01.9"
RK DVERK	0.001	0.787	1.359097	1.125220	43'13.8"
	0.005	0.790	1.355463	1.125237	2'14.9"
	0.01	0.79	1.355475	1.125257	1'54.1"
$j=\frac{E^2(1,t)}{2}$	0.05	0.80	1.343979	1.128980	0'31.6"
	0.1	0.8	1.344898	1.130772	0'16.4"

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS / USP
FÍSICA

Lembramos que este "Euler" a que nos referimos até agora é aquele melhorado, isto é, aquele em que $\frac{dx}{dt} = \frac{E_{velho} + E_{novo}}{2}$. A figura 3.7.a mostra o Euler tradicional, isto é, com $\frac{dx}{dt} = E_{velho}$: vê-se com bastante nitidez quando a escala da corrente é aumentada de 25 vezes que este não é tão bom. No entanto, a figura 3.7.b reforça o que foi visto até agora ou seja que o "Euler" é muito bom, quase tanto quanto o Runge-Kutta.

A seguir, mostramos os perfis de carga, isto é, os gráficos da densidade de carga em função da posição. Esta pode ser calculada a partir da integração da equação diferencial para ρ (na verdade para $u = 1/\rho$) ou a partir de $\rho = \frac{\partial E}{\partial x}$, a derivada feita numericamente. Na figura 3.9 estão os perfis de carga, calculados da primeira forma, nos instantes $t = 0.4$, $t = t_1 \simeq 0.787$, $t = 1.2$ e $t = t_2 \simeq 1.514$, onde t_1 e t_2 são, respectivamente, os instantes de chegada da primeira e da última linha da "caixa" de carga espacial. Nesta figura, cada gráfico tem duas curvas: uma exata e uma calculada com "Euler". Não mostramos as curvas correspondentes a estas calculadas com Runge-Kutta e com Euler, nem aquelas calculadas com $\rho = \frac{\partial E}{\partial x}$, por serem idênticas a estas. Mas, para confirmar o fato de que é melhor usar $\frac{dx}{dt} = \frac{E_{velho} + E_{novo}}{2}$, mostramos, em escala aumentada, um pedaço das curvas com Euler e com "Euler" para $t = 0.4$ e $t = 1.2$, figura 3.10. As curvas com a escala aumentada para o Runge-Kutta e para ρ calculado por $\frac{\partial E}{\partial x}$ são também graficamente idênticas àquelas para o "Euler" com $\rho = \frac{1}{u}$ e, portanto, muito boas.

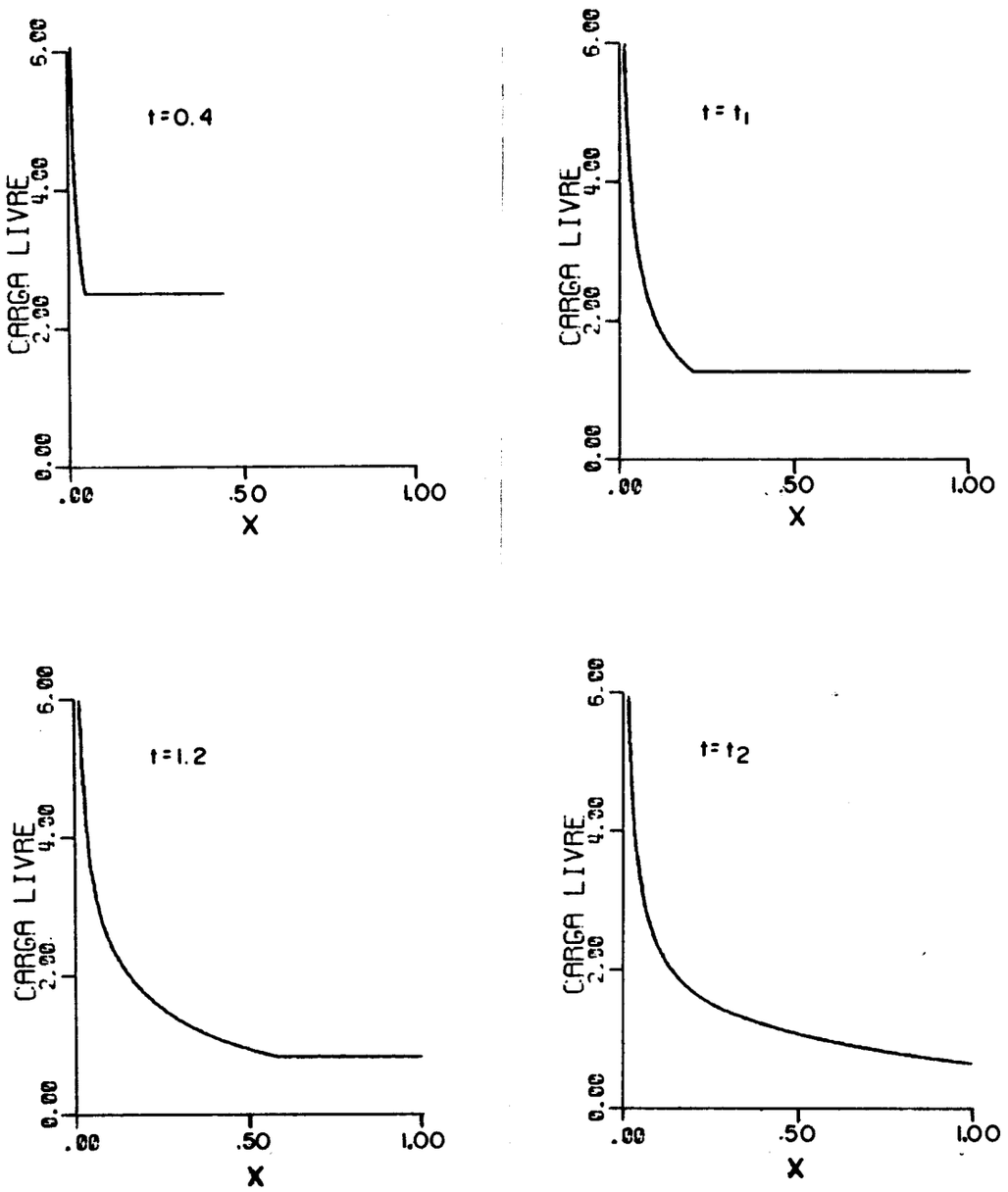

Figura 3.9. Comparação entre a densidade volumétrica de carga livre ρ exata com aquelas calculadas numericamente com o método das características - "Euler" - usando $j = \int_0^1 \rho E dx$ e $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$, sendo ρ, nos dois casos, calculada pela integração da equação diferencial para u ($u = \frac{1}{\rho}$). $\Delta t = 0.005$, $ME = 200$. Nos cálculos numéricos $t_1 = 0.79$ e $t_2 = 1.515$; no exato t_1 e t_2 têm seus valores exatos, ou seja, $t_1 = 0.7869...$ e $t_2 = 1.51377...$.

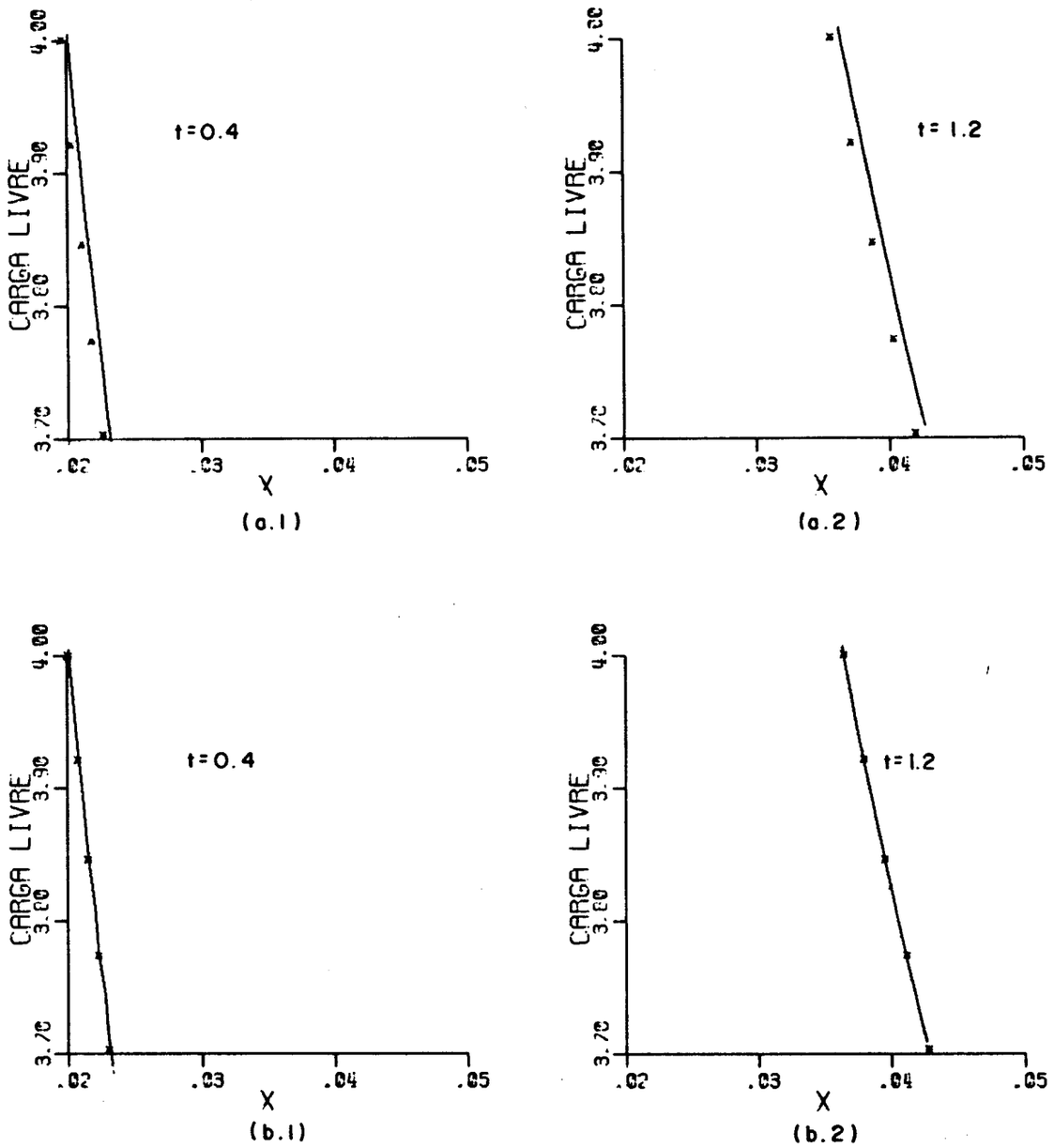

Figura 3.10. Comparação entre ρ exato (linhas contínuas) e aqueles calculados numericamente com o método das características (pontos) com a escala de ρ aumentada de 20 vezes a a escala de x aumentada de 40 vezes em relação às da Fig. 3.9. (a.1) e (a.2) Euler, (b.1) e (b.2) "Euler". $j=\frac{E^2(i,t)}{2}$, $\rho=\frac{1}{u}$. $\Delta t = 0.005$, ME = 200.

3.3.3. *Resultados das Integrações Numéricas com Métodos das Diferenças Finitas*

Montar um programa para resolver um problema usando métodos de diferenças finitas é, em geral, mais simples do que com o método das características, pois a rede de pontos para a integração numérica no primeiro caso é regular e fixada previamente, enquanto que no segundo caso ela é irregular e determinada pela própria solução do problema. Talvez seja por este motivo que, mesmo sendo melhores as soluções numéricas obtidas com o método das características do que com diferenças finitas, estes últimos ainda sejam largamente utilizados e, embora não tenhamos pesquisado muito sobre este assunto, percebemos que muito esforço tem sido feito com o objetivo de melhorá-los (ver, por exemplo, as referências [15], [16], [17] e as referências contidas nestes artigos). Por isso e também para fins de comparação com o método das características, não poderíamos deixar de empregar algumas de suas formas nas soluções dos nossos problemas.

Como na seção anterior, aqui também poderemos calcular a corrente por $\frac{E^2(1,t)}{2}$ ou por $\int_0^1 \rho E dx$. Mas como, agora, a rede de pontos é regular não será preciso fazer extrapolação para calcular E(1,t) e a integral será calculada usando a regra de Simpson (apêndice A, eq. (A.2)). Quando usarmos a integral, precisaremos do produto da densidade de carga (ρ) pelo campo elétrico (E) em x = 0, para o que usaremos

$$\rho(0,t)E(0,t) = j(t)$$

já que E(0,t) = 0 sempre e, portanto $\frac{d}{dt}E(0,t) = 0$.

A figura 2.1 mostra a rede de pontos usada em todos os problemas resolvidos com métodos de diferenças finitas. O primeiro índice do ponto corresponde à coordenada x e o segundo à coordenada t. Todas as funções são conhecidas em todos os

pontos da linha J = 0 (condições iniciais) e da coluna K = 0 (condições de contorno); a partir destes elas são calculadas nos outros pontos da rede da maneira como será descrita em cada sub-item desta seção.

3.3.3.1 - *Método das Diferenças Finitas Explícito - Euler*

Resolvemos o problema em questão com o método de diferenças finitas explícito, usando três formas diferentes para o sistema, todas, obviamente, equivalentes do ponto de vista analítico mas não necessariamente do numérico. Na seção 2.2.1, quando apresentamos os métodos de diferenças finitas, mostramos só a primeira forma, pois será ela que usaremos nos outros problemas por ser mais simples e porque os resultados obtidos com ela, quando não são melhores são, pelo menos, iguais aos obtidos com as outras duas.

As três formas que usamos para o sistema diferencial com as respectivas equações de diferenças e condições iniciais e de contorno foram:

(a)
$$\frac{\partial E}{\partial t} = j - E\frac{\partial E}{\partial x} \qquad (3.3.19)$$

$$\frac{E(K,J+1)-E(K,J)}{\Delta t} = j(J) - E(K,J)\left(\frac{E(K,J)-E(K-1,J)}{\Delta x}\right) \qquad (3.3.20)$$

$$E(K,0) = 1, \quad 1 \leq K \leq M$$
$$E(0,J) = 0, \quad J \geq 0 \qquad (3.3.21)$$
$$j(0) = 0.5$$

(b)
$$\frac{\partial E}{\partial t} = j - \rho E$$
$$\qquad (3.3.22)$$
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho E)$$

$$\frac{E(K,J+1)-E(K,J)}{\Delta t} = j(J) - \rho(K,J)E(K,J)$$

$$\frac{\rho(K,J+1)-\rho(K,J)}{\Delta t} = -\left(\frac{\rho(K,J)E(K,J)-\rho(K-1,J)E(K-1,J)}{\Delta x}\right) \qquad (3.3.23)$$

$$E(K,0) = 1, \quad 1 \leq K \leq M$$

$$\rho(1,0) = \frac{E(1,0)-E(0,0)}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x}$$

$$\rho(K,0) = 0, \quad 1 < K \leq M$$

$$j(0) = 0.5 \qquad (3.3.24)$$

$$E(0,J) = 0, \quad J \geq 0$$

$$\rho(0,J)E(0,J) = j(J), \quad J \geq 0$$

(c)
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho E)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \rho \qquad (3.3.25)$$

$$\frac{\rho(K,J+1)-\rho(K,J)}{\Delta t} = -\left(\frac{\rho(K,J)E(K,J)-\rho(K-1,J)E(K-1,J)}{\Delta x}\right)$$

$$\frac{E(K,J+1)-E(K-1,J+1)}{\Delta x} = \rho(K,J) \qquad (3.3.26)$$

$$\rho(1,0) = \frac{E(1,0)-E(0,0)}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x}$$

$$\rho(K,0) = 0, \quad 1 < K \leq M$$

$$j(0) = 0.5 \qquad (3.3.27)$$

$$E(0,J) = 0, \quad J \geq 0$$

$$\rho(0,J)E(0,J) = j(J), \quad J \geq 0$$

Observe-se que usamos somente diferenças para trás para as derivadas espaciais pois com diferenças centrais, de segunda ou quarta ordem (como na eq. (3.3.31)) a solução é instável e com diferenças para a frente a carga não avança.

O critério de estabilidade do método de diferenças finitas

explícito para equações hiperbólicas, apresentado na seção 2.2.1, eq.(2.2.14), aplicado a este problema é

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{1}{E_{máx}} \qquad (3.3.28)$$

Conhecemos a solução exata e sabemos que, para um instante t_0 qualquer, $E(x,t_0)$ é uma função de x monotonamente crescente para $0 \leq x \leq 1$ e, portanto, seu valor máximo é em $x = 1$; sabemos também que

$$j(t) = \frac{E^2(1,t)}{2}$$

e que

$$j_{máx} = \frac{e}{2},$$

onde "e" é a base dos logarítmos naturais. Assim, a estabilidade está garantida para

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{1}{\sqrt{e}} \simeq 0.6065 \qquad (3.3.29)$$

Apresentaremos, agora, os resultados obtidos com este método. Como fizemos na seção anterior, em todas as figuras colocamos a curva exata junto com aquela obtida com o método numérico a fim de facilitar a comparação dos dois.

A figura 3.11 mostra as curvas de corrente vs. tempo (corrente calculada por $\frac{E^2(1,t)}{2}$) para alguns valores de Δx e Δt, usando a forma (a) acima para o sistema. O valor máximo da corrente calculada com o método de diferenças finitas é sempre menor do que o exato; por isso as curvas ainda são estáveis para Δt um pouco maiores do que aqueles permitidos com o critério de estabilidade acima. Mostramos na tabela II, com o nome "Explícito Euler (a)", os valores do tempo e corrente correspondentes ao máximo, a corrente em $t = 3.0$ (para o qual o valor exato já é muito próximo da corrente estacionária, $j_{est} = 9/8 = 1.125$) e o tempo de CPU, os quais devem ser comparados com os da tabela I para o método das caracteríticas

e com os valores exatos indicados na sua legenda. Vê-se, tanto na figura quanto na tabela que, quanto maior a razão $\Delta t/\Delta x$ (obedecendo, obviamente, ao critério de estabilidade), mais o resultado numérico se aproxima do exato; isto se deve à difusão numérica produzida pelos métodos de diferenças finitas, que é

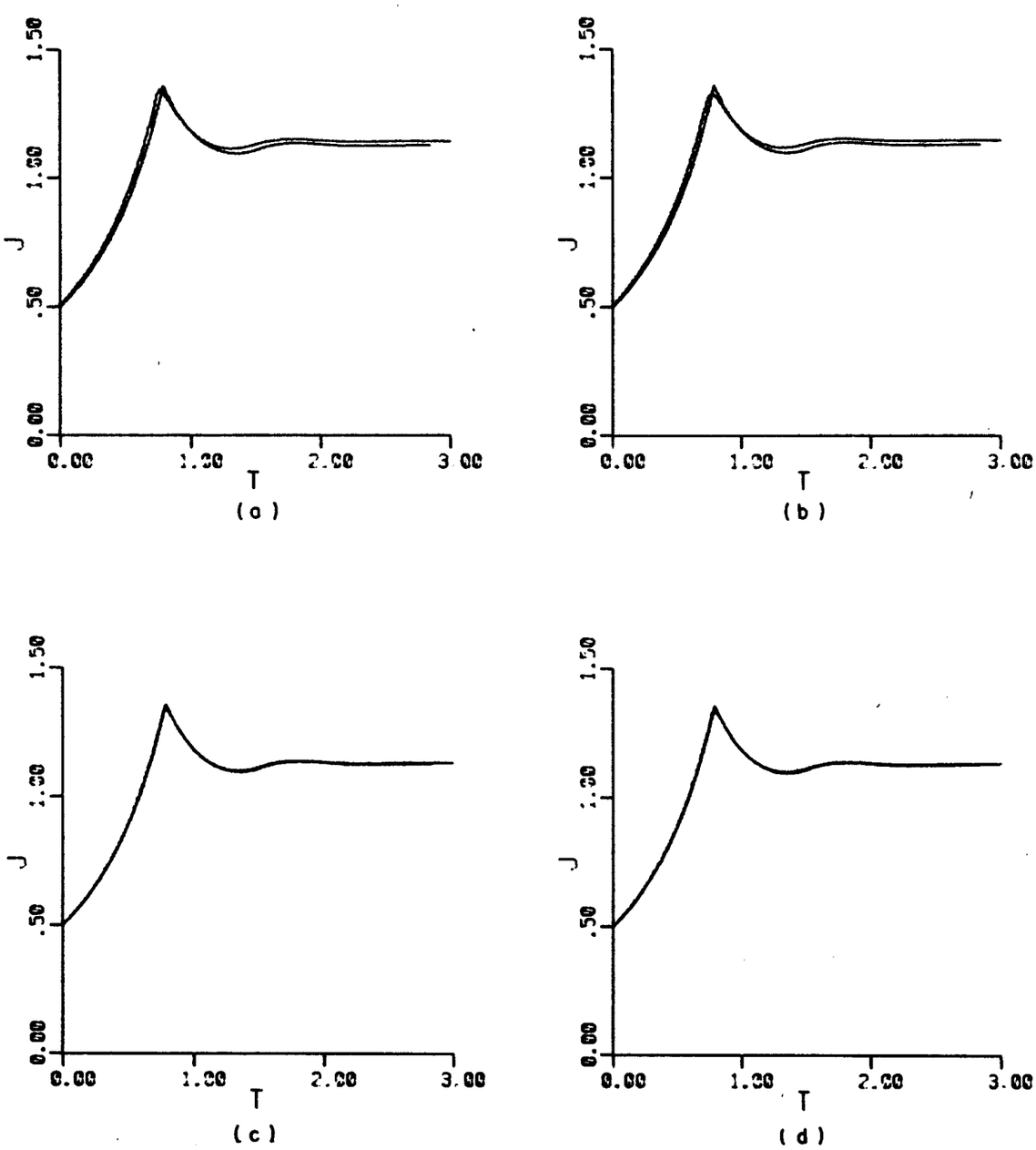

Figura 3.11. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das diferenças finitas explícito - Euler, forma (a) com $j=\frac{E^2(1,t)}{2}$. (a) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0034$; (b) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$; (c) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.00061$; (d) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0005$.

tanto maior quanto menor a razão $\Delta t/\Delta x$. As figuras 3.12 e 3.13 mostram os perfis de carga (ρ obtida da equação de Poisson, $\rho = \partial E/\partial x$, usando diferenças para trás) para os instantes 0.4, 0.787, 1.2, 1.514; percebe-se claramente a difusão a que nos referimos acima, a qual não ocorre no método das características.

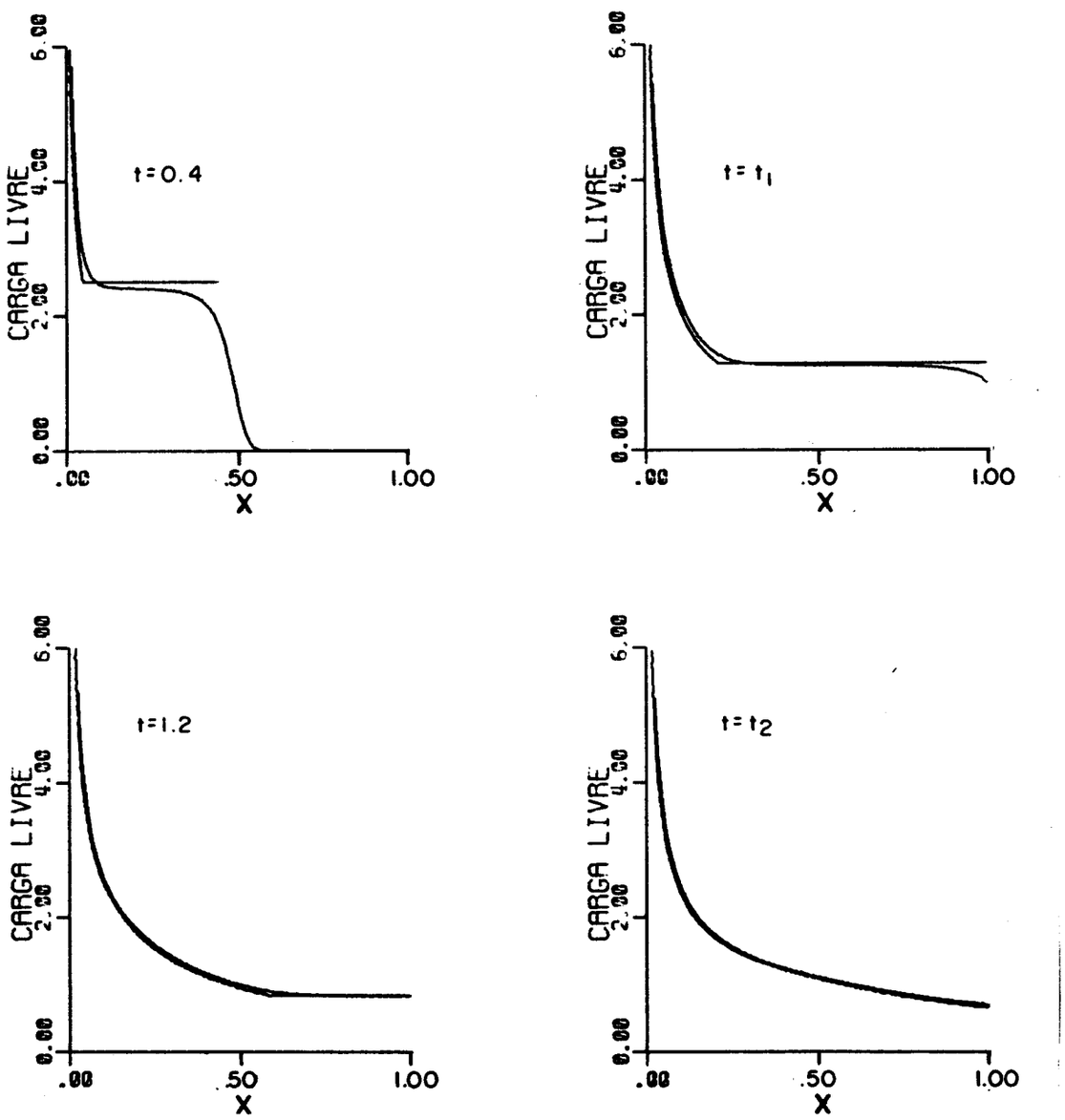

Figura 3.12. Comparação entre ρ exato e aquele calculado numericamente com o método das diferenças finitas explícito - Euler, forma (a) com $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$. $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$.

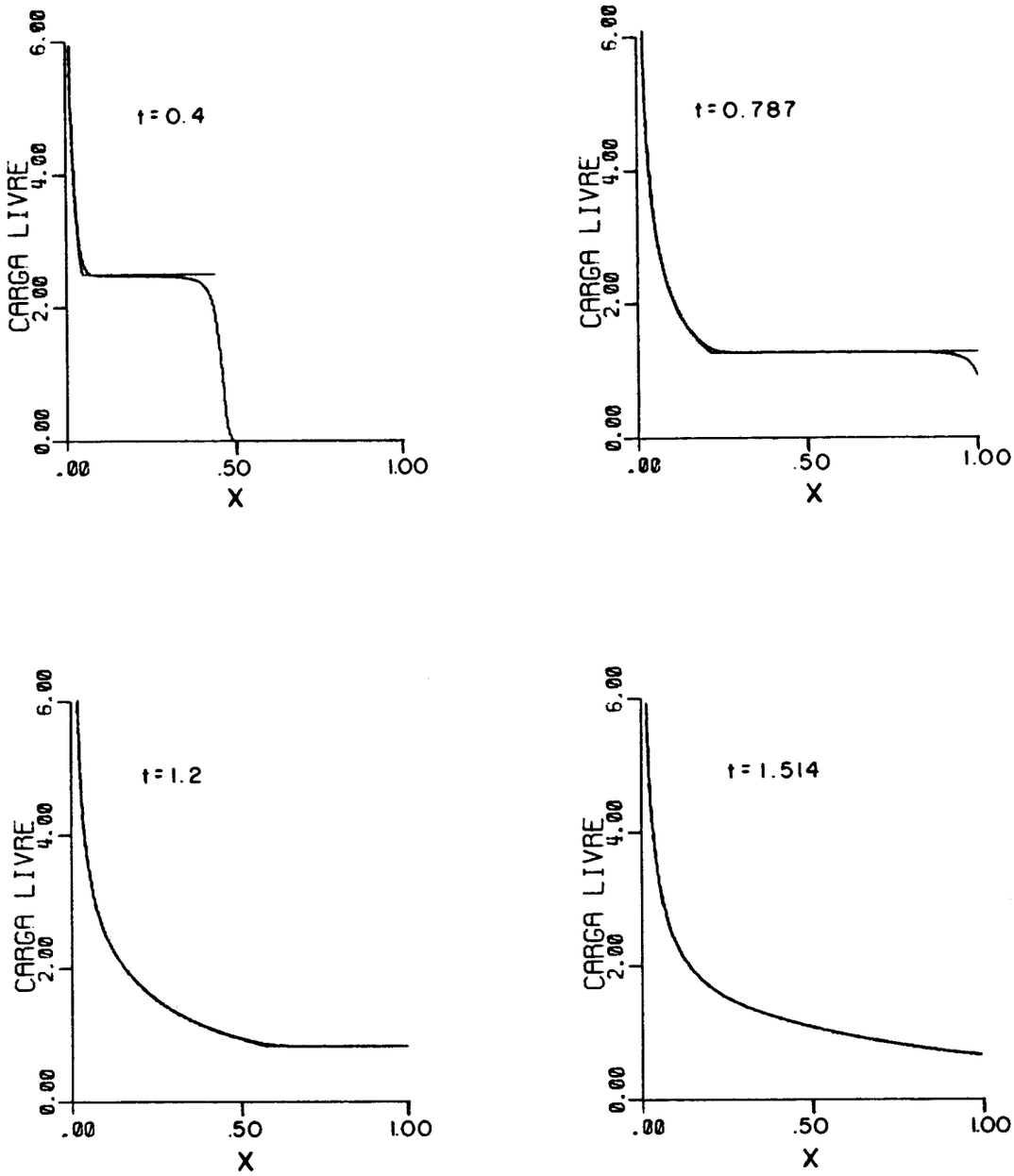

Figura 3.13. Comparação entre ρ exato e aquele calculado numericamente com o método das diferenças finitas explícito - Euler, forma (a) com $j = \frac{E^2(i,t)}{2}$. $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0005$.

As outras duas formas para o sistema, itens (b) e (c), dão curvas semelhantes àquelas da forma (a). Por isso não vamos mostrar as figuras correspondentes a elas, mas apenas alguns valores na tabela II com os nomes Explícito Euler (b) e (c). Chamamos a atenção para as condições iniciais destes dois itens, mais especificamente para o fato de termos considerado

$$\rho(1,0) = \frac{E(1,0)-E(0,0)}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x},$$

onde $\rho(1,0)$ é a densidade de cargas no ponto $x = \Delta x$ e $t = 0$ (no ítem (a) ela também é usada mas não explicitamente). A condição inicial exata para ρ está na seção 3.2: $\rho(0,0) = \infty$ e $\rho(x,0) = 0$, $x>0$, de maneira que poderia parecer mais natural, ou mais correto, considerar $\rho(1,0) = 0$; mas, fazendo assim, a corrente cresce muito lentamente significando que está entrando pouca carga, o que ocorre porque o computador não tem a informação de que havia uma densidade superficial de cargas em $x = 0$ no instante $t = 0$. Como a condição inicial não é a exata, devido à incapacidade de este método tratar a delta de cargas, as densidades calculadas nos primeiros passos não são boas, mas logo se ajeitam, o que pode ser comprovado na figura 3.14 em que a corrente foi calculada com $\int_0^1 \rho E dx$ (que usa ρ). Vê-se nas duas curvas desta figura que a corrente dá um pulo no início mas logo reproduz os resultados obtidos com a corrente calculada por $\frac{E^2(1,t)}{2}$ (figura 3.11).

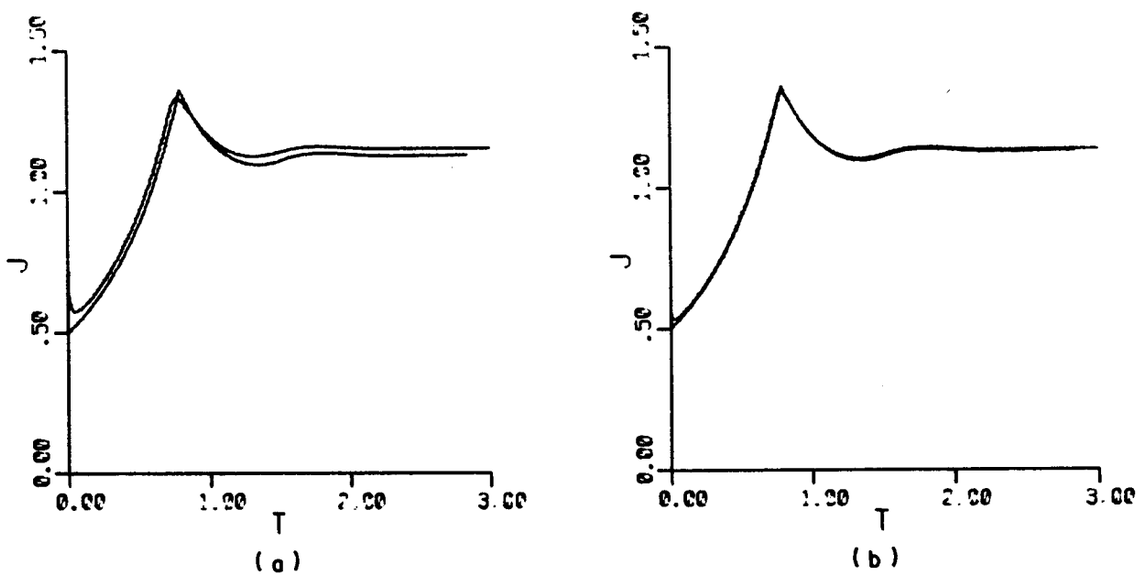

Figura 3.14. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das diferenças finitas explícito - Euler, forma (a) com $j = \int_0^1 \rho E dx$. (a) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$; (b) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0005$.

3.3.3.2. *Método das Diferenças Finitas Explícito - Runge-Kutta Quarta Ordem para a Variável Tempo*

Para aplicar as fórmulas de Runge-Kutta, tratamos o sistema (forma (a) da seção anterior) como se fosse ordinário na variável temporal, escrevendo as derivadas espaciais com diferenças finitas de duas maneiras diferentes:

(a) $$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_k} = \frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{\Delta x} \qquad (3.3.30)$$

que é a diferença para trás e tem precisão de primeira ordem em Δx.

(b) $$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_k} = \frac{f(x_{k-2})-8f(x_{k-1})+8f(x_{k+1})-f(x_{k+2})}{12\Delta x} \qquad (3.3.31)$$

que é central e tem precisão de quarta ordem em Δx.

A primeira não resultou melhor do que o método de Euler para a integração temporal (seção anterior), a não ser pelo fato de que pudemos usar $\Delta t/\Delta x$ maiores do que lá, embora não

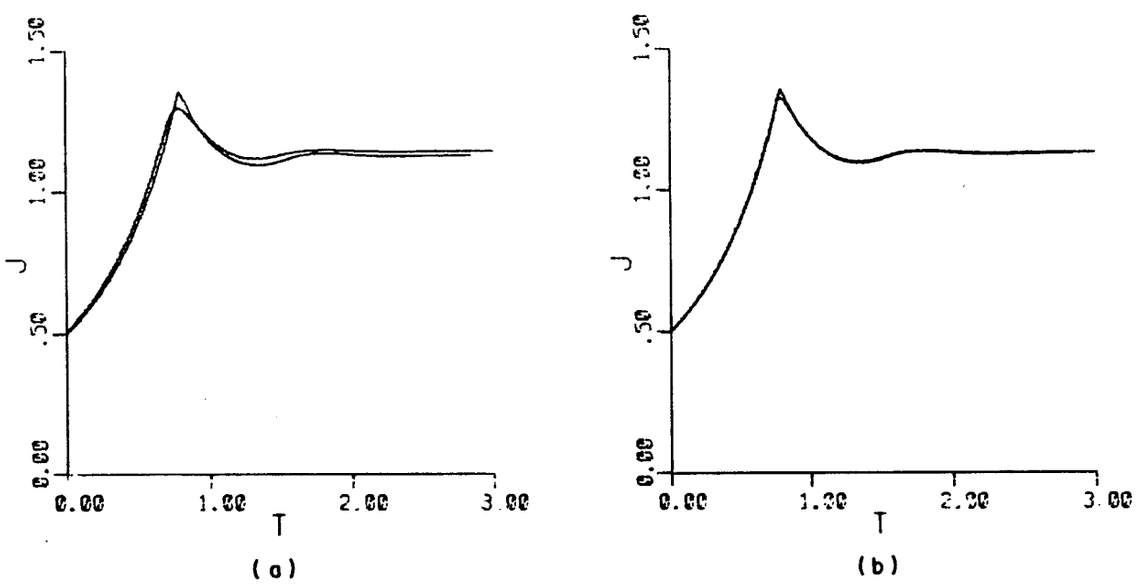

Figura 3.15. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das diferenças finitas explícito - RK quarta ordem com derivadas espaciais de primeira ordem ("para trás") usando $j=\frac{E^2(1,t)}{2}$. (a) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$; (b) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0005$.

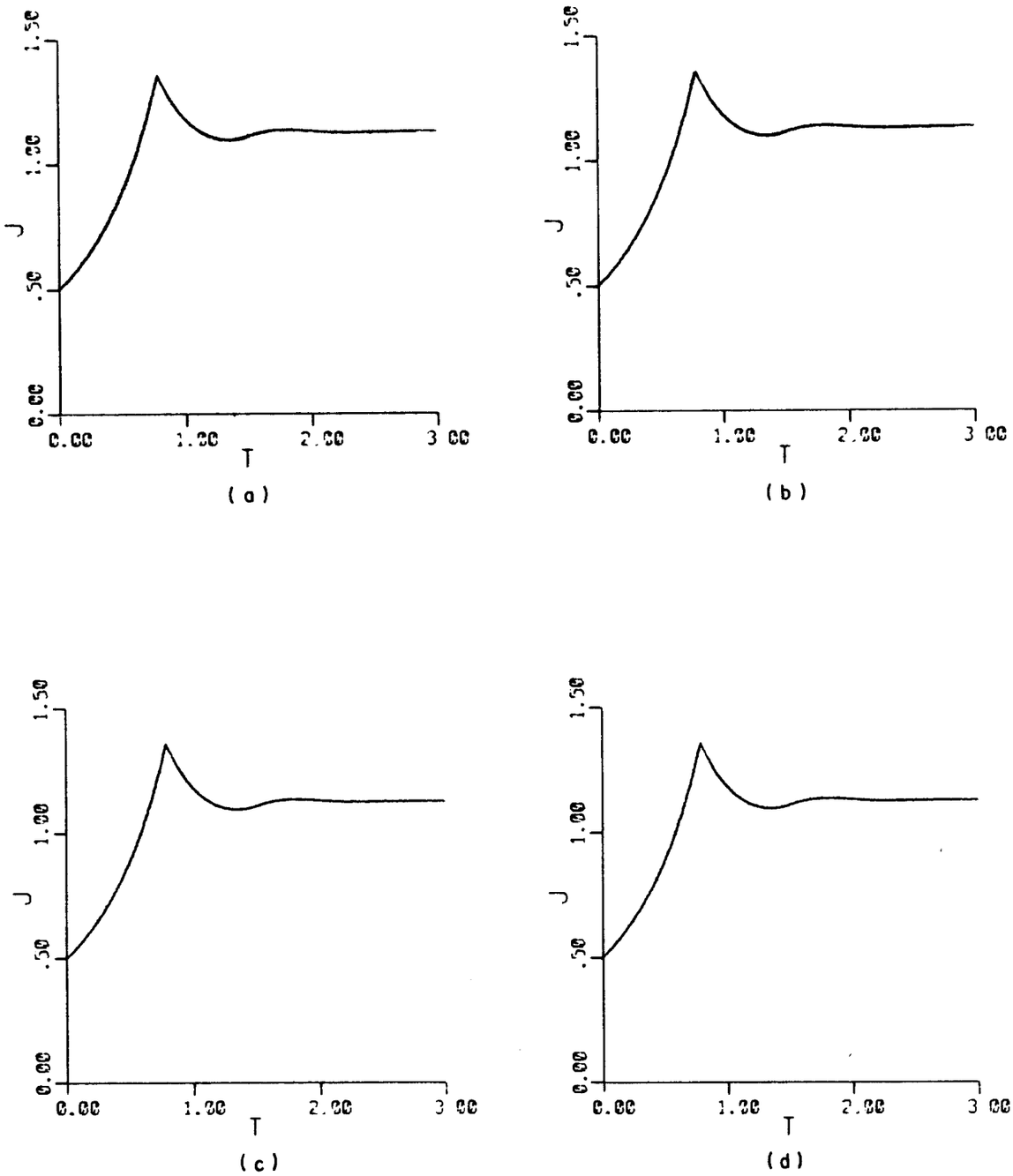

Figura 3.16. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das diferenças finitas explícito - RK quarta ordem com derivadas espaciais de quarta ordem usando $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$. (a) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$; (b) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.005$; (c) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0005$; (d) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.001$.

fossem incondicionalmente estáveis como acontecerá com os métodos implícitos que faremos a seguir. Mostramos na figura 3.15 duas curvas obtidas com este método, com a corrente calculada por $\frac{E^2(1,t)}{2}$ (com a corrente calculada pela integral também dá o pulo que vimos na figura 3.14).

A segunda forma, no entanto é bem superior, como mostra a figura 3.16 para a corrente e a figura 3.17 para os perfis de carga (a figura 3.17 deve ser comparada com a 3.12 feita com o método da seção anterior e os mesmos Δx e Δt que a 3.17). Vê-se que, agora, a difusão numérica é bem atenuada, mas que aparece

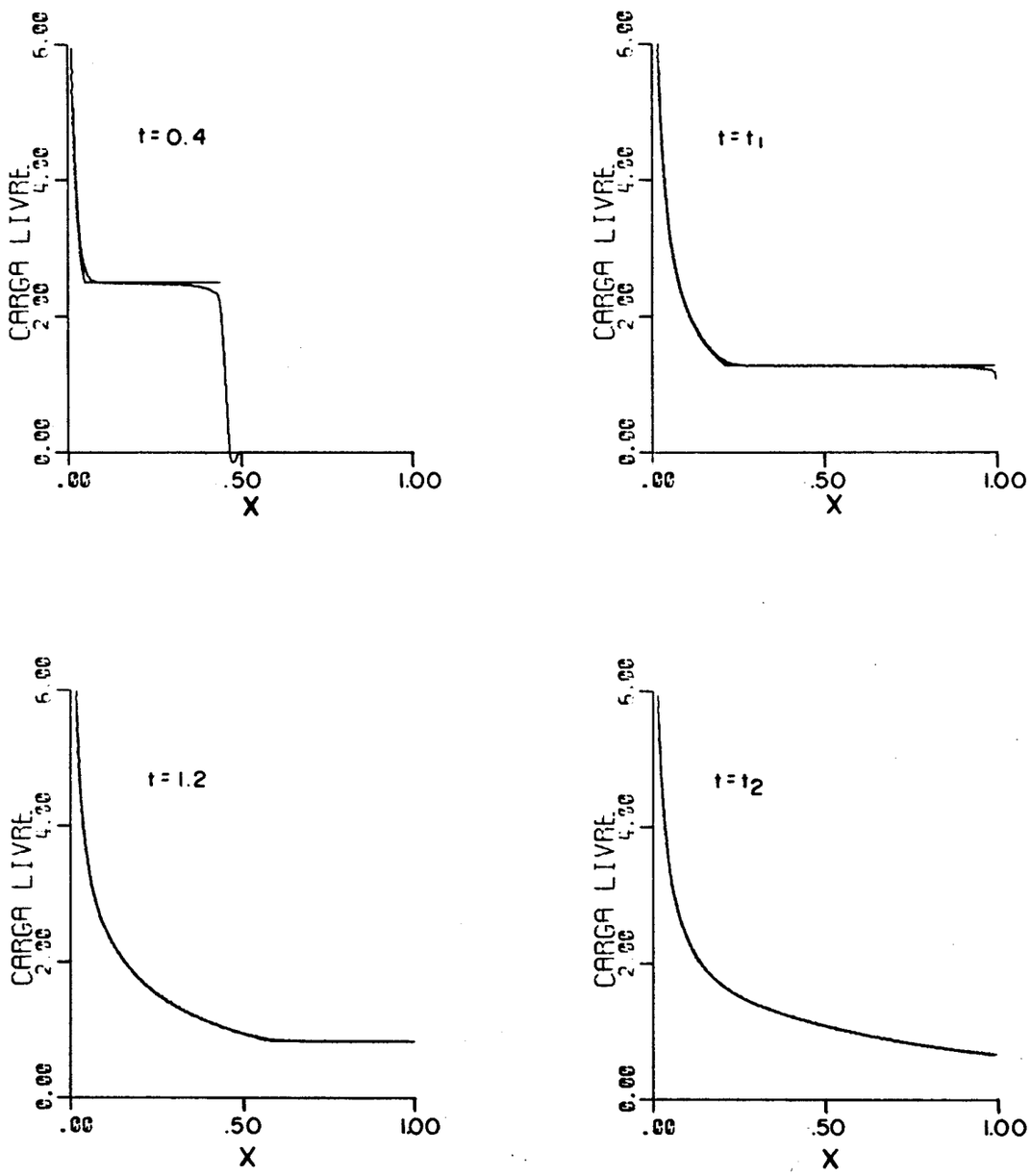

Figura 3.17. Comparação entre ρ exato e aquele calculado numericamente com o método das diferenças finitas explícito - RK quarta ordem com derivadas espaciais de quarta ordem usando $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$. $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$.

uma pequena inversão na frente do perfil do instante t = 0.4 (e para todo instante anterior ao tempo de trânsito), resultados estes parecidos com aqueles obtidos na ref. [15].

Para fazer as curvas da figura 3.17, a densidade de carga foi calculada pela derivação numérica do campo elétrico em relação a x (equação de Poisson) usando a equação (3.3.31). Quando se usa a eq. (3.3.30) as curvas de ρ vs. x oscilam em torno do valor exato.

Calcular a corrente pela integral também dá um pulo no início, mas muito pequeno e imperceptível nos gráficos com as escalas que estamos usando.

3.3.3.3. *Métodos das Diferenças Finitas Implícito*

Nos métodos das diferenças finitas explícitos, sempre se usa os valores velhos (no tempo t_J) no segundo membro das equações usadas para calcular os valores novos (no tempo t_{J+1}). Os métodos de diferenças finitas implícitos consistem em usar os valores novos, ainda desconhecidos, no segundo membro destas equações o que faz com que as equações algébricas assim obtidas sejam, muitas vezes, acopladas.

Aplicamos os métodos implícitos somente à forma (a) da seção 3.3.3.1., isto é, à equação (3.3.19)

$$\frac{\partial E}{\partial t} = j - E\frac{\partial E}{\partial x} \ .$$

Como esta equação não é linear, usar os valores ainda desconhecidos no segundo membro resulta, obviamente, num sistema algébrico que também não é linear. Para simplificar sua resolução usamos a sugestão dada na referência [12] pag. 464: substituímos $E\partial E/\partial x$ por $\langle E\rangle \partial E/\partial x$ e fizemos o cálculo em duas etapas: consideramos primeiro

$$\langle E(K)\rangle = E(K,J) \qquad (3.3.32)$$

o que resulta em $E^{(1)}(K,J+1)$ e, depois,

$$\langle E(K)\rangle = \left[\frac{E(K,J)+E^{(1)}(K,J+1)}{2}\right], \qquad (3.3.33)$$

resultando num $E^{(2)}(K,J+1)$. Este procedimento pode ser repetido quantas vezes se quiser ou se fizer necessário; nos nossos cálculos só usamos estes dois passos para cada incremento do tempo, considerando $E(K,J+1) = E^{(2)}(K,J+1)$.

Também é conveniente usar este processo iterativo para a densidade de corrente (j), por razões óbvias nos casos em que usamos $j = \int_0^1 \rho E dx$, e para desacoplar as equações nos casos em que usamos $j = \frac{E^2(1,t)}{2}$.

Como nas duas seções anteriores, a derivada espacial pode ser escrita com diferenças centrais, para trás ou para a frente. Fizemos os cálculos apenas de duas maneiras: com diferenças para trás e central de segunda ordem. Não usamos diferenças para a frente porque as características indicam diferenças para trás, nem central de quarta ordem porque resultaria num sistema algébrico mais complicado e difícil de resolver. Nas figuras e na tabela II chamamos de Implícito (a) ao caso com diferenças para trás e Implícito (b) àquele com diferenças centrais de segunda ordem.

Usando diferenças para trás, a equação de diferenças se escreve

$$\frac{E(K,J+1)-E(K,J)}{\Delta t} = \langle j\rangle - \langle E(K)\rangle\left[\frac{E(K,J+1)-E(K-1,J+1)}{\Delta x}\right] \qquad (3.3.34)$$

e, portanto

$$E(K,J+1) = \frac{E(K,J)+\langle j\rangle\Delta t+\frac{\Delta t}{\Delta x}\langle E(K)\rangle E(K-1,J+1)}{1+\frac{\Delta t}{\Delta x}\langle E(K)\rangle} \qquad (3.3.35)$$

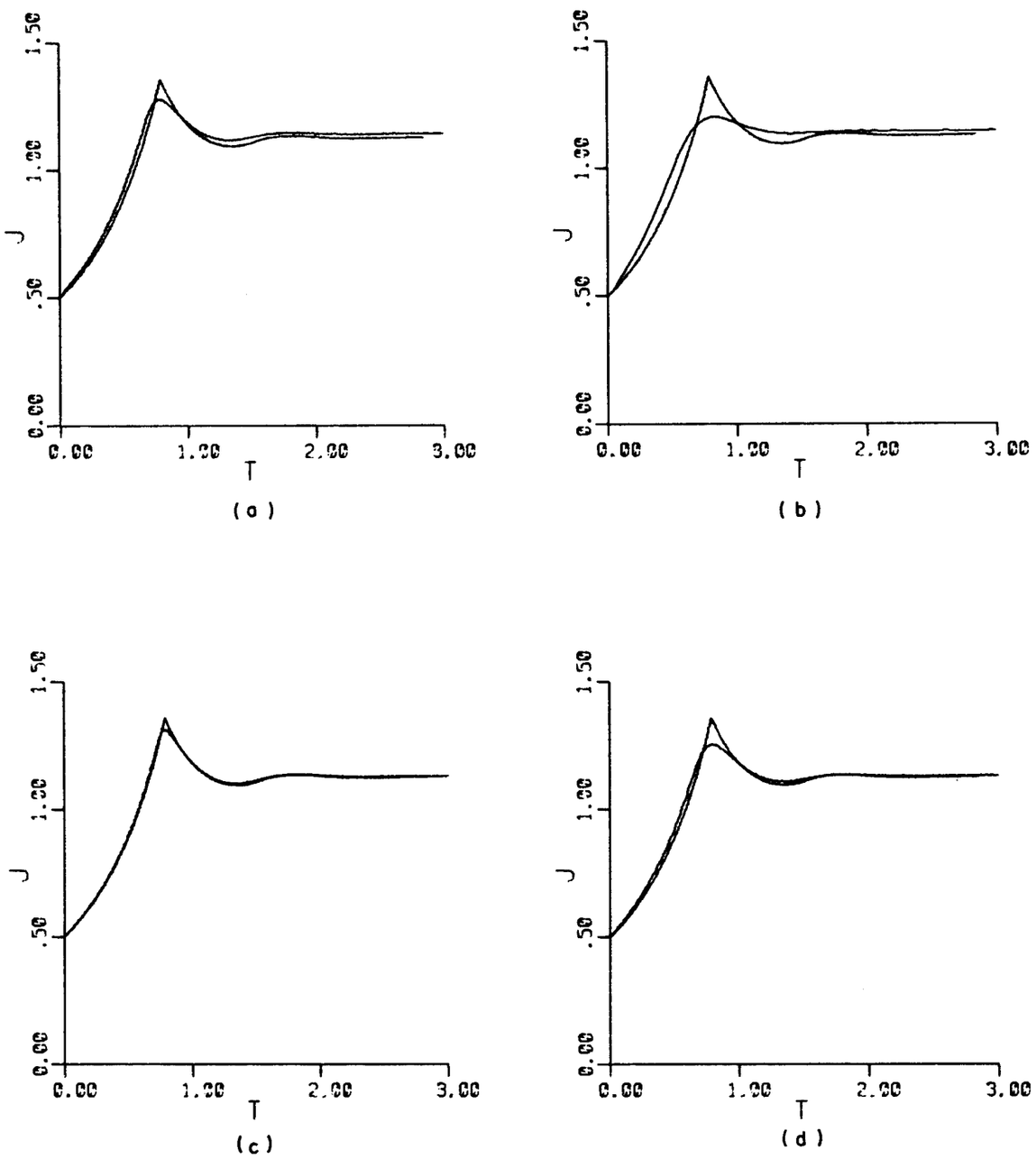

Figura 3.18. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das diferenças finitas implícito (a) com $j=\frac{E^2(1,t)}{2}$. (a) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$; (b) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.05$; (c) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0005$; (d) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.01$.

como, em $x=0$, o campo elétrico é nulo, começando de $K=1$, podemos calculá-lo em todos os pontos da linha t_{J+1}, isto é, desde $K=1$ até M. A figura 3.18 mostra curvas de corrente obtidas assim; só têm uma vantagem com relação aos métodos de diferenças finitas explícitos: é incondicionalmente estável,

isto é, podemos usar qualquer $\Delta t/\Delta x$, mesmo que sejam maiores que um.

Se usamos diferença central de segunda ordem a equação de diferenças se escreve:

$$\frac{E(K,J+1)-E(K,J)}{\Delta t} = \langle j \rangle - \langle E(K) \rangle \left[\frac{E(K+1,J+1)-E(K-1,J+1)}{2\Delta x} \right] \quad (3.3.36)$$

Para K = M não podemos usar diferença central e, portanto, só para ele usamos diferença para trás:

TABELA II

Tempo e corrente no pico, corrente em t = 3.0 e tempo de CPU para as diferentes formas dos métodos de diferenças finitas

MÉTODO	Δx	Δt	t_{pico}	j_{pico}	$j(3.0)$	t_{CPU}
	0.001	0.00061	0.78141	1.341103	1.129399	3'19.9"
Explícito	0.001	0.0005	0.7825	1.336160	1.129390	4'06.0"
Euler (a)	0.005	0.0034	0.7616	1.342721	1.141333	0'08.5"
	0.005	0.0025	0.7700	1.322455	1.141340	0'11.3"
Explícito	0.001	0.0005	0.7830	1.334729	1.127767	5'07.5"
Euler (b)	0.005	0.0025	0.7700	1.316153	1.134601	0'15.2"
Explícito	0.001	0.0005	0.7830	1.335049	1.128733	4'45.5"
Euler (c)	0.005	0.0025	0.7700	1.318217	1.138578	0'13.0"
Explícito	0.001	0.0005	0.7860	1.321267	1.129395	13'29.9"
RK (a)	0.005	0.0025	0.7825	1.293058	1.141357	0'33.8"
	0.001	0.0005	0.7855	1.357262	1.126166	22'20.2"
Explícito	0.001	0.001	0.786	1.356972	1.126168	11'15.7"
RK (b)	0.005	0.0025	0.7825	1.351101	1.129894	0'53.5"
	0.005	0.005	0.785	1.349895	1.129894	0'27.8"
	0.001	0.0005	0.7865	1.312531	1.129391	6'38.3"
Implícito	0.001	0.01	0.79	1.253218	1.129340	0'21.3"
(a)	0.005	0.0025	0.7825	1.278663	1.141336	0'17.5"
	0.005	0.05	0.85	1.198884	1.141106	0'01.7"
	0.001	0.0005	0.7890	1.326030	1.126447	23'10.0"
Implícito	0.001	0.01	0.81	1.246984	1.126399	1'10.8"
(b)	0.005	0.0025	0.7925	1.294796	1.131121	0'55.0"
	0.005	0.05	0.90	1.181235	1.130900	0'03.7"

$$\frac{E(M,J+1)-E(M,J)}{\Delta t} = \langle j \rangle - \langle E(M) \rangle \left[\frac{E(M,J+1)-E(M-1,J+1)}{\Delta x} \right] \quad (3.3.37)$$

Como E(0,2) = 0 podemos escrever as equações anteriores da seguinte maneira:

$$\frac{1}{\Delta t} E(1,J+1) + \frac{\langle E(1) \rangle}{2\Delta x} E(2,J+1) = \langle j \rangle + \frac{E(1,J)}{\Delta t} \quad (3.3.38)$$

$$-\frac{\langle E(K) \rangle}{2\Delta x} E(K-1,J+1) + \frac{1}{\Delta t} E(K,J+1) + \frac{\langle E(K) \rangle}{2\Delta x} E(K+1,J+1) = \langle j \rangle + \frac{E(K,J)}{\Delta t} \quad (3.3.39)$$

$$-\frac{\langle E(M) \rangle}{\Delta x} E(M-1,J+1) + \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\langle E(M) \rangle}{\Delta x} \right) E(M,J+1) = \langle j \rangle + \frac{E(M,J)}{\Delta t} \quad (3.3.40)$$

onde K na segunda equação, assume valores $1<K<M$. A matriz dos coeficientes deste sistema é tridiagonal, de maneira que ele pode ser resolvido facilmente com o método de eliminação de Gauss (ref. [12] pág. 270 e pág. 441 ou aqui, no Apêndice A, item 3).

Os resultados da integração feita com este método, que estão na figura 3.19, são bem melhores do que aqueles obtidos com o de diferenças finitas explícito-Euler, explícito-Runge Kutta com derivadas para trás e o implícito com derivadas para trás além de, como este último, também ser incondicionalmente estável. Mas não são melhores do que aqueles resultados obtidos com diferenças finitas explícito - Runge Kutta com derivada espacial de quarta ordem.

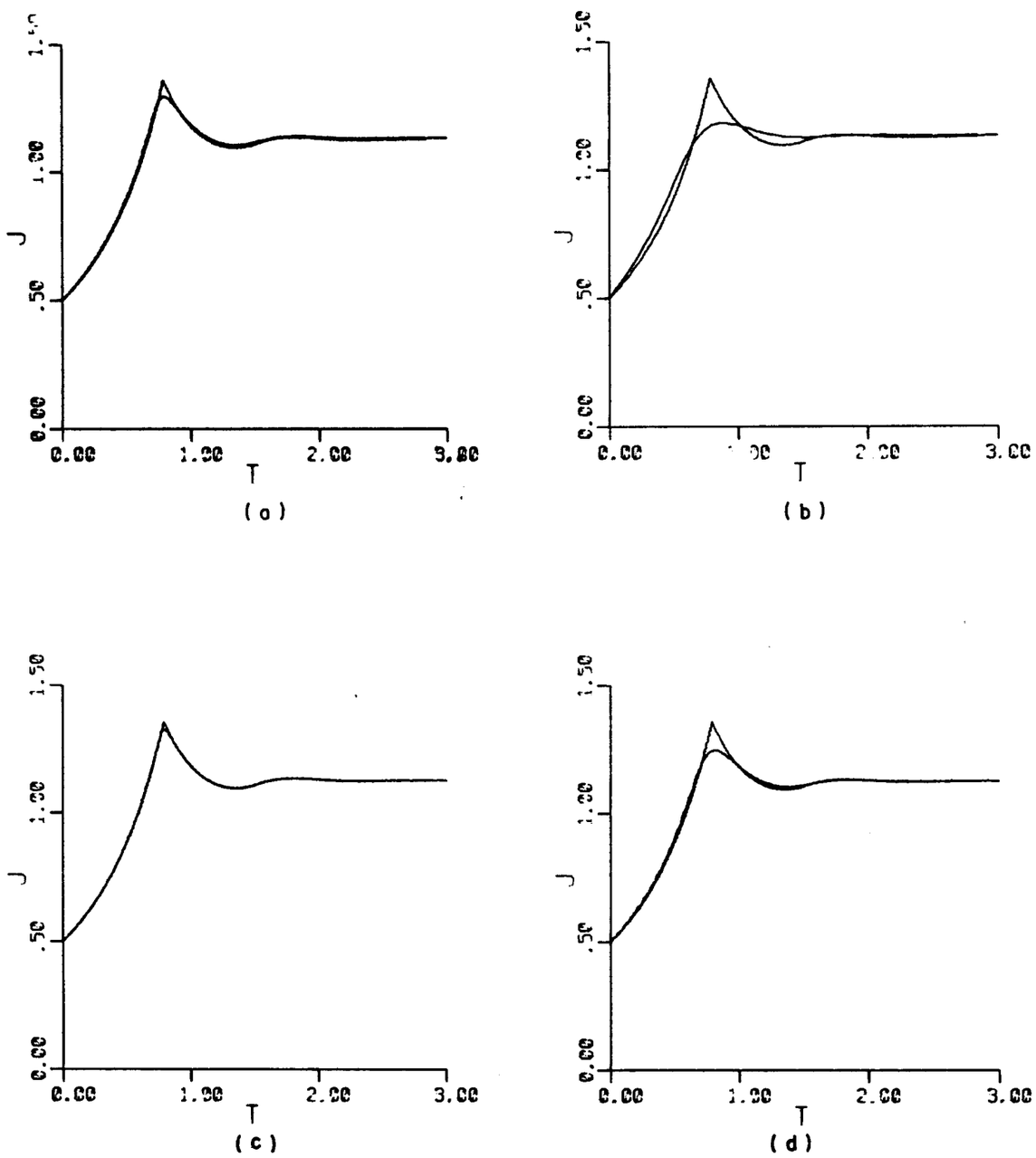

Figura 3.19. Comparação entre a corrente exata e aquela calculada numericamente com o método das diferenças finitas implícito (b) com $j=\frac{E^2(i,t)}{2}$. (a) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$; (b) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.05$; (c) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.0005$; (d) $\Delta x = 0.001$, $\Delta t = 0.01$.

3.4. *Isolante com Armadilhas*

3.4.1. *Equações*

Mesmo considerando as armadilhas podemos, como no caso de isolante perfeito, optar por usar ou não a densidade de carga livre (ρ). No caso em que usamos ρ, as equações que regem o problema são aquelas apresentadas na seção 1.2: eq. (1.2.6') com (1.2.4'), eq.(1.2.3') e eq. (1.2.1'):

$$\frac{\partial E}{\partial t} = j - \rho E$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{\rho}{\tau_t} - \frac{\rho_t}{\tau_d}$$

$$\rho = \frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t$$

as quais na forma normal, que é a forma usada no método das características, ficam (as equações abaixo são as eq. (2.1.20), (2.1.21), (2.1.22) e (2.1.25) escritas nas unidades reduzidas):

$$\frac{dE}{dt} = j + \rho_t E \qquad (2.1.20')$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho^2 - \rho\rho_t - \frac{\rho}{\tau_t} + \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (2.2.21')$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{\rho}{\tau_t} - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (2.1.22')$$

ou

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t E}\left(j - \frac{\partial E}{\partial t}\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (2.1.25')$$

sendo que podemos calcular a corrente por

$$j = \int_0^1 \rho E dx$$

ou por

$$j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$$

Se eliminarmos ρ devemos usar as eq. (1.2.7') e (1.2.8')

$$\frac{\partial E}{\partial t} = j - E\left(\frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t\right)$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t}\left(\frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d}$$

ou

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t E}\left(j - \frac{\partial E}{\partial t}\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d}$$

que na forma normal ficam (como no caso anterior, as equações abaixo são equações da seção 2.1 escritas em unidades reduzidas):

$$\frac{\partial E}{\partial t} = j + \rho_t E \qquad (2.1.26')$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{\tau_t E}\left(j - \frac{\partial E}{\partial t}\right) - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (2.1.25') \text{ ou } (2.1.27')$$

sendo que, agora, só podemos calcular a corrente por

$$j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$$

Lembramos que as derivadas que aparecem nas eq. (2.1.20'), (2.1.21') e (2.1.26') são ao longo da direção dada por dx/dt = E e nas eq. (2.1.22'), (2.1.25') e (2.1.27') ao longo de x = constante.

Quando eliminamos ρ do sistema de equações e queremos o perfil de carga livre, isto é, ρ versus x, este precisa ser calculado da equação de Poisson

$$\rho = \frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t$$

onde a derivada é feita numericamente.

Pelo mesmo motivo que no caso de isolante perfeito, isto é, porque ρ é infinito em x = 0, precisamos usar a função auxiliar $u = 1/\rho$ para integrar a eq. (2.1.21'), com o que esta equação fica

$$\frac{du}{dt} = 1 + u\rho_t + \frac{u}{\tau_t} - \frac{u^2\rho_t}{\tau_d} \qquad (3.4.1)$$

e a equação (2.1.22') seria substituída por

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = \frac{1}{u\tau_t} - \frac{\rho_t}{\tau_d} \qquad (3.4.2)$$

No entanto, não usamos esta última equação, preferindo usar a

eq.(2.1.25') para calcular ρ_t mesmo quando estivermos calculando u. O motivo para isto é simples e é consequência do método de integração (o raciocínio a seguir é feito com base na figura 2.6): para calcular ρ_t nos pontos tipo R precisamos dos valores de todas as funções que aparecem no segundo membro da equação para $\partial\rho_t/\partial t$ nos pontos tipo Q. Quando os pontos tipo Q estão entre dois pontos tipo P estes valores são obtidos por interpolação linear; mas, enquanto a frente de cargas não chegar em $x = 1$, teremos pontos Q que ficarão entre P_0 e $x = 1$, região em que $\rho = 0$ e, consequentemente, u é infinito, impossibilitando o tratamento numérico direto deste termo. Obviamente, isto poderia ser contornado colocando uma condição nos programas: se $x(R)>x(P_0)$ este termo é nulo, senão faz-se a interpolação.

Antes de apresentar os resultados, devemos salientar duas dificuldades na aplicação do método das características a este problema. A primeira delas, que aparece tanto no caso em que usamos ρ (ou u) quanto no caso em que ρ é eliminado do sistema de equações, consiste na integração da equação para o campo elétrico que deve ser feita na direção $dx/dt = \mu E$, eq. (2.1.20') ou (2.1.26'). Sabemos que todas as linhas nascem na origem e que $E(0,t) = 0$ para $t\geq 0$ (e, portanto, $\frac{d}{dt}E(0,t) = 0$), $\rho_t(0,t)\rightarrow\infty$, $t>0$ e $\rho(0,t)E(0,t) = j(t)$. Mas, para calcular o campo elétrico num instante $t + \Delta t$ de uma linha que nasceu num instante t, precisa-se do produto $\rho_t(0,t)E(0,t)$. Para calculá-lo usamos o seguinte procedimento: multiplicamos a eq. (1.2.3') por $E(x,t)$; como o que estamos procurando é o produto $\rho_t E$, no lugar de $E\frac{\partial\rho_t}{\partial t}$ colocamos $\frac{\partial(\rho_t E)}{\partial t} - \rho_t\frac{\partial E}{\partial t}$ e, usando as eq. (1.2.6') e (1.2.4'), substituímos $\partial E/\partial t$ por $(j-\rho E)$. Obtém-se, então, a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_t(x,t)E(x,t)\right) - \rho_t(x,t)[j(t)-\rho(x,t)E(x,t)] = \frac{\rho(x,t)E(x,t)}{\tau_t} - \frac{\rho_t(x,t)E(x,t)}{\tau_d} \qquad (3.4.3)$$

que, para x = 0, fica (lembramos que $\rho(0,t)E(0,t) = j(t)$):

$$\frac{d}{dt}\left(\rho_t(0,t)E(0,t)\right) + \frac{\rho_t(0,t)E(0,t)}{\tau_d} = \frac{j(t)}{\tau_t} \qquad (3.4.4)$$

cuja solução é

$$\rho_t(0,t)E(0,t) = \frac{e^{-t/\tau_d}}{\tau_t}\int_0^t j(t')e^{t'/\tau_d}dt' \qquad (3.4.5)$$

onde a integral deve ser calculada numericamente à medida que j(t) é calculado.

A outra dificuldade só aparece no caso em que se deseja integrar a equação (3.4.1) e também ocorre para a posição x = 0: como $u(0,t) = 0$ $(t \geq 0)$ e

$$\rho_t(0,t) = 0, \quad t = 0$$

$$\rho_t(0,t) = \infty, \quad t > 0$$

o produto $u(0,t)\rho_t(0,t)$ para $t>0$ é, aparentemente, indeterminado. Usando, porém, um procedimento análogo àquele feito para calcular $\rho_t(0,t)E(0,t)$ ou, mais simplesmente, usando $\rho(0,t) = j(t)/E(0,t)$, obtém-se

$$u(0,t)\rho_t(0,t) = \frac{\rho_t(0,t)}{\rho(0,t)} = \frac{\rho_t(0,t)E(0,t)}{j(t)} \qquad (3.4.6)$$

onde $\rho_t(0,t)E(0,t)$ é dado pela eq. (3.4.5).

3.4.2. *Integração Numérica com o Método das Características*

No caso de isolante perfeito, só havia um tipo ou família de linhas características: aquelas dadas por dx/dt = E e, por isso, o sistema na forma normal era ordinário. Agora, considerando as armadilhas, as equações na forma normal envolvem as duas famílias: as equações de E e de u contêm derivadas ao longo das direções dx/dt = E devendo, portanto, ser integradas ao longo delas, enquanto a equação de ρ_t só

contém derivadas ao longo das linhas da família dx/dt = 0 ou x = cte. e, portanto, sua integração deve ser feita ao longo de uma direção diferente daquela das equações para E e para u.

Para fazer, como necessário, a integração simultânea nestas duas direções diferentes, usaremos o método descrito no final da seção (2.2.2) de duas maneiras diferentes: a primeira, à qual chamaremos de Euler, consiste em usar o método de Euler na integração destas equações (semelhantemente ao que chamamos de "Euler" - com aspas - no caso de isolante perfeito, seção 3.3.2, aqui também usaremos $\frac{dx}{dt} = \frac{E_{velho} + E_{novo}}{2}$), e a segunda, à qual chamaremos de Runge-Kutta ou, mais simplesmente, RK, usa as fórmulas de Runge-Kutta de quarta ordem (apêndice A, eq. (A.4)) para as integrações ao longo de dx/dt = E e o método de Euler para calcular o ρ_t necessário em cada passo do processo Runge-Kutta - pois, quando se aplica as fórmulas de Runge-Kutta às integrações de x, E e u, cada passo deste processo leva uma determinada linha característica a posições ligeiramente diferentes na mesma linha do tempo. Como a integração da equação para ρ_t é feita ao longo de x = cte., uma nova integração deve ser feita para cada uma destas posições.

Obviamente, não se deve esperar que o "Runge-Kutta" daqui seja tão preciso quanto o foi no caso de isolante perfeito; isto não ocorrerá devido ao fato de usarmos o método de Euler para a integração de ρ_t, mesmo quando usamos o método de Runge-Kutta para a integração de x, E e u. Mas, ainda assim, deve dar resultados mais precisos do que aqueles obtidos com a aplicação do método de Euler a todas as equações, pois, para o mesmo incremento no tempo (Δt), o caminho ao longo das características da família dx/dt = E é maior do que aquele ao longo da família x = cte.. Isto é mais acentuado quanto mais forte for o aprisionamento, como pode ser visto na figura 3.20, que mostra

algumas das linhas características da família dx/dt = E para $\tau_t \to \infty$ e para τ_t = 0.125, ambos os casos com $\tau_d \to \infty$, isto é, sem liberação das cargas das armadilhas. Como se vê nesta figura, com exceção das linhas rotuladas por E = 1, até x ≃ 0.5 as linhas com τ_t pequenos têm inclinação menor do que as correspondentes (mesmo rótulo) com τ_t grandes e que a situação se inverte para x>0.6. Assim a inclinação pequena, que origina os caminhos mais longos, prejudica mais o cálculo de x, E e ρ quando τ_t é pequeno, pois, neste caso, um erro maior do que

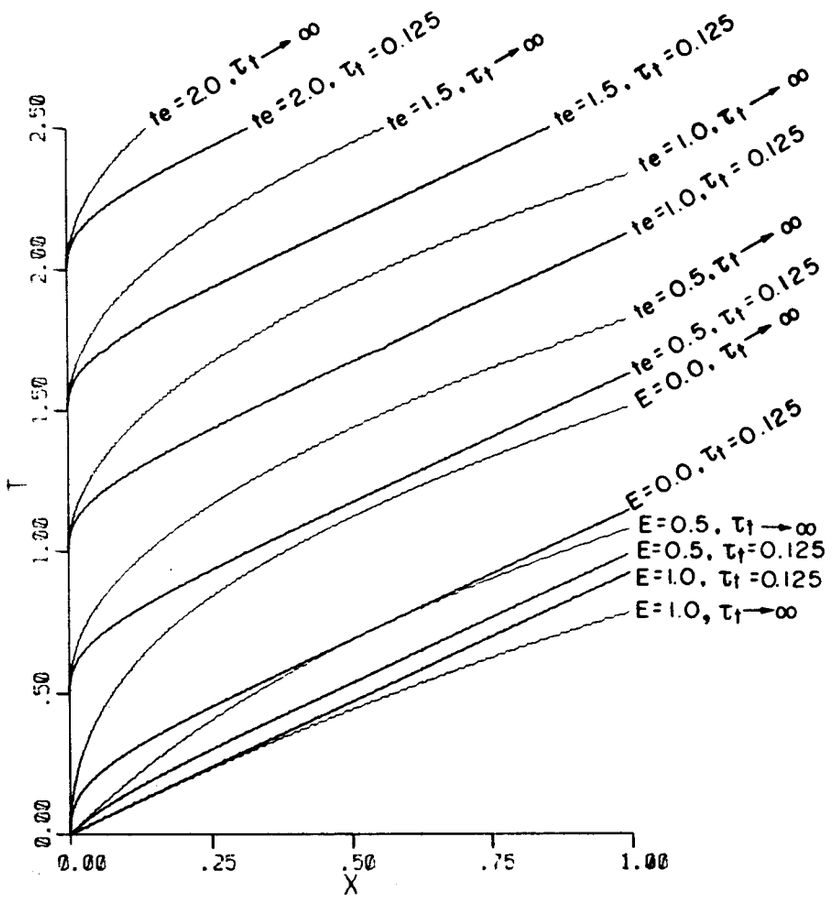

Figura 3.20. Linhas características para $\tau_t \to \infty$ e $\tau_t = 0.125$, sempre com $\tau_d \to \infty$ ($\tau_d = 10^{20}$). Para $\tau_t \to \infty$ as curvas foram calculadas numericamente com o método das características - RK quarta ordem e para $\tau_t = 0.125$ com o método das características - Euler e RK (as curvas coincidem) . $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\Delta t = 0.005$, ME = 200.

aquele para τ_t grande se faz sentir logo no início do percurso das linhas através da amostra e são carregados até o final, ao passo que este erro só é maior para τ_t grande do que para τ_t pequeno quando as linhas já estão mais perto da saída. Quando se tem liberação, e quanto maior for esta, a forma das características se assemelha à daquelas com aprisionamento fraco, figura 3.21.

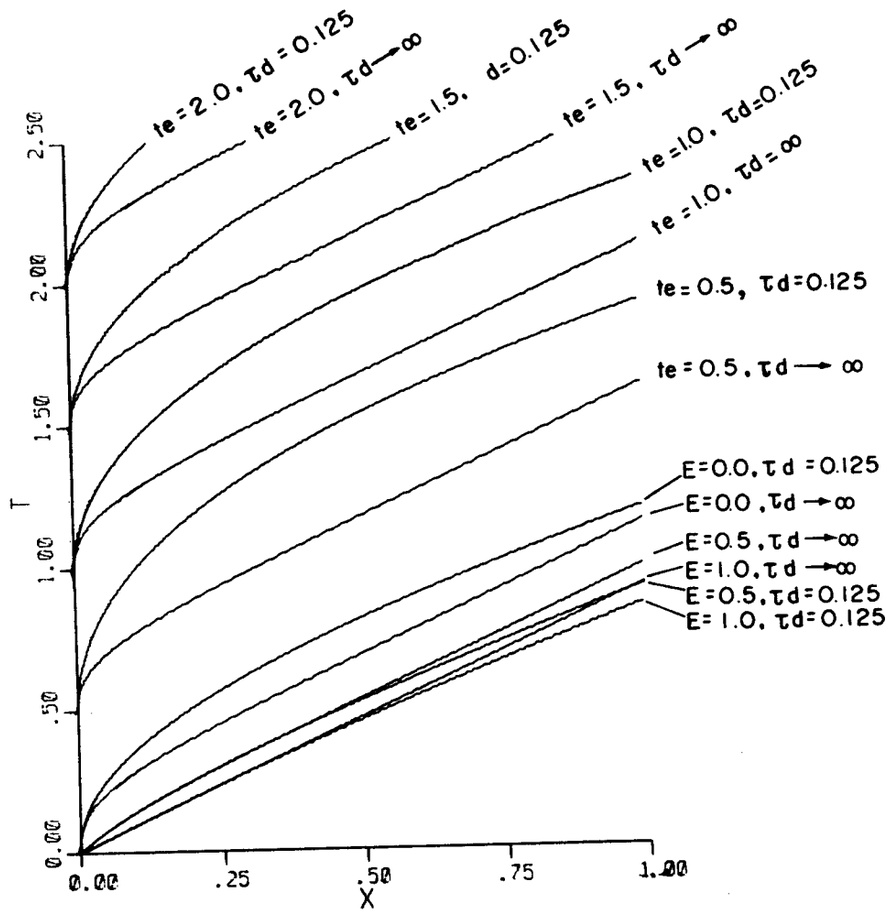

Figura 3.21. Linhas características para $\tau_d \to \infty$ ($\tau_d = 10^{20}$) e $\tau_d = 0.125$, sempre com $\tau_t = 0.125$ feitas numericamente com o método das características - RK. $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\Delta t = 0.005$, ME = 200.

Assim, em termos de precisão, mesmo aqui o Runge-Kutta é superior ao Euler. Na prática, porém, é preciso levar em conta também os tempos de cálculo. Para calcular a corrente desde t = 0 até t = 3.0, os programas que usam o Método de Runge-Kutta demoram cerca de quatro vezes mais do que aqueles que

usam o Método de Euler com o mesmo incremento do tempo. Em sistemas de equações diferenciais ordinários, quando se usa as fórmulas de Runge-Kutta os incrementos podem ser maiores do que com o método de Euler de forma que, mesmo com mais cálculos, o primeiro compensa com grande vantagem o segundo, como aconteceu no caso de isolante perfeito, seção 3.3.2. Mas, no nosso caso em que o sistema não é ordinário e em que o número de linhas que acompanhamos está diretamente relacionado com o incremento Δt (nasce uma linha em $x = 0$ a cada Δt), o Runge-Kutta não é tão superior ao Euler, pois se Δt for muito grande tem-se poucas linhas e estas muito separadas o que não é bom para o processo de interpolação; além disso é preciso lembrar sempre que a equação diferencial para ρ_t é integrada com o método de Euler. Mesmo assim podemos usar incrementos maiores com Runge-Kutta do que com Euler ainda com vantagem no tempo de cálculo, como se pode ver na Tabela III, onde a corrente foi calculada com $\int_0^1 \frac{E}{U} dx$. Com a corrente calculada por $\frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$, os tempos de CPU são um pouco menores, pois, neste caso, não é preciso integrar a equação para u; τ_t e τ_d também têm uma pequena influência nos tempos de CPU: por exemplo, para $\tau_d \to \infty$, quanto maior τ_t, mais tempo as linhas demoram para sair da amostra (ver figura 3.20) e, consequentemente, o cálculo demora mais. A tabela III foi colocada aqui apenas para que se possa ter uma idéia da precisão e velocidade (esta comparativa, já que os tempos de cálculo dependem do computador) dos dois métodos que estamos usando. Talvez, ao escolher o método que será utilizado numa aplicação prática, seja importante considerar também o fato de que, neste caso em que temos integrações ao longo de duas direções diferentes, fazer um programa para usar o método de Euler é bem mais simples do que para o de Runge-Kutta.

TABELA III

Comparação entre os métodos de Euler e RK com diferentes incrementos.

$\tau_t = 0.125, \quad \tau_d \to \infty, \quad ME = 200$

MÉTODO	Δt	t_{CPU}: 0→3.0	j(1.0)	j(3.0)
Euler	0.001	1h57'34"	5.65×10^{-4}	7.92×10^{-11}
	0.005	2'07"	7.46×10^{-4}	2.25×10^{-10}
	0.01	35"	1.02×10^{-3}	6.24×10^{-10}
RK	0.001	8h57'05"	5.13×10^{-4}	5.24×10^{-11}
	0.005	9'39"	5.29×10^{-4}	6.62×10^{-11}
	0.01	2'32"	5.59×10^{-4}	8.04×10^{-11}
	0.05	15"	8.90×10^{-4}	4.46×10^{-10}
	0.1	7"	1.71×10^{-3}	3.50×10^{-9}

Nos dois parágrafos anteriores, quando falamos de precisão, estamos tomando como referência o valor para o qual tende a solução à medida que Δt diminui, pois não temos solução exata para este problema com armadilhas. A única coisa que podemos calcular exatamente, para conferir nossos resultados, é o valor da densidade de carga livre na frente da "caixa" de carga espacial, para tempos menores que o tempo de trânsito desta. Este cálculo é possível porque $\rho_t = 0$ na frente, de maneira que a eq. (2.1.21') fica:

$$\frac{d\rho_{frente}}{dt} = \rho_{frente}^2 - \frac{\rho_{frente}}{\tau_t} \qquad (3.4.7)$$

e pode ser integrada independentemente das outras equações, resultando em

$$\rho_{frente} = \left[\tau_t\left(e^{t/\tau_t} - 1\right)\right]^{-1} \qquad (3.4.8)$$

Como a eq. (3.4.7) é ordinária e não depende de ρ_t, é óbvio que os valores obtidos para ρ_{frente} com o método de Runge-Kutta são melhores, isto é, mais próximos dos exatos dados pela eq.

(3.4.8) do que aqueles obtidos com o método de Euler. Mas só isto não seria suficiente para garantir que a corrente calculada com o método de Runge-Kutta seja melhor do que aquela calculada com o método de Euler.

Como não estamos considerando a saturação das armadilhas, nos casos em que $\tau_d \to \infty$ e $\rho_t \neq \infty$, a corrente deve tender para zero, para tempos grandes. Isto realmente acontece em nossos cálculos, exceto nos casos em que a densidade de carga livre fica muito pequena (como, por exemplo, quando $\tau_t = 0.125$ e $\tau_d \to \infty$) e nos quais a corrente é calculada por $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. Nestes, ao invés de cair sempre como deveria, a corrente fica constante a partir de um determinado instante que depende do incremento Δt usado mas não do fato de usarmos precisão simples ou dupla; para o mesmo Δt, isto acontece para tempos menores com o método de Euler do que com o de Runge-Kutta. Por sua vez, a corrente calculada com $j = \int_0^1 \rho E dx$ tem o comportamento esperado, mesmo com ρ muito pequeno. Também relacionado com este, está o fato de que a densidade de carga livre calculada com a equação de Poisson ($\rho = \frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t$, a derivada feita numericamente), não dá bem para este mesmo caso (τ_t muito pequeno e τ_d grande), nem quando a corrente é calculada por $\int_0^1 \rho E dx$, enquanto que a densidade de carga livre calculada pela integração da eq. (3.4.1) é boa, qualquer que seja a maneira de calcular a corrente. Para que se tenha idéia da diferença, mostramos, na figura 3.22, a densidade de carga livre calculada das duas maneiras - da integração da eq. (3.4.1) e da equação de Poisson - para $\tau_d \to \infty$ e $\tau_t = 5.0$, 0.5 e 0.125: somente no caso em que τ_t é muito pequeno a diferença é pronunciada. Esta figura foi feita com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$; com a corrente calculada da outra forma, o resultado é análogo a este.

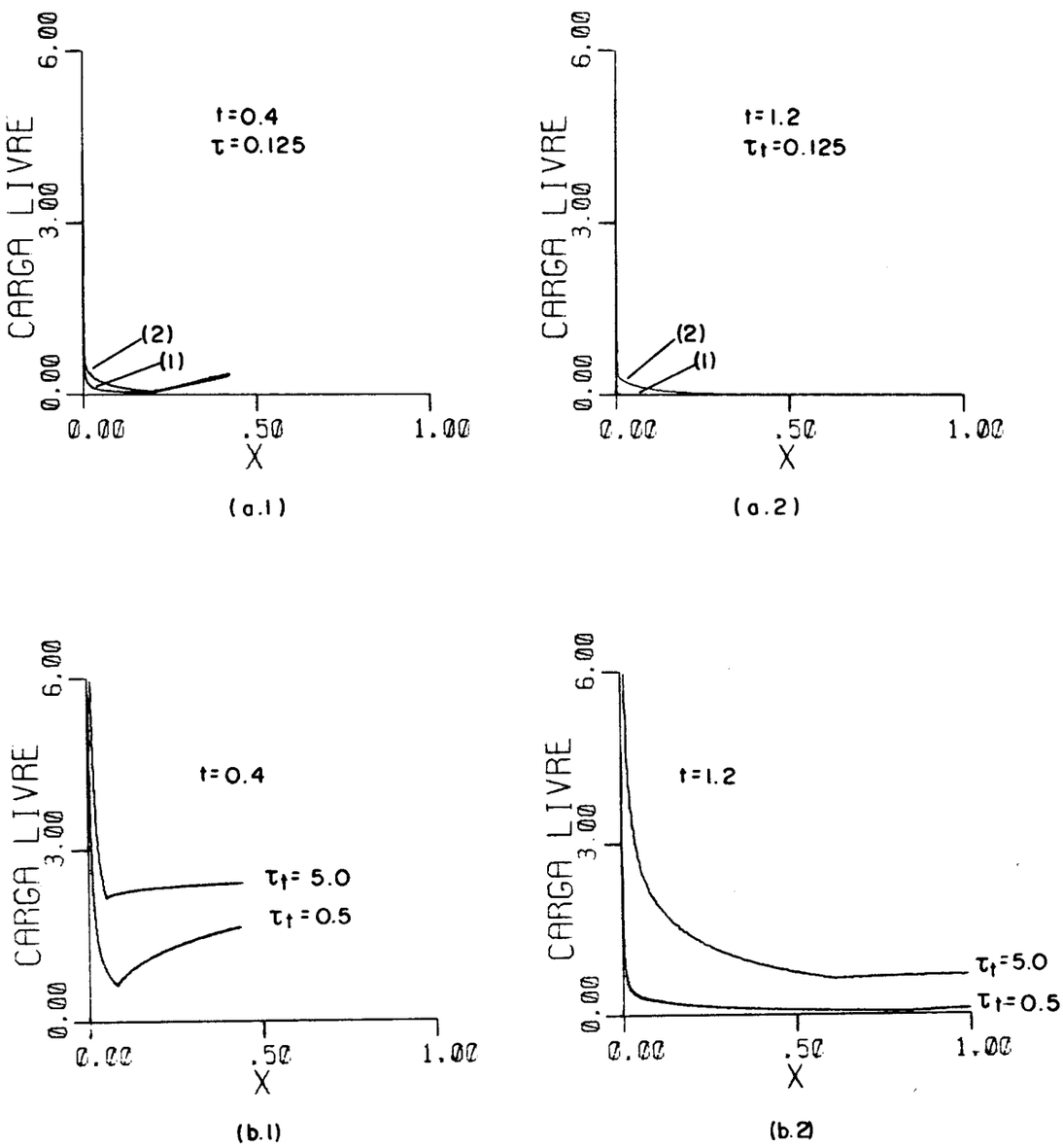

Figura 3.22. Comparação entre ρ calculado por (1) $\rho = \frac{1}{u}$ e por (2) $\rho = \frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t$, ambos calculados numericamente com o método das características - Euler com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\tau_d = 10^{20}$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200.

A figura 3.23 mostra a corrente em função do tempo para o caso de armadilhas profundas ($\tau_d \rightarrow \infty$) com diferentes τ_t. As curvas da figura 3.23(a) foram feitas com o método de Euler com a corrente calculada por $j = \int_0^1 \rho E dx$; a figura 3.23(b) contém quatro curvas para cada τ_t: duas com o método de Euler e duas com o de Runge-Kutta, cada método, por sua vez, tendo a corrente calculada com as duas formas. No caso de τ_t's grandes

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
FÍSICA

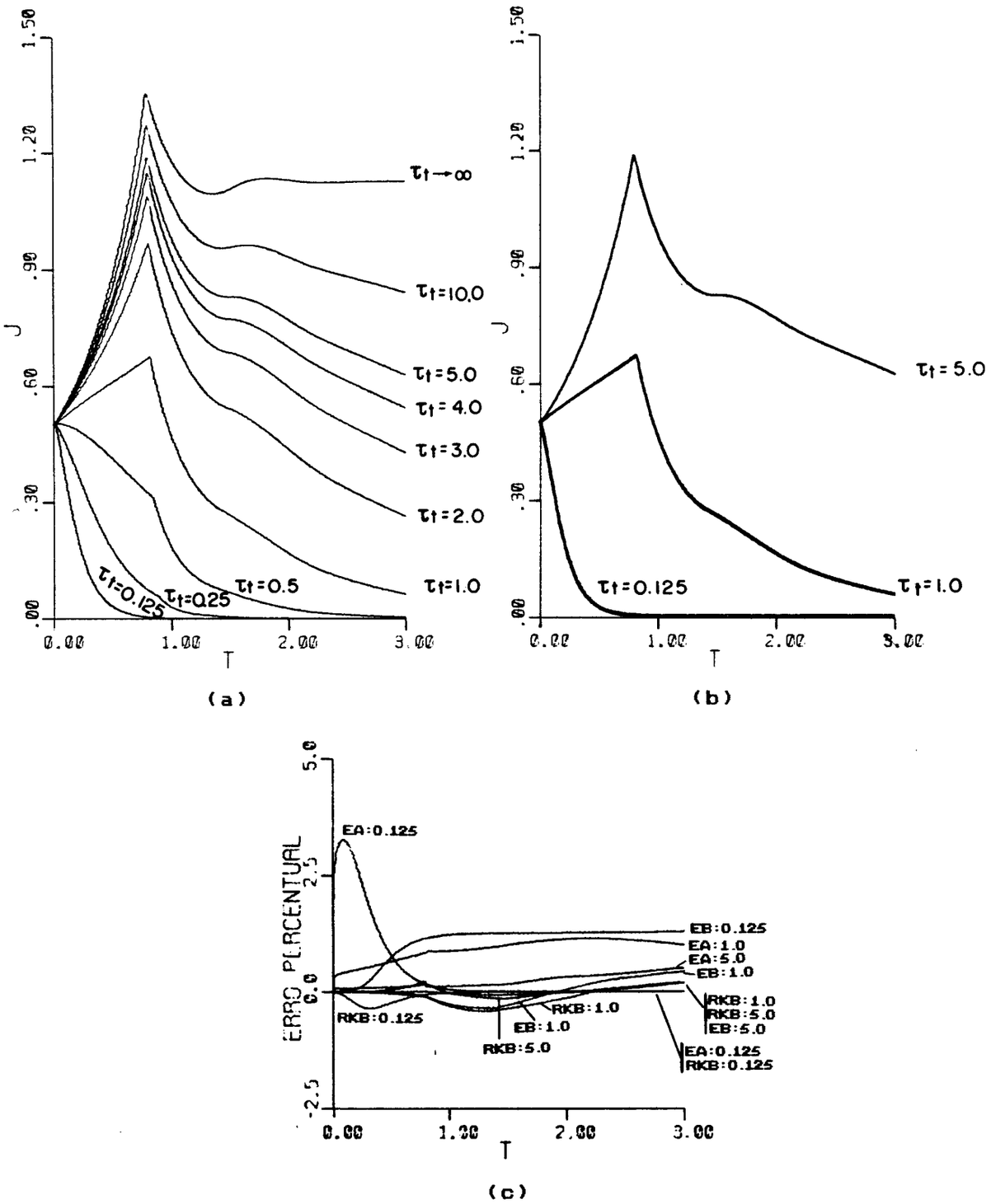

Figura 3.23. Corrente calculada com o método das características para $\tau_d \to \infty$ ($\tau_d = 10^{20}$). "A" significa corrente calculada por $\int_0^1 \rho E dx$ e "B" por $\frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. (a) Euler A ; (b) comparação entre Euler A, Euler B, RK A e RK B; (c) erro percentual calculado por $\frac{(j_* - j_{RKA})}{0.5} \times 100$, onde * pode se referir a Euler A (EA), Euler B (EB) ou RK B (RKB). $\Delta t = 0.005$, ME = 200.

(representados nesta figura por $\tau_t = 5$) as quatro curvas coincidem muito bem; para valores intermediários (representados por $\tau_t = 1$) há uma pequena diferença entre elas; para τ_t's pequenos (representados por $\tau_t = 0.125$) as curvas feitas com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$ apresentam aquele problema que já comentamos: a corrente fica constante a partir de um certo instante quando deveria cair sempre. Observe-se, porém, que todas as curvas foram feitas com o mesmo incremento do tempo ($\Delta t = 0.005$); com Δt's menores, as diferenças também são menores mas os cálculos ficam muito demorados sendo impraticáveis em casos de tentativa de ajuste de resultados experimentais.

As Figs. 3.24, 3.25 e 3.26 contêm gráficos de ρ vs. x, ρ_t vs. x e E vs. x, respectivamente, para os instantes $t = 0.4$ (antes de as frentes chegarem no eletrodo em $x = 1$), $t_1 = 0.79$ (instante em que a frente para $\tau_t \to \infty$ chega em $x = 1$), $t = 1.2$ (um instante intermediário) e $t_2 = 1.515$ (instante em que, para $\tau_t \to \infty$, a última linha emitida de $x = 0$ em $t = 0$ chega em $x = 1$). Nestas três figuras, as curvas foram feitas com os dois métodos (Euler e Runge-Kutta), não sendo perceptível a diferença entre os dois. Para a figura 3.24 usamos $j = \int_0^1 \rho E dx$ e ρ foi calculado a partir da integração da eq. (3.4.1); para as Figs. 3.25 e 3.26 usamos $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. Estas curvas de ρ, ρ_t e E vs. x, mesmo com τ_t pequenos, não dependem da maneira como a corrente foi calculada. Também, como já dissemos com referência à figura 3.22, as curvas de ρ vs. x para τ_t's não muito pequenos não dependem da forma como ρ é calculada (da eq.(3.4.1) ou da equação de Poisson), mas para τ_t pequeno elas são diferentes.

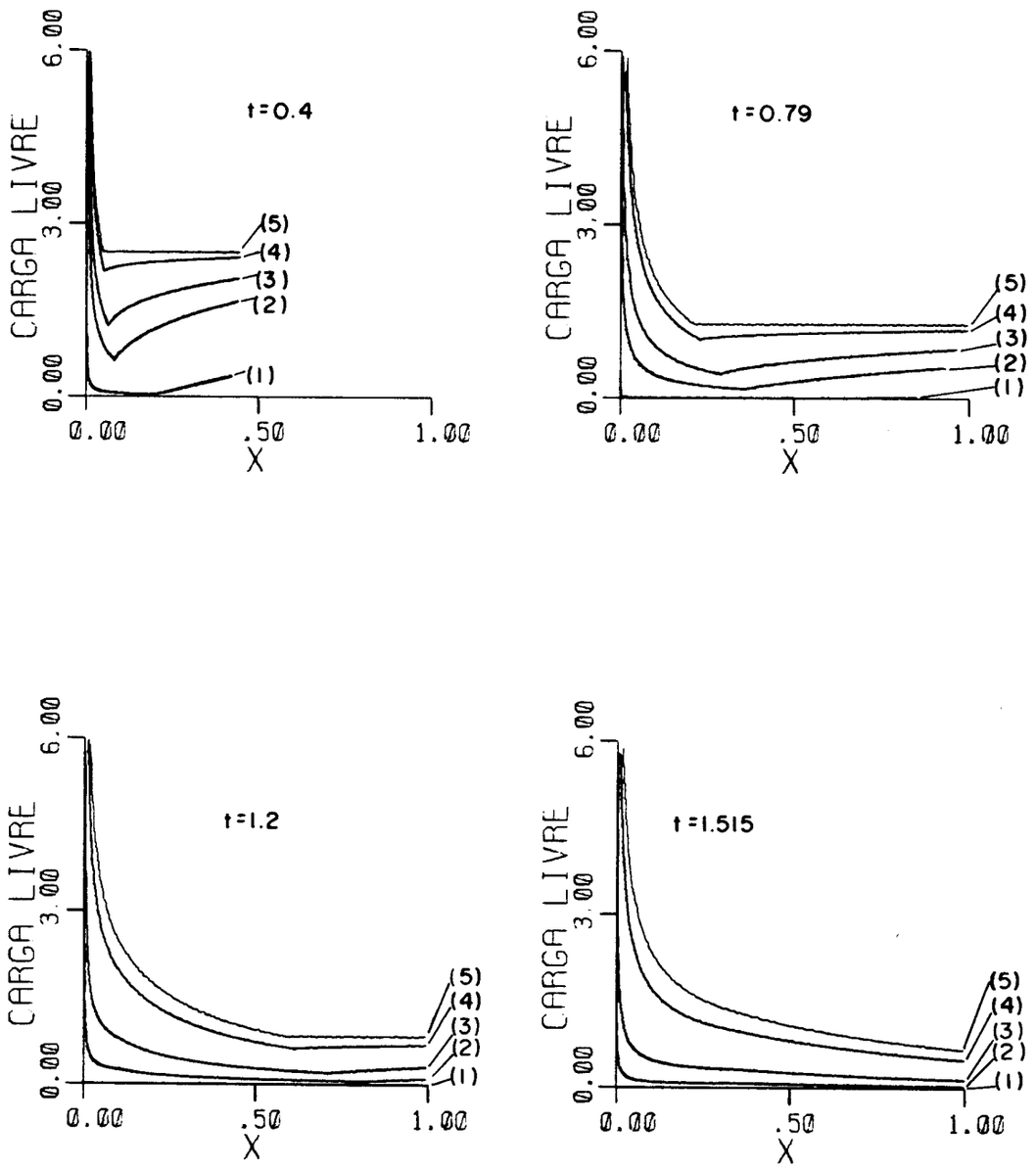

Figura 3.24. Comparação entre ρ ($\rho = \frac{1}{U}$) calculado numericamente com o método das características - Euler e RK, ambos com $j = \int_0^1 \rho E dx$. $\tau_d = 10^{20}$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200. (1) $\tau_t = 0.125$, (2) $\tau_t = 0.5$, (3) $\tau_t = 1.0$, (4) $\tau_t = 5.0$. A curva (5), para $\tau_t \to \infty$, foi feita com o programa para isolante perfeito, método das características - RK quarta ordem.

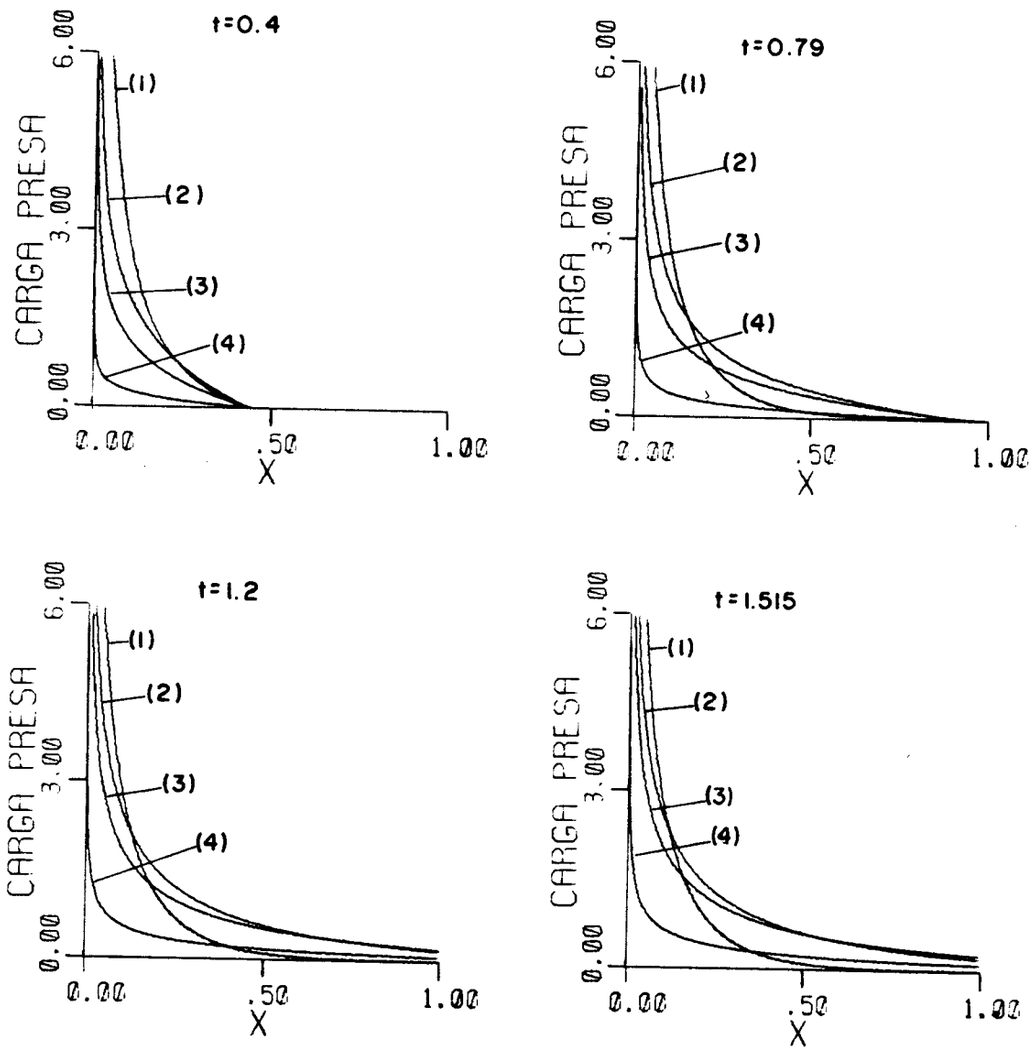

Figura 3.25. Comparação entre ρ_t calculado numericamente com o método das características - Euler e RK, ambos com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\tau_d = 10^{20}$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200. (1) $\tau_t = 0.125$, (2) $\tau_t = 0.5$, (3) $\tau_t = 1.0$, (4) $\tau_t = 5.0$.

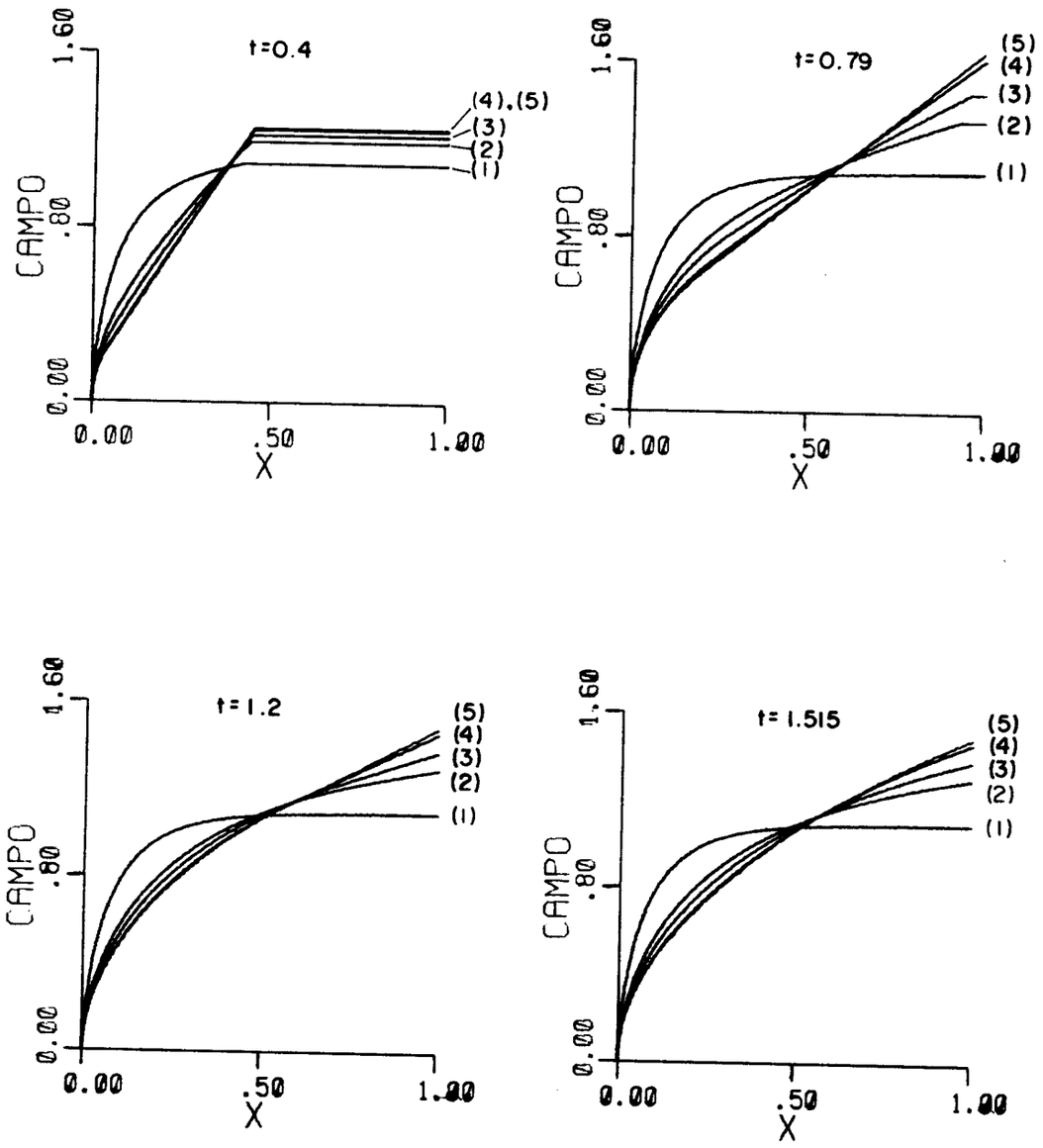

Figura 3.26. Comparação entre o campo elétrico calculado numericamente com o método das características - Euler e RK, ambos com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\tau_d = 10^{20}$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200. (1) $\tau_t = 0.125$, (2) $\tau_t = 0.5$, (3) $\tau_t = 1.0$, (4) $\tau_t = 5.0$, (5) $\tau_t \to \infty$.

A figura 3.27 mostra a corrente em função do tempo para $\tau_t = 1$ e diferentes τ_d's; a figura 3.27(a) foi feita com o método de Euler e a corrente calculada com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$; a figura 3.27(b) contém curvas feitas com o método de Euler e com o de Runge-Kutta, também com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. As Figs. 3.28, 3.29 e 3.30 mostram os perfis de carga livre, presa e o campo elétrico, respectivamente, sendo que todas estas curvas também foram feitas com os métodos de Euler e de Runge-Kutta e em todas elas a corrente foi calculada por $\frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. É interessante observar que o valor de ρ_{frente} não depende de τ_d, eq.(3.4.8), mas, embora não seja perceptível nos gráficos, a posição da frente depende de τ_d, sendo x_{frente} maior quando τ_d é menor.

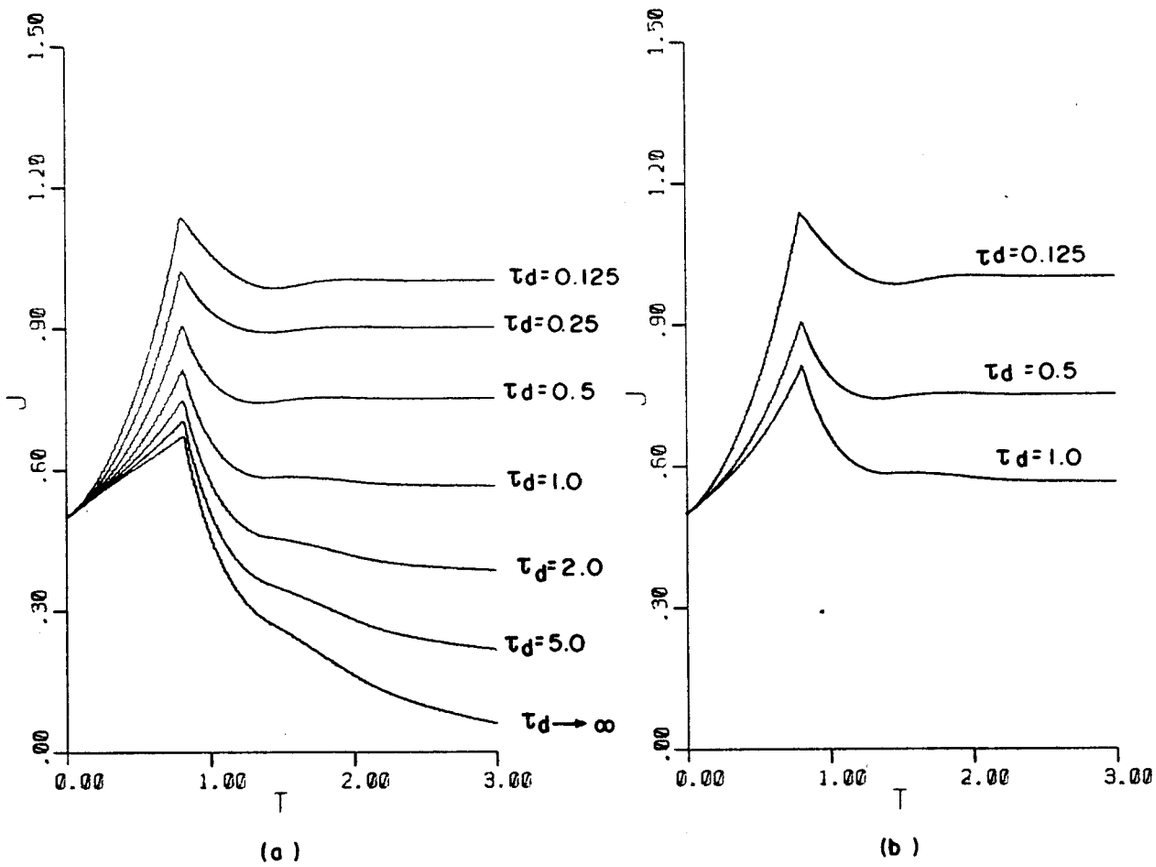

Figura 3.27. Corrente calculada numericamente com o método das características com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. (a) Euler, (b) comparação entre Euler e RK. $\tau_t = 1.0$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200.

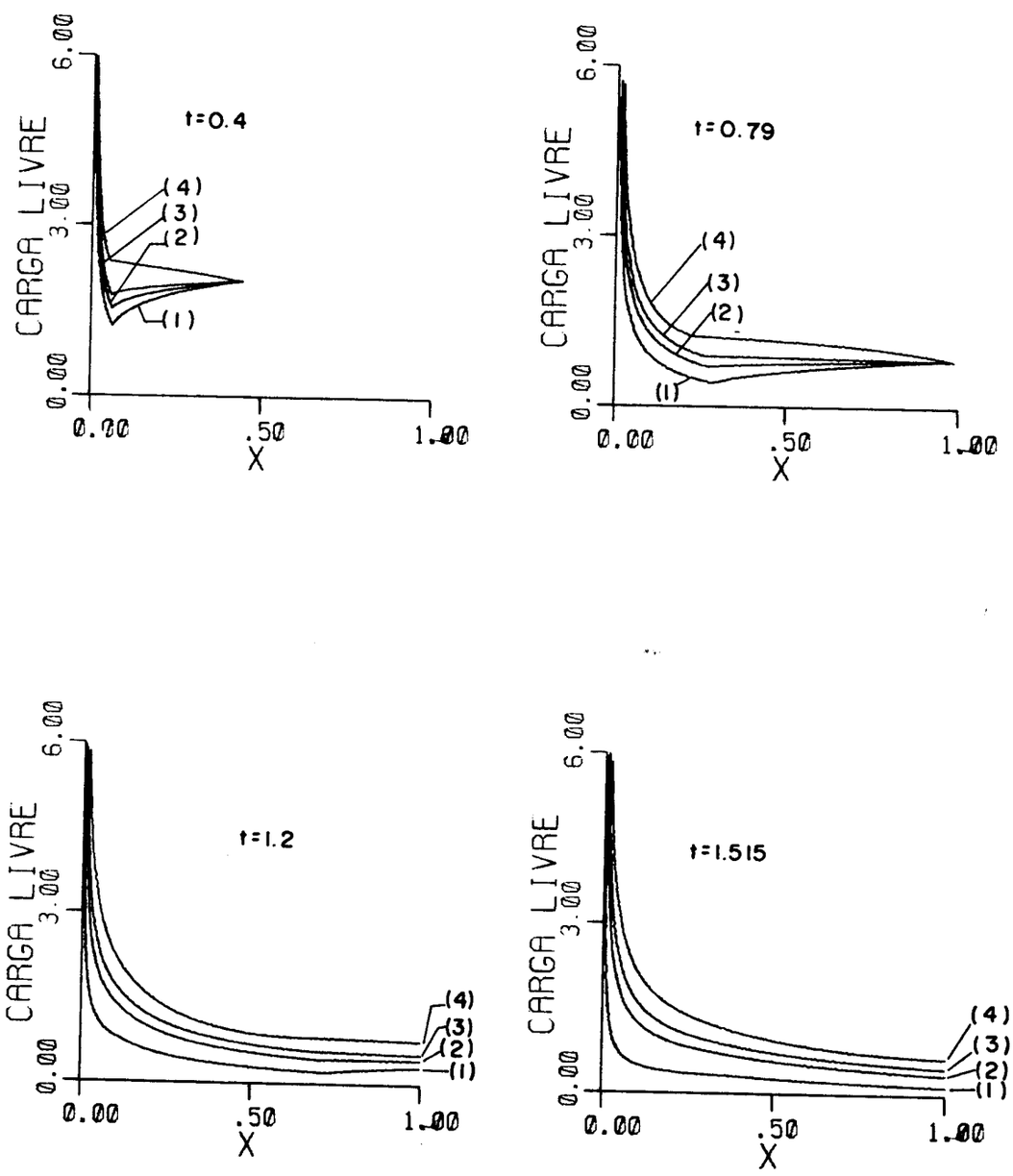

Figura 3.28. Comparação entre ρ ($\rho = \frac{\partial E}{\partial x} - \rho_t$) calculado numericamente com o método das características - Euler e RK, ambos com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\tau_t = 1.0$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200. (1) $\tau_d = 10^{20}$, (2) $\tau_d = 1.0$, (3) $\tau_d = 0.5$, (4) $\tau_d = 0.125$.

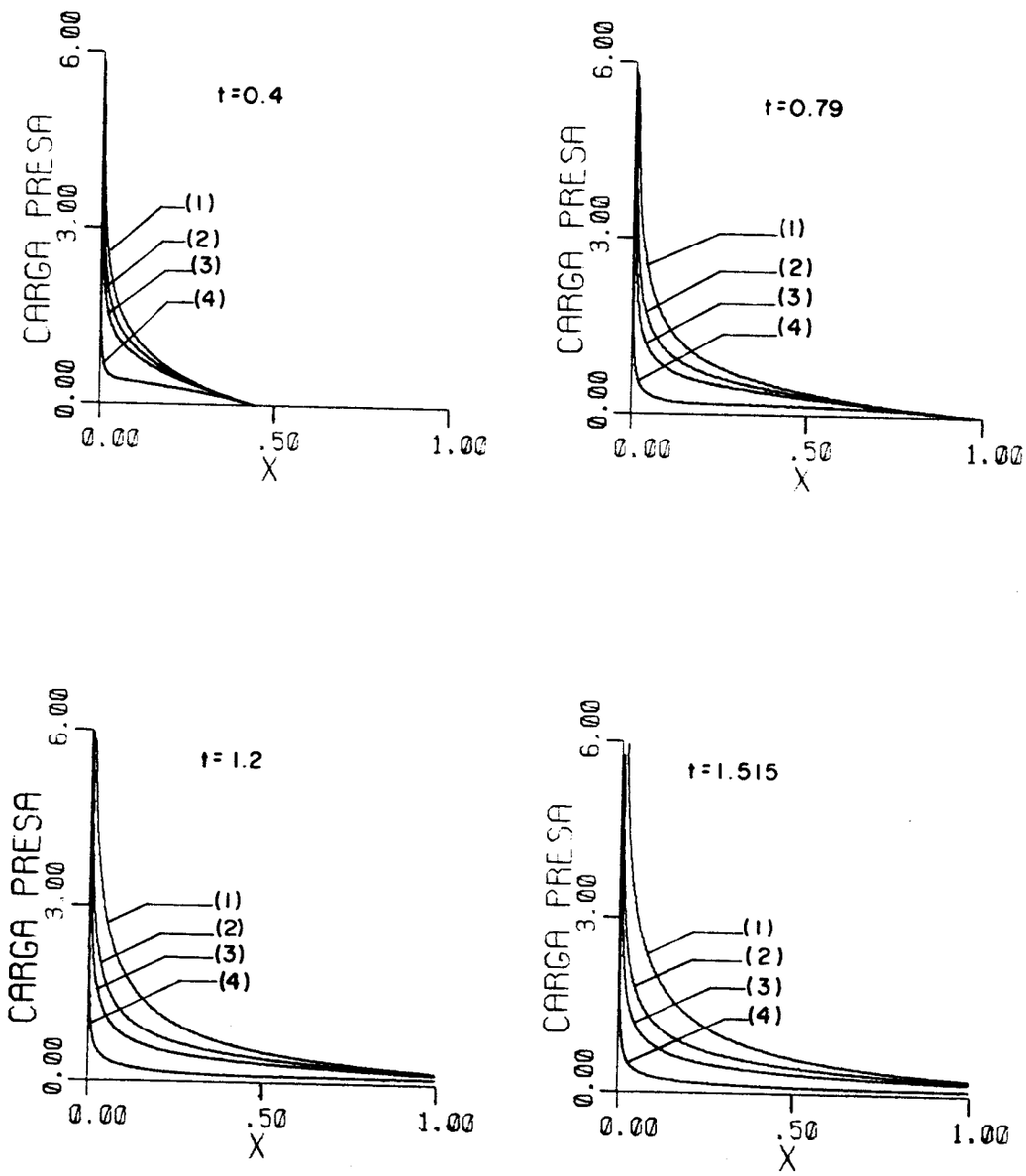

Figura 3.29. Comparação entre ρ_t calculado numericamente com o método das características - Euler e RK, ambos com $j=\frac{E^2(1,t)}{2}-\int_0^1 \rho_t E dx$. $\tau_t = 1.0$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200. (1) $\tau_d = 10^{20}$, (2) $\tau_d = 1.0$, (3) $\tau_d = 0.5$, (4) $\tau_d = 0.125$.

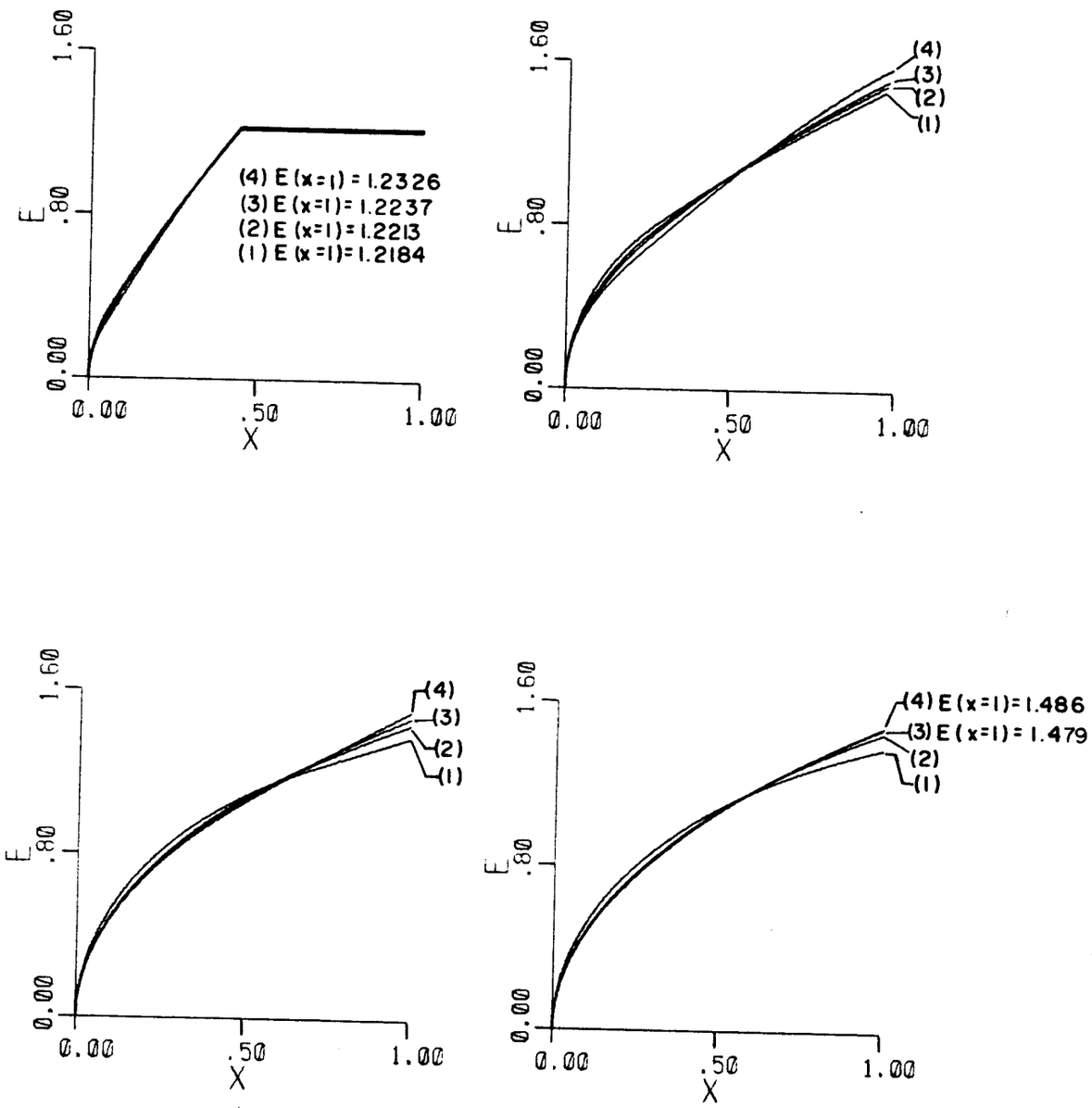

Figura 3.30. Comparação entre o campo elétrico calculado numericamente com o método das características - Euler e RK, ambos com $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\tau_t = 1.0$, $\Delta t = 0.005$, ME = 200. (1) $\tau_d = 10^{20}$, (2) $\tau_d = 1.0$, (3) $\tau_d = 0.5$, (4) $\tau_d = 0.125$.

3.4.3. *Integração Numérica com Métodos das Diferenças Finitas*

As integrações com métodos das diferenças finitas foram feitas com o objetivo de comparar seus resultados com aqueles obtidos com o método das características. Usamos somente duas formas:

(a) diferenças finitas explícito com o método de Euler para as integrações no tempo e diferenças "para trás" para as derivadas espaciais, análogo ao método descrito na seção 3.3.3.1, item (a), para isolante sem armadilhas. Esta é a maneira mais simples de fazer a integração numérica mas é pouco precisa;

(b) diferenças finitas explícito com o método de Runge-Kutta de quarta ordem para as integrações temporais e derivadas espaciais de quarta ordem, análogo ao da seção 3.3.3.2, item (b). Esta é a forma com diferenças finitas que dá os melhores resultados.

As Figs. 3.31 (a) e (b) e 3.32 (a.1), (a.2), (b.1) e (b.2) mostram as curvas obtidas com estes métodos comparadas com aquelas obtidas com o método das características usando o método de Euler com $j = \int_0^1 \rho E dx$ e $\Delta t = 0.005$ e ME = 200. A figura 3.31 (a) contém as curvas de corrente em função do tempo feitas com a forma (a) para as duas maneiras de calcular a corrente (a tabela IV mostra alguns valores correspondentes a esta figura para que se possa identificar as curvas). Analogamente, a figura 3.31 (b) contém as curvas de corrente vs. tempo feitas com a forma (b), também para as duas maneiras de calcular a corrente. É evidente a superioridade da forma (b) sobre a (a), o que se confirma nos gráficos da figura 3.32.

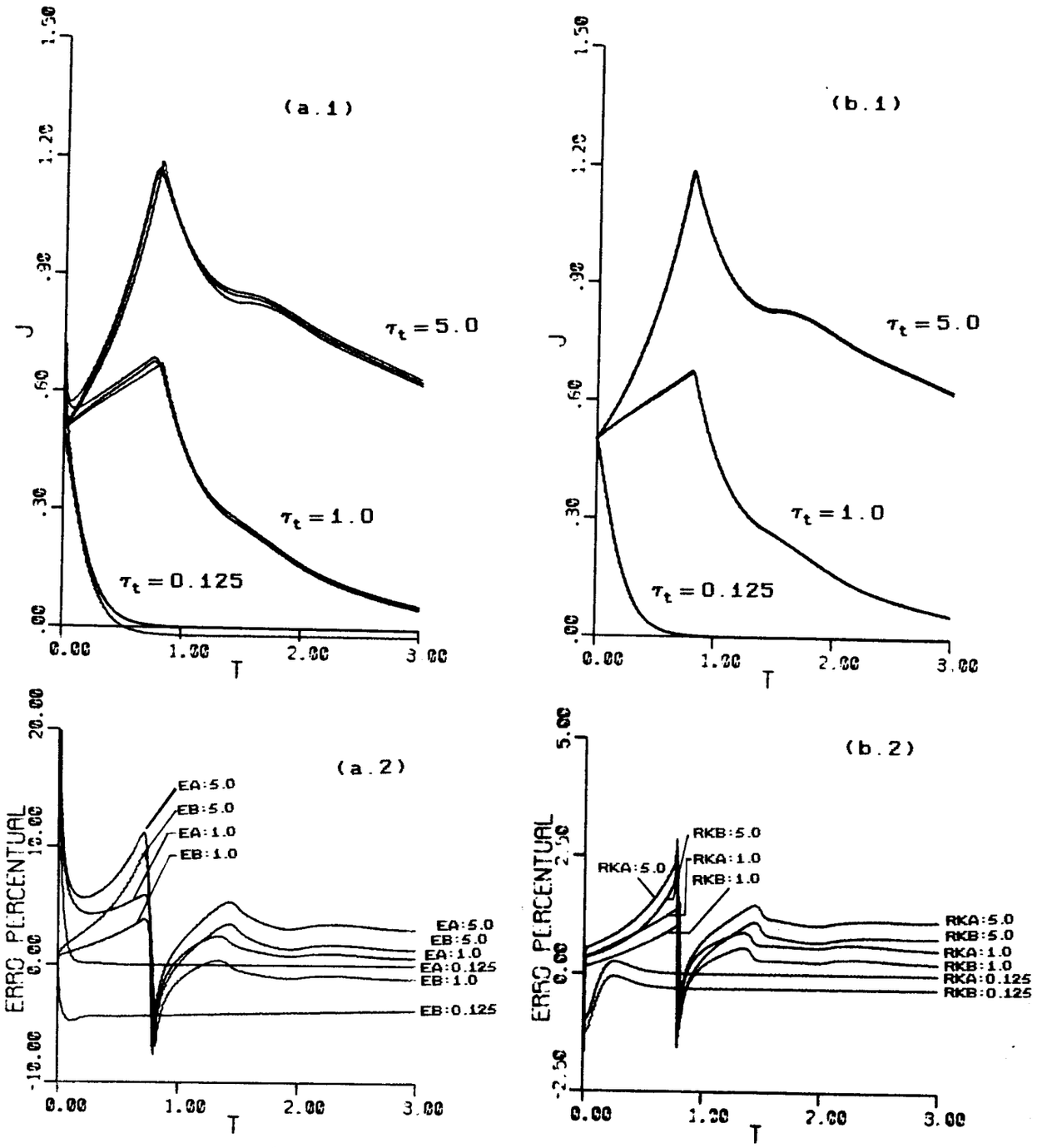

Figura 3.31. $\tau_d = 10^{20}$. "A" significa corrente calculada por $\int_0^1 \rho E dx$ e "B" por $\frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. (a.1) Comparação entre DF finitas explícito Euler com derivadas espaciais "para trás" por A e por B ($\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$) com características RK A ($\Delta t = 0.005$, ME = 200) - ver tabela IV para identificar as curvas; (a.2) erro percentual calculado por $\frac{(j_* - j_{CRKA})}{0.5} X100$, onde * pode se referir a DF Euler A (EA) ou a DF Euler B (EB), e onde CRKA significa características Runge-Kutta A; (b.1) comparação entre DF Runge-Kutta com derivadas espaciais de quarta ordem por A e por B ($\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$) com características RK A ($\Delta t = 0.005$, ME = 200); (b.2) erro percentual calculado por $\frac{(j_* - j_{CRKA})}{0.5} X100$, onde * pode se referir a DF RK A (RKA) ou a DF RK B (RKB) e CRKA tem o mesmo significado que em (a.2).

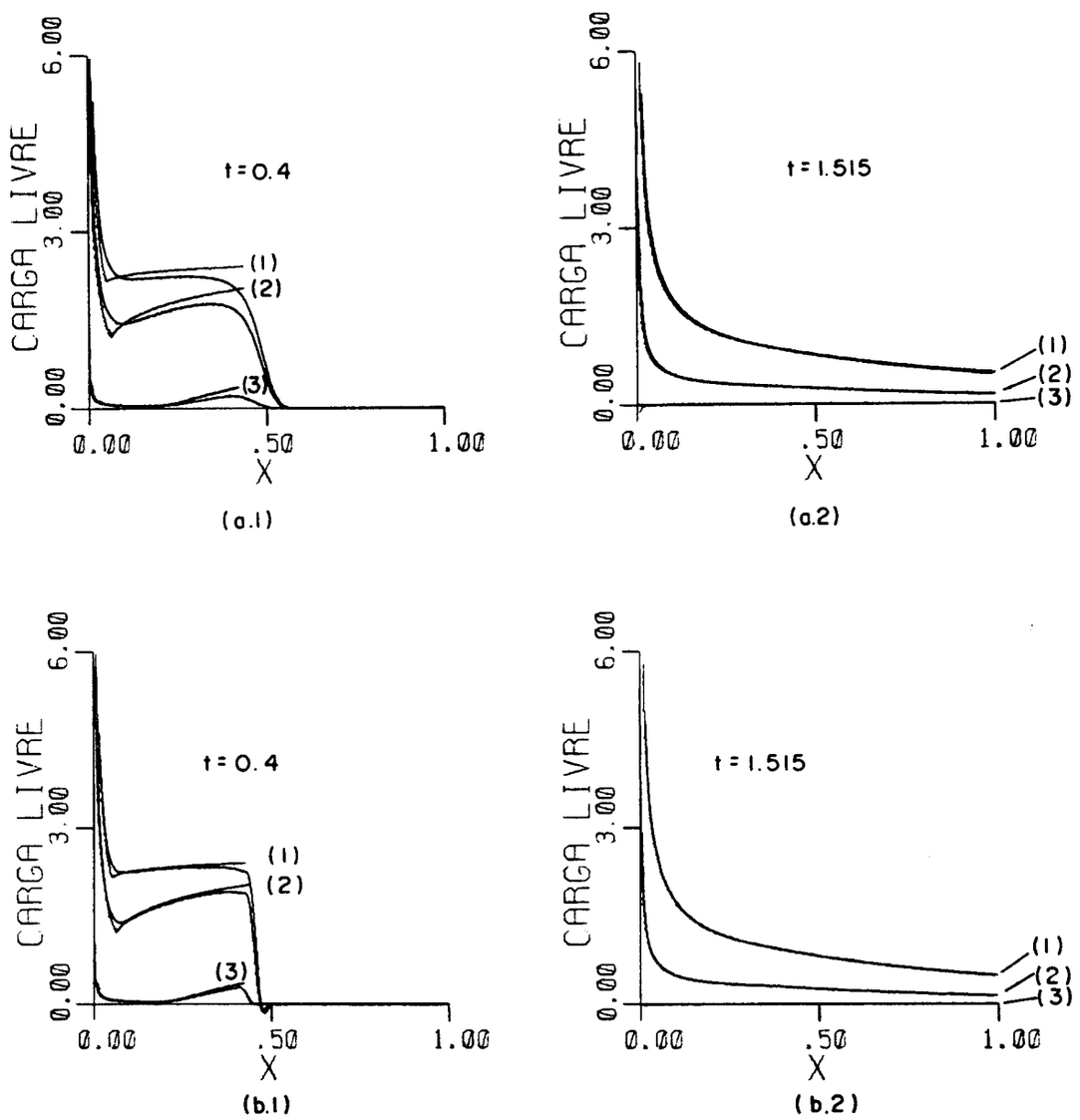

Figura 3.32. Comparação entre ρ calculado numericamente com o método das diferenças finitas explícito - (a) Euler com derivadas espaciais "para trás" ($\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$), (b) RK com derivadas espaciais de quarta ordem ($\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.005$) - usando $j = \int_0^1 \rho E dx$ e $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$, com aquele calculado, também numericamente, com o método das características - Euler com $j = \int_0^1 \rho E dx$ ($\Delta t = 0.005$, ME = 200). $\tau_d = 10^{20}$, (1) $\tau_t = 5.0$, (2) $\tau_t = 1.0$, (3) $\tau_t = 0.125$.

TABELA IV

Alguns valores das curvas da figura 3.31 (a.1)

A: $j = \int_0^1 \rho E dx$ B: $j = \frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$

τ_t	MÉTODO	t_{pico}	j_{pico}	j(1.0)	j(3.0)
5	(a) A	0.762	1.167	0.988	0.639
	(a) B	0.765	1.160	0.980	0.631
	Car. RK A	0.795	1.187	0.980	0.624
1	(a) A	0.745	0.685	0.463	6.07×10^{-2}
	(a) B	0.747	0.675	0.453	5.18×10^{-2}
	Car. RK A	0.810	0.671	0.461	5.75×10^{-2}
0.125	(a) A	—	—	4.73×10^{-4}	1.24×10^{-6}
	(a) B	—	—	-2.09×10^{-2}	-1.91×10^{-2}
	Car. RK A	—	—	5.29×10^{-4}	6.62×10^{-11}

Os tempos de CPU são, agora, bem menores do que aqueles com os métodos das características; por exemplo, para $\tau_t = 0.125$, $\tau_d \to \infty$ e j calculada por $\frac{E^2(1,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$, desde t = 0 até t = 3, a forma (a) com $\Delta x = 0.005$ e $\Delta t = 0.0025$ dá t_{CPU} = 27", a forma (b) com $\Delta x = 0.005$ e $\Delta t = 0.005$ dá t_{CPU} = 1'20" e com $\Delta x = 0.005$ e $\Delta t = 0.0025$ dá t_{CPU} = 2'38".

Dois pontos devem ser destacados com relação às Figs. 3.31 e 3.32. O primeiro se refere ao "pulo" inicial nas curvas da figura 3.31(a) para as correntes calculadas por $\int_0^1 \rho E dx$ que ocorrem aqui pelo mesmo motivo que no caso de isolante perfeito (ver final da seção 3.3.3.1). O segundo, que também tem o seu análogo no caso do isolante perfeito, refere-se à pequena inversão de ρ perto da frente de cargas na figura 3.32 (a.1) e ocorre devido à maneira como ρ é calculado, isto é, por diferenciação numérica.

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

3.5. *Conclusão*

Confirmando o que dissemos no Capítulo II, o método das características foi o mais preciso na resolução deste problema e o único capaz de manter as descontinuidades - todos os métodos de diferenças finitas apresentaram difusão numérica.

No caso de isolante perfeito (em que o sistema de equações na forma normal é ordinário), como se pode ver na tabela II e nas figuras de 3.11 a 3.19, os melhores resultados obtidos com os métodos de diferenças finitas gastaram tempos de CPU da ordem de minutos (o melhor que registramos aqui gastou 11'57.7"). Por sua vez, como mostra a tabela I e as figuras de 3.3 a 3.10, com o método das características temos resultados melhores do que o melhor com diferenças finitas, com tempos de CPU bem menores: da ordem de segundos.

Porém, quando consideramos as armadilhas, os tempos de CPU com os métodos de diferenças finitas aumentam pouco em relação aos dos métodos correspondentes no caso de isolante perfeito, enquanto que, com o método das características aumentam muito mais. É inegável o fato de que, em termos de precisão, o método das características é superior aos de diferenças finitas, mas com tempos de CPU tão pequenos, seria aconselhável, numa aplicação prática, usar diferenças finitas para os primeiros ajustes e deixar características para a fase de refinamento.

3.6. *Observação*

No caso de isolante perfeito comparamos as soluções numéricas com a solução exata, analítica, do problema. Já no

caso do isolante com armadilhas as soluções numéricas só puderam ser comparadas entre si; a confiança nestas é estabelecida com base no fato, empírico, de que, quando diferentes métodos de integração numérica aplicados a uma determinada equação, dão os mesmos resultados, pode-se ter por certo que estes estão corretos.

CAPÍTULO IV

TRANSPORTE DE UM PULSO DE CARGA ATRAVÉS DE UM ISOLANTE EM CIRCUITO ABERTO

4.1. *Colocação do Problema*

No capítulo anterior só foi possível comparar as soluções numéricas com uma solução exata, analítica, para o caso de isolante sem armadilhas. Apresentaremos neste capítulo, um problema que tem solução analítica para o isolante com armadilhas profundas (isto é, que aprisionam as cargas mas não as liberam); o que possibilita tal solução analítica, obtida por A. I. Rudenko [18] usando o método das características, é a condição de contorno: circuito aberto, o que implica em corrente total nula. Este problema, assim como o anterior, foi resolvido com o propósito de testar os métodos numéricos.

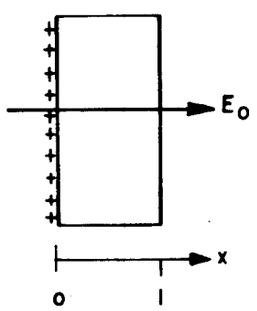

Figura 4.1

A situação física considerada neste problema está ilustrada na figura 4.1 e consiste no seguinte: uma fatia de isolante com um nível de armadilhas profundas, é colocada numa região com campo elétrico E_0, perpendicular às superfícies maiores da amostra e recebe, no instante inicial ($t = 0$), um pulso de carga com densidade superficial σ_0 numa das

superfícies, $x' = 0^-$. A carga se desloca em direção à superfície oposta, $x' = 1$, sob a ação do campo elétrico externo; durante o percurso, parte das cargas cai nas armadilhas.

A frente do pulso sente o campo $E_0 + \frac{\sigma_0}{2\epsilon}$ e a parte de trás, $E_0 - \frac{\sigma_0}{2\epsilon}$. Assim, se $\frac{\sigma_0}{2\epsilon} < E_0$, o pulso entra totalmente no volume da amostra; se $\frac{\sigma_0}{2\epsilon} > E_0$ somente uma parte dele entra e a traseira da parte que entra fica grudada em $x = 0$; se $\frac{\sigma_0}{2\epsilon} = E_0$ o pulso entra totalmente mas a parte de trás fica grudada em $x = 0$.

Problema semelhante a este mas com condições mais reais no sentido de se aplicarem mais diretamente às montagens experimentais comumente utilizadas, está resolvido na referência [19]: consiste numa amostra de isolante tendo numa das superfícies um eletrodo ligado à terra e a outra livre; esta última recebe um pulso de carga o qual induz uma densidade superficial igual e oposta no eletrodo; uma parte da carga do pulso penetra na amostra movimentando-se sob a ação do campo elétrico resultante; as condições iniciais e de contorno usadas ali são praticamente as mesmas que as de Rudenko. A referência [20] também traz um problema parecido mas com uma hipótese adicional: as cargas colocadas na superfície livre no instante inicial, depositam-se em armadilhas da superfície as quais liberam as cargas exponencialmente ($\sigma(t) = \sigma_0 e^{-t/\tau_s}$). O problema da referência [19] foi resolvido analiticamente considerando, assim como Rudenko, somente armadilhas profundas; o da referência [20] considera a liberação das cargas das armadilhas e foi resolvido numericamente com o método de diferenças finitas explícito. O procedimento para resolver numericamente estes problemas, com os métodos das características ou diferenças finitas que usamos no capítulo anterior, é muito parecido com o que será usado neste capítulo. Limitar-nos-emos, portanto, apenas à resolução numérica do problema proposto na

referência [18] acrescentando somente a liberação das cargas das armadilhas.

As equações que regem este problema são as mesmas daquele do capítulo anterior e que foram apresentadas no Capítulo I. A diferença está nas condições iniciais e de contorno que, agora, são:

$$\rho'(x',0) = \sigma_0\delta(x') \qquad 0\leq x'\leq 1$$

$$\rho'_t(x',0) = 0 \qquad 0\leq x'\leq 1$$

$$E'(x',0) = E_0 + \frac{\sigma_0}{2\epsilon} \qquad 0\leq x'\leq 1$$

$$E'(0,t') = E_0 - \frac{\sigma_0}{2\epsilon} \qquad t'>0$$

$$j'(t') = 0 \qquad t'\geq 0$$

As unidades reduzidas são introduzidas usando

$$x = \frac{x'}{l}\ ,\quad E = \frac{E'}{E_0}\ ,\quad t = \frac{\mu E_0}{l}t'\ ,\quad \tau_t = \frac{\mu E_0}{l}\tau'_t\ ,\quad \tau_d = \frac{\mu E_0}{l}\tau'_d\ ,$$

$$\rho = \frac{1}{\epsilon E_0}\rho'\ ,\quad \rho_t = \frac{1}{\epsilon E_0}\rho'_t\ ,\quad \alpha = \frac{\sigma_0}{2\epsilon E_0}$$

Nestas unidades as condições iniciais e de contorno se escrevem:

$$\rho(x,0) = 2\alpha\delta(x) \qquad 0\leq x\leq 1$$

$$\rho_t(x,0) = 0 \qquad 0\leq x\leq 1$$

$$E(x,0) = 1 + \alpha \qquad 0\leq x\leq 1$$

$$E(0,t) = 1 - \alpha \qquad t>0$$

$$j(t) = 0 \qquad t\geq 0$$

Como no capítulo anterior, estas condições dão origem a duas dificuldade numéricas (por causa dos infinitos) e novamente elas foram superadas com tratamentos analíticos. Em primeiro lugar, para integrar a equação

$$\frac{dE}{dt} = j + \rho_t E = \rho_t E \ ,$$

precisamos do valor de $\rho_t E$ em $x = 0$. Já sabemos que $E(0,t) = 1 - \alpha$, mas precisamos de $\rho_t(0,t)$. Para obtê-lo substituímos

$$\rho(x,t) = -\frac{1}{E(x,t)}\frac{\partial}{\partial t}E(x,t) = -\frac{\partial}{\partial t}\ln E(x,t)$$

na eq. (1.2.3'), resultando na equação diferencial:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_t(x,t) = -\frac{1}{\tau_t}\frac{\partial}{\partial t}\ln E(x,t) - \frac{\rho_t(x,t)}{\tau_d}$$

cuja solução é

$$\rho_t(x,t) = \frac{-e^{-t/\tau_d}}{\tau_t}\left[e^{t/\tau_d}\ln E(x,t) - \ln E(x,0) - \frac{1}{\tau_d}\int_0^t e^{t'/\tau_d}\ln E(x,t')dt'\right]$$

Como $E(0,t) = (1 - \alpha)$ que é constante,

$$\rho_t(0,t) = \frac{e^{-t/\tau_d}}{\tau_t}\ln\frac{E(0,0)}{E(0,t)} = \frac{e^{-t/\tau_d}}{\tau_t}\ln\left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha}\right) \qquad (4.1.1)$$

que não apresenta nenhum problema para $\alpha<1$, mas que é infinito para $\alpha = 1$ (só usaremos $\alpha\leq 1$, que são os casos em que o pulso entra totalmente). Como precisamos apenas do produto $E(0,t)\rho_t(0,t)$ e, neste caso de $\alpha = 1$, $E(0,t) = 0$, podemos calcular o limite deste produto para $\alpha\to 1$, obtendo $E(0,t)\rho_t(0,t) = 0$.

Em segundo lugar, se quisermos integrar a equação (2.1.21) para calcular ρ e, assim, obter o perfil de carga livre, precisaremos também de $\rho(0,t)$, $t>0$. Primeiramente queremos chamar a atenção para o fato de que, quando $\alpha = 1$, embora se possa considerar o nascimento de linhas em $x = 0$ para $t>0$, elas não são emitidas, isto é, não conseguem sair da origem, porque $E(0,t) = 0$, $j(t) = 0$ e $\rho_t(0,t)E(0,t) = 0$ (eq. (2.1.23) e (2.1.26)). Por isso, tanto com $\tau_d\to\infty$ quanto com $\tau_d \neq \infty$, se $\alpha = 1$ não se precisa de $\rho(0,t)$, $t>0$, para calcular $\rho(x,t)$ em pontos com $x>0$ usando a eq. (2.1.21). Mesmo sem precisar, para

$\tau_d \to \infty$ pode-se obtê-lo da expressão dada na referência [18] tomando o limite para $\alpha \to 1$, que dá $\rho(0,t) = 0$; para $\tau_d \neq \infty$ não pudemos calculá-lo.

Quando $\alpha < 1$, $E(0,t) = 1 - \alpha$ que é constante e positivo e, portanto, no caso em que $\tau_d \to \infty$, $\rho(0,t)$ é obviamente nulo; para $\tau_d \neq \infty$, isto não é tão óbvio mas como

$$\rho(0,t) = - \frac{\partial}{\partial t} \ln E(0,t)$$

podemos concluir que $\rho(0,t) = 0$ para $t > 0$, também no caso em que $\tau_d \neq \infty$.

Em qualquer dos casos acima, usamos a função auxiliar $u = 1/\rho$, que é nula em $x = 0$ para $t = 0$, para calcular a densidade de carga livre nas linhas emitidas em $t = 0$. No caso de $\alpha < 1$, para as linhas emitidas em $t > 0$, usamos ρ mesmo, pois, neste caso $\rho(0,t)$, $t > 0$, é nulo. Para $\alpha = 1$, não são emitidas linhas de $x = 0$ em $t > 0$.

Quando não se desejar integrar a eq. (2.1.21) para obter $\rho(x,t)$ querendo-se trabalhar apenas com E e ρ_t, o perfil de carga livre pode ser obtido de

$$\rho(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} E(x,t) - \rho_t(x,t) \qquad (4.1.2)$$

ou de

$$\rho(x,t) = - \frac{\partial}{\partial t} \ln E(x,t) \qquad (4.1.3)$$

entendendo-se que as derivadas devem ser feitas numericamente. A segunda forma dá resultados muito bons, semelhantes àqueles obtidos a partir da integração da equação diferencial para ρ (ou u); a primeira é um pouco pior mas ainda assim dá resultados aceitáveis quando se usa o método das características.

4.2. *Resultados*

Como já dissemos no início, este problema foi resolvido com a finalidade de testar o processo de integração ao longo das duas famílias de características - no capítulo anterior o teste com o resultado exato só foi possível para o caso em que todas as integrações eram feitas ao longo de uma única família de linhas características (isolante sem armadilhas). Por isso mostraremos somente os resultados obtidos com a aplicação do método de Euler para as integrações ao longo das duas direções características, tomando sempre o cuidado de usar incrementos pequenos. Usar o método de Runge-Kutta para as integrações ao longo das características $\frac{dx}{dt} = E$ tem o mesmo efeito que se verificou no capítulo anterior, ou seja, quando se usa o mesmo incremento Δt que no método de Euler, os resultados são mais próximos do exato; além disso pode-se obter ainda boa precisão com incrementos maiores do que aqueles necessários quando se usa somente o método de Euler.

Os casos com $\alpha<1$, em que o pulso de cargas desgruda de $x = 0$, não apresentam novidades em relação ao problema do Capítulo III: como lá, consideraremos um "pacote" de linhas emitidas de $x = 0$ em $t = 0$ rotuladas pelo campo elétrico, que varia de $1 + \alpha$ (linha da frente) até $1 - \alpha$ (última linha), e as linhas emitidas de $x = 0$ a cada Δt. Como $\alpha<1$, e portanto $E(0,t)>0$, todas estas linhas saem de $x = 0$ sendo nula a densidade inicial de carga livre sobre elas; se não houver liberação de cargas das armadilhas elas seguem sempre com $\rho = 0$; se houver liberação, estas linhas recebem as cargas que são liberadas. Neste caso de $\alpha<1$, portanto só se precisa tomar o cuidado de usar incrementos temporais pequenos para que o método de Euler funcione bem.

No caso de $\alpha = 1$, o pacote não desgruda de $x = 0$. Numericamente isto significa que a última linha do pacote inicial não sai de $x = 0$, pois o campo sobre ela é sempre nulo. Além disso, mesmo se considerarmos o nascimento de novas linhas em $x = 0$ para $t>0$, elas não são emitidas pois o campo sobre elas também é sempre nulo. Porém a penúltima linha do pacote inicial é emitida e avança sempre em direção a $x = 1$ o que faz com que a região compreendida entre $x = 0$ e a posição dela fique destituída de linhas. Para que isto não prejudique os resultados é necessário que esta penúltima linha ainda não esteja muito afastada de $x = 0$ até o tempo máximo de cálculo, o que pode ser obtido considerando muitas linhas no pacote inicial. Lembramos que, em geral, consideramos que este pacote contém ME linhas (ver apêndice B) cujos campos elétricos variam linearmente do valor do campo na frente do pulso até seu valor na parte de trás deste. Se quisermos continuar fazendo assim mesmo quando $\alpha = 1$ é preciso usar muitas linhas no início o que torna o cálculo demasiadamente demorado. Uma alternativa seria considerar uma densidade maior de linhas com campos pequenos do que com campos grandes; outra ainda seria interpolar uma linha entre $x = 0$ e a posição da linha mais próxima de $x = 0$ a cada incremento do tempo.

Passemos, agora, à apresentação das figuras: a figura 4.2 mostra a comparação de alguns perfis de carga livre e presa e de campo elétrico obtidos a partir da integração numérica com o método das características - Euler - com os correspondentes exatos. As curvas exatas foram feitas usando as expressões analíticas da referência [18] que envolvem integrais exponenciais

$$E_1(x) = -\int_{-x}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u}\,du \qquad (x>0)$$

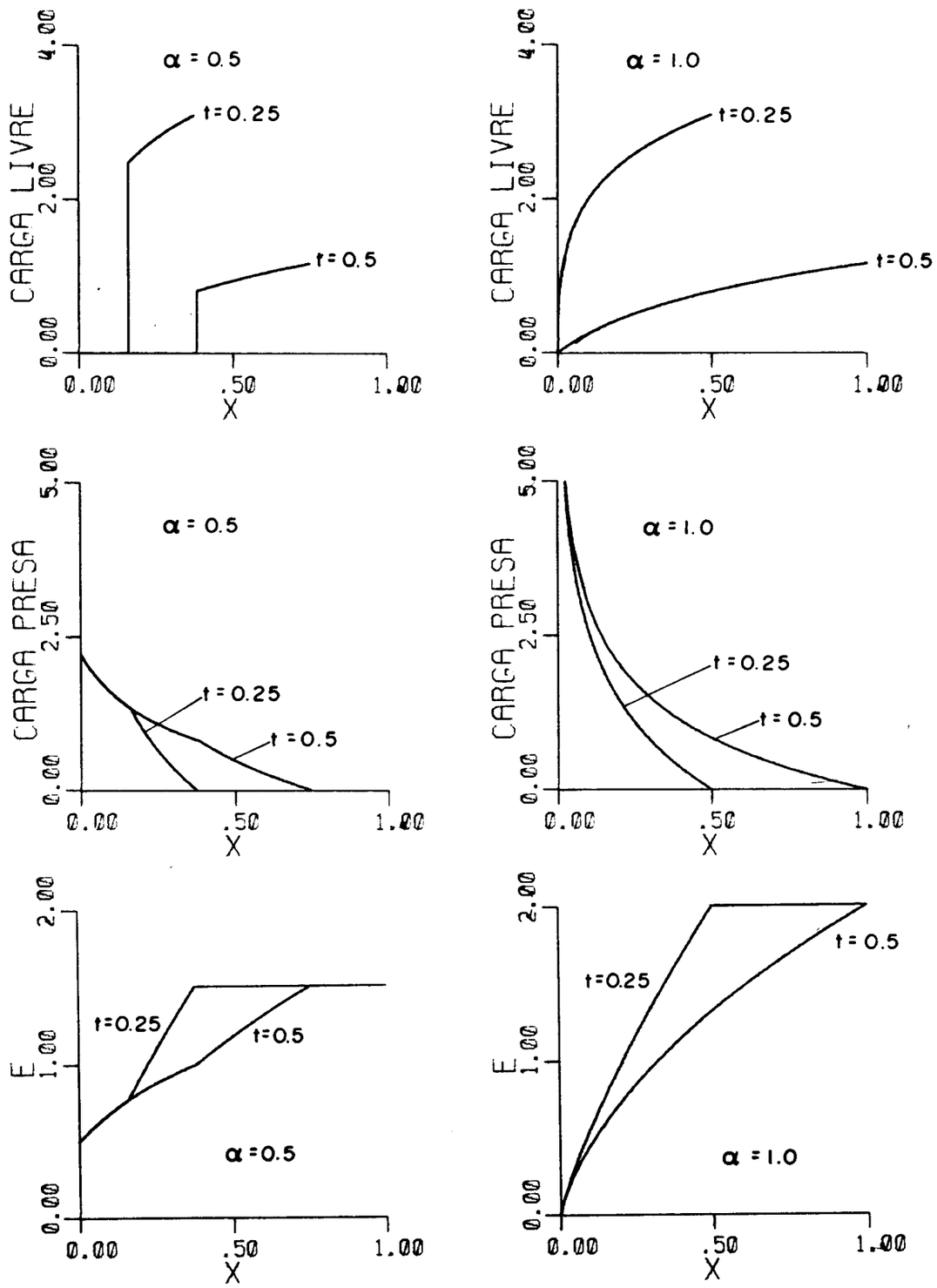

Figura 4.2. Comparação entre curvas exatas das densidades de carga livre e presa e do campo elétrico com as correspondentes obtidas da integração numérica com o método das características - Euler - com $\Delta t = 0.001$, ME = 200. $\tau_t = 0.5$, $\tau_d = 10^{20}$.

as quais foram calculadas usando uma subrotina da IBM (1130 Scientific Subroutine Package (1968)) chamada EXPI. As curvas para ρ, assim como todas as deste capítulo feitas com o método das características, foram feitas a partir da integração da equação diferencial para u, para as linhas emitidas em $t=0$, e para ρ, para as linhas emitidas em $t>0$. Pelo fato de termos usado incrementos bem pequenos ($\Delta t = 0.001$) os resultados para $\alpha = 0.5$ estão muito bons: não se percebe diferença entre as curvas exatas e as numéricas. Para $\alpha = 1$ também estão bem, mas como estas figuras foram feitas com apenas 201 linhas no pacote inicial (a linha da frente tem rótulo zero e a última, que é a que fica grudada em $x = 0$, tem rótulo 200) percebe-se, para o perfil de carga livre em $t = 0.5$, que a última linha emitida já está visivelmente afastada de $x = 0$, e que o valor de ρ nestas últimas linhas não está muito bom. Além disso, para o cálculo da voltagem, o campo elétrico nesta região é tomado como a média entre seus valores na origem e na linha mais próxima desta (regra do trapézio), o que é ruim quando esta linha estiver muito afastada da origem e o campo nesta região não for nulo. Fizemos outros cálculos cujos resultados não mostramos aqui, onde preenchemos a região entre $x = 0$ e a posição da linha de número 199 com mais linhas (300, 800 e 1200): quanto maior o número de linhas maior o tempo máximo para o qual os resultados ainda dão bem. É interessante observar que, quanto menos cargas ficarem presas perto da origem, menor será a velocidade destas últimas linhas; no caso extremo em que $\tau_t \to \infty$, não tem nenhuma importância que esta região fique vazia de linhas, já que o campo elétrico atrás do pacote é igual ao da origem que é nulo.

As figuras 4.3, 4.4 e 4.5 mostram alguns perfis de carga livre e presa e do campo elétrico para o caso em que há libera-

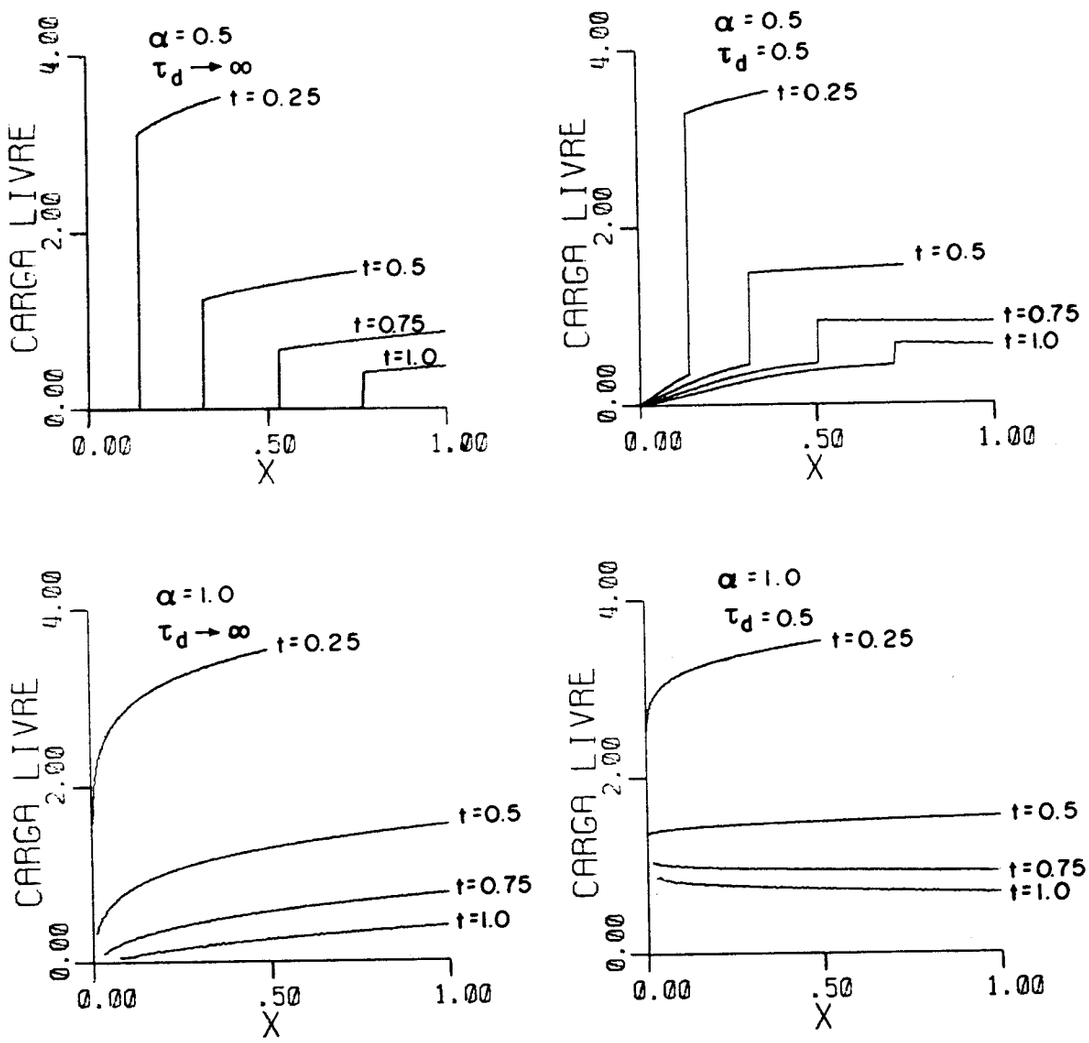

Figura 4.3. Densidades da carga livre calculadas numericamente com o método das características, para $\tau_t = 1.0$, com e sem liberação das cargas das armadilhas. $\Delta t = 0.001$, ME = 200.

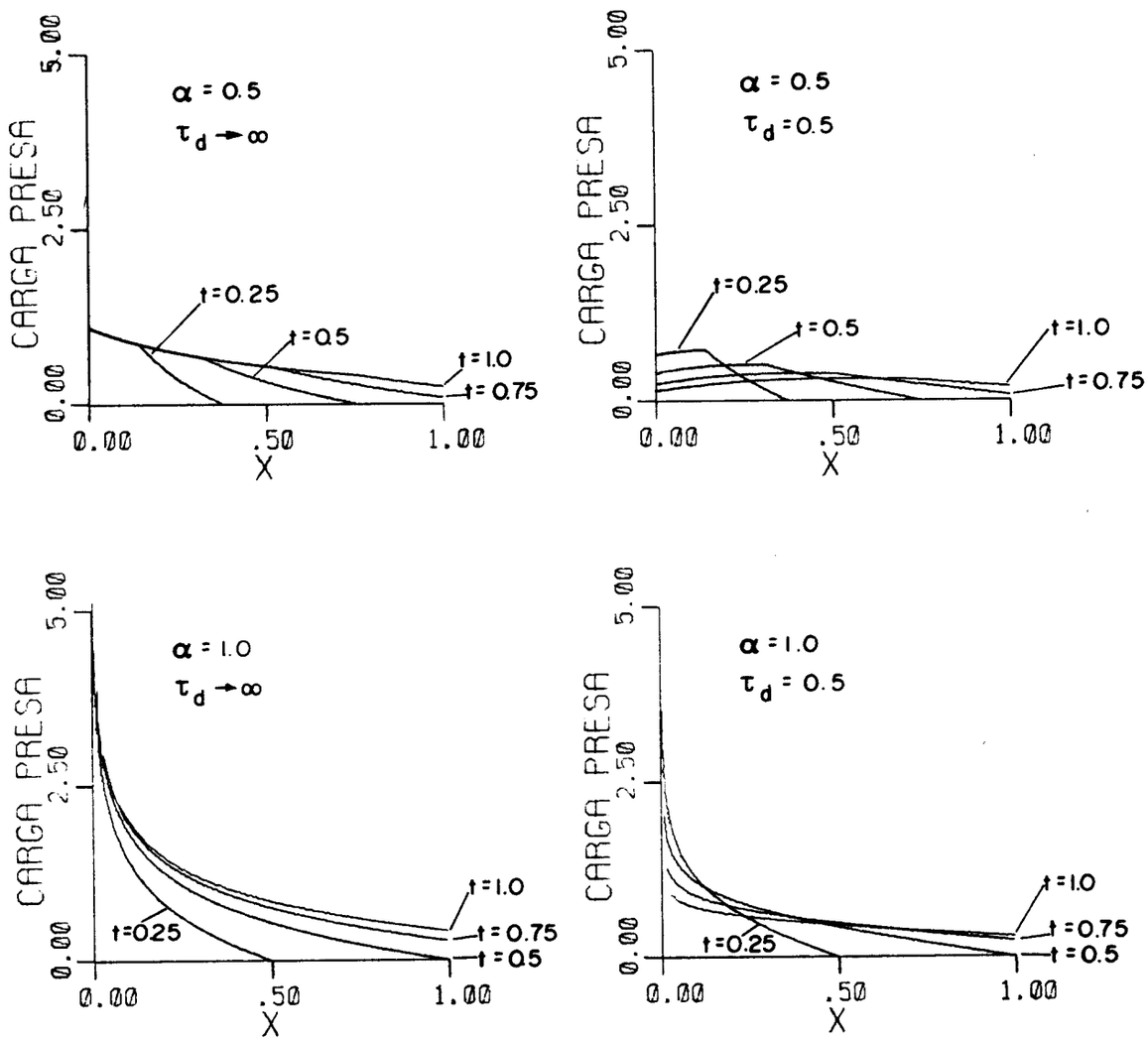

Figura 4.4. Densidades de carga nas armadilhas calculadas numericamente com o método das características, para $\tau_t = 1.0$, com e sem liberação. $\Delta t = 0.001$, ME = 200.

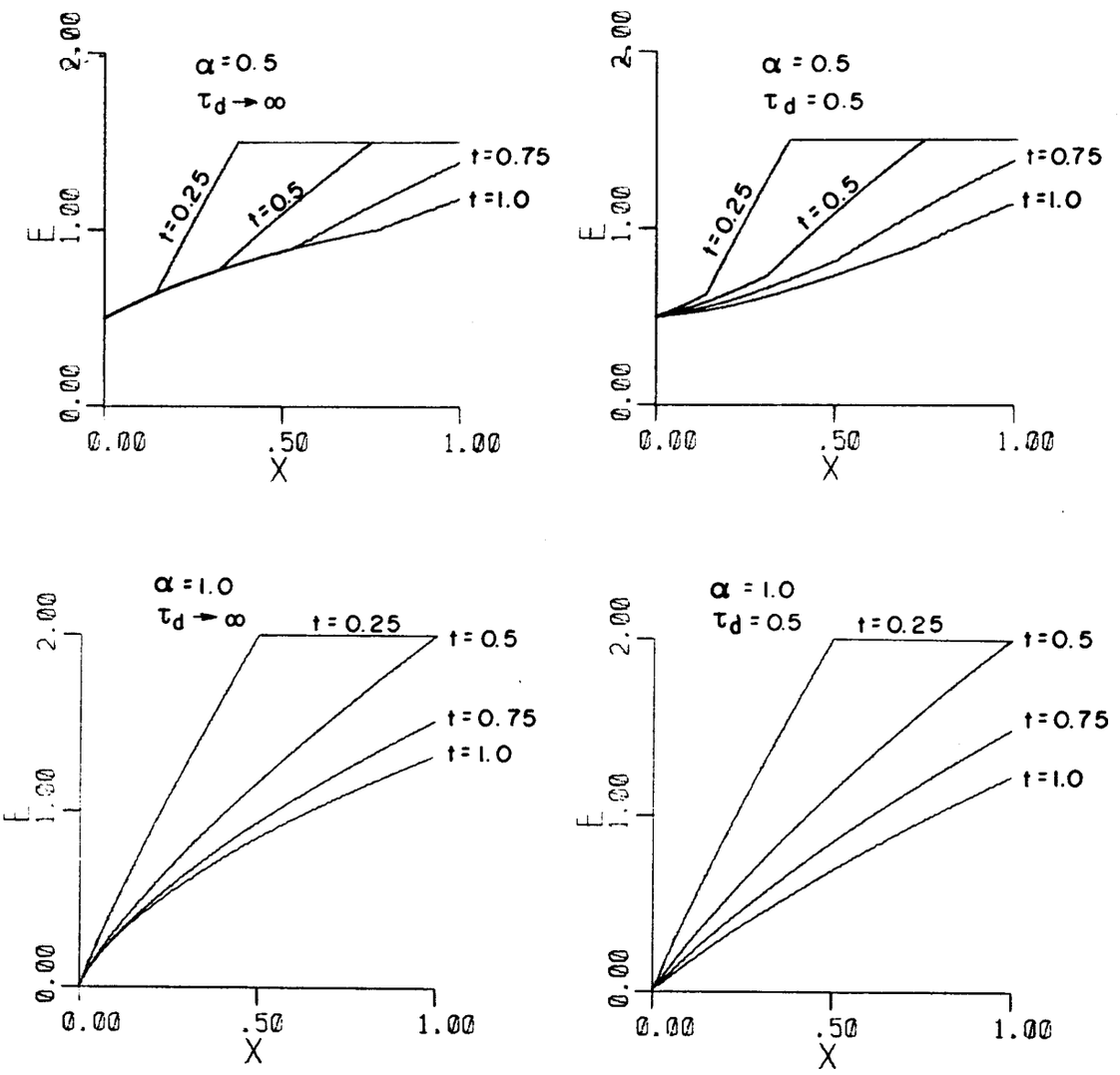

Figura 4.5. Campo elétrico calculado numericamente com o método das características, para $\tau_t = 1.0$, com e sem liberação das cargas das armadilhas. $\Delta t = 0.001$, ME = 200.

ção de cargas das armadilhas, perto dos correspondentes para o caso em que as armadilhas são profundas, para que se possa comparar os dois casos. Observe-se que, em instantes menores do que o tempo de trânsito da frente do pulso, tanto a posição da frente quanto a densidade de carga livre e o campo elétrico aí são os mesmos, tendo ou não liberação. A posição é a mesma porque em qualquer caso o valor do campo elétrico na frente é $(1 + \alpha)$ e, portanto, esta caminha com a mesma velocidade dada por $\frac{dx_f}{dt} = (1 + \alpha)$; e a densidade de carga livre é a mesma, com ou sem liberação, porque seu valor só depende do tempo de captura.

É interessante ver também alguns resultados de integração com o método das diferenças finitas - usamos somente o método das diferenças finitas explícito com derivadas "para trás". Embora os perfis de carga livre fiquem muito deformados, e os de campo elétrico e de carga presa também se deformem um pouco (figura 4.6), a voltagem, que é a grandeza que se mede experimentalmente é praticamente insensível ao método usado, desde que se use Δx e Δt adequados, isto é, que obedeçam à condição (2.2.14), que aqui fica:

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{1}{1 + \alpha} ,$$

e que sejam suficientemente pequenos para que as derivações numéricas não causem muito erro (figura 4.7).

Na figura 4.8 mostramos a derivada temporal da voltagem

$$- \frac{dV}{dt} = \frac{E^2(1,t) - E^2(0,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E \, dx ,$$

que também é uma grandeza que pode ser medida experimentalmente: esta é mais sensível do que a voltagem e os resultados, agora, são semelhantes àqueles obtidos no capítulo anterior para a corrente: o método das diferenças finitas explícito suaviza a curva. Vê-se porém que, usando Δx e Δt adequados, a

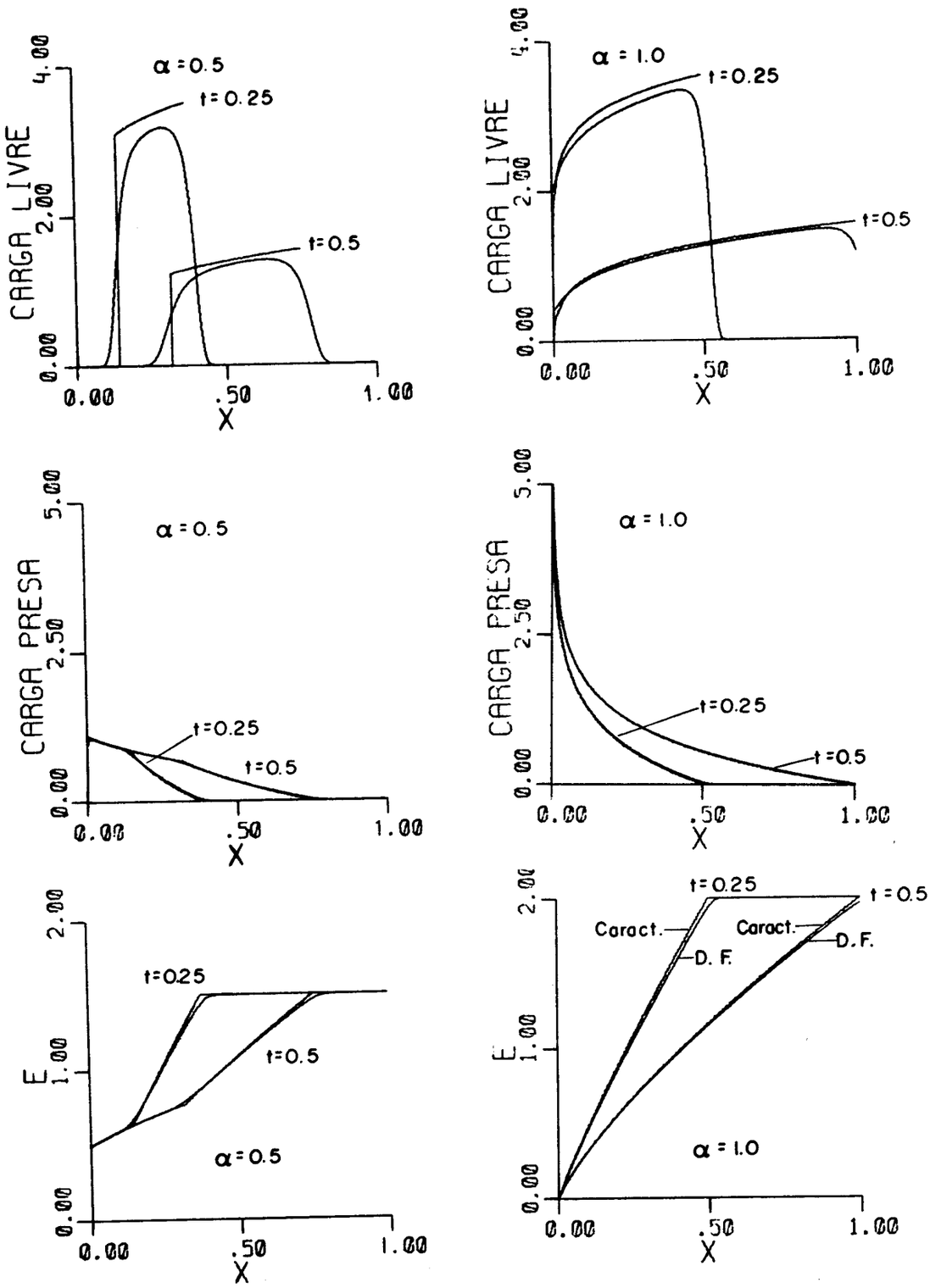

Figura 4.6. Comparação de densidades de carga livre e presa e de campos elétricos calculados com o método das diferenças finitas explícito ($\Delta x = 0.0025$, $\Delta t = 0.001$), com os correspondentes calculados com o método das características (para $\alpha = 0.5$: $\Delta t = 0.001$, ME = 200; para $\alpha = 1.0$: $\Delta t = 0.005$, ME = 200, ME' = 500). $\tau_t = 1.0$, $\tau_d = 10^{20}$.

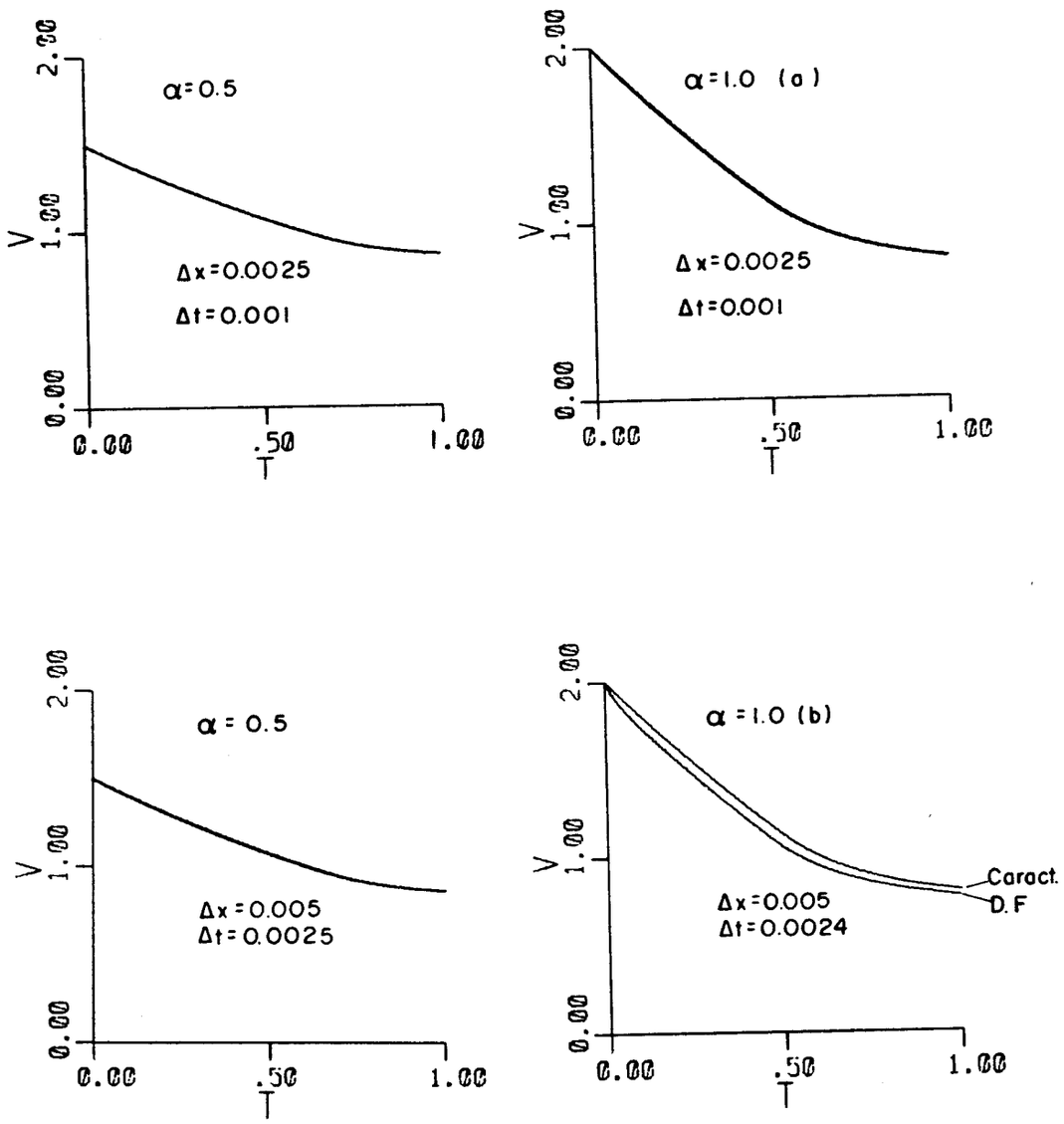

Figura 4.7. Comparação entre voltagens calculadas com o método das diferenças finitas explícito (Δx e Δt nas figuras) e as correspondentes calculadas com o método das características (para $\alpha = 0.5$: $\Delta t = 0.005$, ME = 200; para $\alpha = 1.0$: $\Delta t = 0.005$, ME = 200, ME' = 500). $\tau_t = 1.0$, $\tau_d = 10^{20}$.

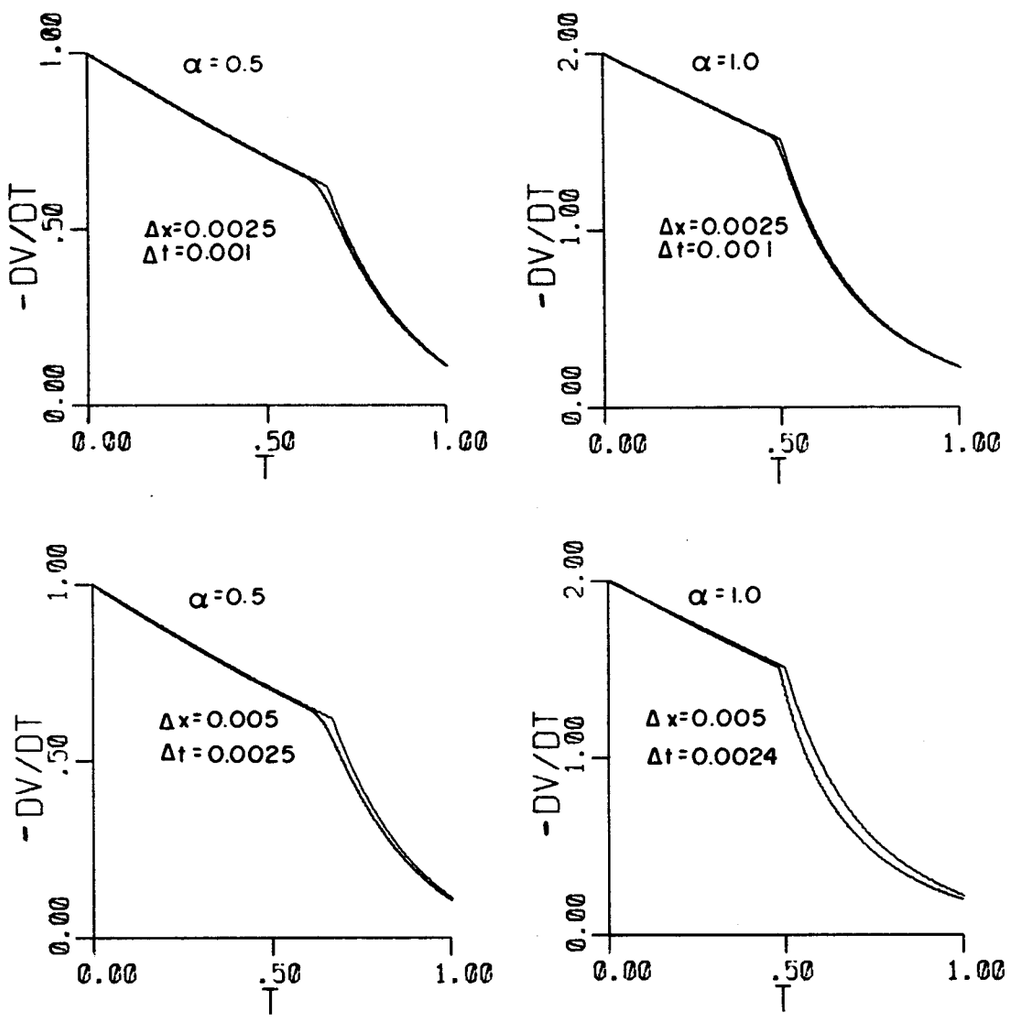

Figura 4.8. Comparação entre derivadas temporais da voltagem obtidas com o método das diferenças finitas explícito (Δx e Δt nas próprias figuras) e as correspondentes obtidas com o método das características (para $\alpha = 0.5$: $\Delta t = 0.005$, ME = 200; para $\alpha = 1.0$: $\Delta t = 0.005$, ME = 200, ME' = 500). $\tau_t = 1.0$, $\tau_d = 10^{20}$.

menos do arredondamento da curva no instante de chegada da frente em $x = 1$, pode-se obter boas curvas para a voltagem e para sua derivada.

Nas figuras 4.6, 4.7 e 4.8, cada curva feita com o método das diferenças finitas tem junto a correspondente feita com o método das características. Como se vê na legenda destas figuras, no caso de $\alpha = 1$, tomamos o cuidado de preencher o espaço entre $x = 0$ e a posição da linha de rótulo ME - 1 com mais 300 linhas (ME' = ME + número de linhas adicionais). Estas curvas foram feitas para $\tau_t = 1.0$ e $\tau_d \to \infty$; no caso de $\tau_t = 0.5$ (cujas curvas não mostramos aqui para não alongar demais esta parte) é necessário usar mais linhas aí (aproximadamente 1000 linhas além das ME + 1 iniciais) senão, para tempos da ordem de 1.0, os resultados já se afastam dos exatos.

CAPÍTULO V

MOVIMENTO DE UM PULSO DE CARGA EM UM ISOLANTE SUBMETIDO A UMA D.D.P. CONSTANTE

5.1. *Introdução*

O principal objetivo dos problemas resolvidos nos dois capítulos anteriores foi testar os métodos numéricos. Neste capítulo, e também no próximo, o objetivo será aplicá-los a situações experimentais.

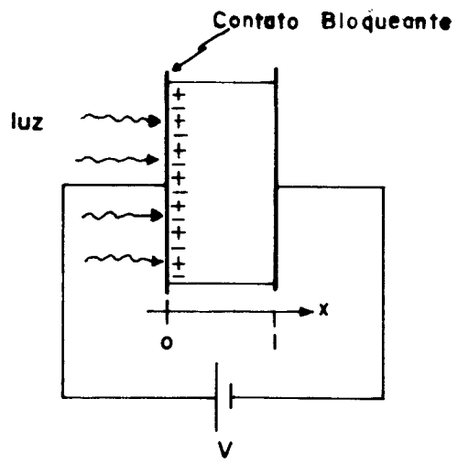

Figura 5.1

O problema deste capítulo teve origem na necessidade de se saber a influência da carga espacial nos modelos teóricos empregados em ajustes de medidas de tempo de vôo [21]. Uma experiência de tempo de vôo, que está esquematizada na figura 5.1, consiste no seguinte: uma amostra de isolante com eletrodos bloqueantes, sendo um deles transparente, é submetida a uma diferença de potencial constante V. No instante t = 0, através do eletrodo transparente que suporemos estar em x = 0, a amostra é iluminada por um flash de luz que é fortemente absorvida na superfície, provocando a criação de pares elétrons-buracos somente numa região muito próxima da superfície. Os portadores de sinal

oposto ao deste eletrodo são imediatamente recolhidos por ele e os de mesmo sinal vão se dirigir ao outro eletrodo. Cria-se, assim, uma camada muito fina - lâmina - de cargas, que podemos representar por uma função delta, e cuja carga total Q é, no máximo, igual a CV onde C é a capacidade da amostra.

Estes modelos teóricos têm solução analítica somente nos casos em que o campo elétrico devido às cargas colocadas no material é desprezível frente ao campo elétrico aplicado. Quando o campo da carga espacial não pode ser desprezado só se pode obter soluções numéricas.

Iniciaremos com o modelo mais simples, de condução com mobilidade uniforme (como temos feito até aqui). Mostraremos depois como obter a solução numérica do modelo proposto na referência [21] que melhor ajustou seus resultados experimentais.

5.2. *Condução Através de um Único Canal de Mobilidade Constante*

5.2.1. *Colocação do Problema*

Este problema tem solução exata, analítica, somente para o caso de isolante livre de armadilhas [21], [22]. No caso mais geral, as equações pertinentes ao problema são as mesmas que usamos até aqui: equação de Poisson, (1.2.1), equação da continuidade, (1.2.2) com a (1.2.4), e a equação de cinética de troca de cargas entre a banda de condução e as armadilhas, (1.2.3). As condições de contorno para ele são:

$$\int_0^l E'(x',t')dx' = V \ , \qquad t' \geq 0$$

$$\rho'(0,t') = \rho'_t(0,t') = 0 \ , \qquad t' > 0$$

(esta última decorre do fato de o eletrodo não injetar cargas e o pulso ser criado já no interior da amostra, $x = 0^+$); as condi-

ções iniciais são:

$$\rho'(x',0) = \frac{Q'}{A}\delta(x'-0^+) \ , \qquad x'\geq 0$$

$$\rho'_t(x',0) = 0 \ , \qquad x'\geq 0$$

$$E'(0,0) = \frac{V}{l} - \frac{Q'}{A\epsilon}$$

$$E'(x',0) = \frac{V}{l} \ , \qquad x'>0$$

onde A é a área. Observe-se que $E'(0,0)\geq 0$ pois $A\sigma' \leq CV = (\frac{\epsilon A}{l})V \Rightarrow$ $\Rightarrow \frac{Q'}{A\epsilon} \leq \frac{V}{l}$. A corrente inicial é obtida da equação da corrente total, lembrando que a voltagem é constante e considerando que o campo elétrico na posição da camada de cargas é a média entre seu valor na frente e atrás desta. Então

$$lJ'(0) = A\int_0^l \mu\rho'(x',0)E'(x',0)dx' = \mu Q'E'(0^+,0)$$

$$J'(0) = \frac{\mu Q'}{l}\left(\frac{V}{l} - \frac{1}{2}\frac{Q'}{A\epsilon}\right) \qquad (5.2.1)$$

Como nos outros problemas, é conveniente trabalhar com a forma adimensional das equações. As relações entre as grandezas com dimensão e as correspondentes adimensionais são

$$x = \frac{x'}{l} \ , \quad t = \frac{t'}{T_0} \ , \quad \tau_t = \frac{\tau'_t}{T_0} \ , \quad \tau_d = \frac{\tau'_d}{T_0} \ , \quad E = \frac{E'}{(V/l)}$$

$$\rho = \frac{Al}{CV}\rho' \ , \quad \rho_t = \frac{Al}{CV}\rho'_t \ , \quad Q = \frac{Q'}{CV} \ , \quad j = \frac{T_0}{CV}Aj' \ , \quad J = \frac{T_0}{CV}J'$$

onde $T_0 = \frac{l^2}{\mu V}$, $C = \frac{\epsilon A}{l}$ e as grandezas com linha têm dimensão e aquelas sem linha são adimensionais (observe-se que, nestas unidades, $j = J$).

Nas unidades reduzidas as condições de contorno e iniciais ficam

$$\int_0^1 E(x,t)dx = 1 \ , \qquad t\geq 0$$

$$\rho(0,t) = \rho_t(0,t) = 0 \ , \qquad t>0$$

$$\rho(x,0) = Q\delta(x-0^+) \ , \qquad x\geq 0$$

$$\rho_t(x,0) = 0 \ , \qquad x\geq 0$$

$$E(0,0) = 1 - Q$$

$$E(x,0) = 1 \ , \qquad x>0$$

$$J(0) = j(0) = Q\left(1-\frac{Q}{2}\right) \ .$$

Como $\rho_t(0,t) = 0$ para $t\geq 0$, e $\rho(0,t) = 0$ para $t>0$ não temos, neste problema, as dificuldades que tivemos nos dois capítulos anteriores, de calcular o produto $\rho_t E$ e a densidade de carga livre na origem. Só temos um infinito no instante inicial: para ρ em $x = 0$, onde nascem todas as linhas, o qual pode ser evitado usando, como já fizemos antes, a função $u = \frac{1}{\rho}$ para calcular ρ sobre as linhas que nascem em $x = 0$ em $t = 0$. Para as linhas que nascem em tempos posteriores, deve-se usar ρ mesmo, pois $\rho(0,t) = 0$.

5.2.2. *Resultados*

Da mesma forma que nos problemas anteriores, os métodos de diferenças finitas introduzem um efeito artificial de difusão. Como nas experiências de tempo de vôo a descontinuidade é importante, só mostraremos os resultados com o método das características.

Não entraremos em detalhes sobre a maneira como foram feitas as integrações numéricas para este problema, pois seria mera repetição do que já foi dito nos capítulos anteriores. É interessante notar, porém, que: (a) mesmo quando o campo elétrico na origem é inicialmente nulo (o que acontece quando $Q = CV$), ele se torna diferente de zero em tempos posteriores (variando sempre) de maneira que, além das linhas emitidas de $x = 0$ em $t = 0$ que são rotuladas pelo campo elétrico E, linhas características são continuamente emitidas de $x = 0$, todas com densidade de carga livre inicialmente nula; (b) se o isolante não tem armadilhas ($\tau_t \to \infty$) ou se suas armadilhas são profundas

($\tau_t \neq \infty$ mas $\tau_d \to \infty$), estas linhas continuam sempre com $\rho = 0$, embora no segundo caso elas tenham $\rho_t \neq 0$; porém, se as armadilhas puderem liberar as cargas que aprisionam, as linhas que nasceram com $\rho = 0$ são alimentadas por estas cargas liberadas.

Semelhantemente ao que aconteceu no problema do Capítulo III, nos casos em que o aprisionamento das cargas pelas armadilhas é muito forte (τ_t pequeno e τ_d grande), não é bom calcular a corrente por $j = \frac{E^2(1,t)-E^2(0,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$, sendo, nestes casos, mais preciso calculá-las por $j = \int_0^1 \rho E dx$. Porém para tempos de captura da ordem do tempo de trânsito, ou maiores, as duas formas dão bons resultados.

Embora este problema tenha solução exata (analítica até o tempo de trânsito da frente do pulso e numérica para tempos maiores) para o caso de isolante sem armadilhas, não é nosso objetivo mostrar mais comparações de resultados numéricos com exatos, subentendendo que os capítulos anteriores já tenham incutido suficiente confiança. Limitar-nos-emos, portanto, a afirmar que o método das características novamente dá resultados muito bons.

Trabalhamos, como sempre, com as equações nas unidades reduzidas, mas as entradas e saídas dos programas foram em unidades reais. Em todas as figuras apresentadas nesta seção usamos:

$$\varepsilon = 4 \times 8.854 \times 10^{-14} \text{ F/cm}, \quad l = 0.22 \text{ cm}, \quad A = 1.1 \text{ cm}^2$$

que são valores típicos das amostras de monocristais de enxofre ortorrômbico usadas na referência [21];

$$\mu = 3.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{Vs},$$

que é, aproximadamente, a mobilidade dos elétrons nas mesmas

amostras à temperatura de 29°C (a mobilidade dos buracos é maior: aproximadamente 3.5 cm^2/Vs à mesma temperatura); e a voltagem

$$V = 2500 \text{ Volts.}$$

Desta forma, obtém-se

$$T_0 = \frac{l^2}{\mu V} \simeq 0.0538 \text{ s}$$

$$C = \frac{\epsilon A}{l} \simeq 1.77 \times 10^{-12} \text{ F}$$

$$CV \simeq 4.425 \times 10^{-9} \text{ C}$$

A figura 5.2. mostra curvas de corrente em função do tempo, com três valores diferentes da carga inicial do pulso, para os casos de isolante sem armadilhas ($\tau_t \to \infty$) e com armadilhas ($\tau_t = 1.0$ e $\tau_d \to \infty$) - a referência [22] contém estas curvas para $\tau_t \to \infty$. Para que todas as curvas pudessem ser colocadas juntas, em vez de colocar J'(t) na ordenada como faremos nas outras figuras, colocamos $\frac{J'(t)}{J'(0)}$ onde J'(0) é a corrente inicial correspondente a cada uma, dada pela eq. (5.2.1). No eixo das abcissas colocamos $\frac{t'}{T_0}$, onde $T_0 = \frac{l^2}{\mu V}$, como faremos também nas outras figuras. Observe-se que $Q = \frac{CV}{100}$ já se aproxima bem da condição de sinal fraco, isto é, daquela em que o campo elétrico das cargas do pulso é desprezível frente ao campo das próprias cargas. Até aqui tudo foi feito com precisão simples (sete algarismos significativos); quando se quer usar cargas muito pequenas, de $\approx 10^{-3}CV$ até $\approx 10^{-13}CV$, é necessário usar precisão dupla (dezessete algarismos significativos). Isto porque o campo inicial sobre as linhas que nascem em t = 0 é dado por (em unidades reduzidas):

$$E_K = 1 - \frac{K}{ME} \frac{Q'}{CV}, \qquad 0<K<ME,$$

de maneira que, se $\frac{Q'}{CV}$ for muito pequeno, o programa "não vê" as

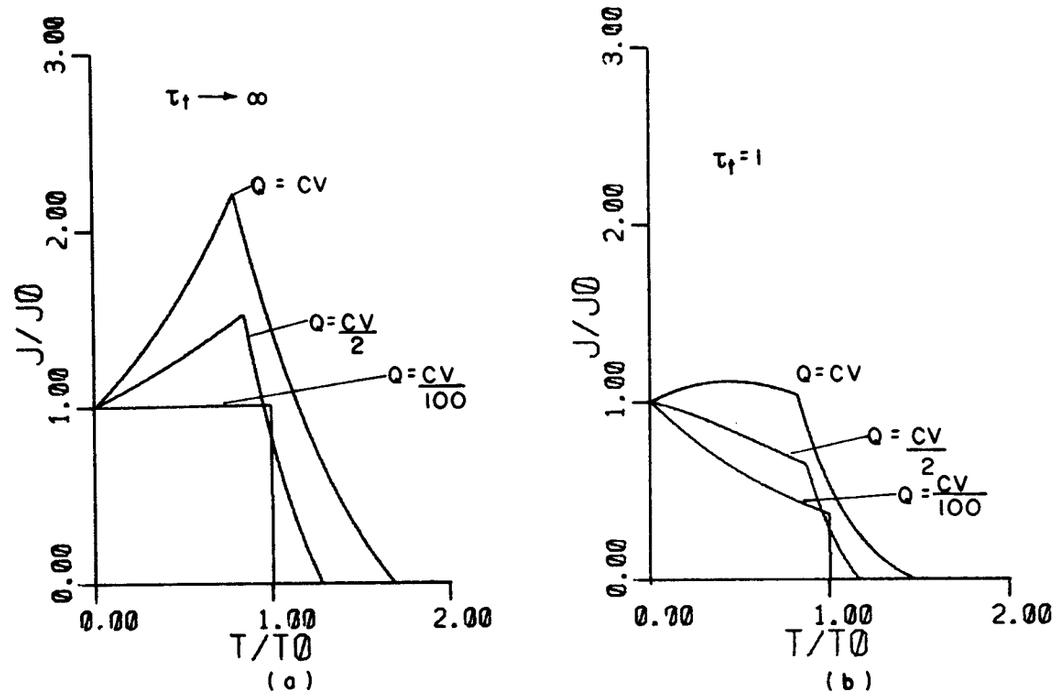

Figura 5.2. J'(t')/J'(0) versus t'/T_0 para três valores diferentes da carga no pulso. $j = \frac{E^2(1,t)-E^2(0,t)}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$. $\tau_t = \frac{\tau'_t}{T_0}$, $\frac{\tau'_d}{T_0} = 10^{20}$, $\frac{\Delta t'}{T_0} = 0.005$, ME = 200.

cargas, dando corrente nula nos casos extremos de $Q' < 10^{-7}$CV com precisão simples e $Q' < 10^{-17}$CV com precisão dupla. Nestes casos deve-se usar a solução analítica obtida com a aproximação de sinal fraco, referência [21] e [23]. Na verdade, como a corrente para $Q = \frac{CV}{100}$ já se aproxima bem da condição de sinal fraco, como observamos acima com relação às curvas da figura 5.2, para $Q < 10^{-3}$CV já se pode usar com segurança a solução aproximada.

As figuras 5.3 e 5.4 mostram curvas de corrente e de densidades de carga livre no instante $t' = \frac{T_0}{2}$ para $\tau_d \to \infty$ e vários τ_t's e para $\tau'_t = \frac{T_0}{2}$ e diferentes τ_d's ($T_0 = \frac{l^2}{\mu V}$). As curvas para a densidade de carga livre foram feitas a partir da integração da eq. (3.4.1) para as linhas do pacote inicial e da eq. (2.1.21') para as linhas emitidas em tempos posteriores.

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
FÍSICA

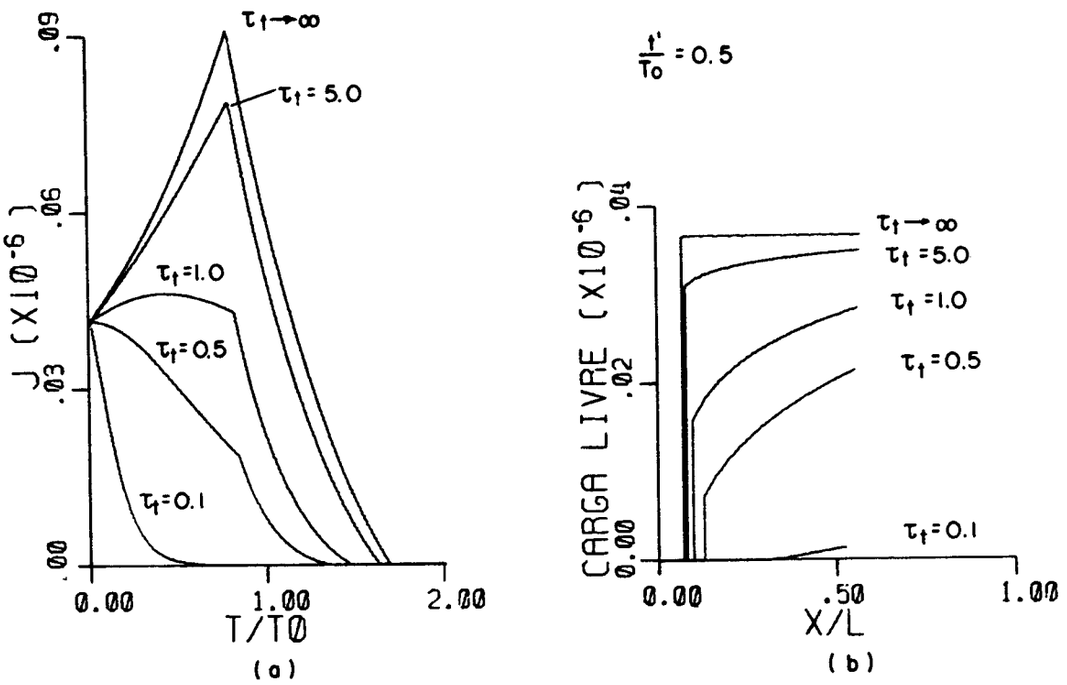

Figura 5.3. $\tau_t = \frac{\tau'_t}{T_0}$, $\frac{\tau'_d}{T_0} = 10^{20}$, $\frac{\Delta t'}{T_0} = 0.005$, ME = 200. $j = \int_0^1 \rho E dx$. (a) Corrente total (em Amperes) em função de $\frac{t'}{T_0}$. (b) Densidade de carga livre (em C/cm^3) em função de $\frac{x'}{l}$.

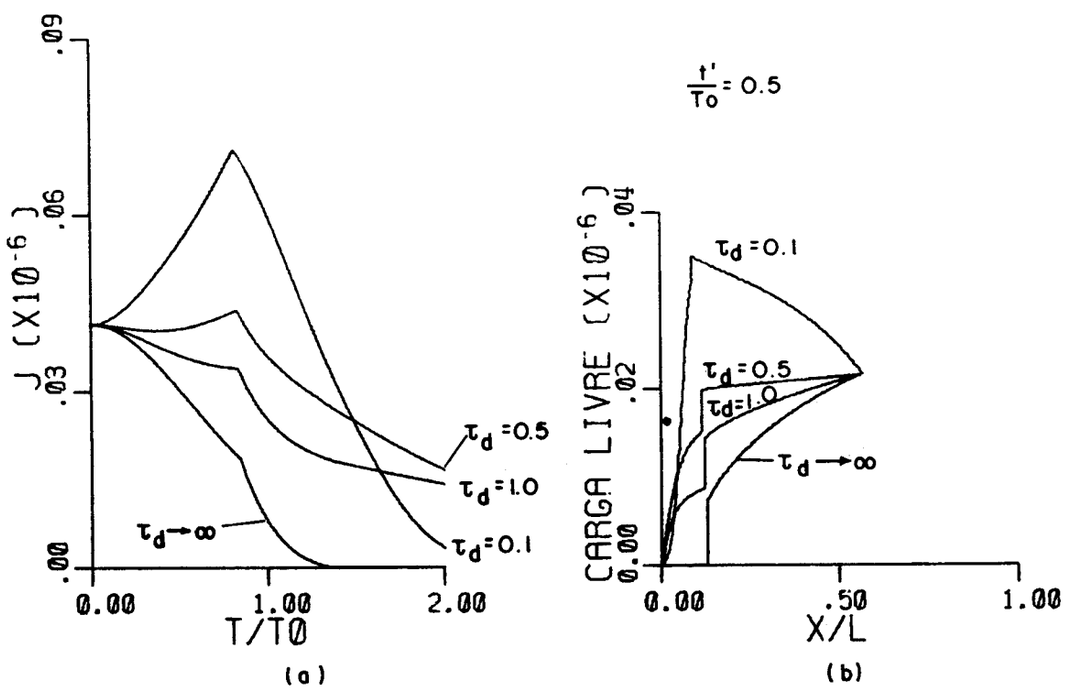

Figura 5.4. $\tau_d = \frac{\tau'_d}{T_0}$, $\frac{\tau'_t}{T_0} = 0.5$, $\frac{\Delta t'}{T_0} = 0.005$, ME = 200. $j = \int_0^1 \rho E dx$. (a) Corrente total (em Amperes) em função de $\frac{t'}{T_0}$. (b) Densidade de carga livre (em C/cm^3) em função de $\frac{x'}{l}$.

5.3. *Condução Através de Dois "Canais"*

O modêlo resolvido numericamente nesta seção foi proposto na referência [21]. Neste modêlo supõe-se que o isolante possui dois processos de condução ocorrendo simultaneamente através de dois "canais": um em que um pacote de portadores caminha com mobilidade constante, interagindo com um nível de armadilhas profundas, e outro em que outro pacote caminha com uma mobilidade que decai exponencialmente com a distância x à superfície de injeção e que interage com outro nível de armadilhas profundas. O canal onde a mobilidade é constante é chamado de canal de condução normal ou canal normal, e o outro de canal de condução anômala ou canal anômalo. Este último foi justificado supondo que estados de superfície se estendem para o volume do material com sua concentração diminuindo a partir da superfície. O caso de sinal fraco tem solução analítica mas, para os casos em que o campo elétrico das cargas do pulso não é desprezível em relação ao campo aplicado, foi importante a solução numérica para os ajustes teóricos dos resultados experimentais. Indicaremos com o índice "1" as grandezas referentes ao canal normal e com índice "2" aquelas referentes ao canal anômalo.

Este problema pode ser colocado da seguinte maneira: o flash de luz cria um pulso com carga total q_1 no canal normal, cuja mobilidade é μ_1, e outro pulso de carga total q_2 no canal anômalo, cuja mobilidade é $\mu_2(x) = \mu_0 e^{-\alpha x}$, μ_0 e α constantes. As equações que regem este problema são semelhantes àquelas apresentadas no Capítulo I; porém, como agora temos dois canais de condução, devemos usar (considerando profundas as armadilhas):

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x}(\mu_1 \rho_1 E) - \frac{\rho_1}{\tau_{t_1}} \qquad (5.3.1)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\mu_2 \rho_2 E) - \frac{\rho_2}{\tau_{t2}} \qquad (5.3.2)$$

$$\frac{\partial \rho_{t1}}{\partial t} = \frac{\rho_1}{\tau_{t1}} \qquad (5.3.3)$$

$$\frac{\partial \rho_{t2}}{\partial t} = \frac{\rho_2}{\tau_{t2}} \qquad (5.3.4)$$

$$j(t) = \mu_1 \rho_1 E + \mu_2 \rho_2 E + \epsilon \frac{\partial E}{\partial t} \qquad (5.3.5)$$

$$\epsilon \frac{\partial E}{\partial x} = \rho_1 + \rho_2 + \rho_{t1} + \rho_{t2} \qquad (5.3.6)$$

As condições de contorno e iniciais são semelhantes àquelas da seção anterior:

$$\int_0^l E(x,t)dx = V \ , \qquad t \geq 0$$

$$\rho_1(0,t) = \rho_2(0,t) = \rho_{t1}(0,t) = \rho_{t2}(0,t) = 0 \ , \qquad t > 0$$

$$\rho_1(x,0) = \frac{q_1}{A}\delta(x-0^{++}) \ , \qquad x \geq 0$$

$$\rho_2(x,0) = \frac{q_2}{A}\delta(x-0^{+}) \ , \qquad x \geq 0$$

$$\rho_{ti}(x,0) = \rho_{t2}(x,0) = 0 \ , \qquad x \geq 0$$

$$E(0,0) = \frac{V}{l} - \frac{(q_1+q_2)}{A\epsilon}$$

$$E(x,0) = \frac{V}{l} \ , \qquad x > 0$$

onde consideramos que $\mu_1 > \mu_0$ de maneira que o pulso de cargas no canal normal, mesmo no instante inicial, já está um pouco à frente ($x = 0^{++}$) do pulso de cargas do canal anômalo ($x = 0^{+}$). Esta condição foi colocada para evitar um "pulo" inicial na corrente calculada numericamente (para cima ou para baixo, dependendo de μ_1 ser maior ou menor que μ_0 e de q_1 ser maior ou menor que q_2), que aparece quando consideramos os dois pulsos na mesma posição no instante inicial. Com exceção deste pulo, não faz diferença colocá-los na mesma posição ou deslocados da maneira como estamos considerando.

A corrente inicial é, então, obtida por:

$$lJ(0) = A\int_0^l (\mu_1\rho_1(x,0)E(x,0)+\mu_2(x)\rho_2(x,0)E(x,0))dx$$

$$J(0) = \frac{A}{l}\left(\mu_1\frac{q_1}{A}E(0^{++},0)+\mu_0\frac{q_2}{A}E(0^{+},0)\right)$$

onde $E(0^{++},0)$ e $E(0^{+},0)$ são os campos elétricos nas posições iniciais dos pulsos dos canais normal e anômalo, respectivamente, e que podem ser obtidos tirando a média entre os valores do campo na frente e atrás de cada um. Obtém-se, então,

$$J(0) = \frac{\mu_1 q_1}{l}\frac{\left(\frac{V}{l}+\left(\frac{V}{l}-\frac{q_1}{A\epsilon}\right)\right)}{2} + \frac{\mu_0 q_2}{l}\frac{\left(\left(\frac{V}{l}-\frac{q_1}{A\epsilon}\right)+\left(\frac{V}{l}-\frac{(q_1+q_2)}{A\epsilon}\right)\right)}{2}$$

$$J(0) = \frac{\mu_1 q_1}{l}\left(\frac{V}{l}-\frac{q_1}{2A\epsilon}\right) + \frac{\mu_0 q_2}{l}\left(\frac{V}{l}-\frac{q_1}{A\epsilon}-\frac{q_2}{2A\epsilon}\right)$$

O sistema de eqs. (5.3.1) a (5.3.6) é hiperbólico com características $\frac{dx}{dt} = 0$, $\frac{dx}{dt} = \mu_1 E$ e $\frac{dx}{dt} = \mu_2 E$. As eqs. (5.3.3), (5.3.4) e (5.3.5) já estão na forma normal com derivadas ao longo da direção dada por $\frac{dx}{dt} = 0$; as eqs. (5.3.1) e (5.3.2) podem ser facilmente colocadas na forma normal usando a eq. (5.3.6) para escrever $\frac{\partial E}{\partial x}$ o que faz com que a (5.3.1) só contenha a derivada de ρ_1 ao longo da direção dada por $\frac{dx}{dt} = \mu_1 E$, e a (5.3.2) a derivada de ρ_2 ao longo da direção determinada por $\frac{dx}{dt} = \mu_2 E$. Há, pelo menos, outras duas maneiras de escrever o sistema em forma normal: usar a eq. (5.3.6) para substituir ρ_1 ou ρ_2 da eq. (5.3.5), obtendo assim a equação para E na direção $\frac{dx}{dt} = \mu_1 E$ ou $\frac{dx}{dt} = \mu_2 E$, respectivamente.

Novamente, temos uma dificuldade na integração das equações pois ρ_1 e ρ_2 são infinitos na origem em t = 0; e aqui não adianta usar $u_1 = \frac{1}{\rho_1}$ e $u_2 = \frac{1}{\rho_2}$ pois isto faz aparecer termos do tipo $\frac{u_1}{u_2}$ e $\frac{u_2}{u_1}$ que são indeterminados. Para evitar este problema, usamos um artifício matemático que possibilitou eliminar ρ_1 e ρ_2 do sistema de equações; ainda assim precisaremos deles para calcular a corrente, para o que usaremos derivação numérica (o motivo para isto será explicado

posteriormente).

O artifício que usamos foi o seguinte: separamos o campo elétrico e a corrente devidos às cargas tipo "1" (aos quais chamamos de F e de j_1) daqueles devidos às cargas do tipo "2" (aos quais chamamos de G e de j_2), para poder escrever:

$$\epsilon\frac{\partial F}{\partial x} = \rho_1 + \rho_{t1} \qquad (5.3.7)$$

$$\epsilon\frac{\partial G}{\partial x} = \rho_2 + \rho_{t2} \qquad (5.3.8)$$

$$j_1 = \mu_1\rho_1 E + \epsilon\frac{\partial F}{\partial t} \qquad (5.3.9)$$

$$j_2 = \mu_2\rho_2 E + \epsilon\frac{\partial G}{\partial t} \qquad (5.3.10)$$

de maneira que

$$F + G = E \qquad (5.3.11)$$

$$j_1 + j_2 = j \qquad (5.3.12)$$

obtendo,assim,

$$\epsilon\left(\frac{\partial F}{\partial t}+\mu_1 E\frac{\partial F}{\partial x}\right) = j_1 + \mu_1\rho_{t1}E \qquad (5.3.13)$$

$$\epsilon\left(\frac{\partial G}{\partial t}+\mu_2 E\frac{\partial G}{\partial x}\right) = j_2 + \mu_2\rho_{t2}E \qquad (5.3.14)$$

ou

$$\epsilon\frac{d_1 F}{dt} = j_1 + \mu_1\rho_{t1}E \qquad (5.3.13')$$

$$\epsilon\frac{d_2 G}{dt} = j_2 + \mu_2\rho_{t2}E \qquad (5.3.14')$$

entendendo-se que $\frac{d_1F}{dt}$ representa a derivada de F na direção dada por $\frac{dx_1}{dt} = \mu_1 E$, e $\frac{d_2G}{dt}$ a derivada de G na direção dada por $\frac{dx_2}{dt} = \mu_2 E$.

Podemos, assim, integrar a eq. (5.3.13') para F ao longo de linhas da família de características $\frac{dx_1}{dt} = \mu_1 E$, a eq. (5.3.14') para G ao longo de linhas da família $\frac{dx_2}{dt} = \mu_2 E$ e as eqs. (5.3.3) e (5.3.4) para ρ_{t1} e ρ_{t2} ao longo das direções x = constante, sendo j_1 e j_2 calculados por

$$j_1 = \frac{\mu_1}{l}\int_0^l \rho_1 E dx \qquad (5.3.15)$$

$$j_2 = \frac{\mu_0}{l}\int_0^l e^{-\alpha x}\rho_2 E dx \ . \qquad (5.3.16)$$

Devemos, agora, fazer três observações:

1 - Estamos supondo que $\int_0^l F dx$ e $\int_0^l G dx$ são constantes por ser mais simples. De outra forma, as correntes parciais j_1 e j_2 seriam diferentes destas, mas a corrente total $j = j_1 + j_2$, que é a que interessa, seria a mesma, isto é, igual àquela obtida com as formas 5.3.15 e 5.3.16.

2 - Precisamos do campo elétrico total (E = F + G) sobre as posições tipo 1 e tipo 2 determinadas, respectivamente, pelas características $\frac{dx_1}{dt} = \mu_1 E$ e $\frac{dx_2}{dt} = \mu_2 E$, para o que precisamos de F e de G nos dois tipos de linhas. Calculamos F nas posições tipo 1, e G nas posições tipo 2; para obter F nas posições 2 e G nas posições 1 usamos interpolação linear;

3 - Neste problema de condução através destes dois canais, não pudemos escrever a densidade de corrente total (j) nem as parciais (j_1 e j_2) somente em função do(s) campo(s) elétrico(s) e das cargas nas armadilhas. Também não foi possível integrar as equações para ρ_1 e ρ_2:

$$\frac{d_1\rho_1}{dt} = -\mu_1\rho_1(\rho_1+\rho_2+\rho_{t1}+\rho_{t2}) - \frac{\rho_1}{\tau_{t1}} \qquad (5.3.17)$$

$$\frac{d_2\rho_2}{dt} = -\mu_2\rho_2(\rho_1+\rho_2+\rho_{t1}+\rho_{t2}) - \frac{\rho_2}{\tau_{t2}} \qquad (5.3.18)$$

nem mesmo usando $u_1 = \frac{1}{\rho_1}$ e $u_2 = \frac{1}{\rho_2}$, o que daria

$$\frac{d_1u_1}{dt} = \mu_1(1+\frac{u_1}{u_2}+u_1\rho_{t1}+u_1\rho_{t2}) + \frac{u_1}{\tau_{t1}} \qquad (5.3.19)$$

$$\frac{d_2u_2}{dt} = \mu_2(\frac{u_2}{u_1}+1+u_2\rho_{t1}+u_2\rho_{t2}) + \frac{u_2}{\tau_{t2}} \qquad (5.3.20)$$

pois, sobre as linhas que nascem em t = 0 em x = 0, ρ_1 e ρ_2 são infinitos, de maneira que não podemos usar as eqs. (5.3.17) e (5.3.18) e, pelo fato de aparecer $\frac{u_1}{u_2}$ na eq. (5.3.19) e $\frac{u_2}{u_1}$ na

eq. (5.3.20), também não pudemos usá-las. Por isso ρ_1 e ρ_2, que são necessários para calcular j_1 e j_2, eqs. (5.3.15) e (5.3.16), foram calculados por

$$\rho_1 = \epsilon\frac{\partial F}{\partial x} - \rho_{t1}$$

$$\rho_2 = \epsilon\frac{\partial G}{\partial x} - \rho_{t2}$$

sendo as derivadas feitas numericamente.

As condições iniciais para F e G podem ser escritas de qualquer maneira desde que a soma das duas dê o campo total inicial, E(x,0), correto. Preferimos escrevê-las de uma forma simétrica, embora tenhamos também feito de outra forma obtendo exatamente os mesmos resultados. Para escrevê-las, consideremos a figura 5.5, onde exageramos as distâncias entre a superfície, x = 0, a posição da lâmina de cargas do canal anômalo, $x = 0^+$, e a posição da lâmina de cargas do canal normal, $x = 0^{++}$.

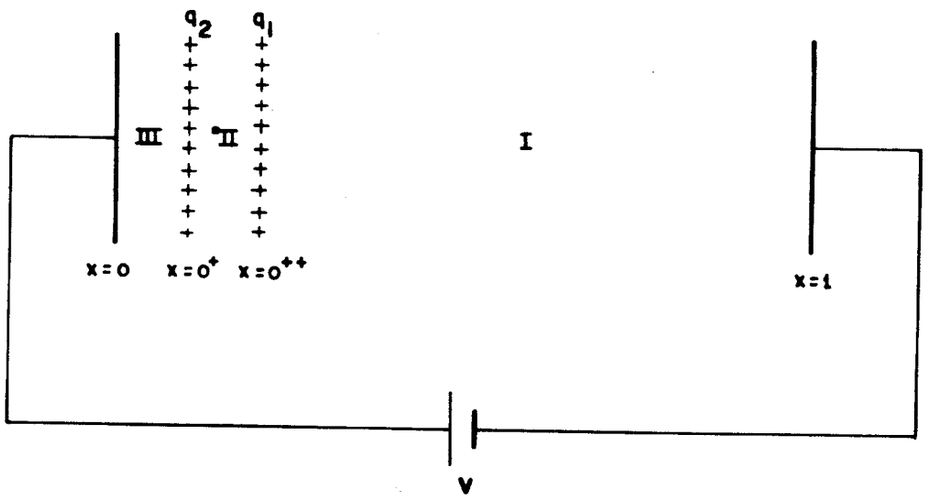

Figura 5.5. Esquema (fora de escala) da distribuição de carga inicial, mostrando as regiões I, II e III que estão, respectivamente, compreendidas entre o eletrodo em x = 1 e a lâmina de cargas do canal 1, entre a lâmina de cargas do canal 1 e a do canal 2 e entre a lâmina de cargas do canal 2 e o eletrodo em x = 0.

Para a região I, usamos:

$$F_I = G_I = \frac{V}{2l} ;$$

para a região II:

$$F_{II} = \frac{V}{2l} - \frac{q_1}{A\epsilon} , \qquad G_{II} = \frac{V}{2l} ;$$

e, para a região III:

$$F_{III} = \frac{V}{2l} - \frac{q_1}{A\epsilon} , \qquad G_{III} = \frac{V}{2l} - \frac{q_2}{A\epsilon} .$$

Em termos práticos, isto é, do programa, as linhas tipo 1 nascem no pulso q_1 e, analogamente, as linhas tipo 2 nascem no pulso q_2. Assim, chamando

F_1: campo devido às cargas tipo 1 nas linhas tipo 1,

F_2: campo devido às cargas tipo 1 nas linhas tipo 2,

G_1: campo devido às cargas tipo 2 nas linhas tipo 1,

G_2: campo devido às cargas tipo 2 nas linhas tipo 2,

E_1: campo total nas linhas tipo 1,

E_2: campo total nas linhas tipo 2,

e considerando ME1 linhas no pacote q_1 e ME2 linhas no pacote q_2, devemos escrever, para uma linha de rótulo K, no instante inicial:

$$F_1(K) = \frac{V}{2l} - \frac{K}{ME1}\frac{q_1}{A\epsilon} \qquad F_2(K) = \frac{V}{2l} - \frac{q_1}{A\epsilon}$$

$$G_1(K) = \frac{V}{2l} \qquad G_2(K) = \frac{V}{2l} - \frac{K}{ME2}\frac{q_2}{A\epsilon}$$

de maneira que

$$E_1(K) = \frac{V}{l} - \frac{K}{ME1}\frac{q_1}{A\epsilon} \qquad E_2(K) = \frac{V}{l} - \frac{q_1}{A\epsilon} - \frac{K}{ME2}\frac{q_2}{A\epsilon} .$$

Com isto, as correntes parciais iniciais são:

$$j_1(0) = \frac{\mu_1 q_1}{Al}\left(\frac{V}{l} - \frac{q_1}{2A\epsilon}\right)$$

$$j_2(0) = \frac{\mu_2 q_2}{Al}\left(\frac{V}{l} - \frac{q_1}{A\epsilon} - \frac{q_2}{2A\epsilon}\right)$$

A figura 5.6 mostra três curvas extraídas da referência [21]; as grandezas referentes à amostra e os parâmetros usados para o ajuste estão indicados na legenda. É preciso observar que, embora estejam atribuídos separadamente valores a α, μ_2 e q_2 (que foram os valores efetivamente usados na confecção das curvas teóricas), o que realmente importa para os ajustes são os produtos $\mu_2\alpha$ e $\mu_2 q_2$. Além disso, nos ajustes das curvas de sinal fraco (exemplificados pelas curvas (a) e (b)), a relação $\frac{q_1}{q_2}$ sempre resultou ser aproximadamente 1, enquanto que, para sinal forte (exemplificado pela curva (c)) $\frac{q_1}{q_2}$, era aproximadamente 0.45. Nesta figura, os pontos correspondem aos valores medidos e as linhas contínuas aos resultados numéricos. Obvserva-se que o ajuste só não é bom na região do tempo de trânsito; esta falha, conforme está dito na referência [21], "indica que o pacote de portadores sofre uma abertura maior do que aquela prevista teoricamente, causando uma dispersão no tempo de trânsito". Com o método das diferenças finitas, os ajustes pareceram melhores, pois as curvas experimentais também têm os "cantos" arredondados; preferiu-se, no entanto, usar a solução com o método das características, porque o arredondamento provocado pelo das diferenças finitas é de origem numérica e não física. Tentou-se também considerar a corrente de difusão, mas para dar conta dos arredondamentos observados experimentalmente era preciso considerar coeficientes de difusão muito grandes, incompatíveis com as mobilidades observadas. Está-se analisando, atualmente, a possibilidade de explicar estes arredondamentos com outros modelos.

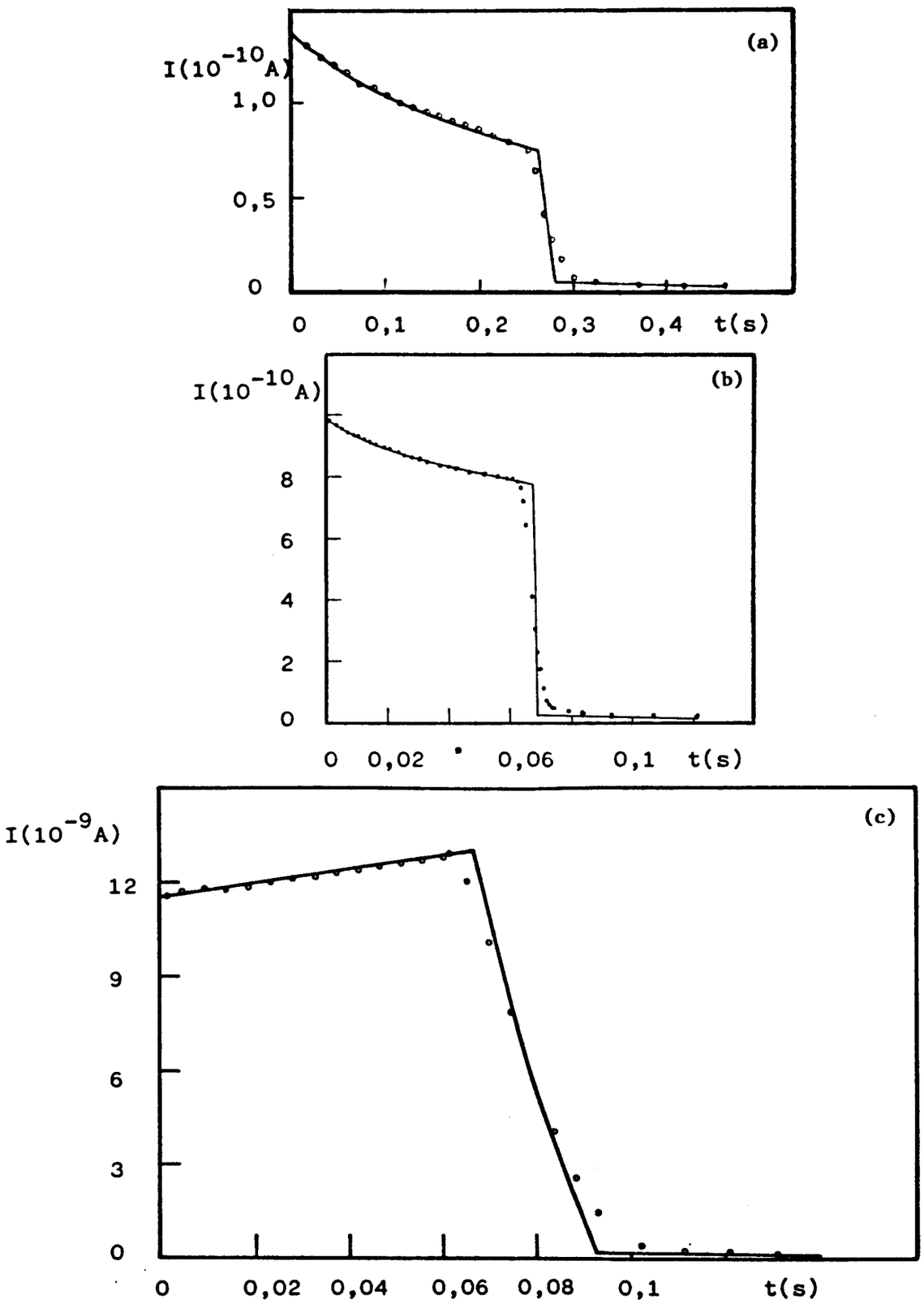

Figura 5.6. Figuras 48.a, 48.b e 50 da referência [21]. $l = 0.22$ cm, $A = 1.1$ cm^2, $\varepsilon = 4 \times 8.854 \times 10^{-14}$ F/cm, $\tau_{t1} = \tau_{t2} = 0.45$ s, $\mu_1 = 3.63 \times 10^{-4}$ cm^2/Vs, $\alpha = 100$ cm^{-1}, $\mu_2 = 5.8 \times 10^{-5}$ cm^2/Vs. (a) $V = -500$ V: $q_1 = 3.3 \times 10^{-11}$ C, $q_2 = 4.6 \times 10^{-11}$ C; (b) $V = -2000$ V: $q_1 = 5.2 \times 10^{-11}$ C, $q_2 = 6.0 \times 10^{-11}$ C; (c) $V = -1600$ V: $q_1 = 1.0 \times 10^{-9}$ C, $q_2 = 0.42 \times 10^{-9}$ C.

CAPÍTULO VI

DESCARGA TERMO-ESTIMULADA EM CIRCUITO ABERTO

6.1. *Introdução*

Métodos[1] de corrente termo-estimulada (TSC[2]) são utilizados na investigação de várias propriedades dos dielétricos. Em particular, eles podem dar informações sobre a presença de armadilhas e dos parâmetros referentes a elas, "embora sua interpretação seja ambígua em vista das estruturas complexas dos picos frequentemente observados" [24].

Nosso objetivo neste Capítulo é experimentar os métodos numéricos, já utilizados, para resolver este tipo de problema que é diferente dos anteriores no sentido de que, aqui, a descontinuidade não será importante porque as escalas de tempo envolvidas são muito maiores do que o tempo de trânsito dos portadores.

O modelo físico que resolvemos é bastante simplificado: isolante contendo apenas um nível de armadilhas no volume e um na superfície. Muito provavelmente, em aplicações a resultados experimentais, o modelo deve ser mais elaborado. Porém, considerar saturação das armadilhas, mobilidade dependente da temperatura e mais do que um nível de armadilhas na superfície e no volume (desde que estes sejam discretos), não tem dificuldades numéricas maiores do que as do modelo simplifi-

---

[1] *Usamos o plural referindo-nos ao fato de que medidas são feitas tanto em circuito fechado - em curto circuito ou com voltagem aplicada - quanto em circuito aberto.*

[2] *Thermally Stimulated Currents.*

cado, embora o número de parâmetros aumente muito.

6.2. *Colocação do Problema*

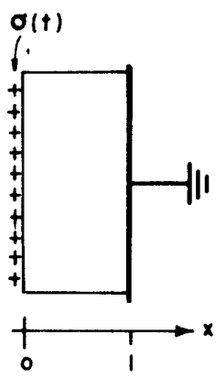

Figura 6.1

Uma amostra de isolante contendo numa das superfícies um eletrodo ligado à terra e na outra, sem eletrodo, uma densidade superficial de carga (ver figura 6.1), é submetida a um aquecimento controlado, em geral com a temperatura (T) variando linearmente com o tempo, como consideraremos aqui:

$$T(t') = T_0 + b't' \ , \qquad (6.2.1)$$

onde T_0 é a temperatura inicial e b' a razão de aquecimento.

As cargas estão inicialmente presas em armadilhas da superfície, e têm uma probabilidade (p) de entrar no volume da amostra, que aumenta exponencialmente com a temperatura (dependência do tipo Arrhenius)

$$p(T(t)) = \tau'^{-1}_{ds}(T(t')) = \nu'_{s0} e^{\frac{-\phi_s}{kT(t')}} \qquad (6.2.2)$$

onde τ'_{ds} é o parâmetro que temos chamado de tempo de liberação das cargas das armadilhas, ν'_{s0} é a frequência de tentativa de escape das armadilhas de superfície, ϕ_s a energia de ativação

destas armadilhas e k a constante de Boltzmann.

Além destas armadilhas na superfície a amostra contém armadilhas distribuídas uniformemente no volume. Supõe-se que tanto a mobilidade dos portadores quanto o tempo de captura destas armadilhas não dependem da temperatura, mas que o tempo de liberação tem uma dependência do mesmo tipo que aquele das armadilhas de superfície:

$$\tau'_d(T(t')) = \nu_0'^{-1} e^{\frac{\phi}{kT(t')}} \qquad (6.2.3)$$

os parâmetros tendo o mesmo significado que acima, referindo-se agora, obviamente, às armadilhas de volume.

As equações que regem este problema são, novamente, aquelas apresentadas no Capítulo I, acrescida de uma equação para a entrada dos portadores da superfície para o volume:

$$\frac{d}{dt'}\sigma'(t') = - \frac{\sigma'(t')}{\tau'_{ds}(t')} \qquad (6.2.4)$$

onde $\sigma'(t')$ é a densidade superficial de cargas no instante t' e $\tau'_{ds}(t')$ é dado pela eq. (6.2.2). Em vez de usar a densidade superficial de cargas no instante inicial, o que talvez fosse mais natural num tratamento teórico, usaremos o potencial inicial da superfície da amostra, V_0, que é uma terminologia mais usual, de maneira que a condição inicial para esta equação é:

$$\sigma'(0) = \frac{\varepsilon V_0}{l} \ .$$

Como esta carga é colocada na superfície ($x' = 0^-$) temos que

$$E'(0,t') = \frac{\sigma'(t')}{\varepsilon} \ , \qquad t' \geq 0 \ ,$$

o qual, juntamente com a condição de circuito aberto $j'(t') = 0$, $t' \geq 0$, determina as condições de contorno.

As condições iniciais para as equações do volume são:

$$E'(x',0) = \frac{V_0}{l} \ , \qquad x \geq 0$$

$$\rho'(x',0) = \rho'_t(x',0) = 0 \ , \qquad x \geq 0$$

O potencial da superfície livre da amostra, chamado mais frequentemente de potencial de superfície, é obtido de

$$V'(t') = \int_0^l E'(x',t')\,dx' \qquad (6.2.5)$$

sendo $V(0) = V_0$.

Experimentalmente, tem-se mais interesse na "corrente" de circuito aberto, a qual é proporcional à derivada temporal do potencial de superfície. Isto porque as curvas do potencial, geralmente, têm pouca estrutura enquanto a sua derivada apresenta picos que podem ser relacionados com propriedades do material em estudo. Integrando a equação da corrente total, eq. (1.2.6), sobre a espessura da amostra e usando a condição de contorno $j'(t') = 0$, esta derivada pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt'}V'(t') = -\frac{\mu}{\varepsilon}\int_0^l \rho'(x',t')E'(x',t')\,dx' \qquad (6.2.6)$$

e, se usarmos a equação de Poisson, eq. (1.2.1), podemos escrevê-la também como

$$\frac{d}{dt'}V'(t') = -\mu\left(\frac{E'^2(l,t') - E'^2(0,t')}{2}\right) + \frac{\mu}{\varepsilon}\int_0^l \rho'_t(x',t')E'(x',t')\,dx' \qquad (6.2.7)$$

que são análogas às expressões da densidade de corrente total, eqs. (1.2.11) e (1.2.12).

As relações entre as grandezas nas unidades normais e reduzidas são:

$$x = \frac{x'}{l} \ , \qquad V = \frac{V'}{V_0} \ , \qquad E = \frac{E'}{(V_0/l)}$$

$$t = \frac{t'}{(l^2/\mu V_0)} \ , \qquad \tau = \frac{\tau'}{(l^2/\mu V_0)} \ , \qquad \nu = \frac{l^2}{\mu V_0}\nu' \ , \qquad b = \frac{l^2}{\mu V_0}b'$$

$$\sigma = \frac{\sigma'}{(\varepsilon V_0/l)} \ , \qquad \rho = \frac{\rho'}{(\varepsilon V_0/l^2)} \ , \qquad \rho_t = \frac{\rho_t'}{(\varepsilon V_0/l^2)}$$

(a temperatura e a energia de ativação das armadilhas serão usadas nas unidades normais).

Nestas unidades, as eqs. (6.2.1) a (6.2.7) se escrevem

$$T(t) = T_0 + bt \qquad (6.2.1')$$

$$\tau_{ds}(T(t)) = \nu_{s0}^{-1} e^{\frac{\phi_s}{kT(t)}} \qquad (6.2.2')$$

$$\tau_d(T(t)) = \nu_0^{-1} e^{\frac{\phi}{kT(t)}} \qquad (6.2.3')$$

$$\frac{d}{dt}\sigma(t) = -\frac{\sigma(t)}{\tau_{ds}(t)} \qquad (6.2.4')$$

$$V(t) = \int_0^1 E(x,t)\,dx \qquad (6.2.5')$$

$$\frac{d}{dt}V(t) = -\int_0^1 \rho(x,t)E(x,t)\,dx \qquad (6.2.6')$$

$$\frac{d}{dt}V(t) = -\left(\frac{E^2(1,t)-E^2(0,t)}{2}\right) + \int_0^1 \rho_t(x,t)E(x,t)\,dx \qquad (6.2.7')$$

e as condições iniciais e de contorno

$$E(0,t) = \sigma(t)\ , \qquad t \geq 0$$

$$j(t) = 0\ , \qquad t \geq 0$$

$$E(x,0) = 1\ , \qquad x \geq 0$$

$$\rho(x,0) = \rho_t(x,0) = 0\ , \qquad x \geq 0$$

Quando se usa o método das características e se deseja integrar a eq. (2.1.21) para a densidade de carga livre, precisa-se de $\rho(0,t)$ que é facilmente obtida usando a eq. (1.2.6) com $j = 0$, e a condição de contorno para o campo elétrico, procedimento que resulta em

$$\rho'(0,t') = \frac{\epsilon}{\mu}\frac{1}{\tau'_{ds}(T(t'))} \qquad (6.2.8)$$

ou, nas unidades adimensionais

$$\rho(0,t) = \frac{1}{\tau_{ds}(T(t))} \qquad (6.2.8')$$

6.3. *Resultados*

Apresentaremos numa mesma seção os resultados obtidos com os dois tipos de métodos que usamos em todo este trabalho (o mé-

todo das características e o das diferenças finitas) porque a maneira de aplicá-los é a mesma que nos outros problemas, a menos de uma dificuldade adicional na composição do programa que usa o método das características. Porém, antes de falar nela vale a pena fazer um comentário a respeito das linhas características: neste problema não temos, como aconteceu nos três anteriores, o pacote inicial das linhas características rotuladas pelo campo elétrico. Isto decorre do fato de que os portadores colocados na superfície se alojam em armadilhas e são emitidos com probabilidade dada pela eq. (6.2.2) que à temperatura inicial é praticamente nula (no problema da referência [20], que citamos no Capítulo IV, também não se tem este pacote).

A dificuldade que mencionamos acima é consequência do fato de que os tempos envolvidos neste tipo de problema são muito longos, muito maiores do que os tempos de trânsito dos portadores, de maneira que se deixássemos nascer uma linha em $x = 0$ a cada incremento do tempo Δt teríamos no final (isto é, quando o campo elétrico em $x = 0$ se aproximasse de zero) um acúmulo muito grande de linhas, o que consumiria muita memória do computador. Por isso, fixamos um valor tal que, quando o número de linhas dentro da amostra atingia pela primeira vez este valor, em vez de nascer uma linha a cada Δt, passava a nascer uma a cada $2\Delta t$; a segunda vez que este valor era atingido, uma a cada $3\Delta t$, e assim por diante.

Todas as figuras deste capítulo foram feitas considerando:

$$l = 25X10^{-4}\,cm, \quad \mu = 6.25X10^{-11}\,cm^2/Vs, \quad \tau'_t = 100\,s,$$

$$\nu'_{so} = \nu'_0 = 10^9\,s^{-1}, \quad \phi_s = 1.0\,eV, \quad \phi = 1.1\,eV, \quad b' = 2^0C/min$$

Como estamos usando $\phi > \phi_s$, obtemos dois picos: o primeiro

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

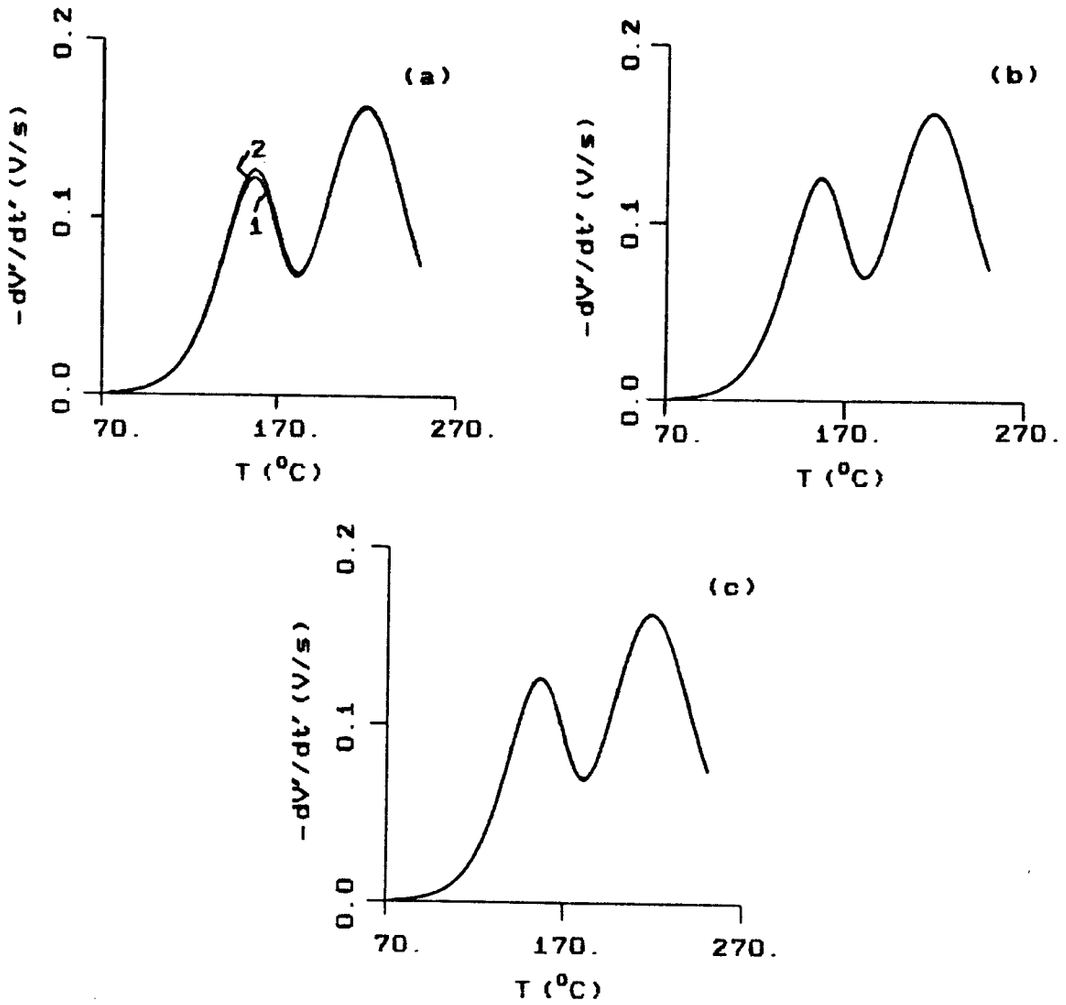

Figura 6.2. $\frac{dV'}{dt'}$ em função da temperatura, calculados com o método das características. (a) e (b): comparação entre $\frac{dV'}{dt'}$ calculado (1) com a expressão (6.2.7) e (2) pela derivação numérica de V(t), eq. (6.3.1); (a) $\Delta t = 0.01$, (b) $\Delta t = 0.025$. (c) $\frac{dV'}{dt'}$ calculado somente com a derivação numérica mas com três diferentes Δt's: 0.01 ($t_{CPU} \approx 14'$), 0.005 ($t_{CPU} \approx 1h\,8'$), 0.0025 ($t_{CPU} \approx 9h\,50'$). $V_0 = 500$ V.

(temperatura mais baixa) correspondente à liberação das cargas das armadilhas da superfície e o segundo correspondente à liberação das cargas das armadilhas do volume. Se tivéssemos usado ϕ menor que ϕ_s ou mesmo maior mas bem próximos, teríamos somente um pico.

Nas figuras 6.2, 6.3 e 6.4 a derivada do potencial de superfície ($\frac{dV'}{dt'}$) foi calculada de duas maneiras diferentes:

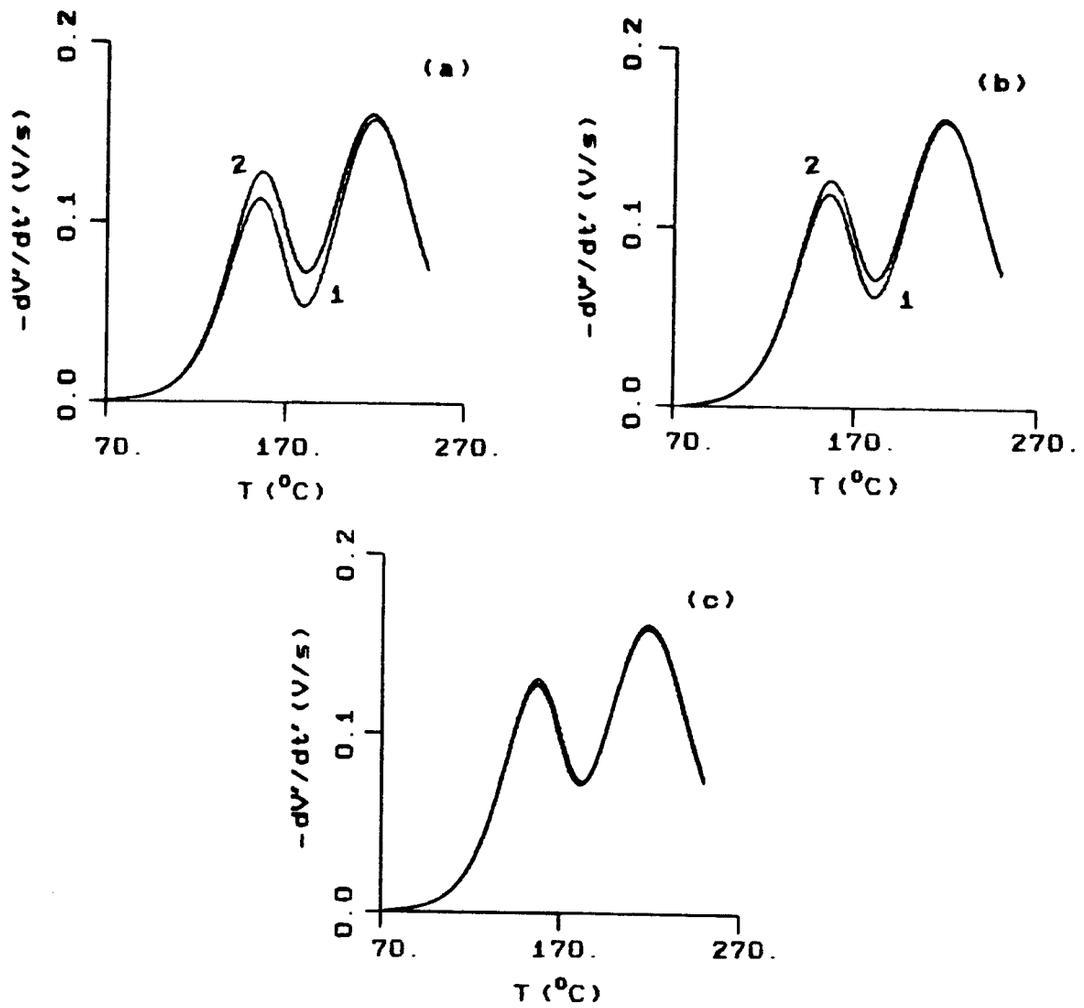

Figura 6.3. $\frac{dV'}{dt'}$ em função da temperatura calculados com o método das diferenças finitas explícito - Euler. (a) e (b): comparação entre $\frac{dV'}{dt'}$ calculado (1) com a expressão (6.2.7) e (2) pela derivação numérica de V(t), eq. (6.3.1). (a) $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.005$; (b) $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$. (c) $\frac{dV'}{dt'}$ calculado somente com a derivação numérica, mas com três diferentes pares Δx, Δt: $\Delta x = 0.02$, $\Delta t = 0.01$ ($t_{CPU} \approx 13''$); $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.005$ ($t_{CPU} \approx 40''$); $\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$ ($t_{CPU} \approx 2'27''$). $V_0 = 500$ V.

(1) usando a expressão (6.2.7)

(2) por derivação numérica de V(t), usando

$$\left.\frac{dV}{dt}\right|_t = - \frac{V(t+2\Delta t) - 8V(t+\Delta t) + 8V(t-\Delta t) - V(t-2\Delta t)}{12\Delta t} \qquad (6.3.1)$$

As figuras 6.2 (a) e (b), 6.3 (a) e (b) e 6.4 (a) e (b) contêm a comparação destas duas formas, e as 6.2(c), 6.3(c) e 6.4(c) curvas feitas com a forma (2) para diferentes valores de

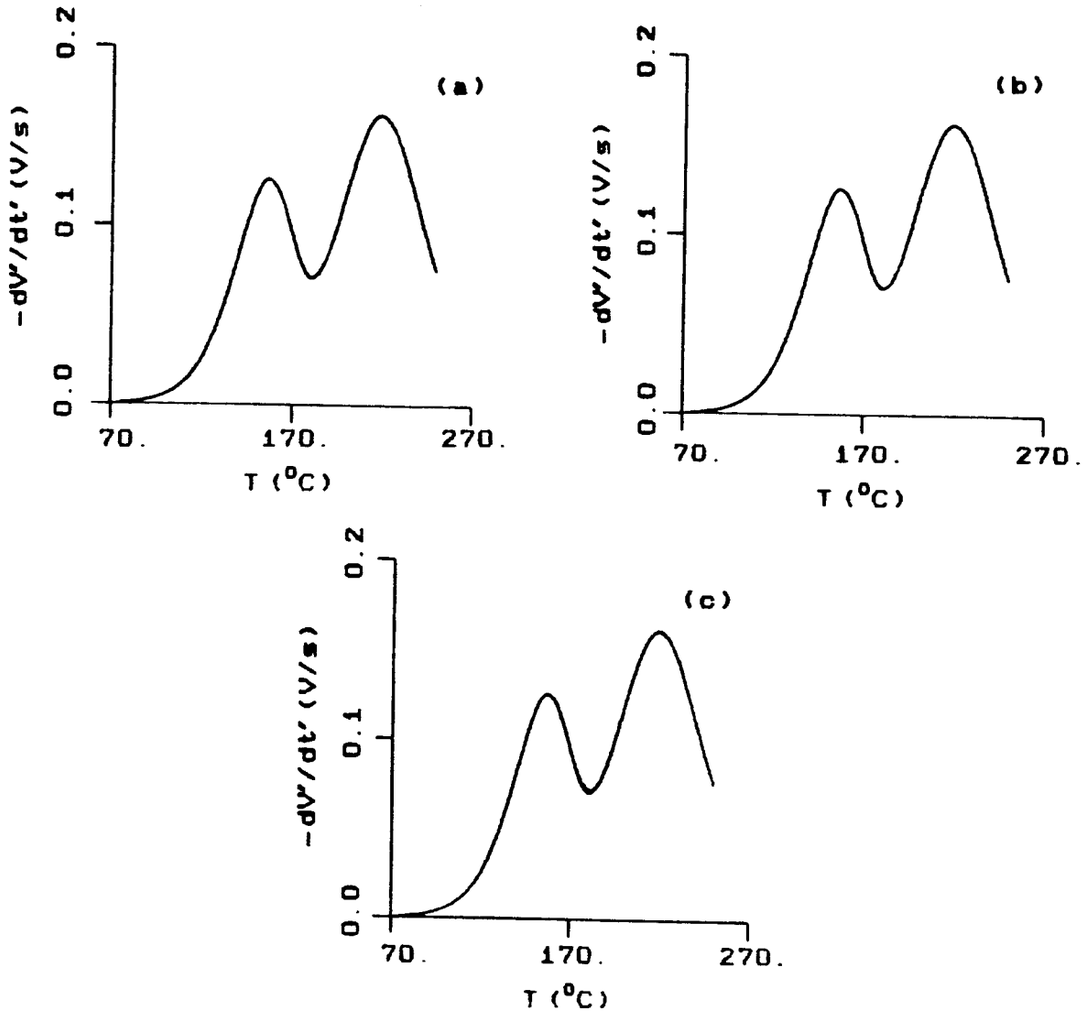

Figura 6.4. $\frac{dV'}{dt'}$ em função da temperatura calculados com o método das diferenças finitas implícito. (a) e (b): comparação entre $\frac{dV'}{dt'}$ calculado com a expressão (6.2.7) e pela derivação numérica de V(t), eq. (6.3.1). (a) Δx =0.01, Δt = 0.005; (b) Δx = 0.005, Δt = 0.0025. (c) $\frac{dV'}{dt'}$ calculado somente com a derivação numérica, mas com três diferentes pares Δx, Δt: Δx = 0.02, Δt = 0.01 ($t_{CPU} \approx 53''$); Δx = 0.01, Δt = 0.005 ($t_{CPU} \approx 3'11''$); Δx = 0.005, Δt = 0.0025 ($t_{CPU} \approx 12'21''$). V_0 = 500 V.

Δt e Δx (este último, obviamente, somente nos casos de diferenças finitas). É importante dizer que os $(\frac{dV}{dt})$'s calculados da segunda maneira, nos três métodos, dão curvas coincidentes. Além disso, à medida que diminuímos os incrementos, as curvas calculadas pela forma (1) tendem àquelas da forma (2). Concluimos assim que é vantajoso usar a forma (2) com a qual podemos usar incrementos maiores sem perda de precisão. Por isso, nas figuras 6.5, 6.6 e 6.7 só usamos a segunda forma.

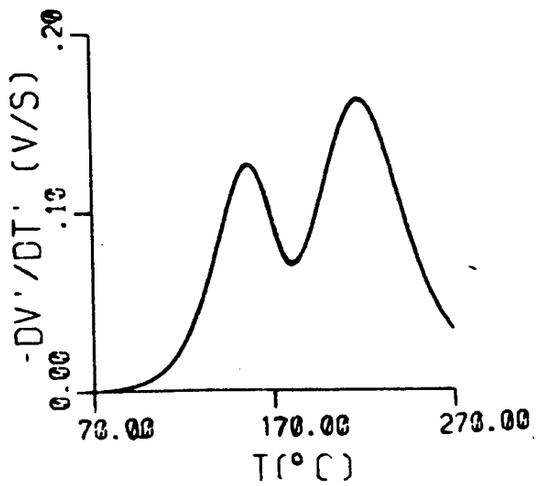

Figura 6.5. $\frac{dV'}{dt'}$ em função da temperatura calculado somente com a derivação numérica, mas com quatro métodos diferentes: características ($\Delta t = 0.005$, $t_{CPU} = 1h8'55''$), diferenças finitas explícito Euler ($\Delta x = 0.005$, $\Delta t = 0.0025$, $t_{CPU} = 2'27''$), diferenças finitas implícito ($\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.005$, $t_{CPU} = 3'11''$), e diferenças finitas explícito Runge-Kutta ($\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.005$, $t_{CPU} = 4'43''$).

As figuras 6.2, 6.3 e 6.4 mostram curvas feitas com o método das características (usando Euler para as integrações temporais, ao qual chamaremos simplesmente de características), das diferenças finitas explícito (também usando Euler para as integrações temporais e derivadas espaciais "para trás", ao qual chamaremos somente de diferenças finitas Euler) e das diferenças finitas implícito (semelhante ao que chamamos de "implícito (b)" na seção 3.3.3.3, pág. 64, isto é, usando Euler para as integrações temporais e derivadas espaciais "centrais", ao qual chamaremos simplesmente de implícito), respectivamente. A Fig. 6.5 contém curvas calculadas com os três métodos já apresentados (Fig. 6.2, 6.3 e 6.4) e mais uma calculada com o método das diferenças finitas explícito usando Runge-Kutta quarta ordem para as integrações temporais e derivadas espaciais de quarta ordem. Nas legendas destas figuras estão indicados alguns tempos de CPU. Como se pode ver, curvas muito boas foram obtidas com o método das diferenças finitas

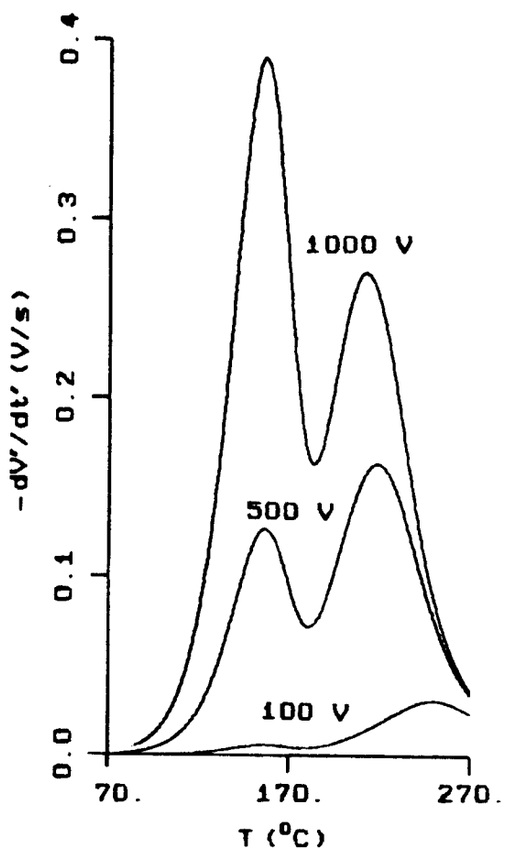

Figura 6.6. $\frac{dV'}{dt'}$ em função da temperatura para três valores diferentes do potencial inicial. Método: diferenças finitas implícito. $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.005$.

implícito e com o das diferenças finitas explícito Runge Kutta com tempos de cálculo bem menores do que os que são necessários no método das características. Não se justifica, portanto, o uso do método das características neste problema, a não ser, eventualmente, como um teste para os métodos das diferenças finitas.

As figuras 6.6 e 6.7 pretendem simular resultados experimentais: na 6.6 variamos o potencial inicial (V_0) e na 6.7 fizemos uma "limpeza de pico" [25]. Com relação à 6.6 é interessante observar que a temperatura em que ocorre o pico devido às armadilhas da superfície é praticamente insensível à variação do potencial de carga, V_0, enquanto o outro pico se desloca bastante para o lado das temperaturas menores à medida que se aumenta o potencial.

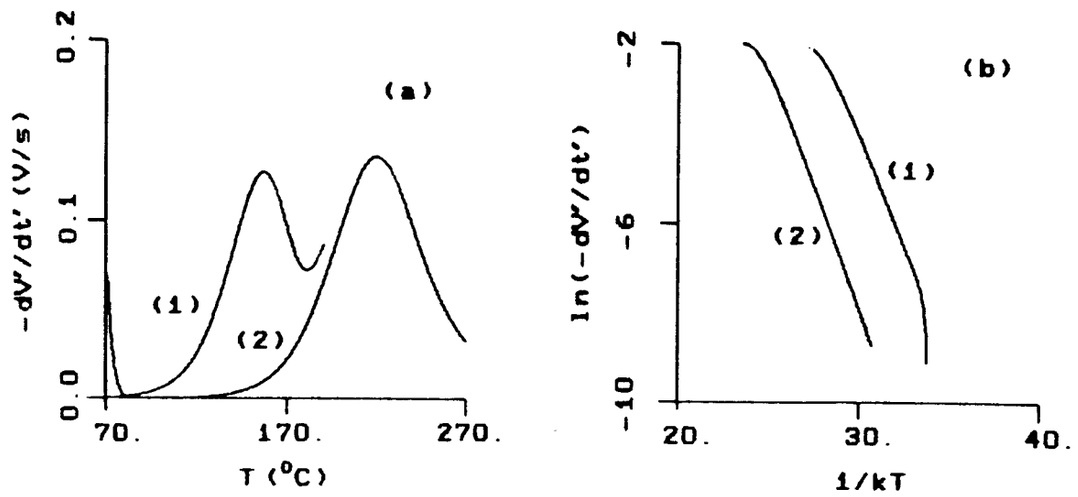

Figura 6.7. (a) Limpeza do segundo pico para $V_0 = 500\,V$. A interrupção do primeiro aquecimento foi feita em $T = 190\,^{0}C$. Método: diferenças finitas implícito. $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.005$.

A limpeza de pico mostrada na figura 6.7(a) é um procedimento usual e consiste em resfriar a amostra após um pico, "congelando" assim a distribuição de cargas, e reiniciar o processo de aquecimento. Esta limpeza é feita com o objetivo de usar o método da subida inicial, [25] e [26], para a determinação da energia de ativação das armadilhas responsáveis pelo pico. Este método consiste em lançar em gráfico o logaritmo da corrente inicial em função de $\frac{1}{kT}$, que deve dar uma reta cuja inclinação, em valor absoluto, é a energia de ativação procurada. É um gráfico deste tipo que mostramos na figura 6.7(b), do qual obtivemos $\phi^{(1)} = 1.003\,eV$ e $\phi^{(2)} = 1.106\,eV$ que são, realmente, as energias usadas na construção destes gráficos ($\phi_s = 1.0\,eV$ e $\phi_r = 1.1\,eV$). Devemos observar que a corrente no início do reaquecimento, figura 6.7(a), apresenta um valor grande por causa da carga livre que também foi congelada. É claro que numa experiência real isto não acontece porque lá o resfriamento não é instantâneo como no cálculo teórico.

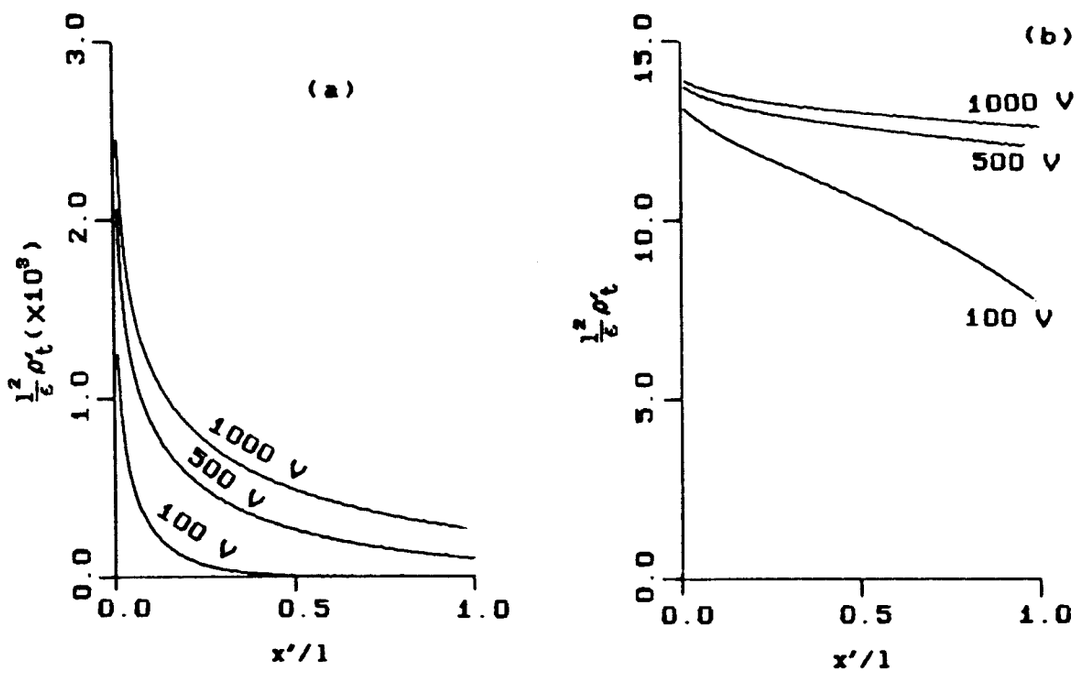

Figura 6.8. Densidades de cargas nas armadilhas em (a) T = 190 °C, (b) T = 270 °C. Método: diferenças finitas implícito. $\Delta x = 0.01$, $\Delta t = 0.005$. As curvas são rotuladas por V_0 .

Finalmente, a título de curiosidade, mostramos na figura 6.8 as distribuições de carga nas armadilhas às temperaturas de 190 °C (após o primeiro pico) e 270 °C (após o segundo pico).

CONCLUSÃO

A conclusão do trabalho aqui apresentado pode ser resumida numa recomendação: na resolução numérica dos problemas de transporte de cargas nos isolantes governados por equações hiperbólicas, que tiverem descontinuidades e elas forem de interesse, convém que se use o método das características; naqueles que não têm descontinuidades ou em que elas não são importantes é mais conveniente usar métodos de diferenças finitas que são de execução mais rápida do que o método das características. Isto foi ilustrado nos dois últimos capítulos: no problema resolvido no Capítulo V, de movimento de um pulso de carga, a aplicação do método das características não serviu apenas de referência para a solução com o método das diferenças finitas, como também, e principalmente, auxiliou na interpretação dos resultados do modelo sem carga espacial (pensava-se que toda a abertura do pacote era devida à carga espacial; com a solução obtida quando se incluiu a carga espacial, viu-se que ela é responsável só por parte desta abertura, indicando a necessidade de o modelo físico ser aperfeiçoado). Por outro lado, no problema de descarga termo-estimulada, Capítulo VI, em que a descontinuidade da carga espacial só persiste durante um tempo curto em comparação com o tempo de cálculo, pôde-se ver que a utilização do método das características só foi importante para confirmar os resultados obtidos com os métodos de diferenças finitas, sendo tão mais demorado que estes últimos que não vale a pena usá-los na prática, isto é, em ajustes de resultados experimentais deste tipo.

Sabemos não ter esgotado o assunto proposto, nem matematicamente nem ao nível de aplicação imediata, no sentido

de não termos resolvido todos os problemas que poderão surgir na resolução das equações pertinentes a modelos físicos destinados ao ajuste de resultados experimentais. Isto porque cada problema é praticamente um "novo problema".Um prolongamento imediato deste trabalho seria:

1 - resolver problemas cuja condição de contorno é de curto circuito ($V = \int_0^L E dx = 0$), em particular problemas de corrente termo-estimulada em curto circuito, uma técnica amplamente utilizada em trabalhos experimentais;

2 - incluir a corrente de difusão cuja contribuição para o transporte de cargas em isolantes deve realmente ser pequena, como se conclui na referência [6] por exemplo. Mas, pode-se aproveitar os cálculos numéricos para estimar seu efeito.

3 - resolver problemas em que os dois tipos de portadores (positivos e negativos) estejam presentes.

APÊNDICE A

FÓRMULAS NUMÉRICAS USADAS

1 - Integração Numérica $\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx$.

a) Regra do Trapézio [27].

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\left(f(x_i)+f(x_{i+1})\right)}{2} (x_{i+1}-x_i) \qquad (A.1)$$

b) Regra de Simpson ([28] pág. 886)

$$\int_{x_0}^{x_{2n}} f(x)dx \simeq \frac{\Delta x}{3}\left(f_0+4(f_1+f_3+\ldots+f_{2n-1})+2(f_2+f_4+\ldots+f_{2n-2})+f_{2n}\right) \qquad (A.2)$$

2 - Fórmulas de Runge - Kutta de quarta ordem para a integração de equações diferenciais ordinárias ([28] pág. 897, [27] pág. 251).

$$\frac{dy}{dt} = f(t,y,z)$$

$$\frac{dz}{dt} = g(t,y,z)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(a_1+2a_2+2a_3+a_4) \qquad (A.3)$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6}(b_1+2b_2+2b_3+b_4)$$

onde

$$a_1 = \Delta t\, f(t_n, y_n, z_n)$$

$$b_1 = \Delta t\, g(t_n, y_n, z_n)$$

$$a_2 = \Delta t\, f\left(t_n+\frac{\Delta t}{2}, y_n+\frac{a_1}{2}, z_n+\frac{b_1}{2}\right)$$

$$b_2 = \Delta t\, g\left(t_n+\frac{\Delta t}{2}, y_n+\frac{a_1}{2}, z_n+\frac{b_1}{2}\right)$$

$$a_3 = \Delta t\, f\left(t_n+\frac{\Delta t}{2}, y_n+\frac{a_2}{2}, z_n+\frac{b_2}{2}\right)$$

$$b_3 = \Delta t\, g\left(t_n+\frac{\Delta t}{2}, y_n+\frac{a_2}{2}, z_n+\frac{b_2}{2}\right)$$

$$a_4 = \Delta t\, f(t_n+\Delta t\,,\, y_n+a_3\,,\, z_n+b_3)$$

$$b_4 = \Delta t\, g(t_n+\Delta t\,,\, y_n+a_3\,,\, z_n+b_3)$$

As fórmulas acima estão na forma em que são normalmente encontradas nos livros de cálculo numérico. Podemos escrevê-las, também na seguinte forma:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= \frac{y_{n+1}^{(1)}+2y_{n+1}^{(2)}+2y_{n+1}^{(3)}+y_{n+1}^{(4)}}{6} \\ z_{n+1} &= \frac{z_{n+1}^{(1)}+2z_{n+1}^{(2)}+2z_{n+1}^{(3)}+z_{n+1}^{(4)}}{6} \end{aligned} \qquad (A.4)$$

onde

$$y_{n+1}^{(1)} = y_n + \Delta t\, f(t_n\,,\, y_n\,,\, z_n)$$

$$z_{n+1}^{(1)} = z_n + \Delta t\, g(t_n\,,\, y_n\,,\, z_n)$$

$$y_{n+1}^{(2)} = y_n + \Delta t\, f\left(\frac{t_n+t_{n+1}}{2}\,,\, \frac{y_n+y_{n+1}^{(1)}}{2}\,,\, \frac{z_n+z_{n+1}^{(1)}}{2}\right)$$

$$z_{n+1}^{(2)} = z_n + \Delta t\, g\left(\frac{t_n+t_{n+1}}{2}\,,\, \frac{y_n+y_{n+1}^{(1)}}{2}\,,\, \frac{z_n+z_{n+1}^{(1)}}{2}\right)$$

$$y_{n+1}^{(3)} = y_n + \Delta t\, f\left(\frac{t_n+t_{n+1}}{2}\,,\, \frac{y_n+y_{n+1}^{(2)}}{2}\,,\, \frac{z_n+z_{n+1}^{(2)}}{2}\right)$$

$$z_{n+1}^{(3)} = z_n + \Delta t\, g\left(\frac{t_n+t_{n+1}}{2}\,,\, \frac{y_n+y_{n+1}^{(2)}}{2}\,,\, \frac{z_n+z_{n+1}^{(2)}}{2}\right)$$

$$y_{n+1}^{(4)} = y_n + \Delta t\, f\left(t_{n+1}\,,\, y_{n+1}^{(3)}\,,\, z_{n+1}^{(3)}\right)$$

$$z_{n+1}^{(4)} = z_n + \Delta t\, g\left(t_{n+1}\,,\, y_{n+1}^{(3)}\,,\, z_{n+1}^{(3)}\right)$$

3 - Método de eliminação de Gauss para resolução de um sistema algébrico tridiagonal do seguinte tipo ([12] pág. 441):

$$\begin{aligned} b_1v_1 + c_1v_2 &= d_1 \\ a_2v_1 + b_2v_2 + c_2v_3 &= d_2 \\ a_3v_2 + b_3v_3 + c_3v_4 &= d_3 \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_iv_{i-1} + b_iv_i + c_iv_{i+1} &= d_i \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n-1}v_{n-2} + b_{n-1}v_{n-1} + c_{n-1}v_n &= d_{n-1} \\ a_nv_{n-1} + b_nv_n &= d_n \end{aligned}$$

Solução:

$$v_n = \gamma_n$$

$$v_i = \gamma_i - \frac{c_i v_{i+1}}{\beta_i} \qquad i = n-1,\ n-2,\ \ldots,\ 1$$

onde

$$\beta_1 = b_1$$

$$\gamma_1 = \frac{d_1}{\beta_1}$$

$$\beta_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \qquad i = 2,\ 3,\ \ldots,\ n$$

$$\gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{\beta_i} \qquad i = 2,\ 3,\ \ldots,\ n$$

APÊNDICE B

DETALHES GERAIS DOS PROGRAMAS DE INTEGRAÇÃO NUMÉRICA COM O MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS

1 - As linhas de corrente ou características da família $\frac{dx}{dt} = \mu E$ são rotuladas por um índice inteiro K, $0 \leq K \leq M$, sendo K = 0 a primeira linha que nasceu e K = M a que acaba de nascer.

2 - E e ρ_t têm dois índices (E(K,J) e ρ_t(K,J)), onde K é o rótulo da linha e J, que só assume os valores 1 ou 2, corresponde à variável tempo: J = 1 quando são os valores já conhecidos no tempo anterior (que chamamos velhos) e J = 2 quando são os valores que estão sendo calculados (novos). Também a posição das linhas é dada por uma variável indexada da mesma maneira, X(K,J).

3 - Como as linhas que já saíram da amostra não contribuem mais para a corrente e para a voltagem, precisamos identificá-las. Chamamos de IX o menor rótulo de linha dentro da amostra; em outras palavras, a linha IX - 1 foi a última que saiu, de maneira que IX é o menor valor de K para o qual $X(K,2) \leq 1$.

4 - Para fazer as interpolações lineares, que são necessárias para calcular E e ρ_t no tempo velho mas nas posições novas, precisamos antes localizar o ponto, isto é, encontrar as linhas que, no tempo velho, estavam mais próximas desta posição para a qual serão feitas as interpolações. Para isto usamos um índice auxiliar que chamamos de NK tal que $X(NK,1) \leq X(K,2) \leq X(NK-1,1)$. Os valores procurados do campo elétrico e da densidade de cargas nas armadilhas aos quais, nos programas, chamamos de EI(K) e

RTI(K), respectivamente, são então obtidos das fórmulas de interpolação linear:

$$EI(K) = \frac{[X(K,2)-X(NK,1)]E(NK-1,1) - [X(K,2)-X(NK-1,1)]E(NK,1)}{[X(NK-1,1) - X(NK,1)]}$$

$$RTI(K) = \frac{[X(K,2)-X(NK,1)]RT(NK-1,1) - [X(K,2)-X(NK-1,1)]RT(NK,1)}{[X(NK-1,1) - X(NK,1)]}$$

Se acontecer de NK = IX fazemos extrapolação, em vez de interpolação, usando as linhas IX e IX + 1.

Obs.: só usamos um índice para EI e RTI pois eles só têm sentido no tempo velho.

5 - Como os pontos onde a solução é calculada em cada instante não são igualmente espaçados, não podemos usar a regra de Simpson para fazer numericamente as integrais da voltagem e da corrente, como se faz nos métodos de diferenças finitas. Estas integrais são, então, feitas usando a "regra do trapézio" (ver figura B.1 para facilitar o entendimento dos termos das expressões abaixo):

FIGURA B.1

$$V = \sum_{K=IX}^{M-1} \frac{[E(K,2)+E(K+1,2)][X(K,2)-X(K+1,2)]}{2} + \left(\frac{E(IX,2)+E1}{2}\right)[1-X(IX,2)]$$

$$j = \frac{E1^2 - E0^2}{2} - \int_0^1 \rho_t E dx$$

onde E0 é o campo elétrico na posição X = 0 o qual é, geralmente, conhecido, E1 é o campo elétrico na posição X = 1 que é igual ao campo da linha IX se IX = 0 ou é calculada por extrapolação linear usando as linhas IX e IX + 1 se IX ≠ 0 e onde

$$\int_0^1 \rho_t E dx = \sum_{K=IX}^{M-1} \frac{[E(K,2)RT(K,2)+E(K+1,2)RT(K+1,2)][X(K,2)-X(K+1,2)]}{2}, \quad \text{se } IX = 0$$

$$\int_0^1 \rho_t E dx = \sum_{K=IX}^{M-1} \frac{[E(K,2)RT(K,2)+E(K+1,2)RT(K+1,2)][X(K,2)-X(K+1,2)]}{2} +$$

$$+ \frac{[E(IX,2)RT(IX,2)+E1\ RT1][1-X(IX,2)]}{2}, \quad \text{se } IX \neq 0.$$

Lembramos que IX = 0 significa que o pacote de cargas ainda não chegou em X = 1, E1 tem o mesmo significado que acima e RT1 é a densidade de carga presa na posição X = 1, também calculada por extrapolação.

6 - Para a integração numérica os incrementos no tempo precisam ser relativamente pequenos. Mas isto resulta num número muito grande de pares corrente versus tempo que podem ser armazenados. Como não precisamos de tantos, só guardamos j vs. t a intervalos de tempo $\Delta' t = t_{máximo}/N$, onde N é o número de pontos que queremos guardar. Para isto usamos nos programas uma grandeza que chamamos de IDELTAT, definida como:

$$IDELTAT = \frac{t_{maximo}}{N\ \Delta t}$$

e um contador que chamamos de ITCONT que no instante inicial é zero e que é acrescido de 1 a cada Δt, de maneira que só guardamos j vs. t se a parte inteira de ITCONT/IDELTAT multiplicada por IDELTAT for igual a ITCONT. Obviamente existem outras maneiras de fazer isto, mas descrevemos aqui apenas aquela que usamos nos nossos programas.

BIBLIOGRAFIA

1. FORSYTHE, G. E. & WASOW, W. R. - Finite-Difference Methods for Partial Differential Equations. John Wiley & Sons, Inc., 1967.
2. SMITH, G. D. - Numerical Solution of Partial Differential Equations. Oxford University Press, 1974.
3. LAMPERT, M. A. & MARK, P. - Current Injection in Solids. Academic Press, 1970.
4. KAO, K. C. & HWANG, W. - Electrical Transport in Solids. Pergamon Press, 1981.
5. MANY, A. & RAKAVY, G. - Phys. Rev. 126(6), 1980, (1962).
6. SCHILLING, R. B. & SCHACHTER, H. - J.Appl. Phys. 38(2), 841, (1967).
7. AMES, W. F. - Numerical Methods for Partial Differential Equations. Academic Press, 1977.
8. COURANT, R. & FRIEDRICHS, K. O. - Supersonic Flow and Shock Waves. Interscience Publishers, Inc., 1948.
9. HARTREE, D. R. - Numerical Analysis. Oxford University Press, 1958.
10. WALSH, J. E. "Hyperbolic Equations and Characteristics". In: A Survey of Numerical Methods for Partial Differential Equations. Clarendon Press, 1979.
11. COURANT, R. & HILBERT, D. - Methods of Mathematical Physics. v.2. Interscience Publishers, 1966.
12. CARNAHAN, B.; LUTHER, H. A. & WILKES, J. O. - Applied Numerical Methods. John Wiley & Sons, Inc., 1969.
13. OLIVEIRA, L. N & FERREIRA, G. F. L. - Journal of Electrostatics. 1, 371, (1975).
14. SCHILLING, R. B. & SCHACHTER, H. - J. Appl. Phys. 38(4), 1643, (1967).
15. MORROW, R. - J. Comp. Phys. 43, 1, (1981).
16. HARTEN, A. & TAL-EZER, H. - J. Comp. Phys. 41, 329, (1981).
17. MORTON, K. W. "Initial-Value Problems by Finite Difference and other Methods". In: The State of Art in Numerical Analysis. Jacobs, D. A. H. (ed.), 1977.
18. RUDENKO, A. I. - Soviet Phys. - Solid State. 14(11), 2706, (1973).
19. CAMPOS, M. & GIACOMETTI, J. A. - J. Appl. Phys. 52(7), 4546, (1981).
20. SEGGERN, H. - J. Appl. Phys. 50(11), 7039, (1979).
21. MERGULHÃO, S. - Tese de Doutoramento, IFQSC-USP, (1987).
22. PAPADAKIS, A. C. - J. Phys. Chem. Solids. 28, 641, (1967)
23. BLAKNEY, R. M. & GRUNWALD, H. P. - Phys. Rev. 159, 658, (1967).
24. GROSS, B.; SESSLER, G. M. & WEST, J. E. - J. Appl. Phys. 47(3), 968, (1976).
25. NICHOLAS, K. H. & WOODS, J. - Brit. J. Appl. Phys. 15, 783, (1964)
26. GARLICK, G. F. J. & GIBSON, A. F. - Proc. Phys. Soc., 60, 574, (1948)
27. ZURMUHL, R. - Matemática aplicada para insenieros y físicos. Editorial Labor, S.A., 1964.
28. Handbook of mathematical functions. Edited by Abramowitz, M. & Stegun, I.A. National Bureau of Standards. Applied Mathematics Series. ss, 1965.

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA