"SOLUÇÕES APROXIMADAS PELO MÉTODO DE GALERKIN DE PROBLEMAS ENVOLVENDO O TRANSPORTE DE CARGAS EM ISOLANTES".

Mariangela Tassinari de Figueiredo

Dissertação apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para a obtenção do título de Mestre em Física Básica

Orientador: Prof. Dr. Guilherme Fontes Leal Ferreira

USP / IFQSC / SBI
8-2-000586

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - 1982

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE ____
MARIANGELA TASSINARI DE FIGUEIREDO

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 11 DE junho DE 1982.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Guilherme Fontes L. Ferreira - Orientador

Dr. Marcius Fantozi Giorgetti

Dr. Silvestre Ragusa

Ao meu pai e

ao Jasson

AGRADECIMENTOS

Sou extremamente grata ao Prof. Guilherme Fontes Leal Ferreira, pessoa que muito admiro por sua honestidade, perseverança e humildade, cuja orientação foi sempre muito segura, paciente e, sobretudo, amiga e, sem o qual, teria sido impossível a realização deste trabalho.

Agradeço também

- Ao Prof. Heinz Von Seggern pela preciosa ajuda na utilização do Método das Diferenças Finitas,

- À Yvone A.Biason por ter datilografado este trabalho com disposição, cuidado e paciência,

- Ao Prof. René A.Moreno Alfaro pela amizade e carinho que sempre demonstrou,

- Aos Prof. José A.Giacometti, Bernhard Gross, Milton S.Campos, Roberto Faria e a todo o pessoal do Laboratório de Eletretos,

Ao Valdeci Massaro e Valdir Camargo Milchior pelo auxílio na utilização do computador.

Este trabalho foi realizado com o auxílio financeiro do CNPq, da FINEP, da TELEBRÁS e da FAPESP.

ÍNDICE

Resumo I

Abstract II

Notação III

I - INTRODUÇÃO 1

II - MÉTODO DE GALERKIN 4

2.1- Redução a equações algébricas 4

2.2- Redução a equações diferenciais ordinárias 6

2.3- Condições iniciais 7

III - INTRODUÇÃO À RESOLUÇÃO DOS PROBLEMAS 8

IV - DECAIMENTO DO POTENCIAL DE SUPERFÍCIE DE UMA AMOSTRA CARREGADA COM DESCARGA CORONA..... 11

4.1- Introdução 11

4.2- Cálculo do potencial de superfície 13

4.2.1- $t \leqslant 1$ 13

4.2.2- $t > 1$ 17

4.2.3- Resultados 19

4.3- Solução analítica 23

4.3.1- Cálculos 23

4.3.2- Resultados 25

4.4- Amostra com um nível de traps 27

4.4.1- Cálculos..... 27

4.4.2- Resultados 31

V - POTENCIAL DE SUPERFÍCIE DE UMA AMOSTRA COM DENSIDADE INICIAL DE CARGAS CONHECIDA 33

5.1- Introdução 33

5.2- $\rho_o=0$ e $\rho_{to}= 1 + 0.5x$ 37

5.3- $\rho_o=C\ x^{-1/2}$ e $\rho_{to}= C + x^{-1/2}$ 39

VI - IDC E TSD EM CURTO CIRCUITO 44

6.1- Introdução 44

6.2- IDC em curto circuito 47

6.2.1- Condições iniciais (1) 48

6.2.2- Condições iniciais (2) 50

6.2.3- Condições iniciais (3) 53

6.3- TSC em curto circuito 56

VII - IDC E TSC COM VOLTAGEM APLICADA 67

7.1- Introdução 67

7.2- IDC com voltagem aplicada 70

7.2.1- Condições iniciais dadas pela eq.(VI.10) ... 70

7.2.2- Condições iniciais dadas pela eq.(VI.11) ... 75

7.3- TSC com voltagem aplicada 78

CONCLUSÕES 83

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 86

APÊNDICE A A1

APÊNDICE B B1

APÊNDICE C C1

RESUMO

São apresentadas as soluções aproximadas de alguns problemas de transporte de carga em dielétricos, inexpugnáveis ainda a um tratamento rigoroso, usando-se o Método de Galerkin. Com ele reduz-se o sistema de equações a derivadas parciais, que descrevem o transporte na presença de armadilhas, em um sistema de equações diferenciais ordinárias que são, então, integradas numericamente. Sempre que possível, a solução aproximada é comparada com alguma exata ou quase-exata, como a que se obtém da integração numérica direta do sistema de equações a derivadas parciais com o Método das Diferenças Finitas. Três diferentes condições de contorno são empregadas aqui: circuito aberto, curto circuito e circuito fechado com uma voltagem aplicada entre os eletrodos; em alguns casos considera-se temperatura variável. Este método requer que seja escolhida a priori , a forma da distribuição de carga livre; verifica-se que a corrente é mais sensível a esta distribuição do que o potencial de superfície, que sempre resulta muito próximo do exato, mesmo quando a aproximação parece grosseira.

ABSTRACT

Approximate solutions for some problems of charge transport in dielectrics, unsolved yet by exact methods, are presented using Galerkin's Method. This allows to transforming the system of partial differential equations, describing transport with trapping, into a system of ordinary differential equations which are, then, integrated numerically. Whenever possible, a comparison is made between this approximate solution with some exact or quasi-exact solution as, for example, that obtained from the direct numerical integration of the system of partial differential equations using the Finite Difference Method. Three different boundary conditions are considered here: open circuit, short circuit and closed circuit with a voltage applyed between the electrodes; in some cases the temperature was allowed to vary. Use of Galerkin's Method requires a priori choice of the free charge distribution; there results that the current is more sensitive to this distribution than the surface potential which leads to good results even when the approximation seems crude.

NOTAÇÃO

A,B,C: variáveis auxiliares

E',E: campo elétrico

$E_1(x)$: integral exponencial $E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-u}}{u} du$

i'_c, i_c: densidade de corrente de condução

j',j: densidade de corrente total

k: probabilidade de detrapping, ou mais corretamente, inverso do tempo de detrapping

k_B: constante de Boltzmann

ℓ: espessura da amostra

M_{ti}: momento de ordem i da carga inicial nos traps

P,p: variáveis auxiliares

Q',Q: carga por unidade de área

S,s: variáveis auxiliares

t',t: tempo

t_r: $\ell^2/\mu V_o$

T: temperatura

T*: temperatura correspondente ao máximo da corrente termo-estimulada

T_1, T_2: menor e maior temperaturas, respectivamente, em que a corrente tem um valor igual à metade do seu máximo valor.

u: variável auxiliar

V', V, V'_1, V_1: diferenças de potencial

w_1, w_2: variáveis auxiliares

x',x: coordenada de posição

Y_i : momento de ordem (i-1) da carga nos traps

α_1, α_2: variáveis auxiliares

β: razão de aquecimento

ε: constante dielétrica

λ_1, λ_2: variáveis auxiliares

μ: mobilidade

ν: frequência de escape

ρ', ρ: densidade volumétrica de carga livre

ρ'_t, ρ_t: densidade volumétrica de carga nos traps

τ',τ: tempo de trapping, ou, tempo de captura

ϕ: energia de ativação dos traps

obs: as quantidades $x,t,\rho,\rho_t,\tau,k,E,V,i_c,j$ estão nas unidades adimensionais, mais convenientes para serem usadas nos problemas que testaremos. A relação entre elas e as quantidades correspondentes em unidades normais é dada no Capítulo III.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O problema de transporte de cargas em dielétricos com armadilhas no estado transiente é relativamente difícil devido às complicadas equações que o regem exigindo, no caso mais geral de trapping e detrapping, a resolução de um sistema de equações diferenciais parciais, não lineares. Já existem soluções exatas deste sistema para determinadas condições iniciais e de contorno, e particulares parâmetros de trapping e detrapping como a de Rudenko(1) que apresentou a solução para o caso de amostra carregada por descarga corona em circuito aberto quando os traps são profundos; a de Many e Rakavy(2), para injeção de portadores por um contacto ôhmico quando uma voltagem é aplicada para duas situações extremas: nenhum trapping e trapping rápido; e a de Leal Ferreira e Nunes Oliveira (3) para o caso de distribuição inicial de cargas nos traps linear e nenhum retrapping. Para muitos problemas ainda sem solução exata, têm sido propostas soluções aproximadas como nas referências (4-7).

Embora seja bastante vasta a literatura neste campo, este assunto ainda não está esgotado, existindo, ainda, muitos problemas sem solução. Muitos destes podem ser resolvidos através da integração numérica direta do sistema de equações, aproximando as derivadas por diferenças finitas (Método de Diferenças Finitas)(8, 9). Esta forma de resolução pode dar resultados muito próximos dos exatos, apresentando, no entanto, o inconveniente de requerer, às vezes, longos tempos de computação a fim de dar soluções estáveis. Por isso, continua sendo válida a busca de soluções aproximadas desde que estas possam ser obtidas mais rapidamente.

Neste trabalho, as equações de transporte de carga são

resolvidas, para várias condições iniciais e de contorno, fazendo uso de um método matemático aproximado: o método de Galerkin(10). Como será visto no Capítulo II, os fundamentos deste método são bem simples, e a solução pode se aproximar bastante da solução exata, de maneira que ele pode ser uma ferramenta poderosa para se resolver tal sistema de equações.

O método de Galerkin pode ser usado em equações diferenciais ou, mesmo, íntegro-diferenciais, de qualquer tipo, dando os mesmos resultados que os métodos variacionais que, por sua vez, só são justificáveis quando a equação diferencial é linear e auto adjunta(10). Isto porque os métodos variacionais carregam, implicitamente, a idéia da existência de algum funcional cujas condições de ser estacionário dão a solução do problema; mas funcionais, geralmente, só podem ser obtidos quando a equação diferencial é auto-adjunta e linear (11,12). Quando as equações não são deste tipo outros princípios, também chamados de variacionais, têm sido propostos (13), porém, conforme Finlayson e Scriven(12), estes não são verdadeiros princípios variacionais, devendo ser mais corretamente chamados de princípios quasi-variacionais sendo, na verdade, equivalentes ao método de Galerkin.

Este método já foi usado por P.C.Camargo (14) para o caso de isolante sem traps em curto circuito sendo os resultados muito bons. Neste trabalho é tratado o caso de isolante com traps; os problemas são resolvidos pelo método de Galerkin fazendo-se, quando possível, uma comparação entre a solução assim obtida com alguma outra, exata ou mais próxima da exata. Os capítulos II e III são introdutórios: o Capítulo II contém um resumo do método e o Capítulo III as hipóteses e equações básicas necessárias nos capítulos seguintes. Nos Capítulos IV e V a condição de contorno é a de circuito aberto, tendo o primeiro, como condição inicial, toda a carga concentrada numa das superfícies e o segundo, a carga

distribuída no interior da amostra (duas distribuições diferentes). No Capítulo VI a condição de contorno é a de curto circuito e se considera três diferentes condições iniciais, todas com a carga no interior da amostra. Finalmente, no Capítulo VII, a condição de contorno é a de voltagem aplicada e a condição inicial análoga a duas das usadas no Capítulo VI. Em todos estes problemas, o objetivo final é calcular a quantidade experimentalmente mensurável: o potencial de superfície nos dois primeiros casos e a corrente total nos dois últimos, sendo a resolução apresentada com mais detalhes nos primeiros e mais diretamente nos últimos, já que o procedimento é, basicamente, o mesmo e a leitura se torna, dessa forma, mais fácil.

As integrações numéricas diretas do sistema de equações a derivadas parciais empregando o Método das Diferenças Finitas apresentadas nos capítulos VI e VII e utilizadas como um teste para as soluções aproximadas pelo Método de Galerkin, foram feitas aproveitando a visita do Prof. H.Von Seggern a este Departamento.

CAPÍTULO II

MÉTODO DE GALERKIN

2.1- Redução a equações algébricas

Suponha que se queira determinar f(x,t) solução da equação

$$L(f(x,t),x,t) = 0 \qquad \text{(II.1)}$$

onde L(f(x,t),x,t) é uma expressão que pode conter termos do tipo $\frac{\partial^n f}{\partial x^n}$, $\frac{\partial^n f}{\partial t^n}$, $\frac{\partial^n}{\partial x^n}\frac{\partial^m f}{\partial t^m}$ $(\forall m,n)$, $f(x,t)$, x, t, $\int dx$, $\int dt$, $\int\int dxdt$, ou qualquer produto destes termos. L(f(x,t),x,t) pode , portanto, representar qualquer equação diferencial ou íntegro-diferencial, não necessariamente linear. Observe que se considera aqui f como função de duas variáveis, pois, este é o caso que utilizaremos neste trabalho; mas o método descrito a seguir pode, pelo menos em princípio, ser empregado para qualquer número de variáveis independentes.

A solução f(x,t) pode ser representada como uma série

$$f(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i(x,t)$$

onde os c_i são constantes indeterminadas e as funções $\Psi_i(x,t)$ são linearmente independentes e formam um conjunto completo de funções $\{\Psi_i(x,t)\}$ $(i=1,2,\ldots,N,\ldots)$. Pode-se, ainda, interpretar o fato de a expressão L(f(x,t),x,t) ser identicamente nula dizendo que esta expressão é ortogonal a todas as funções do conjunto $\{\Psi_i(x,t)\}$ no domínio de interesse para o problema. A partir das condições de ortogonalidade

$$\iint_D L(f(x,t),x,t)\Psi_i(x,t)\,dxdt = 0 \qquad i=1,2,\ldots,N,\ldots$$

determina-se os coeficientes c_i.

O que foi dito acima é exato. A aproximação de Galerkin consiste em:

1 - truncar a série, considerando como solução da eq. (II.1) a função

$$\bar{f}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} c_i\Psi_i(x,t) \qquad \text{(II.2)}$$

onde as funções $\Psi_i(x,t)$ devem obedecer às mesmas condições de contorno que as requeridas da solução exata. Quando se conhece previamente o comportamento desta solução, é possível escolher as funções $\Psi_i(x,t)$ de tal forma que, com poucos termos na série (N=1 ou 2), $\bar{f}(x,t)$ já se aproxime bem da solução exata.

2 - satisfazer a apenas N condições de ortogonalidade

$$\iint_D L(\bar{f}(x,t),x,t)\Psi_i(x,t)\,dx\,dt, \qquad i=1,2,\ldots,N \qquad \text{(II.3)}$$

Estas condições de ortogonalidade dão as N equações algébricas necessárias para a determinação dos N coeficientes c_i com as quais se obtém a solução aproximada na forma da eq.(II.2).

O método de Galerkin se aplica, em princípio, a qualquer problema. Quando este problema pode ser tratado com a formulação variacional (o que acontece quando a eq.(II.1) é auto-adjunta podendo, portanto, ser tratada como a equação de Euler cuja solução minimiza determinado funcional) o método de Galerkin e o de Ritz (10,15) (que é um método variacional) dão a mesma solução aproximada.

2.2- Redução a equações diferenciais ordinárias

Já foi dito que o método de Galerkin converge rapidamente quando se conhece previamente a forma da solução em todas as direções (x e t no caso discutido na seção anterior), o que facilita a escolha das funções $\Psi_i(x,t)$. No entanto, quando não se conhece o comportamento da solução numa das direções, a utilização do método descrito acima pode se tornar inconveniente. Uma boa alternativa é usar o método de Galerkin fazendo a mesma modificação proposta por Kantorovich para o método de Ritz que é descrita na referência (10) como "Redução a equações diferenciais ordinárias". Esta modificação aplicada ao método de Galerkin aparece, na referência (15), como o método de Faedo-Galerkin.

Neste método, deixa-se indeterminada a solução em uma das variáveis, ou seja, representa-se a solução na forma

$$\bar{f}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} c_i(t)\Psi_i(x) \qquad \text{(II.4)}$$

onde, agora, os $c_i(t)$ são funções desconhecidas do tempo e $\Psi_i(x)$ funções de apenas uma variável, escolhidas de acordo com o comportamento da solução na direção desta variável. Dessa forma, derivadas parciais da função f(x,t) se transformam em derivadas totais dos coeficientes $c_i(t)$ e integrais duplas em simples. Com condições de ortogonalidade análogas às da eq. (II.3)

$$\int_D L(\bar{f}(x,t),x,t)\Psi_i(x)\,dx = 0 \quad , \quad i=1,2,\ldots N \qquad \text{(II.5)}$$

obtém-se um sistema de N equações diferenciais ou íntegro-diferenciais (dependendo da equação original, eq.(II.1)) ordinárias na variável t para a determinação dos N coeficientes $c_i(t)$.

Além de ser mais preciso, este método tem a vantagem de

exigir o conhecimento prévio de apenas parte da solução, sendo o resto determinado de acordo com o caráter do problema(10). É este o método que será utilizado na resolução de todos os problemas desta dissertação, fixando a priori apenas o comportamento da solução na variável espacial e deixando indeterminado seu comportamento na variável temporal.

2.3- Condições iniciais

Quando as condições iniciais para os $c_i(t)$ não são óbvias a partir daquelas do problema original, estas devem ser obtidas impondo-se que

$$\int_D \left[f(x,0) - \bar{f}(x,0)\right]\Psi_i(x)\,dx=0 \quad , \; i=1,\ldots,N \qquad \text{(II.6)}$$

No caso ideal em que $\bar{f}(x,0)\equiv f(x,0)$, o termo entre colchetes na integral acima é identicamente nulo sendo, portanto, ortogonal a todas as funções do conjunto completo $\{\Psi_i(x)\}$. No caso mais geral em que isto não acontece, a eq.(II.6) corresponde a impor que a diferença $f-\bar{f}$ seja ortogonal pelo menos às N primeiras funções deste conjunto completo. Quando o conjunto $\{\Psi_i(x)\}$ for escolhido como $\{x^i\}$, $i=0,1,2,\ldots$, a eq.(II.6) pode ser entendida como a imposição de que os momentos de ordem 0 até N da distribuição inicial sejam mantidos na aproximação.

CAPÍTULO III

INTRODUÇÃO À RESOLUÇÃO DOS PROBLEMAS

Este capítulo contém algumas considerações que são comuns à maioria dos problemas resolvidos nesta dissertação.

1 - Isolante com geometria plano-paralela, de espessura ℓ, com o eixo x' perpendicular ao plano da amostra.

2 - Efeitos dos contactos ou de superfície serão ignorados: ou os contactos serão bloqueantes para a entrada de carga ou receberão as cargas que chegam às imediações dos eletrodos.

3 - A densidade de traps livres será sempre considerada muito maior do que a de traps preenchidos.

4 - Não será levado em conta o termo de difusão na corrente total, o que é comum no tratamento de correntes limitadas por carga espacial (SCLC) e que, em geral, é uma boa aproximação(16,17).

5 - Considera-se que só há um tipo de portadores (positivos ou negativos) participando do processo de condução.

6 - As equações básicas são:

$$i'_c(x',t') = \mu\rho'(x',t')E'(x',t')$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} E'(x',t') = \frac{\rho'(x',t')}{\varepsilon} + \frac{\rho'_t(x',t')}{\varepsilon}$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} i'_c(x',t') + \frac{\partial}{\partial t'} \rho'(x',t') + \frac{\partial}{\partial t'}\rho'_t(x',t') = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t'} \rho'_t(x',t') = \frac{\rho'(x',t')}{\tau'} - k'\rho'_t(x',t')$$

$$j'(t') = i'_c(x',t') + \varepsilon \frac{\partial}{\partial t'} E'(x',t')$$

$$V'(t') = \int_0^{\ell} E'(x',t')\,dx'$$

que são, respectivamente, a definição da densidade de corrente de condução, a equação de Poisson, a equação da continuidade, a e - quação de balanço entre a banda de condução e os traps, a densida de de corrente total e a diferença de potencial entre $x'=0$ e $x'=\ell$.

7 - As soluções são dadas com as grandezas em unidades adimensionais , que se relacionam com as normais da seguinte maneira:

$$x = \frac{x'}{\ell} \quad , \quad t = \frac{t'}{t_r} \quad , \quad \tau = \frac{\tau'}{t_r} \quad , \quad k = k' \, t_r \quad ,$$

$$V = \frac{V'}{V_o} \quad , \quad E = \frac{E'}{(V_o/\ell)} \quad , \quad \rho = \rho' \frac{\ell^2}{\varepsilon V_o} \quad , \quad \rho_t = \rho_t' \frac{\ell^2}{\varepsilon V_o}$$

$$i_c = i_c' \frac{\ell^3}{\mu\varepsilon V_o^2} \quad , \quad j = j' \frac{\ell^3}{\mu\varepsilon V_o^2} \quad , \quad Q = \frac{Q'}{Q_o}$$

onde $t_r = \ell^2/(\mu V_o)$, V_o é uma quantidade arbitrária, com dimensão de potencial, escolhida de forma a simplificar os coeficientes numéricos, e

$$Q_o = \int_o^{\ell} \left[\rho'(x',0) + \rho_t'(x',0)\right] dx'$$

é a carga total na amostra no instante inicial.

8 - Com estas unidades reduzidas as equações básicas se simplificam e, na mesma ordem com que foram colocadas no ítem (6) acima, escrevem-se

$$i_c(x,t) = \rho(x,t)\, E(x,t) \qquad \text{(III.1)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} E(x,t) = \rho(x,t) + \rho_t(x,t) \qquad \text{(III.2)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} i_c(x,t) + \frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial t} \rho_t(x,t) = 0 \qquad \text{(III.3)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho_t(x,t) = \frac{\rho(x,t)}{\tau} - k\,\rho_t(x,t) \tag{III.4}$$

$$j(t) = i_c(x,t) + \frac{\partial}{\partial t}\,E(x,t) \tag{III.5}$$

$$V(t) = \int_0^{l} E(x,t)\,dx \tag{III.6}$$

CAPÍTULO IV

DECAIMENTO DO POTENCIAL DE SUPERFÍCIE DE UMA AMOSTRA CARREGADA COM DESCARGA CORONA

4.1- Introdução

Considera-se uma amostra dotada de apenas um nível de traps, tendo uma superfície metalizada, ligada à terra, e a outra, livre, carregada por uma descarga corona rápida. A condição de contorno é a de circuito aberto e a condição inicial é toda a carga concentrada em $x'=0$ no instante $t'=0$. Supõe-se que toda a carga entra na amostra em direção à outra extremidade, $x'=\ell$, caminhando sob a ação de seu próprio campo. O que se pretende, neste capítulo, é calcular a diferença de potencial entre as duas extremidades da amostra como função do tempo.

As considerações do Capítulo III são válidas aqui. As eq. (III.1), (III.2) e (III.4) podem ser usadas para escrever a eq. (III.3) na forma

$$E\frac{\partial\rho}{\partial x} + \rho^2 + \rho\rho_t + \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\rho}{\tau} - k\rho_t = 0 \qquad \text{(IV.1)}$$

O campo elétrico $E(x,t)$ e a densidade de cargas presas nos traps são funções da densidade de cargas livres (ρ) e são dados pelas equações de Poisson e de balanço entre a banda de condução e os traps, respectivamente.

A eq.(IV.1) é uma expressão do mesmo tipo que a eq. (II.1), com derivadas parciais, integrais e não linear. É possível, então, resolvê-la com o método aproximado descrito na seção 2 do Capítulo II.

O comportamento de ρ na variável espacial (x) será fixa

do com base no seguinte: depois que toda a carga entra na amostra o campo elétrico, e consequentemente a velocidade dos portadores em x=0, se anula obrigando a distribuição de cargas a ter uma extremidade sempre encostada na superfície x=0. A frente de cargas caminha com a velocidade

$$\frac{dx'_f}{dt'} = \mu E'_o = \mu \frac{V_o}{\ell}$$

ou

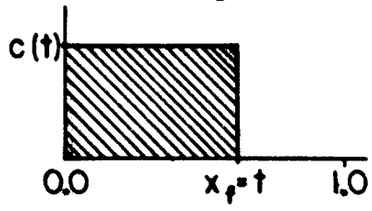
$$\frac{dx_f}{dt} = 1$$

onde x'_f e x_f são a posição da frente de cargas nas unidades normais e reduzidas respectivamente.

Para a representação de ρ na forma dada pela eq.(II.4), vamos considerar apenas um termo na série, ou seja N=1, com

$$\Psi_i(x) = \begin{cases} 1 & , \quad x \leqslant x_f = t \\ 0 & , \quad x > x_f = t \end{cases} \qquad \text{(IV.2)}$$

Isto significa considerar que ρ tem o perfil mostrado na Fig.1, ou seja:



$$\rho = \begin{cases} c(t) & , \quad x \leqslant t \\ 0 & , \quad x > t \end{cases} \qquad \text{(IV.3)}$$

FIG.1. Perfil aproximado da densidade de cargas num instante t < 1

Resta, agora, determinar c(t). Isto é feito através da condição

$$\int_0^1 (E\frac{\partial\rho}{\partial x} + \rho^2 + \rho\rho_t + \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\rho}{\tau} - k\rho_t)\Psi_i(x)\,dx = 0 \quad , \qquad \text{(IV.4)}$$

que corresponde à eq.(II.5).

4.2- Cálculo do potencial de superfície

O fato de a distribuição ter uma frente que caminha até tocar o eletrodo em x=1, exige que o problema seja separado em duas partes: antes e depois de esta frente chegar em x=1.

4.2.1- $t \leqslant 1$

Em unidades normais esta condição se escreve $t' \leqslant \ell^2/\mu V_o$. Isto significa que a frente de cargas ainda não chegou, ou apenas chegou, em $x' = \ell$.

Introduzindo (IV.2) e (IV.3) na eq. (IV.4) obtém-se

$$\int_0^t \{ [c(t)]^2 + c(t)\rho_t(x,t) + \dot{c}(t) + \frac{c(t)}{\tau} - k\rho_t(x,t)\}dx = 0$$

$$tc^2 + t\dot{c} + \frac{tc}{\tau} + (c-k)\int_0^t \rho_t(x,t)\,dx = 0 \qquad \text{(IV.5)}$$

$\rho_t(x,t)$ é obtido da integração da eq. (III.4), lembrando de (IV.3)

$$\rho_t(x,t) = \frac{e^{-kt}}{\tau}\int_x^t e^{kt'}c(t')\,dt' \qquad \text{(IV.6)}$$

Então

$$\int_o^t \rho_t(x,t)\,dx = \frac{e^{-kt}}{\tau}\int_o^t dx \int_x^t e^{kt'}c(t')\,dt' =$$

$$= \frac{e^{-kt}}{\tau}\int_o^t dt'\int_o^{t'} c(t')e^{kt'}dx = \frac{e^{-kt}}{\tau}\int_o^t t'e^{kt'}c(t')\,dt'$$

Introduzindo este resultado na eq.(IV.5)

$$tc^2 + t\dot{c} + \frac{tc}{\tau} + (c-k)\frac{e^{-kt}}{\tau}\int_o^t t'e^{kt'}c(t')\,dt' = 0 \qquad \text{(IV.7)}$$

Seja

$$P(t) = e^{-kt}\int_o^t t'e^{kt'}c(t')\,dt' \qquad \text{(IV.8)}$$

e $\quad S = \dot{P}$

Então

$$c(t) = \frac{S+kP}{t} \qquad \text{(IV.9)}$$

e a eq.(IV.7) se desdobra em duas equações diferenciais, uma para P, outra para S

$$\dot{P} = S$$

$$\dot{S} = -(S+kP)\left[\frac{(S+kP) + P/\tau - 1}{t} + \frac{1}{\tau}\right] + k\left(\frac{P}{\tau} - S\right) \qquad \text{(IV.10)}$$

A tensão através da amostra é dada pela eq.(III.6)

$$V(t) = \int_o^1 E(x,t)\,dx = \int_o^t E\,dx + \int_t^1 E\,dx = \int_o^t E\,dx + (1-t) \qquad \text{(IV.11)}$$

onde usamos o fato de que o campo elétrico na região que ainda não

tem cargas é, nas unidades adimensionais, igual à unidade.

O campo elétrico, em função de c(t), pode ser obtido da equação de Poisson usando as equações (IV.3) e (IV.6). Para resolver as integrais que aparecem, então, na expressão do potencial, é preciso conhecer c(t) que é obtido numericamente; consequentemente, estas integrais também devem ser feitas numericamente. Preferiu-se, por isso, usar uma equação diferencial para o potencial de superfície, obtida da seguinte maneira: deriva - se com relação ao tempo a expressão acima para V(t), obtendo-se

$$\frac{dV}{dt} = \int_0^t \frac{\partial E}{\partial t}\, dx \qquad \text{(IV.12)}$$

Será necessário, agora, introduzir a condição de circuito aberto o que significa que a corrente total é nula. Integrando em x os dois membros da eq.(III.5), usando as eq.(III.1) e (IV.3) e a condição j(t)=0, resulta

$$c \int_0^t E dx + \int_0^t \frac{\partial E}{\partial t}\, dx = 0$$

Colocando nesta equação os resultados das eq.(IV.11) e (IV.12), obtém-se a equação procurada

$$\frac{dV}{dt} + cV = c(1 - t) \qquad \text{(IV.13)}$$

Observemos que, nesta equação, aparece o c(t) dado pela eq.(IV.9) que por sua vez é dado em termos de P e S obtidos da eq.(IV.10).

Falta,ainda, explicitar as condições iniciais para P,S e V. Com o uso da eq.(IV.3) e da condição de que, para $t \to 0, \rho_t(x,t) = 0$ na equação da continuidade, eq.(III.3) resulta

$$\frac{dc}{dt} + c^2 = 0,$$

cuja integração dá

$$c(t) = \frac{c_o}{1 + c_o t}$$

onde c_o é a densidade de carga no instante $t = 0$ que é muito grande, já que neste instante toda a carga está concentrada em $x = 0$. Então, para um instante t_o muito próximo de zero,

$$c(t_o) \simeq \frac{1}{t_o} \qquad \text{(IV.14)}$$

Este $c(t_o)$ nas eq.(IV.8) que definem P e S dá as condições iniciais

$$P(t_o) = \frac{1 - e^{-kt_o}}{k}$$

$$\text{e} \qquad S(t_o) = e^{-kt_o} \qquad \text{(IV.15)}$$

Inserindo agora, a eq.(IV.3), a equação de Poisson e a condição $\rho_t(t \to 0) = 0$ na condição $j(t) = 0$, obtém-se

$$\frac{1}{2}\frac{\partial E^2}{\partial x} + \frac{\partial E}{\partial t} = 0$$

que, integrada em x de 0 até 1 dá

$$\frac{dV}{dt} = -\frac{1}{2} \qquad \text{(IV.16)}$$

$V(t_o)$ é, finalmente, obtido pela substituição de (IV.14) e (IV.16) na eq.(IV.13)

$$V(t_o) = 1 - t_o/2 \qquad \text{(IV.17)}$$

A integração do sistema de equações (IV.10), (IV.9) e (IV.13) com as condições iniciais dadas pelas eq.(IV.15) e (IV.17) foi feita numericamente e os resultados são apresentados na seção 4.2.3 em conjunto com aqueles para o caso $t \geqslant 1$. Na seção 4.3.1 é apresentada a solução analítica para a eq.(IV.5).

4.2.2- $t > 1$

Como $x \leqslant 1$ e, aqui, $t > 1$, as eq.(IV.2) e (IV.3) na eq. (IV.4) dão

$$\int_o^1 \left[c^2 + c\rho_t + \dot{c} + \frac{c}{\tau} - k\rho_t\right]dx = 0,$$

$$c^2 + \dot{c} + \frac{c}{\tau} + (c - k)\int_o^1 \rho_t dx \qquad \text{(IV.18)}$$

Da eq.(IV.6)

$$\int_o^1 \rho_t dx = \frac{e^{-kt}}{\tau} \int_o^1 dx \int_x^t e^{kt'} c(t')dt' =$$

$$= \frac{e^{-kt}}{\tau} \{\int_o^1 dt' \int_o^{t'} e^{kt'} c(t')dx + \int_1^t dt' \int_o^1 e^{kt'} c(t')dx\} =$$

$$= \frac{e^{-kt}}{\tau} \{\int_o^1 t' e^{kt'} c(t')dt' + \int_1^t e^{kt'} c(t')dt'\}$$

Mas, conforme (IV.8)

$$e^{-k} \int_o^1 t' e^{kt'} c(t')dt' = P(1)$$

Então, a eq.(IV.18) se escreve

$$\dot{c} + c^2 + \frac{c}{\tau} + \frac{(c-k)}{\tau}\{P(1)e^{k(1-t)} + e^{-kt}\int_1^t e^{kt'} c(t')dt'\} = 0$$

Definindo agora

$$p(t) = e^{-kt}\int_1^t e^{kt'} c(t')dt'$$

$$\text{e} \qquad s(t) = \dot{p} \,, \tag{IV.19}$$

obtém-se

$$c(t) = s + kp \tag{IV.20}$$

e a equação acima se desdobra em duas

$$\dot{p} = s \tag{IV.21}$$

$$\dot{s} = -(s + kp)\left[(s + kp) + \frac{e^{k(1-t)}P(1)+p+1}{\tau}\right] + k\left[\frac{e^{k(1-t)}P(1)+p}{\tau} - s\right]$$

A equação para a voltagem é obtida de maneira análoga à correspondente para $t \leqslant 1$: derivando em relação ao tempo a eq. (III.6)

$$\frac{dV}{dt} = \int_0^1 \frac{\partial E}{\partial t}\, dx \quad , \tag{IV.22}$$

integrando em x os dois membros da eq.(III.5), e usando as eq.(III.1), (IV.3) e a condição de circuito aberto, $j(t) = 0$, obtém-se

$$c \int_0^1 E dx + \int_0^1 \frac{\partial E}{\partial t} dx = 0,$$

que, com as eq.(III.6) e (IV.22), dá

$$\frac{dV}{dt} + cV = 0 \qquad \text{(IV.23)}$$

Tendo, então, c(t) que é dado pela eq.(IV.20) em termos de s(t) e p(t) que podem ser tirados das eq.(IV.21), pode-se integrar a eq.(IV.23) obtendo - se V(t) para t > 1.

As condições iniciais, ou seja p(1), s(1) e V(1) são determinadas a partir das eqs. (IV.19) e (IV.20)

$$p(1) = 0$$

$$s(1) = c(1) \qquad \text{(IV.24)}$$

onde c(1) é o último valor calculado para c(t) no caso de $t \leqslant 1$, já que c(t) deve ser contínuo. O mesmo acontece com a voltagem , sendo V(1) também tirado do cálculo anterior.

4.2.3- Resultados

As curvas cheias da Fig.(2) são curvas de decaimento do potencial de superfície em função do tempo feitas numericamente a partir dos cálculos da seção 4.2.1 para $t \leqslant 1$ e 4.2.2 para t > 1, para o caso de traps profundos (k=0). Os pontos correspondem à voltagem calculada na ref.(18) a partir da densidade de cargas calculada por Rudenko(1), teoria que foi utilizada nas ref. (18 e 19) para ajustar as curvas de decaimento do potencial de superfície e determinar o tempo de captura, τ, de monocris -

tais de naftaleno. Observe que, para este caso de traps profundos, o potencial só vai a zero quando $t \to \infty$, se $\tau \to \infty$, que é o caso de carga livre. Quanto menor o tempo de captura, mais cargas ficam presas nos traps o que dá origem a um potencial residual maior.

O cálculo de Rudenko é exato, porém, não considera o detrapping, enquanto o cálculo apresentado aqui, aproximado, não tem essa limitação. Como o método de Galerkin se mostrou muito bom para o caso de k=0, podemos esperar que também o será para $k \neq 0$. Deve-se salientar, no entanto, que os resultados aqui apresentados não se devem aplicar aos casos em que a mobilidade modulada (2), $\frac{k'\tau'}{1+k'\tau'}\mu$, que, nas unidades adimensionais, se escreve $\frac{k\tau}{1+k\tau}$, seja muito diferente da mobilidade real dos portadores, μ. Isto porque foi usada a condição (eq.(IV.16)),

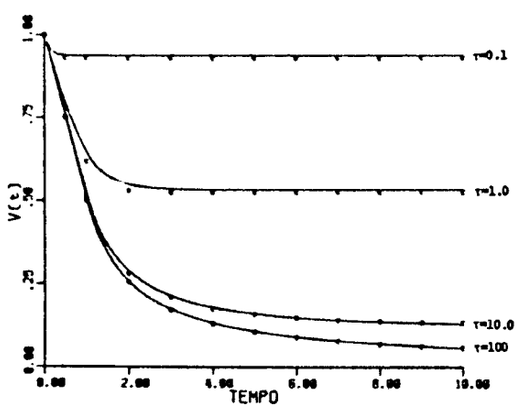


FIG.2. Decaimento do potencial de superfície de uma amostra carregada por descarga corona rápida. Sem detrapping (k=0). Curvas cheias: cálculos feitos nesta seção. Pontos: cálculo exato de Rudenko.

$$\left.\frac{dV}{dt}\right|_{t=0} = -\frac{1}{2},$$

para determinar a condição inicial para V(t), e foi considerado que a frente de cargas se move com velocidade unitária, hipóteses

que estão diretamente relacionadas com o fato de se considerar mobilidade igual a 1, nas unidades adimensionais. Com base nisto podemos afirmar que este cálculo deve dar bons resultados se:

a) o tempo de trapping (τ) for grande (maior que, aproximadamente, duas vezes o tempo de trânsito), de forma que poucas cargas são aprisionadas e a frente de cargas se mova com velocidade muito próxima de 1.

b) τ for muito pequeno e k não muito grande ($1/k \geqslant$ tempo de medida) de forma que a maior parte da carga fica perto de x=0. Para tempos maiores do que da ordem de 1/k as cargas já estão penetrando na amostra, a frente destas caminhando justamente com a mobilidade modulada.

c) $k\tau >> 1$ de forma que

$$\frac{k\tau}{1+k\tau} \simeq 1.$$

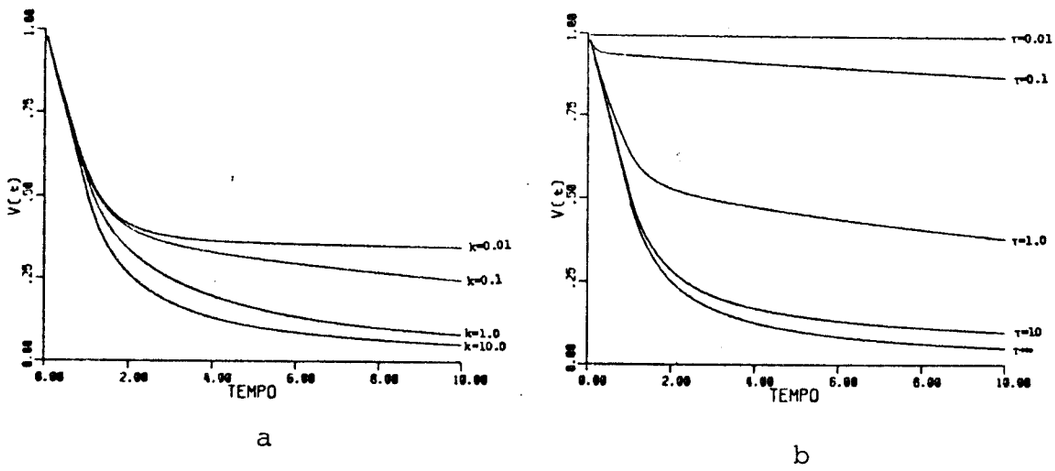


FIG.3. Decaimento do potencial de superfície de uma amostra carregada por descarga corona, considerando detrapping.
(a) τ=2.0 , (b) k=0.1

TECA E

As Fig.(3.a) e (3.b) mostram o decaimento do potencial de superfície quando $k \neq 0$, ou seja, quando há detrapping. Neste caso $V \to 0$, quando $t \to \infty$, e o decaimento é mais rápido do que se as cargas ficassem congeladas nos traps, aspectos que estão de acordo com o que se poderia esperar de uma análise apenas qualitativa do problema.

Da Fig.(6) da ref.(19) pode-se ver que é importante incluir detrapping na teoria a fim de ajustar as curvas experimentais para tempos maiores do que, aproximadamente, metade do tempo de trânsito. Isto foi feito, usando a teoria aqui apresentada, para uma das curvas desta figura. O resultado é mostrado na Fig. (4.b). Para o ajuste foi usado $\tau' = 135$ s, $k' = 0{,}0008\ s^{-1}$ e $t_r = \ell^2/\mu V_o = 355$ s. A Fig.(4.a) mostra os mesmos pontos experimentais que a (4.b) e a teoria sem detrapping ($k' = 0$) para os mesmos t_r e τ'.

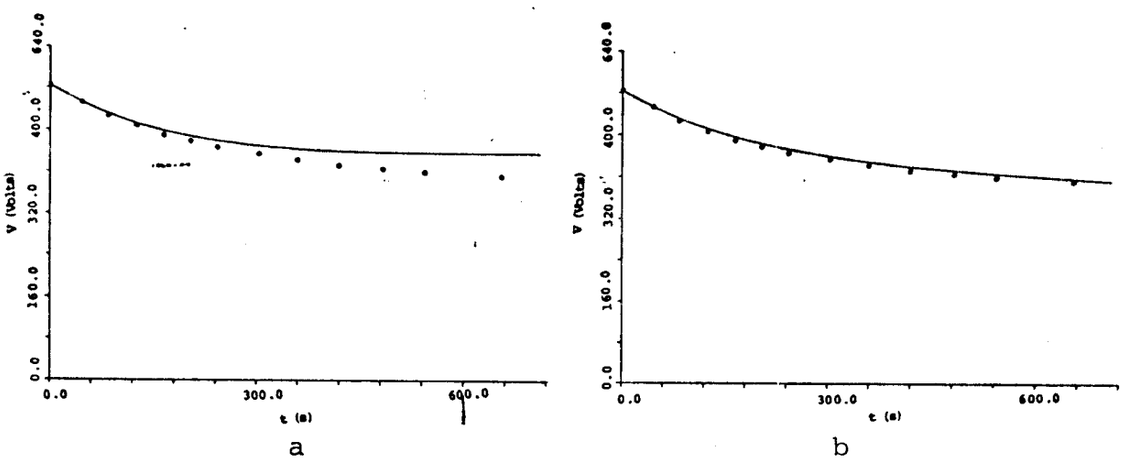


FIG.4. Pontos: decaimento do potencial de superfície de uma amostra de naftaleno medido por J.A.Giacometti (19)
Linhas: ajuste teórico destes pontos experimentais:
$\ell^2/\mu V_o = 355$ s, $\tau' = 135$ s . (a) $k' = 0$, (b) $k' = 0.0008\ s^{-1}$.

4.3- Solução analítica

Esta seção será dividida em duas partes: numa são apre - sentadas as equações e na outra as curvas correspondentes.

4.3.1- Cálculos

Existe uma outra maneira de resolver a eq.(IV.5) a qual dá uma expressão analítica para a densidade de cargas para $t \leqslant 1$. Basta lembrar que, se a frente de cargas ainda não atravessou o eletrodo em $x = 1$, toda a carga que foi colocada em $x = 0$ no instante inicial deve estar na região $0 \leqslant x \leqslant x_f = t$, onde x_f é a posição dessa frente. Nas unidades adimensionais essa condição se escreve

$$\int_0^t (\rho(x,t) + \rho_t(x,t))\,dx = 1 \qquad \text{(IV.25)}$$

e, com o uso de (IV.3), se obtém

$$\int_0^t \rho_t(x,t)\,dx = 1 - tc$$

Substituição deste resultado na eq.(IV.5) dá

$$t\dot{c} + \frac{tc}{\tau} + ktc + c - k = 0 \qquad \text{(IV.26)}$$

Seja

$$c(t) = \frac{u(t)}{t} \quad , \qquad \text{(IV.27)}$$

com essa nova variável, u, a eq. (IV.26) se simplifica para

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$\dot{u} + (\frac{1}{\tau} + k)u = k$$

A condição inicial para u(t) é obtida a partir daquela para c(t) dada pela eq.(IV.14) e da eq.(IV.27)

$$u(0) = 1$$

Então

$$u(t) = \frac{k\tau + e^{-(\frac{1}{\tau} + k)t}}{1 + k\tau}$$

e, portanto, da eq.(IV.27)

$$c(t) = \frac{1}{t}\{\frac{k\tau + e^{-(\frac{1}{\tau} + k)t}}{1 + k\tau}\} \qquad \text{(IV.28)}$$

O potencial de superfície é obtido da eq.(IV.11), usando-se a equação de Poisson, com as eq.(IV.3), (IV.6) e (IV.28), obtendo-se

$$V(t) = 1 - \frac{t}{2} + \frac{1}{2(1+k\tau)}\{\frac{1-e^{-kt}}{k} + \tau e^{-kt}(e^{-t/\tau}-1)\}, \quad t \leqslant 1$$

(IV.29a)

Para t > 1 a condição (IV.25) não é mais verdadeira. Pode-se, no entanto, argumentar que a razão de variação da densidade de carga livre com o tempo não deve depender do fato de a frente de cargas já haver chegado em x=1 ou não, sendo, então, c(t) dado pela equação (IV.28) também para t > 1. (é o que ocorre, por exemplo, no cálculo de Rudenko). A partir da eq.(IV.23) determina-se, então, V(t), sendo

$$V(t) = V(1)\, t^{\frac{-k\tau}{1+k\tau}} \exp\{\frac{E_1[(1/\tau+k)t] - E_1(1/\tau+k)}{1+k\tau}\}, \quad t>1 \qquad \text{(IV.29b)}$$

onde V(1) é o potencial no instante t = 1, podendo ser obtido da eq.(IV.29a) , e E_1 representa a integral exponencial (20)

$$E_1(x) = \int_x^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du$$

4.3.2- Resultados

A eq.(IV.28) é a solução analítica para a densidade de cargas e foi obtida com cálculos mais simples do que aqueles feitos na seção 4.2.1 que, aparentemente, só tem solução numérica.É possível mostrar que para $t \leqslant 1$, as duas soluções são equivalentes:basta substituir (IV.28) em (IV.7). Isto pode ser visto, também, nas **Fig.(5.a)** e (5.b): para $t \leqslant 1$ as duas soluções para V(t) coincidem. Estas figuras mostram curvas do potencial de superfície feitas a partir dos resultados desta seção (linhas) e da anterior (pontos). Vê-se que a hipótese feita para $t > 1$ só é boa para valores extremos (pequenos ou grandes) de k e τ. Esta maneira de calcular tem, no entanto, a vantagem de dar uma expressão analítica para a densidade de cargas e também para o potencial de superfície, o que permite uma análise mais direta dos resultados.

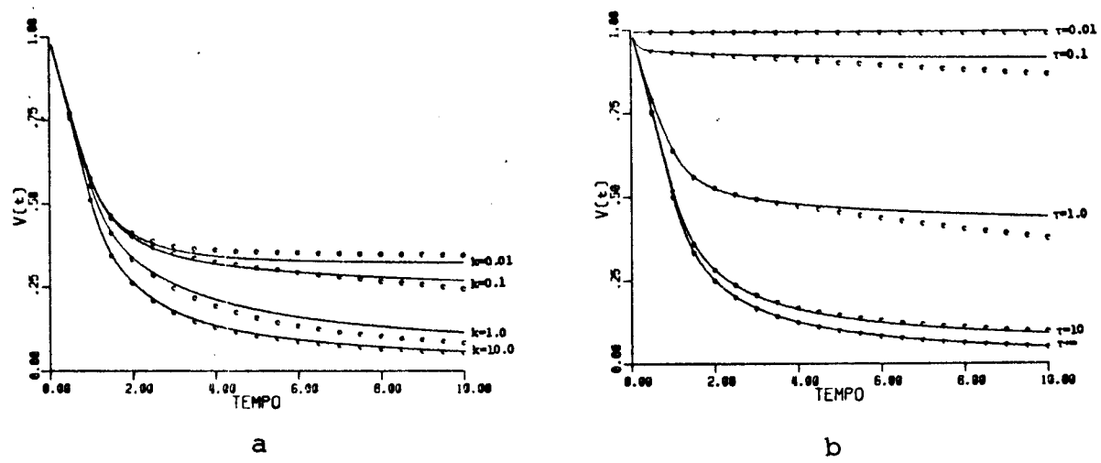
Por exemplo, no caso de $\tau \to \infty$, que corresponde ao caso de isolante sem traps a eq. (IV.29a) dá

$$V(t) = 1 - \frac{t}{2} \quad , \qquad t \leqslant 1$$

e a eq.(IV.29b) dá

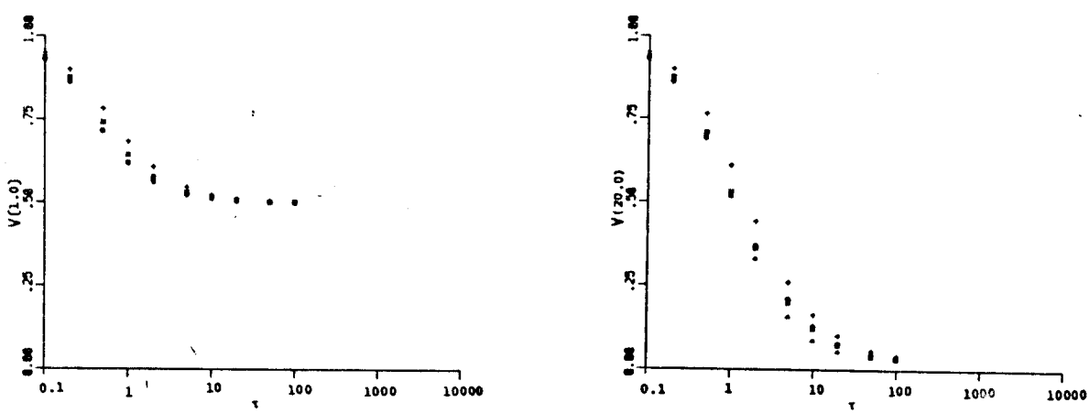
$$V(t) = \frac{V(1)}{t} = \frac{1}{2t} \quad , \qquad t > 1$$

ou seja,no caso de carga livre, o potencial decai linearmente com o tempo, para $t \leqslant 1$ e como 1/t para $t > 1$, resultados bastante conhecidos (19,21).



a b

FIG.5. Curvas de decaimento do potencial feitas a partir dos re - sultados desta seção 4.3 (linhas) e da seção anterior(pontos). (a) $\tau = 2.0$, (b) $k = 0.1$



a b

FGI.6. Potencial de superfície em função do tempo de trapping nos instantes (a) $t = 1$ e (b) $t = 20$ tirado dos cálculos de Ru - denko (o), Reiser (+), seção 4.2 (*) e seção 4.3 (Δ)

A Figura (6.a) mostra o potencial de superfície quando a frente de cargas chega em x=l(V(l)), e a Fig.(6.b) o potencial residual $V(20) \simeq V_R$ em função do tempo de trapping (τ), tirado de quatro cálculos diferentes: o de Rudenko(1,18), que é exato, o de Reiser (17), aquele feito na seção 4.2 e o feito na seção 4.3 deste trabalho. Vê-se que o potencial calculado na seção 4.2 sempre está muito próximo do exato e, mesmo aquele calculado agora, mostra-se melhor do que o de Reiser.

No caso de $k \neq 0$ é simples verificar, da equação do potencial para $t > 1$ que $V_R = 0$, resultado que deve ser esperado já que todas as cargas podem sair dos traps e, assim, deixar a amostra . É possível mostrar, ainda, que o termo dominante quando $t \to \infty$ é $t^{-k\tau/(1+k\tau)}$. Para isto, basta usar a expansão assimptótica para a integral exponencial (20)

$$E_1((1/\tau + k)t) \underset{t\to\infty}{\sim} \frac{e^{-(1/\tau+k)t}}{(1/\tau+k)t}$$

que vai a zero muito mais depressa do que o termo $t^{-k\tau/(1+k\tau)}$. Como ele é o argumento de uma exponencial, esta tende rapidamente para 1. Obtém-se, então

$$V(t) \overset{t\to\infty}{\simeq} V(1)\exp\{\frac{E_1(1/\tau+k)}{1+k\tau}\}t^{-k\tau/(1+k\tau)}$$

4.4- Amostra com dois níveis de traps

Como a seção anterior, esta também será dividida em duas partes, uma para os cálculos, outra para os resultados.

4.4.1- Cálculos

Usando os mesmos argumentos da seção anterior é possí-

vel encontrar uma solução analítica para o problema apresentado na seção 4.1 considerando que o material tem dois níveis de traps em vez de um, como foi feito até aqui.

As equações básicas devem, agora, incluir a densidade de cargas nos dois níveis de traps (ρ_{t1} e ρ_{t2}), cada um com seu tempo de trapping (τ_1 e τ_2) e sua probabilidade de detrapping (k_1 e k_2). As equações correspondentes às eq.(III.2)-(III.4) se escrevem

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \rho + \rho_{t1} + \rho_{t2} \quad , \tag{IV.30}$$

$$\frac{\partial i_c}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{t1}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{t2}}{\partial t} = 0 \tag{IV.31}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{t1}}{\partial t} &= \frac{\rho}{\tau_1} - k_1 \rho_{t1} \\ \frac{\partial \rho_{t2}}{\partial t} &= \frac{\rho}{\tau_2} - k_2 \rho_{t2} \end{aligned} \tag{IV.32}$$

Com um procedimento análogo àquele usado para se obter a eq.(IV.5), isto é, usando as eq.(III.1), (IV.30) e (IV.32) na eq.(IV.31), aplicando a condição (II.5) e considerando as eq. (IV.2) e (IV.3) resulta, para $t \leqslant 1$,

$$\begin{aligned} & tc^2 + c \int_0^t (\rho_{t1} + \rho_{t2})\, dx + t\dot{c} + tc\left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}\right) - \\ & - k_1 \int_0^t \rho_{t1} dx - k_2 \int_0^t \rho_{t2} dx = 0 \end{aligned} \tag{IV.33}$$

Argumentando, como na seção anterior, que toda a carga colocada em $x = 0$ no instante $t = 0$ deve estar dentro da região $0 \leqslant x \leqslant t$, obtém-se

$$\int_o^t (\rho + \rho_{t1} + \rho_{t2})\,dx = 1 \qquad \text{(IV.34)}$$

Seja

$$w_1(t) = \int_o^t \rho_{t1}(x,t)\,dx$$

$$w_2(t) = \int_o^t \rho_{t2}(x,t)\,dx \qquad \text{(IV.35)}$$

$$u(t) = tc(t)$$

Com estas novas variáveis e a eq.(IV.3) a condição(IV.34) pode ser escrita na forma

$$w_1 + w_2 = 1 - tc = 1 - u, \qquad \text{(IV.36)}$$

e a eq. (IV.33) fica

$$\dot{u} + u\left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}\right) - k_1 w_1 - k_2 w_2 = 0 \qquad \text{(IV.37)}$$

As eq.(IV.32) têm soluções análogas à eq.(IV.6) para ρ_{t1} e ρ_{t2}. Então

$$w_1 = \int_o^t \rho_{t1}\,dx = \frac{e^{-k_1 t}}{\tau_1} \int_o^t dx \int_x^t e^{k_1 t'}\, c(t')\,dt' =$$

$$= \frac{e^{-k_1 t}}{\tau_1} \int_o^t dt' \int_o^{t'} c(t')\,e^{k_1 t'}\,dx = \frac{e^{-k_1 t}}{\tau_1} \int_o^t t' e^{k_1 t'} c(t')\,dt'$$

e, analogamente,

$$w_2 = \frac{e^{-k_2 t}}{\tau_2} \int_o^t t' e^{k_2 t'} c(t')\,dt'$$

Portanto

$$\dot{w}_1 = - k_1 w_1 + \frac{u}{\tau_1}$$

$$\dot{w}_2 = - k_2 w_2 + \frac{u}{\tau_2} \qquad \text{(IV.38)}$$

Derivando a eq.(IV.37) com relação ao tempo e usando (IV.38), (IV.36) e a própria eq.(IV.37), resulta

$$\ddot{u} + (k_1 + k_2 + \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2})\dot{u} + (\frac{k_1}{\tau_2} + \frac{k_2}{\tau_1} + k_1 k_2) u = k_1 k_2$$

Das eq.(IV.35), (IV.14) e (IV.37), obtém-se as condições iniciais

$$u(0) = 1$$

$$\dot{u}(0) = - (\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2})$$

A equação acima é facilmente resolvida e, com a eq.(IV.35), resulta

$$c(t) = \frac{1}{t} \{\frac{1/\tau + \lambda_2(1-A)}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{\lambda_1 t} - \frac{1/\tau + \lambda_1(1-A)}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{\lambda_2 t} + A\} \qquad \text{(IV.39)}$$

onde

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}$$

$$A = \left(\frac{1}{k_1 \tau_1} + \frac{1}{k_2 \tau_2} + 1\right)^{-1}$$

$$\lambda_{1,2} = - \frac{(k_1 + k_2 + 1/\tau) \pm \left[(k_1 - k_2)^2 + 1/\tau^2 + 2(k_1 - k_2)(1/\tau_1 - 1/\tau_2)\right]^{1/2}}{2}$$

A voltagem é obtida a partir da eq.(IV.11), obtendo-se

$$V(t)=\frac{ct^2}{2} - ct + 1 - \frac{e^{-k_1 t}}{2\tau_1}\int_0^t t'^2\, e^{k_1 t'}\, c(t')dt' -$$

$$- \frac{e^{-k_2 t}}{2\tau_2}\int_0^t t'^2 e^{k_2 t'} c(t')dt' \qquad , \qquad t \leqslant 1$$

sendo

$$\int_0^t t'^2 e^{k_{1,2} t'} c(t')dt' = \frac{\alpha_1}{k_{1,2}+\lambda_1}\{(t - \frac{1}{k_{1,2}+\lambda_1})e^{(k_{1,2}+\lambda_1)t}$$

$$+ \frac{1}{k_{1,2}+\lambda_1}\} + \frac{\alpha_2}{k_{1,2}+\lambda_2}\{(t - \frac{1}{k_{1,2}+\lambda_2})e^{(k_{1,2}+\lambda_2)t} +$$

$$+ \frac{1}{k_{1,2}+\lambda_2}\} + \frac{A}{k_{1,2}}\{(t - \frac{1}{k_{1,2}})e^{k_{1,2}t} + \frac{1}{k_{1,2}}\}$$

onde

$$\alpha_1 = \frac{1/\tau + \lambda_2(1-A)}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

$$\alpha_2 = - \{\frac{1/\tau + \lambda_1(1-A)}{\lambda_2 - \lambda_1}\}$$

Se se considera, como na seção 4.3, que c(t) é dado por essa expressão, mesmo para t>1, a eq.(IV.23) dá a voltagem para t > 1:

$$V(t) = V(1)t^{-A}\exp\{\alpha_1\left[E_1(-\lambda_1 t)-E_1(-\lambda_1)\right]+\alpha_2\left[E_1(-\lambda_2 t)-E_1(-\lambda_2)\right]\}$$

$$t > 1$$

4.4.2- Resultados

De modo análogo ao que foi feito na seção 4.3.2 é possí-

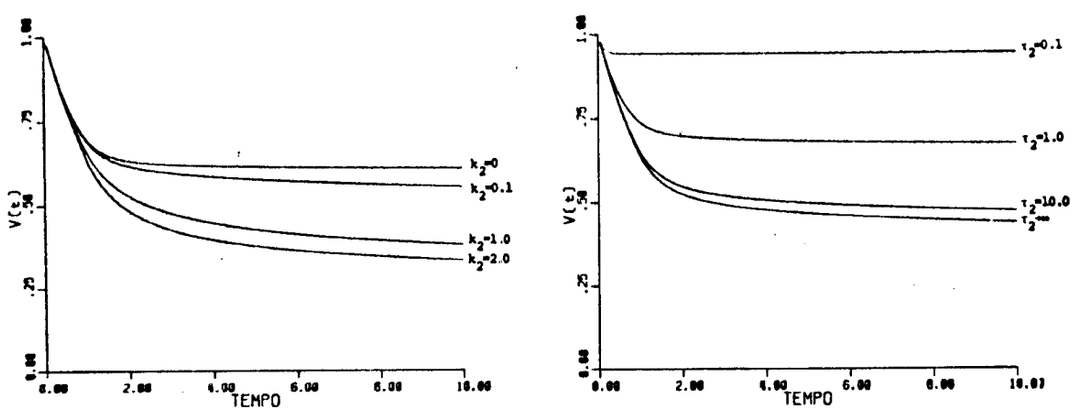
vel mostrar, a partir desta equação para o potencial para $t > 1$ que, se $k_1 \neq 0$ e $k_2 \neq 0$, o potencial $\to 0$ quando $t \to \infty$, como

$$V(t) \overset{t\to\infty}{\simeq} V(1)\exp\{-CE_1(-\lambda_1)-DE_1(-\lambda_2)\}\ t^{-A}$$

Se um dos traps for profundo, ou, seja, se $k_1 = 0$ ou $k_2 = 0$, ou ambos, $A = 0$ e aparece um potencial residual

$$V_R = V(1)\exp\{-CE_1(-\lambda_1) - DE_1(-\lambda_2)\}$$

Apenas a título de ilustração, já que são muitos os parâmetros a serem variados, apresenta-se, nas fig.(7.a) e (7.b), algumas curvas de decaimento do potencial de superfície para amostra com dois níveis de traps.



a b

FIG.7. Decaimento do potencial de superfície de amostra com dois níveis de traps.

(a) $k_1 = 0.1$, $\tau_1 = 2.0$, $\tau_2 = 1.0$

(b) $k_1 = 0.1$, $k_2 = 0.0$, $\tau_1 = 1.0$

CAPÍTULO V

POTENCIAL DE SUPERFÍCIE DE UMA AMOSTRA COM DENSIDADE INICIAL DE CARGAS CONHECIDA

5.1- Introdução

Neste capítulo também se calcula o decaimento do potencial de superfície de uma amostra de isolante com apenas um nível de traps, com as mesmas equações básicas que no capítulo anterior e com a condição de contorno de circuito aberto. A diferença entre os dois problemas está na condição inicial: lá a carga se concentrava em x=0 no instante inicial, enquanto aqui está distribuída por toda a amostra, sendo conhecida a densidade inicial de cargas livres e presas. Supõe-se que o plano de campo nulo está em x=0.

Usando as equações de Poisson, balanço entre a banda de condução e os traps e a definição da densidade de corrente de condução, eq.(III.2), (III.4) e (III.1), respectivamente, a equação da continuidade, eq.(III.3), se escreve

$$E\frac{\partial\rho}{\partial x} + \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho^2 + \frac{\rho}{\tau} + (\rho-k)\rho_t = 0 \qquad \text{(V.1)}$$

Como E e ρ_t são funções de ρ determinadas a partir, das equações de Poisson e de balanço entre a banda de condução e os traps, a equação acima é uma equação íntegro diferencial, não linear nem ordinária, para a carga livre ρ. Uma solução aproximada para esta equação com as condições iniciais

$$\rho(x,0) = \rho_o(x)$$
$$\rho_t(x,0) = \rho_{to}(x) \qquad \text{(V.2)}$$

será obtida aqui usando o método de Galerkin - redução a equa - ções diferenciais ordinárias, apresentado na seção 2.2.

Considerando dois termos, N=2, na série (II.4) com

$$\Psi_1(x) = 1$$
$$\Psi_2(x) = x \qquad (V.3)$$

a densidade de cargas livres se escreve

$$\bar{\rho}(x,t) = c_1(t) + c_2(t)x \qquad (V.4)$$

e as condições correspondentes à eq.(II.5) dão

$$\int_0^1 \left[E\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho}^2 + \frac{\bar{\rho}}{\tau} + (\bar{\rho} - k)\rho_t\right]dx = 0$$
$$\int_0^1 \left[E\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho}^2 + \frac{\bar{\rho}}{\tau} + (\bar{\rho} - k)\rho_t\right]x\,dx = 0 \qquad (V.5)$$

Com $\bar{\rho}(x,t)$ dado por (V.4) e a condição inicial, eq.(V.2), a eq.(III.4) dá

$$\rho_t(x,t) = e^{-kt}\{\rho_{t_o}(x) + \frac{1}{\tau}\int_0^t e^{kt'}c_1(t')dt' + \frac{x}{\tau}\int_0^t e^{kt'}c_2(t')dt'\} \qquad (V.6)$$

Tendo ρ e ρ_t, a equação de Poisson pode ser integrada para dar o campo elétrico como função dos coeficientes c_1 e c_2. Com a condição de contorno E(0,t)=0, obtém-se

$$E(x,t) = c_1 x + c_2 \frac{x^2}{2} + e^{-kt}\{\int_0^x \rho_{t_0}(x')dx' + \frac{x}{\tau}\int_0^t e^{kt'} c_1(t')dt' +$$

$$+ \frac{x^2}{2\tau}\int_0^t e^{kt'} c_2(t')dt'\} \qquad (V.7)$$

Seja Q_{to}, M_{t1} e M_{t2} a carga total nos traps no instante inicial e seu primeiro e segundo momentos, respectivamente, isto é,

$$Q_{to} = \int_0^1 \rho_{t_0}(x)\,dx$$

$$M_{t1} = \int_0^1 x\rho_{to}(x)\,dx \qquad (V.8)$$

$$M_{t2} = \int_0^1 x^2\rho_{to}(x)\,dx$$

Seja ainda

$$P = e^{-kt}\int_0^t e^{kt'} c_1(t')dt'$$

$$H = e^{-kt}\int_0^t e^{kt'} c_2(t')dt' \qquad (V.9)$$

$$S = \dot{P}$$

$$L = \dot{H}$$

de forma que

$$c_1 = S + kP$$

$$(V.10)$$

$$c_2 = L + kH$$

Usando as eq.(V.6), (V.7), (V.8), (V.9) e (V.10) e traba

lhando as eq.(V.5) obtém-se

$$\dot{P} = S$$

$$\dot{H} = L$$

$$\dot{S} = (L+kH)\{\frac{(L+kH)}{4}+(3M_{t2}- Q_{to})e^{-kt}+ \frac{H}{4\tau}\} -kS +$$

$$+(S+kP-k)\{(6M_{t1}-4Q_{to})e^{-kt}- \frac{P}{\tau}\}- (S + kP)(S+kP+ \frac{1}{\tau})$$

(V.11)

$$\dot{L} = - (L+kH)\{3(S+kP)+ \frac{3}{2}(L+kH)+6M_{t2}e^{-kt}+\frac{2P}{\tau} + \frac{3H}{2\tau} + \frac{1}{\tau}\} -$$

$$- kL - (S+kP - k)\{\frac{H}{\tau} + (12M_{t1} - 6Q_{to})e^{-kt}\}$$

Dadas as condições iniciais o sistema de equações acima pode ser integrado numericamente e $c_1(t)$ e $c_2(t)$ obtidos a par - tir da eq.(V.10).

O potencial de superfície é

$$V(t) = \int_0^1 E(x,t)\,dx \qquad \text{(III.6)}$$

Usando a eq.(V.7), obtém-se

$$V(t) = \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{6} + e^{-kt}\left[(Q_{to}-M_{t1}) + \frac{P}{2\tau} + \frac{H}{6\tau}\right] \qquad \text{(V.12)}$$

Note-se que, neste caso, não está fixada a inclinação i- nicial das curvas de decaimento do potencial de superfície, como no capítulo anterior. Esta inclinação dependerá das condições iniciais, e pode ser tirada da eq. (V.12) obtendo-se

$$\left.\frac{dV}{dt}\right|_{t=0} = -\frac{L(0)}{2}\left(\frac{L(0)}{4} + Q_{to} - M_{t_2}\right) -$$

$$- S(0)\left(\frac{S(0)}{2} + Q_{t_o} - M_{t_1}\right) - \frac{L(0)\ S(0)}{2} \qquad (V.13)$$

Nas seções que se seguem, são apresentados os resultados obtidos para duas diferentes condições iniciais.

5.2- $\rho_o = 0$ e $\rho_{t_o} = 1 + 0.5\ x$

Estas condições iniciais foram escolhidas a fim de tes - tar o método; são as mesmas usadas na ref(3) onde se considera que não há retrapping, ou seja, $\tau \to \infty$. Com elas e usando (V.8) obtém-se

$$Q_{t_o} = 5/4$$

$$M_{t_1} = 2/3$$

$$M_{t_2} = 11/24$$

Como estamos considerando $\rho = c_1 + c_2 x$, $\rho_o = 0$ implica em

$$c_1(0) = 0$$

$$c_2(0) = 0$$

e as eq.(V.9) e (V.10) dão

$$P(0) = H(0) = S(0) = L(0) = 0$$

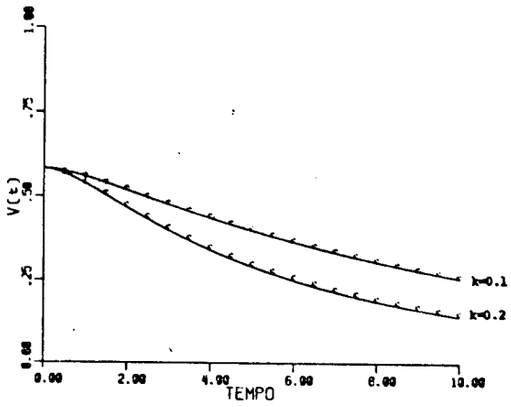
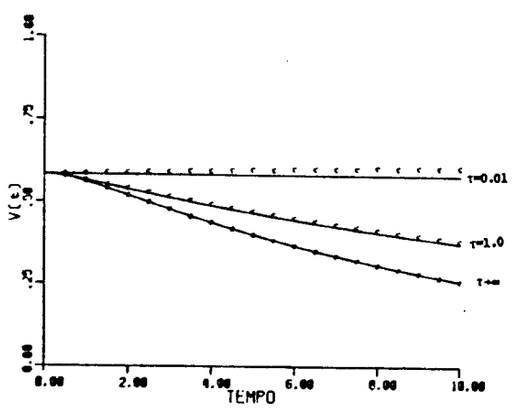
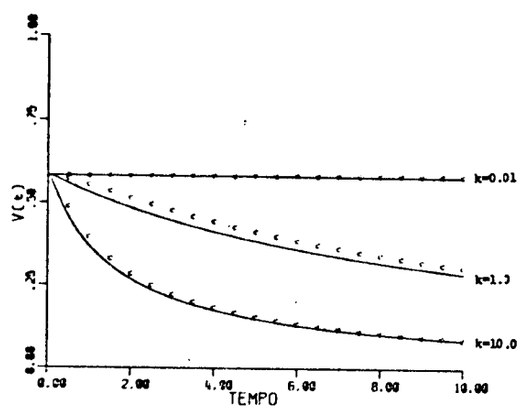


FIG.8. Comparação dos resultados obtidos nesta seção com aqueles quase-exatos da ref.(3) . $\rho_o = 0, \rho_{t_o} = 1+0,5x$. $\tau \to \infty$.

A Figura (8) mostra o potencial calculado a partir das equações aqui apresentadas juntamente com aqueles quase-exatos da ref.(3).



a



b

FIG.9. Decaimento do potencial de superfície de uma amostra com a seguinte distribuição inicial de cargas: $\rho_o=0$, $\rho_{to}=1+0,5x$
Linhas: $\rho(x,t)$ aproximado para $c_1(t) + c_2(t)x$
Pontos: $\rho(x,t)$ aproximado para $c(t)$
(a) $k = 0.1$, (b) $\tau = 0.1$

As Figuras (9.a) e (9.b) apresentam o potencial de superfície quando se leva em conta o retrapping. Aí está, também, o potencial calculado quando se considera $\bar{\rho} = c(t)$, ou seja, apenas um termo na série do $\bar{\rho}$ (cujos cálculos estão feitos no apêndice A), mostrando que o potencial de superfície é pouco sensível à distribuição exata de cargas na amostra.

A inclinação inicial destas curvas de decaimento do potencial de superfície é nula, já que no instante inicial toda a carga está nos traps (eq.V.13).

5.3- $\rho_o = C\, x^{-1/2}$ e $\rho_{to} = C_t\, x^{-1/2}$

Um isolante ideal, sem traps, sujeito à aplicação de uma voltagem constante através de contacto ôhmico tem, no estado estacionário e considerando $E(0,t) = 0$, a densidade de cargas (nas unidades reduzidas, escolhendo V_o como esta voltagem aplicada) dada por $3/4\ x^{-1/2}$(22). No caso do isolante ideal com traps a densidade de carga total deve ser a mesma, ou seja

$$\rho_o + \rho_{to} = \frac{3}{4}\ x^{-1/2} \qquad \text{(V.14)}$$

Como, no regime estacionário, $\partial\rho_t/\partial t = 0$ obtém-se da eq. (III.4)

$$\frac{\rho_o}{\tau} - k\rho_{to} = 0 \qquad \text{(V.15)}$$

A combinação destas duas equações dá

$$\rho_o = \frac{3}{4}\ \frac{k\tau}{1+k\tau}\ x^{-1/2} \qquad \text{(V.16)}$$

$$\rho_{t_o} = \frac{3}{4}\,\frac{1}{1+k\tau}\,x^{-1/2}$$

Estas condições iniciais foram escolhidas para simular a situação experimental de uma amostra provida de um contato injetante em x=0, carregada pela aplicação de uma voltagem constante durante um tempo suficiente para ser atingido o estado estacionário. Abre-se, então, o circuito e mede-se o potencial. Esta distribuição inicial de cargas é mais interessante, na prática, do que aquela considerada na seção anterior.

As condições iniciais $c_i(0)$, $i=1,\ldots,N$, são obtidas a partir da eq.(II.6) com $\rho(x,0) = \rho_o(x)$ dado pela eq.(V.16). Isto corresponde a impor que, inicialmente, a carga livre e seu primeiro momento têm o valor correto, o que garante que o potencial inicial tenha o valor correto, já que ele só depende da carga total e do primeiro momento destas. Obtém-se

$$c_1(0) = 3\,\frac{k\tau}{1+k\tau}$$

$$c_2(0) = -\,3\,\frac{k\tau}{1+k\tau} \qquad \text{(V.17)}$$

Então

$$\bar{\rho}(x,0) = c_1(0) + c_2(0)\,x = \frac{3}{1+1/k\tau}(1-x)\,.$$

A Fig. (10) mostra, apenas a título de ilustração, os perfis $\rho(x,0) = \rho_o(x)$ e $\bar{\rho}(x,0)$ para o produto $k\tau = 1$.

As eq.(V.9) e (V.10) dão

$$P(0) = 0$$

$$H(0) = 0$$

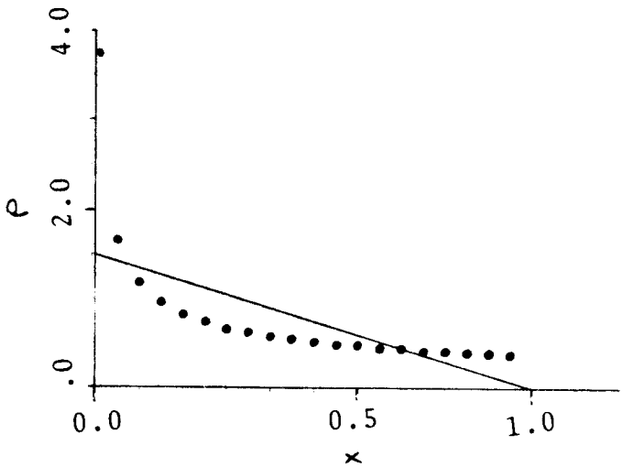


FIG.10. Perfil da densidade inicial de cargas livres

Pontos: $(3/4)(1+1/k\tau)x^{-1/2}$

Linha: aproximação para o Método de Galerkin:

$3(1-x)/(1+1/k\tau)$.

$k\tau = 1.0$

$$S(0) = c_1(0)$$

$$L(0) = c_2(0).$$

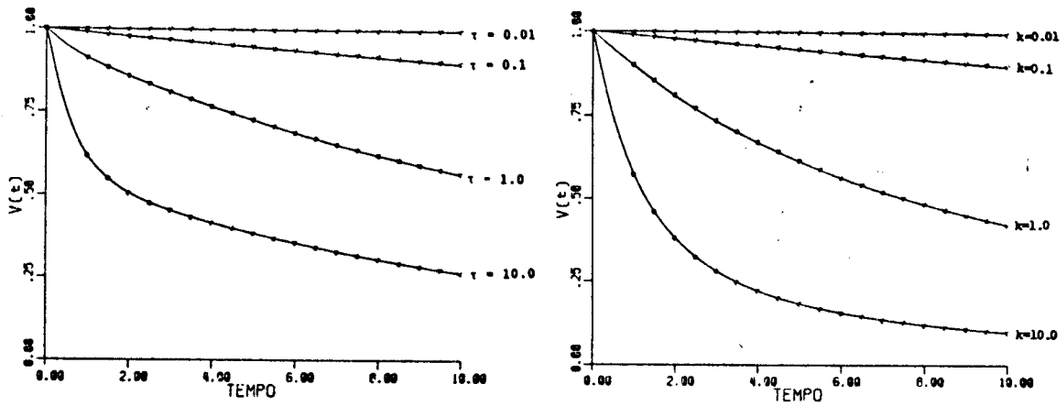
Q_{to}, M_{t1} e M_{t2} são determinados pelas eq.(V.8) com ρ_{to} dado por(V.16), obtendo-se

$$Q_{t_o} = \frac{3/2}{1+k\tau}$$

$$M_{t1} = \frac{1/2}{1+k\tau}$$

$$M_{t2} = \frac{3/10}{1+k\tau}$$

As Figuras (11.a) e (11.b) mostram o resultado deste cálculo para diferentes valores do tempo de trapping e detrapping. A inclinação inicial da curva de decaimento do potencial de superfície depende agora de k e τ já que a distribuição inicial de cargas livre depende destes parâmetros e pode ser obtida da eq. (V.13)



a b

FIG.11. Decaimento do potencial de superfície para uma amostra com a seguinte distribuição inicial de cargas:

$\rho_o = (3/4)k\tau/(1 + 1/k\tau)x^{-1/2}$, $\rho_{to} = (3/4)/(1+k\tau)x^{-1/2}$

Linhas: ρ_{to} correto

Pontos: ρ_{to} aproximado para $3(1-x)/(1+k\tau)$

(a) $k = 0.1$ (b) $\tau = 0.1$

$$\left.\frac{dV}{dt}\right|_{t=0} = -\frac{3}{2}\frac{k\tau}{(1+k\tau)^2}\{\frac{3}{4}k\tau + \frac{4}{5}\}$$

Estas mesmas Figuras mostram uma comparação entre o potencial calculado considerando $\rho_{to} = \frac{3/4}{1+k\tau}x^{-1/2}$ e $\rho_{to} = c_{1t}+c_{2t}x$, onde c_{1t} e c_{2t} são calculados de maneira análoga àquela usada para a determinação de $c_1(0)$ e $c_2(0)$, ou seja, usando a eq.(II.6) , com ρ_{to} dado pela eq.(V.16). Novamente, esta condição implica que a carga total inicialmente nos traps e seu primeiro momento são preservados, e,portanto,que o potencial inicial é o mesmo. Obtém-se

$$c_{1t} = \frac{3}{1+k\tau}$$

$$c_{2t} = \frac{-3}{1+k\tau}$$

Observa-se que o potencial calculado com esta distribuição inicial da carga presa nos traps $\rho_{to} = c_{1t} + c_{2t}x$ praticamente coincide com aquele em que $\rho_{to} = \frac{3/4}{1+k\tau} \; x^{-1/2}$. Este fato mostra, mais uma vez, que o potencial de superfície não é sensível à forma exata da distribuição de cargas, o que pode justificar a utilização do método de Galerkin na resolução das equações de transporte de cargas em isolantes quando o objetivo é o cálculo do potencial.

CAPÍTULO VI

IDC E TSC EM CURTO CIRCUITO

6.1- Introdução

Nos dois últimos capítulos calculou-se o potencial de superfície com a condição de contorno de circuito aberto, verificando-se que este potencial é pouco sensível à distribuição exata de cargas no interior da amostra.

Neste capítulo será usada a condição de curto-circuito para calcular a corrente através de uma amostra, com uma distribuição inicial de cargas conhecida, à temperatura constante (IDC-Isothermal Decay Current) e à temperatura variável (TSC - Thermally Stimulated Current). A corrente, ao contrário do potencial, é sensível à distribuição de cargas, o que será verificado comparando a corrente IDC calculada usando o método de Galerkin com apenas dois termos na série da densidade de cargas (como foi feito no capítulo anterior), e aquela calculada a partir da integração numérica direta do sistema de equações a derivadas parciais pelo Método das Diferenças Finitas.

Novamente, usa-se as equações de Poisson, balanço entre a banda de condução e os traps e continuidade e aplica-se o Método de Galerkin considerando dois termos na série do ρ, exatamente como foi feito no capítulo anterior até a obtenção das eq.(V.5). Não será repetido este procedimento aqui, fazendo, quando necessário, referência às equações (V.1), (V.2), (V.3), (V.4) e (V.5). A condição de contorno de curto circuito se escreve

$$\int_0^1 E(x,t)\,dx = 0 \qquad \text{(VI.1)}$$

Definindo

$$Y_1(t) = \int_0^1 \rho_t(x,t)\,dx$$

$$Y_2(t) = \int_0^1 x\rho_t(x,t)\,dx \qquad \text{(VI.2)}$$

$$Y_3(t) = \int_0^1 x^2\rho_t(x,t)\,dx$$

a carga total nos traps e seu primeiro e segundo momentos, respectivamente, usando as equações citadas acima, (V.1), (V.2), (V.3), (V.4) e (V.5), e a condição de contorno, eq.(VI.1), obtém-se o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\frac{dY_1}{dt} = \frac{c_1}{\tau} + \frac{c_2}{2\tau} - kY_1$$

$$\frac{dY_2}{dt} = \frac{c_1}{2\tau} + \frac{c_2}{3\tau} - kY_2$$

$$\frac{dY_3}{dt} = \frac{c_1}{3\tau} + \frac{c_2}{4\tau} - kY_3 \qquad \text{(VI.3)}$$

$$\frac{dc_1}{dt} = c_2\left(\frac{c_1}{2} + \frac{5}{12}c_2 - Y_2 + 3Y_3\right) - c_1\left(c_1 + \frac{1}{\tau}\right) + (c_1 - k)(6Y_2 - 4Y_1)$$

$$\frac{dc_2}{dt} = -c_2\left(3c_1 + \frac{3}{2}c_2 + 6Y_3 + \frac{1}{\tau}\right) + (c_1 - k)(6Y_1 - 12Y_2)$$

sendo, como no capítulo anterior, c_1 e c_2 tais que

$$\bar{\rho}(x,t) = c_1(t) + c_2(t)x \qquad \text{(VI.4)}$$

No caso de TSC será considerado que a temperatura aumenta a uma razão constante

$$T = T_o + \beta t \quad , \qquad \text{(VI.4)}$$

sendo β a razão de aquecimento, e que a probabilidade de que um portador escape de um trap é dada pela lei de Arrhenius

$$k = \nu \, e^{-\phi/k_B T}$$

onde ν é a frequência de escape, ϕ a energia de ativação, ou profundidade em energia, dos traps e k_B a constante de Boltzmann.

No caso de temperatura constante, basta considerar k constante, ou $\beta=0$; neste caso, um sistema de quatro equações diferenciais pode ser obtido em lugar deste de cinco, definindo P,H,S e L como no capítulo anterior.Optamos,no entanto,por este sistema de cinco equações,que pode ser usado tanto para IDC como para TSC, a fim de diminuir a quantidade de cálculos presentes neste trabalho.

A densidade de corrente de curto circuito pode ser obtida da eq.(III.5) e (III.1)

$$j(t) = \rho E + \frac{\partial E}{\partial t}$$

Integrando esta equação sobre toda a amostra

$$\int_o^1 j(t)\,dx = \int_o^1 \rho E dx + \frac{\partial}{\partial t} \int_o^1 E \, dx$$

e usando a condição de contorno de curto circuito, eq.(IV.1),obtém-se

$$j(t) = \int_o^1 \rho(x,t) E(x,t)\,dx \qquad \text{(IV.7)}$$

ou, em termos das funções usadas aqui,

$$j(t) = c_2\left(\frac{c_1}{12} + \frac{c_2}{24} + \frac{Y_2-Y_3}{2}\right) \qquad \text{(IV.8)}$$

Nas seções que se seguem, serão apresentados os resultados obtidos para determinadas condições iniciais, todas assimétricas (caso contrário nenhuma corrente seria observada nesta situação de curto-circuito) em que as cargas podem se mover para a esquerda ou direita, dependendo da posição com relação ao plano de campo nulo.

6.2- IDC em curto circuito

As equações acima dão a corrente de curto-circuito à temperatura constante ou variável e foram obtidas com o Método de Galerkin, considerando que, em cada instante, a distribuição de cargas livres é linear. Para o caso do decaimento à temperatura constante (IDC) a integração destas equações foi feita para três diferentes condições iniciais:

(1) $\rho(x,0) = 0$

$\rho_t(x,0) = 1 + 0{,}5\ x$

(2) $\rho(x,0) = 0$

$\rho_t(x,0) = \frac{3}{4}(x+a)^{-1/2}$

(3) $\rho(x,0) = \frac{3}{4}\ \frac{k\tau}{1+k\tau}\ x^{-1/2}$

$\rho_t(x,0) = \frac{3}{4}\ \frac{1}{1+k\tau}\ x^{-1/2}$

e a corrente, calculada por este Método de Galerkin, foi compara-

da com aquela obtida da integração numérica do sistema de equações a derivadas parciais, eq.(III.1) a (III.5), aproximando os diferenciais por diferenças finitas (forma explícita) (8,9). No caso das condições iniciais (2) e (3) os gráficos mostram o módulo da corrente, já que, nestes casos, ela é negativa.

6.2.1- Condições iniciais (1)

Para estas condições iniciais

$$\rho(x,0) = 0$$
$$\rho_t(x,0) = 1 + 0,5\ x \qquad \text{(VI.9)}$$

obtém-se

$$c_1(0) = 0$$

$$c_2(0) = 0$$

$$Y_1(0) = 5/4$$

$$Y_2(0) = 2/3$$

$$Y_3(0) = 11/24$$

A Fig(12) mostra a corrente de curto circuito em função do tempo, para estas condições iniciais, calculada pelo Método de Galerkin (pontos) e pelo Método de Diferenças Finitas (linhas). Vê-se que, para este caso, a corrente calculada pelos dois métodos é a mesma, o que decorre do fato de ser muito boa a aproximação da

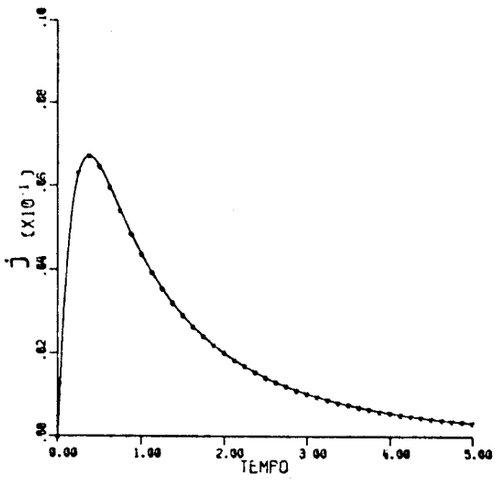


FIG.12. Comparação entre a corrente de curto circuito calculada com o Método de Galerkin (pontos) e com o Método de Diferenças Finitas (linhas) para as condições iniciais.

$\rho_o=0, \rho_{to}=1+0.5x. k=1, \tau=1.$

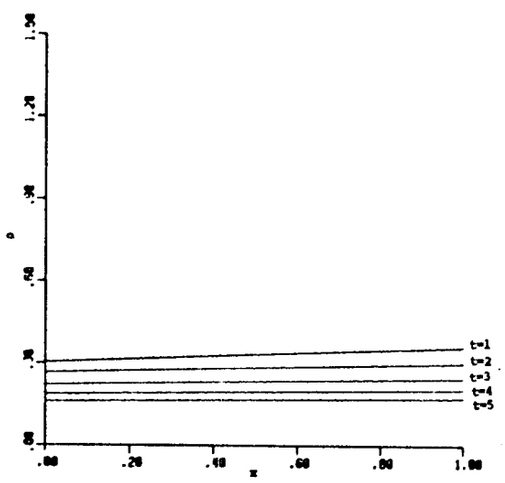


FIG.13. Distribuição de cargas livres para as condições iniciais $\rho_o=0$, $\rho_{to}= 1+0,5x$, calculada com o Método de Diferenças Finitas. $k=1, \tau=1$.

densidade de cargas livres por uma função linear. Isto pode ser verificado na Fig.(13), que mostra a distribuição de cargas livres no interior do dielétrico para vários tempos, calculada com este Método de Diferenças Finitas, mostrando que uma reta pode aproximar muito bem estas curvas.

6.2.2- Condições iniciais (2)

Com as condições iniciais

$$\rho(x,0) = 0$$

$$\rho_t(x,0) = \frac{3}{4}(x + a)^{-1/2} \qquad \text{(VI.10)}$$

obtém-se

$$c_1(0) = 0$$

$$c_2(0) = 0$$

$$Y_1(0) = \frac{3}{2}(\sqrt{1+a} - \sqrt{a})$$

$$Y_2(0) = \frac{(1+a)^{3/2}}{2} + a^{3/2} - \frac{3}{2}\, a\sqrt{1+a}$$

$$Y_3(0) = \frac{3}{10}\,(1+a)^{5/2} - \frac{12}{15}\, a^{5/2} + \frac{3}{2}\, a^2\sqrt{1+a} - a\,(1+a)^{3/2}$$

As Fig.(14) e (16) mostram a corrente calculada com estas condições iniciais para a = 1.0 e a = 0.1, respectivamente e as Fig. (15) e (17) as distribuições de cargas livres correspondentes. No primeiro caso, a = 1, a aproximação de distribuição linear de cargas livres é bastante boa (Fig.15); consequentemente a

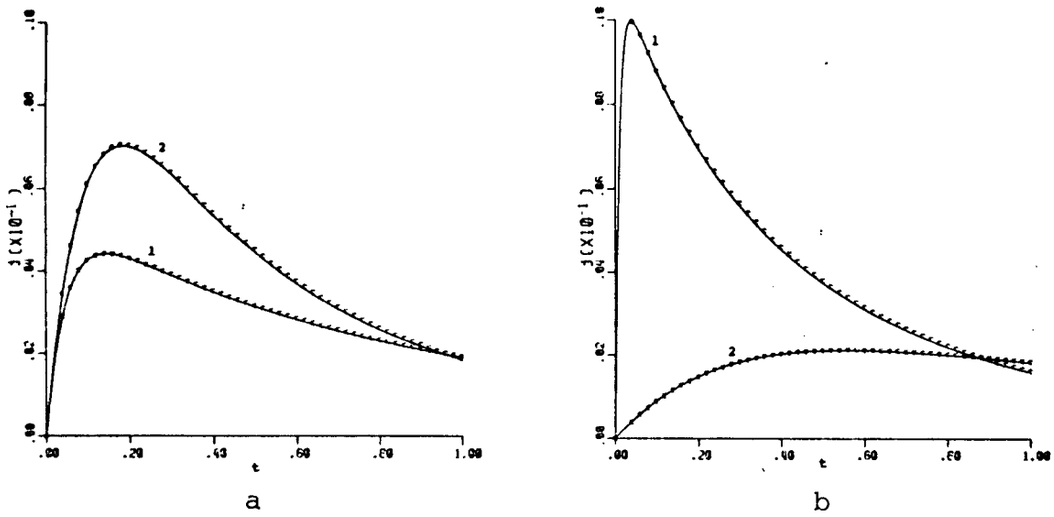


FIG.14. Corrente de curto-circuito calculada com o Método de Galerkin (pontos) e Diferenças Finitas (linhas) para as condições iniciais

$\rho_o = 0$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}(x + a)^{-1/2}$ com a = 1.0.

(a) k = 10:(1)τ=0.1 , (2)τ = 1000

(b) τ = 1 : (1) k = 100 , (2) k = 1.0

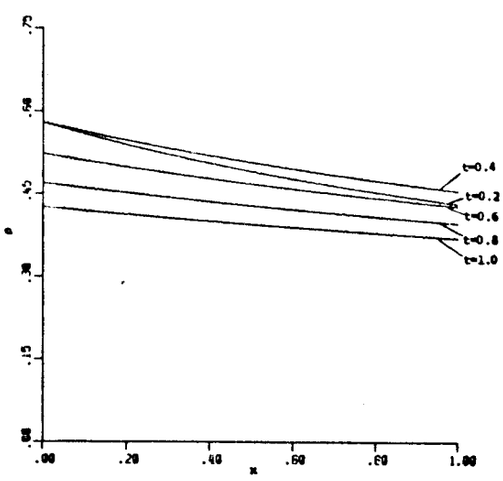


FIG.15. Distribuição de cargas livres para as condições iniciais ρ_o=0 , $\rho_{to}=\frac{3}{4}(x+a)^{-1/2}$, a=1.0. k=10 , τ=1000.

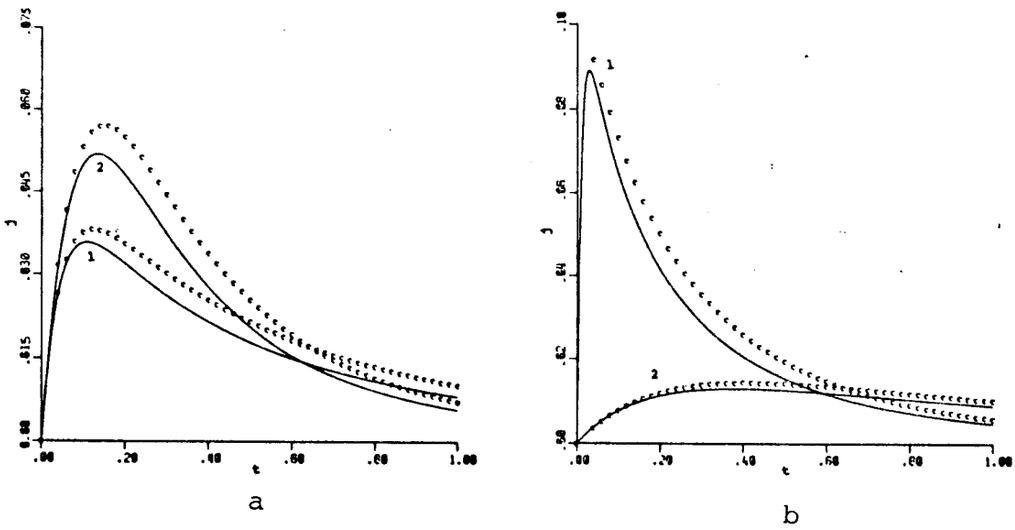


FIG.16. Corrente de curto-circuito calculada pelo Método de Galerkin (pontos) e Diferenças Finitas (linhas), para as condições iniciais $\rho_o=0$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}(x+a)^{-1/2}$, a = 0.1

(a) k = 10 : (1) τ = 0.1 , (2) τ = 1000

(b) τ = 1 : (1) k = 100 , (2) k = 1.0

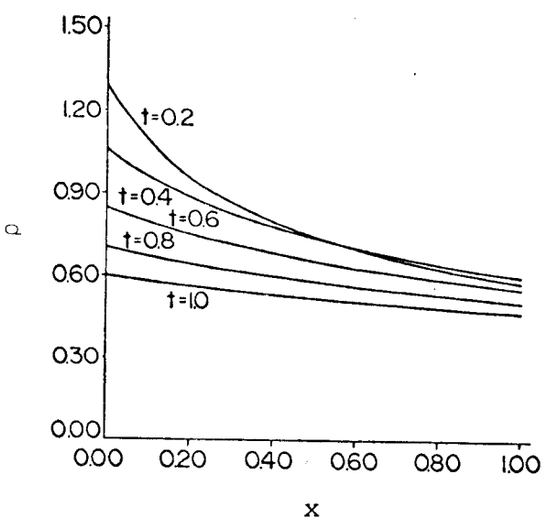


FIG.17. Distribuição de cargas livres para as condições iniciais $\rho_o=0$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}(x+a)^{-1/2}$, a=0.1 k=10, τ=1000

corrente calculada com esta aproximação resulta praticamente igual à exata Fig.(14). Já no caso de a = 0.1, a reta não aproxima muito bem a distribuição de cargas livres, como se pode ver na Fig.(17); assim a corrente aproximada se afasta daquela exata Fig.(16). Note-se, porém, que as características da corrente não são muito diferentes: o máximo ocorre num tempo próximo daquele dado pelo Método de Diferenças Finitas e as curvas, depois deste máximo, seguem praticamente paralelas.

6.2.3- Condições iniciais (3)

Com as condições iniciais

$$\rho(x,0) = \frac{3}{4}\,\frac{k\tau}{1+k\tau}\,x^{-1/2}$$

$$\rho_t(x,0) = \frac{3}{4}\,\frac{1}{1+k\tau}\,x^{-1/2} \qquad \text{(VI.11)}$$

obtém-se

$$c_1(0) = \frac{3k\tau}{1+k\tau}$$

$$c_2(0) = \frac{-3k\tau}{1+k\tau}$$

$$Y_1(0) = \frac{1.5}{1+k\tau}$$

$$Y_2(0) = \frac{0.5}{1+k\tau}$$

$$Y_3(0) = \frac{0.3}{1+k\tau}$$

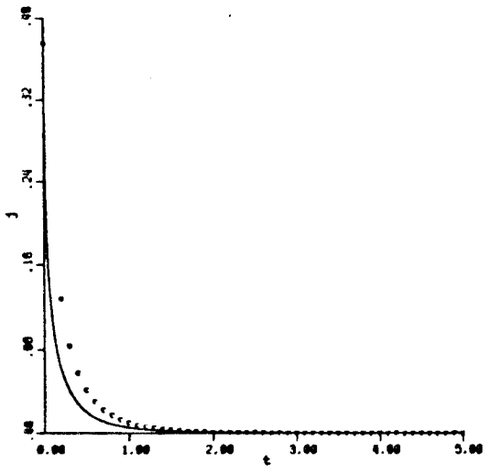


FIG.18. Corrente de curto-circuito calculada pelo Método de Galerkin (pontos) e Diferenças Finitas (linhas) para as condições iniciais $\rho_o = \frac{3}{4}\frac{k\tau}{1+k\tau}x^{-1/2}$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}\frac{1}{1+k\tau}x^{-1/2}$

$k=10$, $\tau=1000$

A aproximação de distribuição linear é ainda mais drástica no caso destas condições iniciais. Consequentemente a diferença entre as correntes calculadas pelos dois métodos, Fig (18), é mais acentuada, principalmente no início do decaimento. Com o passar do tempo, no entanto, a distribuição exata de cargas livres fica mais suave e a aproximação tende a melhorar o que se reflete na aproximação das duas curvas, que seguem praticamente paralelas. Note-se ainda que, embora pareça irreal, para este caso, aproximar a distribuição de cargas livres por uma reta, já no início do decaimento a corrente calculada por este método aproximativo tem sempre a ordem de grandeza correta.

As curvas das Fig(19) mostram a corrente em função do tempo para estas condições iniciais (3) para alguns valores de k e τ. Como a densidade inicial de cargas livres depende destes parâmetros, a corrente inicial também dependerá, sendo tanto maior quanto maior o produto $k\tau$, o que corresponde a uma maior densidade inicial de cargas livres. Vê-se ainda que as curvas se cruzam o que também é fácil de entender: a carga total inicialmente na amostra é a mesma para todas as curvas. Consequentemente, quanto

mais depressa as cargas saem da amostra, ou, quanto maior a corrente inicial, mais depressa a corrente deve ir a zero, ocorrendo, portanto, este cruzamento.

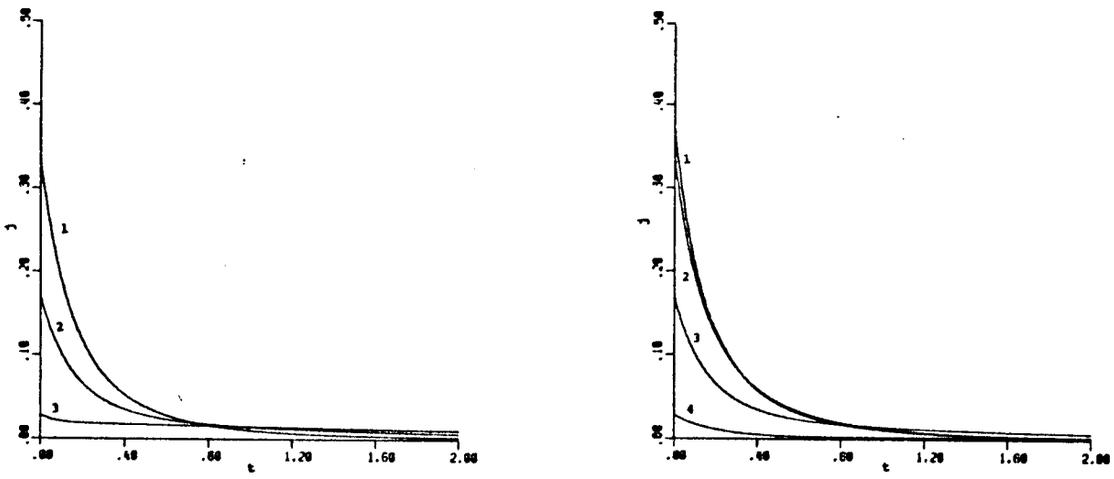


FIG.19. Corrente de curto-circuito calculada pelo Método de Galerkin para as condições iniciais $\rho_o = \frac{3}{4}\frac{k\tau}{1+k\tau}x^{-1/2}$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}\frac{1}{1+k\tau}x^{-1/2}$

(a) k=1.0:(1) τ=10, (2) τ=1.0 , (3) τ=0.1

(b) τ=1.0:(1)k=100, (2) k=10 , (3) k=1.0, (4) k=0.1

De acordo com as equações deduzidas por Simmons & Tam(6) para o caso de densidade uniforme de cargas e campo alto de forma que o retrapping seja desprezível, o produto (corrente.tempo) é proporcional à distribuição dos traps e o log (tempo), à energia de ativação destes. Mais precisamente, segundo estes autores, curvas de j.t vs.log(t) deveriam apresentar um pico num tempo igual ao tempo de detrapping((1/k) aqui). Este resultado também foi usado nas ref.(5) e (23) para o caso de distribuição não uniforme de cargas (as mesmas condições usadas aqui), com voltagem aplicada e em curto circuito. A Fig. (20) contém as curvas deste tipo, para k=1.0 e τ=1000 (praticamente nenhum retrapping),

feitos pelos Métodos de Galerkin e Diferenças Finitas, com estas condições iniciais(3). Vê-se que elas realmente apresentam um pico sendo que as posições dos picos das duas curvas praticamente coincidem. No entanto, não se verifica a relação de Simmons & Tam entre a posição do pico e o tempo de detrapping, nem para a corrente calculada pelo Método de Galerkin, nem para aquela calculada pelo Método de Diferenças Finitas, que deve dar resultados muito próximos dos exatos.

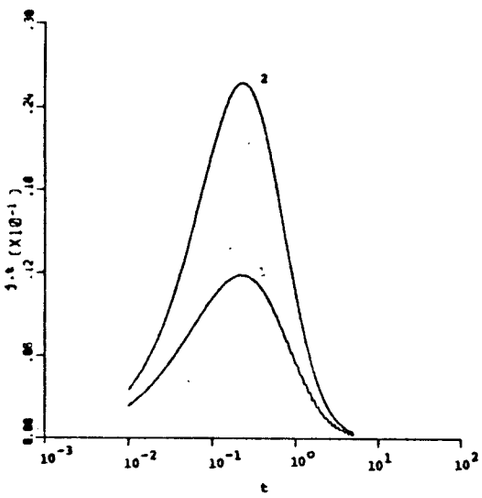


FIG.20. Corrente.tempo versus log(tempo) para as condições iniciais $\rho_o = \frac{3}{4}\frac{k\tau}{1+k\tau}x^{-1/2}$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}\frac{1}{1+k\tau}x^{-1/2}$ $k=1.0$, $\tau=1000$. (1) Método de Galerkin, (2) Diferenças Finitas.

Casos em que k é pequeno e τ grande (por exemplo, $k=0.1$ e $\tau=10$ ou $\tau=5$) apresentaram uma pequena inversão da corrente. Não sabemos, porém, se esta inversão é real ou se é decorrente das aproximações feitas aqui.

6.3- TSC em curto circuito

Nesta seção serão apresentados os resultados para o caso de temperatura variável, ou, a corrente termo estimulada(TSC) em curto circuito, com as condições iniciais

$$\rho_o = \frac{3}{4}\,\frac{k\tau}{1+k\tau}\,x^{-1/2}$$

$$\rho_{t_o} = \frac{3}{4}\,\frac{1}{1+k\tau}\,x^{-1/2}$$

que são as condições iniciais (3) da seção anterior e foram escolhidas aqui porque representam uma distribuição que pode ser obtida na prática (amostra com contacto ôhmico carregada pela aplicação de uma d.d.p. constante).

Este caso de temperatura variável será tratado somente pelo Método de Galerkin, pois, o Método de Diferenças Finitas na sua forma explícita, como foi usado na seção anterior, já apresentava soluções pouco estáveis para o caso com condições iniciais mais delicadas, mesmo à temperatura constante. Pretende-se, futuramente, buscar soluções mais estáveis com este método, mesmo para estes casos de temperatura variável.

Curvas de corrente termo-estimulada apresentam picos, assimétricos, cujas posições e larguras têm sido relacionadas com os parâmetros característicos dos traps e com a razão de aquecimento (veja, por exemplo, a ref.(24) que contém uma síntese dos principais resultados obtidos neste campo até 1964 com as respectivas referências, a ref.(25) ou, ainda, o capítulo 3 da ref.(26), mais atual).

Também aqui será apresentada a dependência da posição e meia largura do pico da corrente termo-estimulada (só um neste caso pois se considera somente um nível de traps) com a razão de aquecimento β, a energia de ativação dos traps ϕ, a frequência de escape ν e o tempo de trapping τ, conforme os cálculos feitos na seção 6.1.

O máximo da corrente ocorre porque, à medida que a temperatura aumenta, cresce a probabilidade de os portadores saírem dos traps ($k=\nu\exp(-\phi/k_BT)$), devendo, por isso, a corrente aumentar ini-

cialmente. Por outro lado, a carga nos traps vai diminuindo até que se atinge um estágio em que, apesar de k ser grande, há pouca carga na amostra, o que se reflete num decréscimo da corrente. Entre estas duas situações ocorre o máximo, cuja posição , portanto , deve ser dominada, principalmente, pelo processo de saída de cargas dos traps, não devendo ser de muita importância a forma exata da distribuição de cargas livres.

As Figuras (21), (22), (23) e (24) mostram esta corrente termo-estimulada em função da temperatura conforme são variados β, ϕ, ν e τ, respectivamente. Se na Fig.(21) fosse usado o tempo no eixo das abcissas, no lugar da temperatura, os picos ocorreriam em tempos tanto menores quanto mais depressa a temperatura aumentasse, isto é, quanto maior fosse β. No entanto o deslocamento do pico se dá na direção contrária para gráficos da corrente em função da temperatura porque, enquanto os portadores saem dos traps, e depois da amostra, a temperatura vai aumentando tanto mais depressa quanto maior for β. Por sua vez, é óbvio o aumento da temperatura do máximo conforme a energia de ativação aumenta ou a frequência de escape diminui. Também é compreensível o comportamento do máximo com o tempo de trapping : quanto menor τ, o que corresponde a um forte retrapping, mais as cargas demoram para deixar a amostra, isto ocorrendo, portanto, a temperaturas maiores. Para $\tau > 1$, praticamente não há mais retrapping dos portadores e a temperatura correspondente ao máximo fica estacionária.

Estas dependências da temperatura do máximo com β, ϕ, ν e τ estão mais claras nas Fig.(25.a), (26.a), (27.a) e (28.a) . Vê-se que a dependência com ϕ é linear, resultado que também foi obtido por Simmons e Taylor (7). Também, seguindo o procedimento adotado por estes autores, foram feitos os gráficos de inverso da temperatura do máximo ($1/T^*$) versus log β e versus log ν.

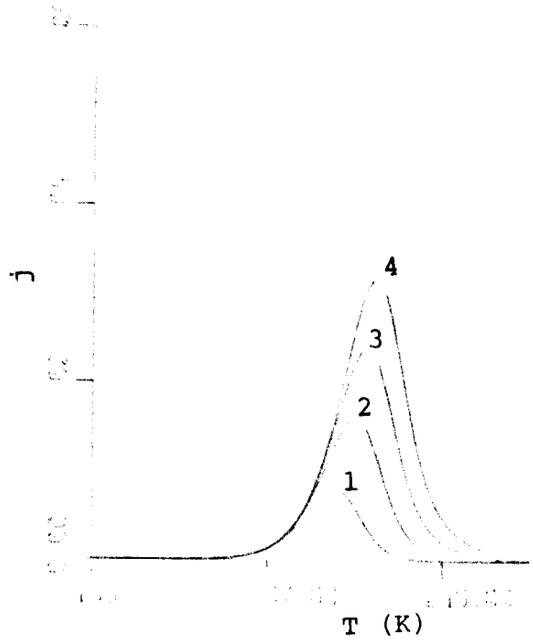


FIG.21. Corrente termo-estimulada em curto -circuito para vários valores da razão de aquecimento β . ϕ=0.65 eV, $\nu=10^{13}\ s^{-1}$, τ=1.0, $\ell^2/\mu V_o$=100 s.
(1) β=0.025 K/s, (2) β=0,05K/s (3) β=0.075K/s, (4) β=0.1K/s. j e τ em unidades adimensionais.

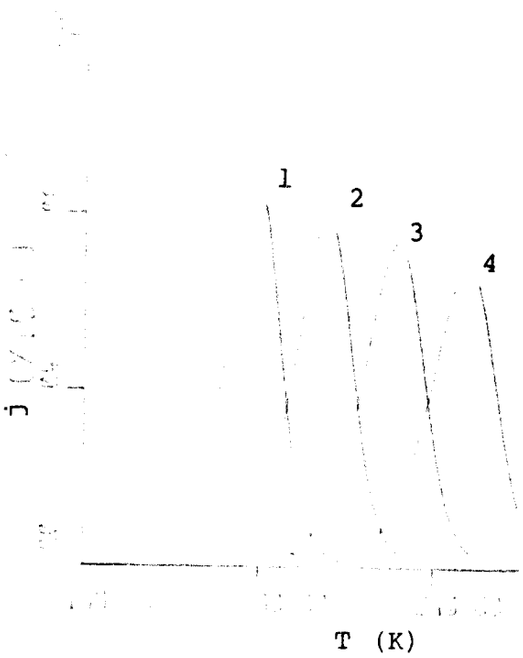


FIG.22. TSC em curto circuito para vários valores da energia de ativação ϕ . β=0.025K/s, $\nu=10^{13}s^{-1}$, τ=1.0, $\ell^2/\mu V_o$=100s. (1) ϕ = 0.60 eV, (2) ϕ = 0,65 eV , (3) ϕ=0.70 eV, (4) ϕ=0.75 eV. j e τ em unidades adimensionais.

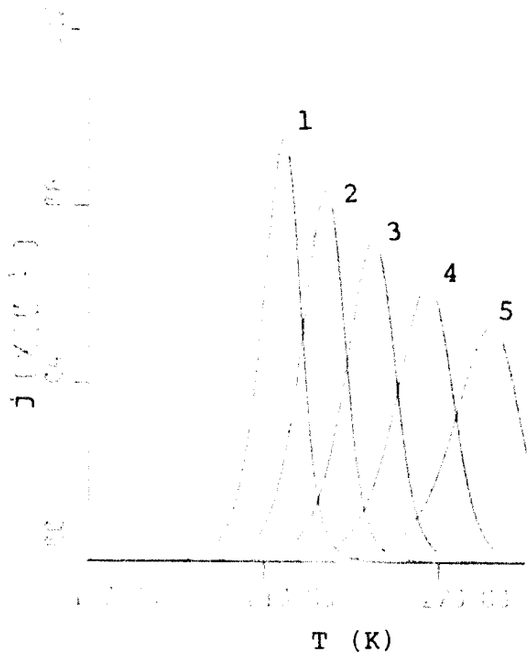


FIG.23. TSC em curto circuito para vários valores da frequência de escape ν. β=0.03K/s, ϕ=0.65 eV, τ=1.0, $\ell^2/\mu V_o$=100s. (1) $\nu=10^{13}s^{-1}$, (2) $\nu=10^{12}s^{-1}$, (3) $\nu=10^{11}s^{-1}$, (4) $\nu=10^{10}s^{-1}$, (5) $\nu=10^{9}s^{-1}$. j e τ em unidades adimensionais.

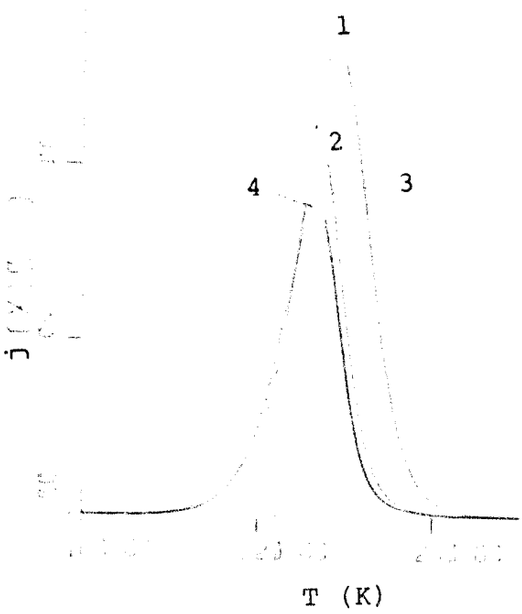


FIG.24. TSC em curto circuito para vários valores do tempo de trapping τ. β=0.03K/s, ϕ=0.70 eV, $\nu=10^{13}s^{-1}$, $\ell^2/\mu V_o$=100s. (1) τ=0.1, (2) τ=1.0, (3) τ=10.0, (4) $\tau\to\infty$. j e τ em unidades adimensionais.

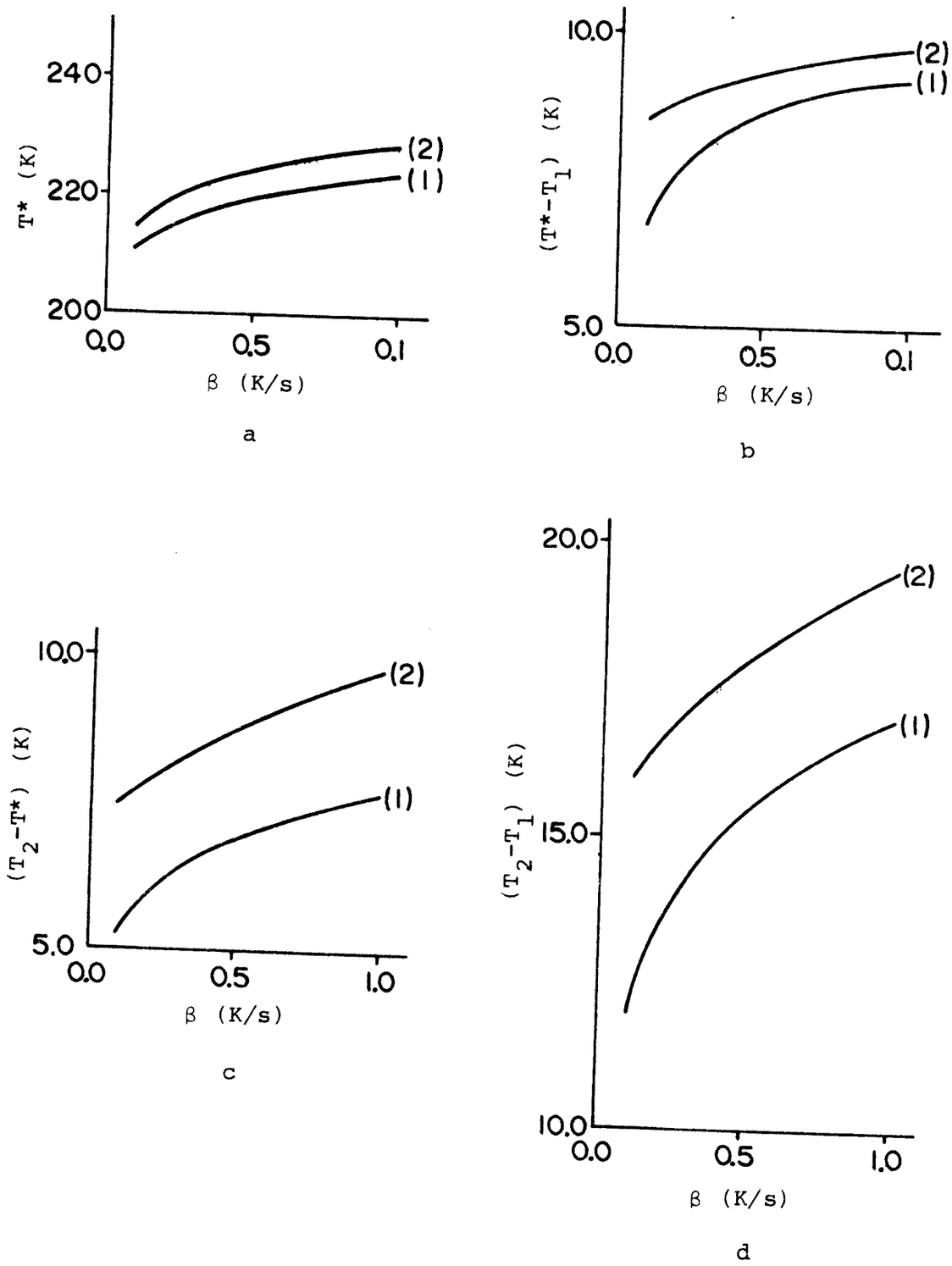


FIG.25. (a) T^*, (b) T^*-T_1, (c) T_2-T^* e (d) T_2-T_1 em função da razão de aquecimento β. $\phi=0.65$ eV, $\nu=10^{13}s^{-1}$, $t_r=\ell^2/\mu V_o$ = 100s. (1) $\tau\to\infty$. (2) $\tau=0.1$ ($\tau=\tau'/t_r$).

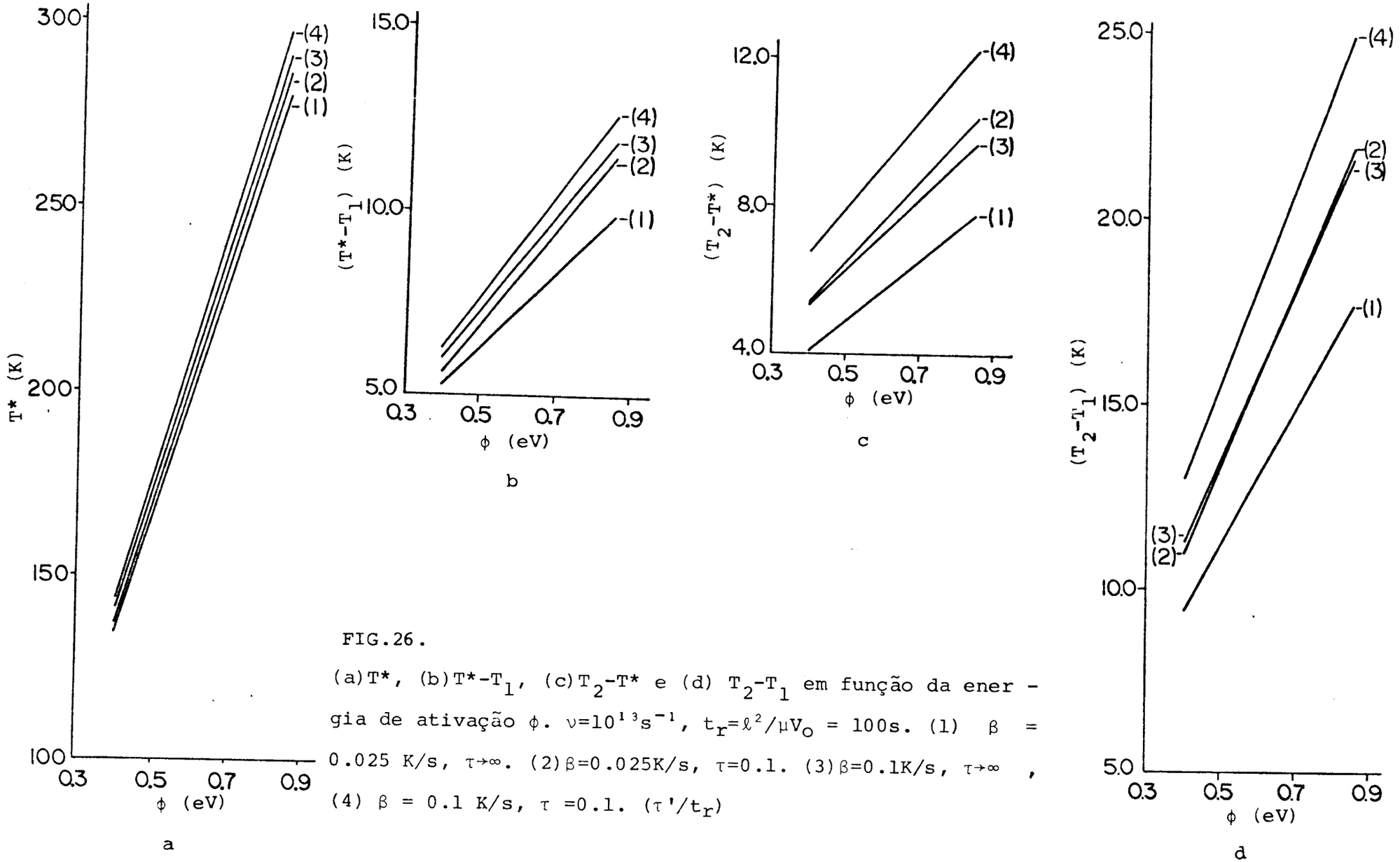


FIG.26.

(a) T^*, (b) T^*-T_1, (c) T_2-T^* e (d) T_2-T_1 em função da energia de ativação ϕ. $\nu=10^{13}s^{-1}$, $t_r=\ell^2/\mu V_o$ = 100s. (1) β = 0.025 K/s, $\tau\to\infty$. (2) β=0.025K/s, τ=0.1. (3) β=0.1K/s, $\tau\to\infty$, (4) β = 0.1 K/s, τ =0.1. (τ'/t_r)

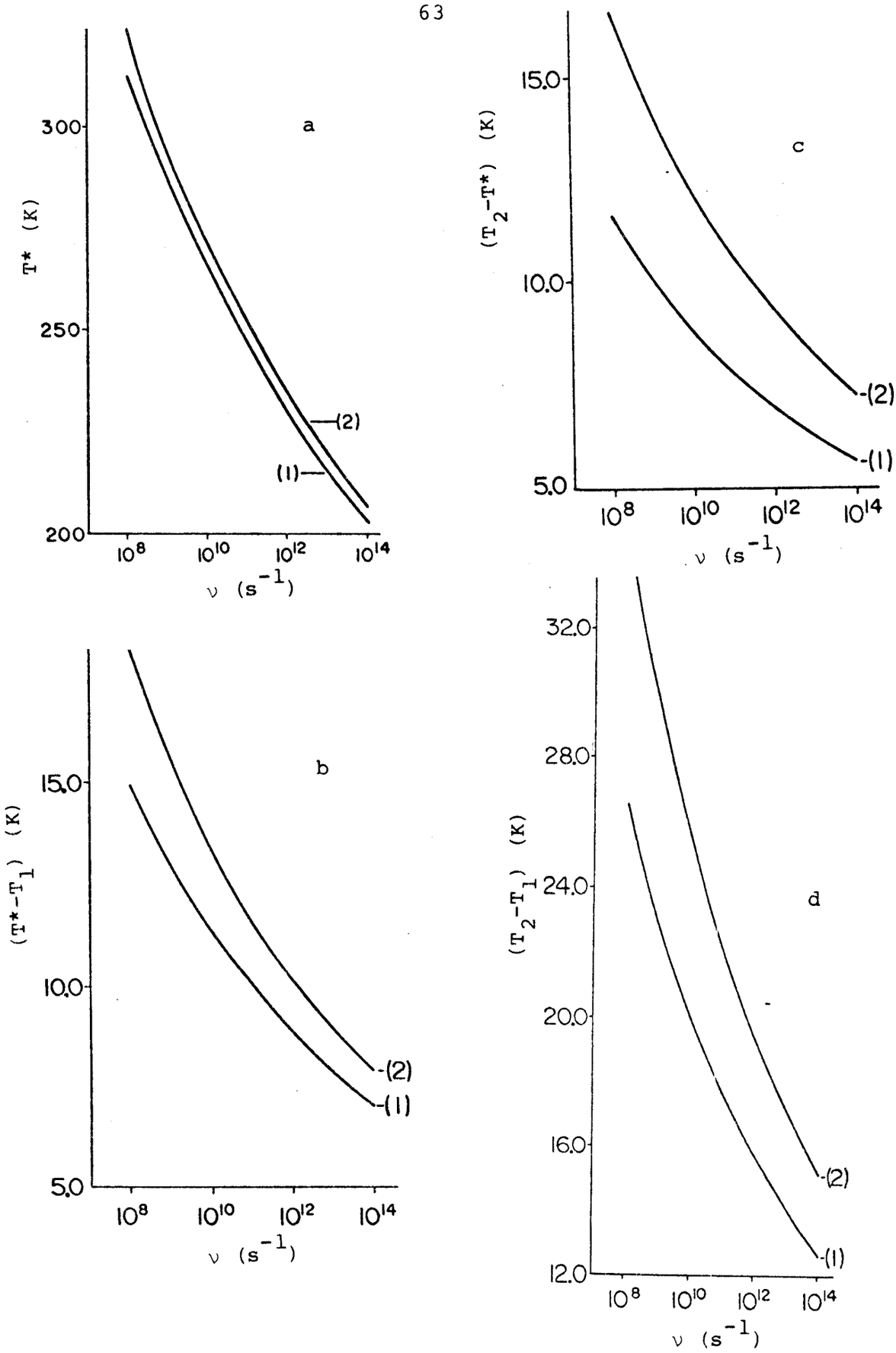


FIG.27. (a) T^*, (b) T^*-T_1, (c) T_2-T^* e (d) T_2-T_1, em função da frequência de escape ν . ϕ = 0.65 eV, β = 0.025 K/s, $t_r = \ell^2/\mu V_o$ = 100 s. (1) $\tau\to\infty$, (2) τ = 0.1 ($\tau=\tau'/t_r$)

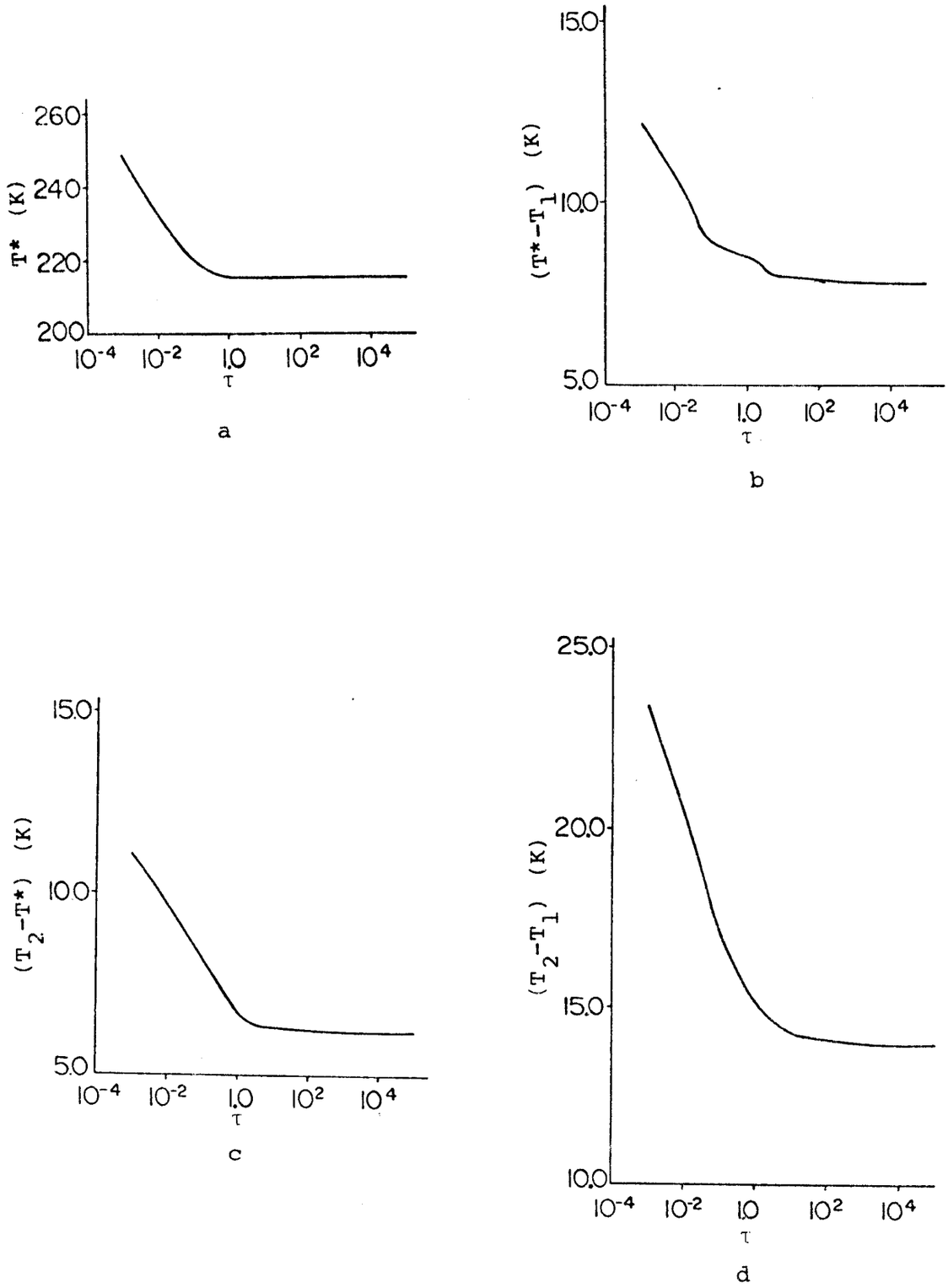


FIG.28. (a) T^*, (b) T^*-T_1, (c) T_2-T^* e (d) T_2-T_1 em função do tempo de trapping $\tau(\tau=\tau'/t_r)$. $\phi=0.65$ eV, $\nu=10^{13}s^{-1}$, $\beta=0.025K/s$, $t_r = \ell^2/\mu V_o = 100s$.

No caso sem retrapping ($\tau \to \infty$), estes dois gráficos dão retas cujas inclinações, juntamente com aquelas dos gráficos de T* vs.ϕ permitem escrever

$$\phi = T^*(1.82\text{x}10^{-4}\log(\nu/\beta) + 4.24\text{x}10^{-4}) - 0.014 \qquad (\tau > 1)$$

em analogia com o resultado de Simmons e Taylor

$$\phi = T^*(1.92\text{x}10^{-4}\log(\nu/\beta) + 3.2\text{x}10^{-4}) - 0,0155$$

que também só vale para o caso sem retrapping.

No caso de $\tau < 1$, a temperatura do máximo depende do tempo de trapping e a curva 1/T*vs.log β já não se aproxima tão bem de uma reta, embora 1/T*vs.log ν seja ainda linear. Apesar de desejável, não foi possível encontrar a dependência de T* com τ e β, de maneira que não foi possível escrever uma equação do mesmo tipo para o caso com retrapping.

As Fig.(25.b,c,d), (26.b,c,d)(27.b,c,d) e (28.b,c,d) mostram a dependência da largura do pico com estes mesmos parâmetros β, ϕ, ν e τ. As Figuras (b) mostram (T^*-T_1), as (c),(T_2-T^*)e as (d), (T_2-T_1), onde T* é a temperatura do máximo e T_1 e T_2 a menor e maior temperaturas, respectivamente, em que a corrente fica igual à metade do seu máximo valor.

Estas curvas de corrente termo-estimuladas calculadas aqui, apresentam, ainda, a característica notada por Garlick e Gibson (27,24) de que um gráfico de ℓn (corrente) versus $1/k_BT$, quando a corrente começa a crescer, dá uma reta cuja inclinação, negativa, é a energia de ativação dos traps ($-\phi$).Este resultado, juntamente com a equação acima, permitem a determinação de ϕ e ν,já que a condição $\tau > 1$ é sempre possível desde que se carregue a amostra com uma d.d.p. (V_o) suficientemente grande.

Também foram feitas curvas TSC com as condições iniciais (2) da seção anterior, eq.(VI.10) com a=0.1, observando-se que, embora o valor da corrente seja diferente, as posições e larguras dos picos diferem por décimos de Kelvin daquelas das curvas apresentadas nesta seção.

Ainda com as condições iniciais (2) e (3) da seção anterior, foram feitas as curvas TSC, considerando para a distribuição de cargas livres

$$\bar{\rho} = c_1(t) + c_2(t)x + c_3(t)x^2 \,.$$

em lugar da distribuição linear, eq.(VI.4), cujas equações encontram-se no apêndice B. Também aqui, verificou-se que a posição e a largura dos picos diferem por décimos de Kelvin das correspondentes quando se considera distribuição linear para a carga livre.

Estes fatos vêm confirmar o argumento de que as características das curvas de corrente termo-estimulada são dominadas mais pelo processo de saída dos portadores dos traps, do que pela forma da distribuição de cargas.

CAPÍTULO VII

IDC E TSC COM VOLTAGEM APLICADA

7.1- Introdução

Já aplicamos o Método de Galerkin para calcular o potencial de superfície em circuito aberto e a corrente de curto circuito de uma amostra com uma densidade inicial de cargas conhecida. Este método será usado, agora, para calcular a corrente através de uma amostra, carregada pela aplicação de uma diferença de potencial V_o até o estado estacionário, quando uma outra ddp V_1' (ou $V_1 = V_1'/V_o$ nas unidades adimensionais), de polaridade inversa, é aplicada. Supõe-se que a amostra é provida de um contacto injetante em x=0 e um bloqueante em x=1, e que a d.d.p. inversa aplicada é tal que o campo elétrico seja negativo em toda a amostra, obrigando os portadores a sair pelo eletrodo em x=0. Como o contacto em x=1 é bloqueante, portadores não podem ser injetados por aí e, conforme saem dos traps, são imediatamente arrastados pelo campo elétrico, de forma que a densidade de cargas livres em x=1 é sempre nula.

Novamente, usando as equações de Poisson, continuidade e balanço entre a banda de condução e os traps, obtém-se a equação

$$E\frac{\partial\rho}{\partial x} + \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho^2 + \frac{\rho}{\tau} + (\rho-k)\rho_t = 0 \qquad \text{(VII.1)}$$

que será resolvida com o Método de Galerkin.

Usando a notação do Capítulo II, seja

$$\Psi_1(x) = 1 - x \qquad \text{(VII.2)}$$

$$\Psi_2(x) = x(1-x)$$

de modo que

$$\bar{\rho}(x,t) = (1-x)(c_1(t) + c_2(t)x) \qquad \text{(VII.3)}$$

onde o termo (1-x) em evidência dá conta da imposição de que $\bar{\rho}$ seja nula em x=1.

Com esta densidade de cargas livres e a condição de contorno

$$\int_0^1 E(x,t)\,dx = -V_1 \ , \qquad \text{(VII.4)}$$

a equação de Poisson pode ser integrada, dando

$$E(x,t) = -V_1 - \frac{c_1}{3} - \frac{c_2}{12} - \int_0^1 \rho_t(x,t)\,dx - \int_0^1 x\rho_t(x,t)\,dx + \\ + c_1(x - \frac{x^2}{2}) + c_2(\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3}) + \int_0^x \rho_t(x,t)\,dx \qquad \text{(VII.5)}$$

A eq.(VII.1), correspondendo à (II.1), e usando as eq. (VII.2), as condições (II.5) dão

$$\int_0^1 (E\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho}^2 + \frac{\bar{\rho}}{\tau} + (\bar{\rho}-k)\rho_t)(1-x)\,dx = 0$$

$$\int_0^1 (E\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho}^2 + \frac{\bar{\rho}}{\tau} + (\bar{\rho}-k)\rho_t)x(1-x)\,dx = 0$$

Usando, então, $\bar{\rho}$ dado por (VII.3), E(x,t) dado por (VII.5) e a equação de balanço entre a banda de condução e os traps, eq.(III.4), e trabalhando as equações acima, obtém-se o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\frac{dY_1}{dt} = \frac{c_1}{2\tau} + \frac{c_2}{6\tau} - kY_1$$

$$\frac{dY_2}{dt} = \frac{c_1}{6\tau} + \frac{c_2}{12\tau} - kY_2$$

$$\frac{dY_3}{dt} = \frac{c_1}{12\tau} + \frac{c_2}{20\tau} - kY_3$$

$$\frac{dY_4}{dt} = \frac{c_1}{20\tau} + \frac{c_2}{30\tau} - kY_4$$

$$\frac{dY_5}{dt} = \frac{c_1}{30\tau} + \frac{c_2}{42\tau} - kY_5 \qquad \text{(VII.6)}$$

$$\frac{dc_1}{dt} = -\frac{2}{3}(c_1-2c_2)V_1 - c_1\left(\frac{25}{18}c_1 + \frac{c_2}{18} + \frac{1}{\tau} + 8Y_1 - \frac{86}{3}Y_2 + 34Y_3 - \frac{40}{3}Y_4\right) +$$

$$+c_2\left(\frac{c_2}{14} - \frac{4}{3}Y_2 + 14Y_3 - \frac{68}{3}Y_4 + 10Y_5\right) + k(8Y_1 - 28Y_2 + 20Y_3)$$

$$\frac{dc_2}{dt} = -\frac{10}{3}(c_1+c_2)V_1 + c_1\left(\frac{37}{18}c_1 - \frac{11}{18}c_2 + 20Y_1 - \frac{290}{3}Y_2 + 130Y_3 - \frac{160}{3}Y_4\right) -$$

$$-c_2\left(\frac{2}{7}c_2 + \frac{1}{\tau} - \frac{10}{3}Y_2 + 50Y_3 - \frac{260}{3}Y_4 + 40Y_5\right) + k(-20Y_1 + 100Y_2 - 80Y_3)$$

onde Y_1, Y_2, Y_3, Y_4 e Y_5 representam a carga total nos traps e seu primeiro, segundo, terceiro e quarto momentos, respectivamente, cujas equações diferenciais foram obtidas a partir da equação de balanço entre a banda de condução e os traps.

A corrente total, que é a grandeza experimentalmente mensurável, pode ser obtida da eq.(VI.7)

$$j(t) = \int_0^1 \rho(x,t)E(x,t)\,dx \qquad \text{(VII.7)}$$

resultando

$$j(t) = -\frac{1}{2}(c_1 + \frac{c_2}{3})V_1 - \frac{c_1}{2}(\frac{c_1}{12} + \frac{c_2}{36} + Y_2 - Y_3) + c_2(\frac{Y_2}{6} - \frac{Y_3}{2} + \frac{Y_4}{3}) \quad \text{(VII.7)}$$

No caso de temperatura variável $k = k(t)$ e, como no Capítulo anterior, será considerado

$$k = \nu \exp(-\phi/k_B T)$$

e

$$T = T_o + \beta t$$

No apêndice C são apresentadas as equações resultantes quando se considera linear a distribuição de cargas livres, em lugar de parabólica como foi feito aqui.

7.2- IDC com voltagem aplicada

Nesta seção são apresentados os resultados para o caso de temperatura constante para duas condições iniciais, já usadas na seção 6.2.

7.2.1- Condições iniciais dadas pela eq.(VI.10)

Ou seja $\rho_o = 0$ e $\rho_{to} = \frac{3}{4}(x + a)^{-1/2}$. Para estas condições iniciais, obtém-se

$$c_1(0) = c_2(0) = 0$$

$$Y_1(0) = \frac{3}{2}((1 + a)^{1/2} - a^{1/2})$$

$$Y_2(0) = \frac{(1 + a)^{3/2}}{2} + a^{3/2} - \frac{3}{2} a (1 + a)^{1/2}$$

$$Y_3(0) = \frac{3}{10}(1+a)^{5/2} - \frac{12}{15}a^{5/2} + \frac{3}{2}a^2(1+a)^{1/2} - a(1+a)^{3/2}$$

$$Y_4(0) = \frac{3}{14}(1+a)^{7/2} + \frac{24}{35}a^{7/2} - \frac{9}{10}a(1+a)^{5/2} + \frac{3}{2}a^2(1+a)^{3/2} -$$

$$- \frac{3}{2}a^3(1+a)^{1/2}$$

$$Y_5(0) = \frac{(1+a)^{9/2}}{6} - \frac{64}{105}a^{9/2} - \frac{6}{7}a(1+a)^{7/2} + \frac{9}{5}a^2(1+a)^{5/2} -$$

$$2a^3(1+a)^{3/2} + \frac{3}{2}a^4(1+a)^{1/2}$$

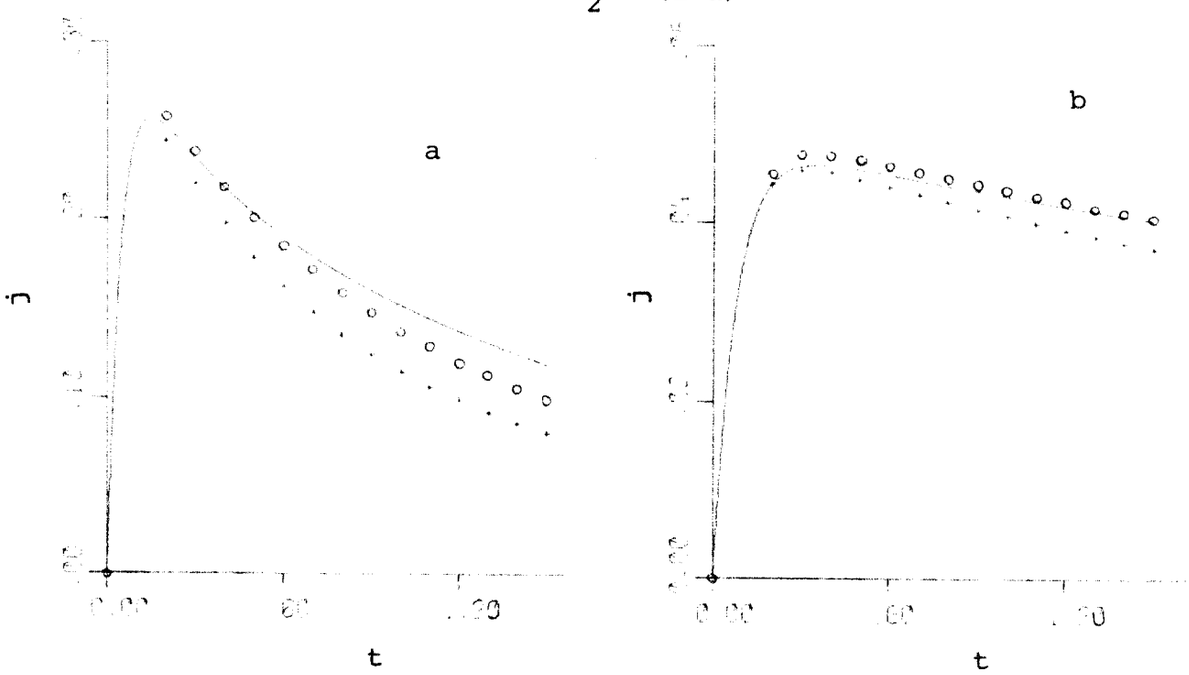


FIG.29. Comparação entre a corrente calculada pelo Método das Diferenças Finitas (linhas), e pelo Método de Galerkin com distribuição parabólica (o) e linear (+) para a carga livre, com as condições iniciais: $\rho_o = 0$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}(x+a)^{-1/2}$ $a = 0.1$, $V = 0.5$, $\tau = 0.1$, (a) k=10.0, (b) k=1.0

Nas Fig.(29.a e 29.b) estão a corrente calculada pelo Método de Diferenças Finitas, e aquelas calculadas pelo Método de Galerkin considerando a distribuição de carga livre parabólica (cál-

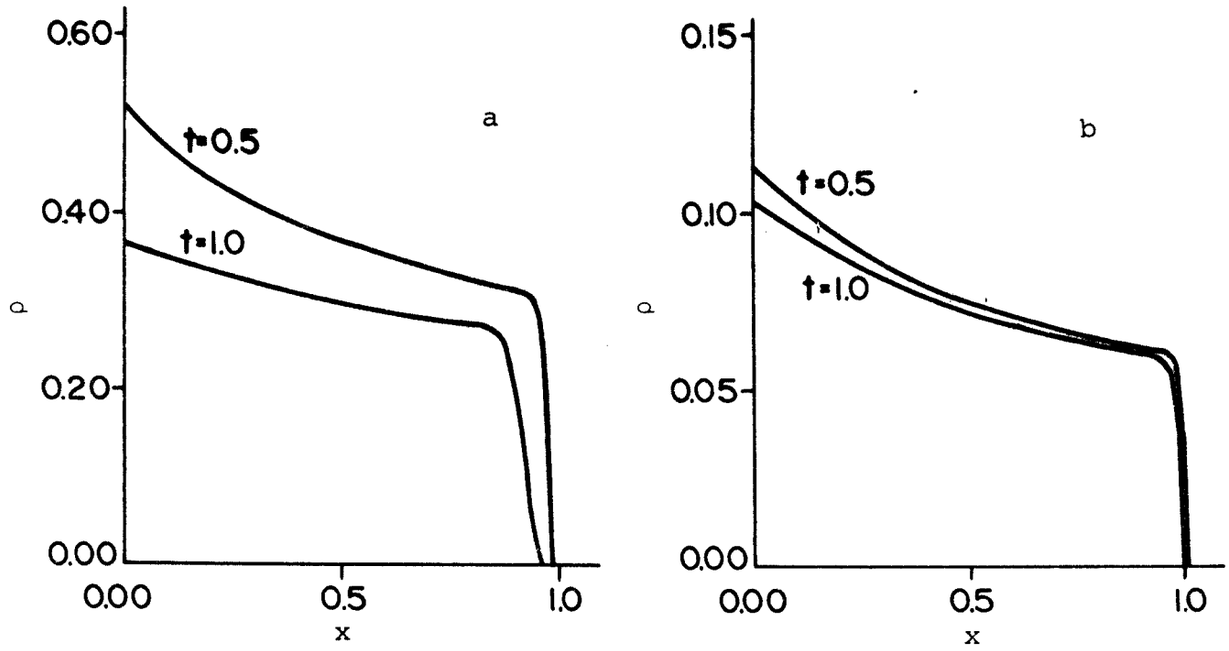


FIG.30. Perfis da densidade de carga livre, calculados com o Método das Diferenças Finitas para as condições iniciais : $\rho_o = 0$, $\rho_{to} = \frac{3}{4}(x+a)^{-1/2}$. a=0.1, V = 0.5, τ = 0.1.(a)k = 10.0. (b) k = 1.0.

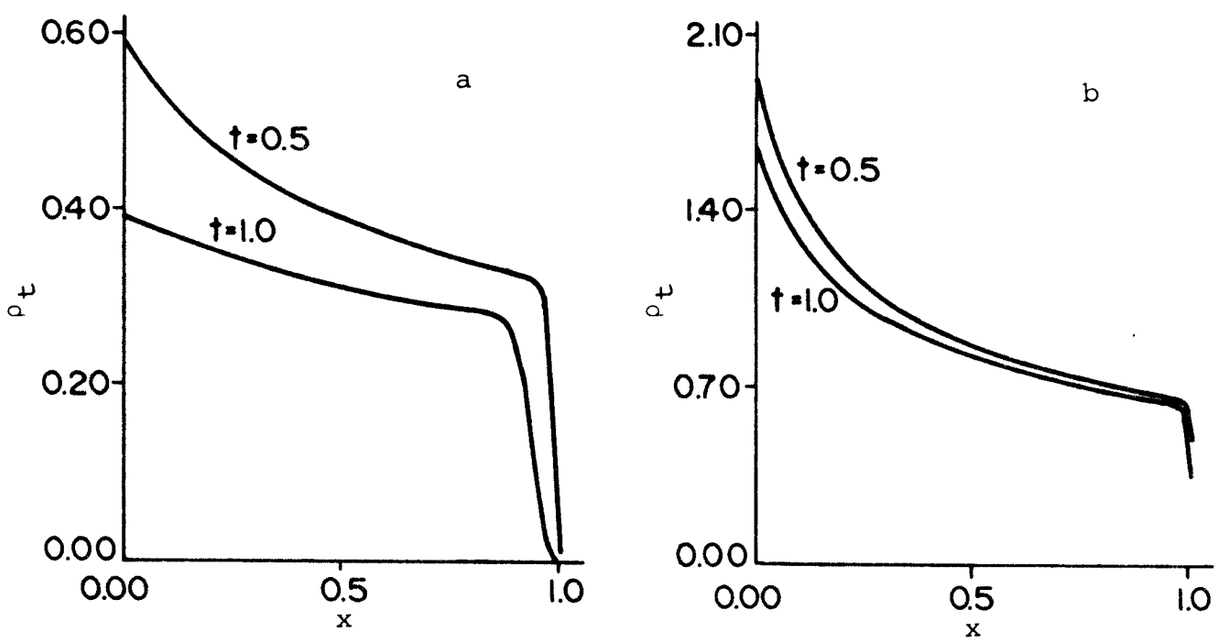


FIG.31. Perfis da densidade de cargas nos traps, calculados com o Método das Diferenças Finitas para as condições iniciais: ρ_o=0, $\rho_{to} = \frac{3}{4}(x+a)^{-1/2}$. a = 0.1, V = 0.5, τ = 0.1 (a) k = 10.0, (b) k = 1.0.

culos da seção anterior) e linear (apêndice C), para k = 10.0 e k = 1.0. Em ambos os casos, a aproximação de distribuição parabólica resulta numa corrente mais próxima daquela calculada com as Diferenças Finitas do que a aproximação de distribuição linear. Por outro lado, as duas aproximações se mostram melhores quando k = 1.0 do que quando k = 10.0. Isto acontece porque, quando k é grande, as cargas saem de uma vez dos traps e, já na banda de condução, são arrastadas pelo campo elétrico, o que provoca um esvaziamento rápido da região próxima do eletrodo bloqueante (em x=1), o que torna ruins as aproximações consideradas aqui para a distribuição de cargas livres. É claro que, para tempos menores (da ordem de 1/k, que é o tempo de detrapping), a aproximação é melhor; na verdade é esta a situação da curva com k=1.0: o máximo tempo considerado, t=1.5, ainda é da ordem do tempo de detrapping. Para ilustrar este efeito as Fig.(30) e (31) mostram os perfis da carga livre e da carga nos traps, respectivamente, correspondentes às curvas de corrente acima.

A Fig.(32) apresenta a corrente para estas mesmas condições iniciais, eq.(VII.8), para vários valores da voltagem aplicada $-V_1$, tomando sempre o cuidado de usar

$$V_1 > \sqrt{1 + a}\,(\frac{1}{2} - a) + a^{3/2}$$

(no caso das curvas desta Figura em que a = 0.1, esta condição dá $V_1 > 0.45$); isto é necessário a fim de garantir que o campo elétrico seja negativo em toda a amostra. Como, inicialmente, só há carga nos traps, a corrente inicial é nula, crescendo à medida que os portadores saem dos traps até atingir o máximo, e decrescendo depois até se anular, porque, portadores podem sair da amostra, mas não entrar. Quanto mais depressa os portadores saem dos traps, ou, quanto maior k, mais acentuado é o pico da corren

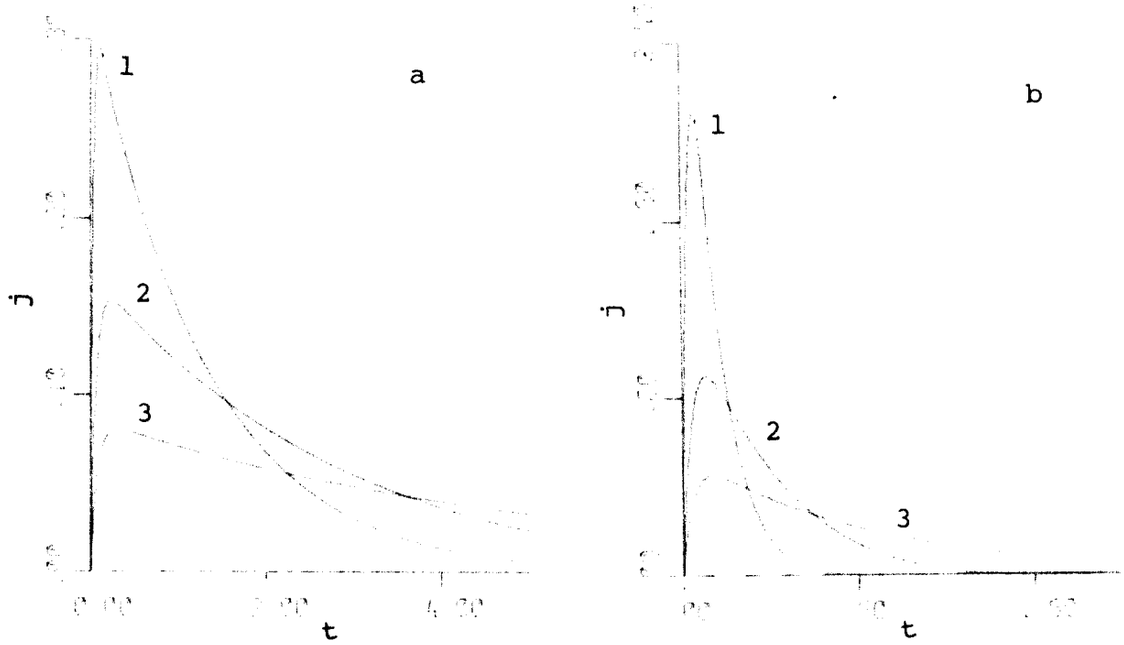


FIG.32. Corrente em função do tempo para as condições iniciais:
$\rho_o = 0$, $\rho_{to} = 3/4(x+a)^{-1/2}$. $a = 0.1$, $\tau = 0.1$ (a) $k = 1.0$:
(1) $V_1=10.0$, (2) $V_1=2.5$, (3) $V_1=1.0$
(b) $k = 10.0$: (1) $V_1 = 10.0$, (2) $V_1 = 2.5$, (3) $V_1 = 1.0$

te, isto é, mais alto e mais estreito ele fica (observe que são diferentes as escalas dos gráficos da Fig.(32.a) e da (32.b)) . Ainda, como toda a carga caminha em direção ao eletrodo em x=0, a integral da corrente $\int_0^\infty j dt$, que é a carga que passa pela resistência de medida, deveria ser a mesma para todas estas curvas e igual ao produto $\bar{x}_o Q_o$, que é igual a Y_{2_o}, onde Q_o é a carga total inicialmente na amostra e $\bar{x}_o$ o centróide desta carga ($\bar{x}_o = \int_0^1 x\rho dx / \int_0^1 \rho dx$). As áreas medidas sob as curvas resultaram muito próximas umas das outras, porém um pouco diferentes de $\bar{x}_o Q_o$.

Como na seção 6.2.3, foram feitas também as curvas de corrente.tempo versus log (tempo) (j.t vs.log t): no caso de $\tau \to \infty$(sem retrapping) e voltagens grandes (campo alto), que se a

proxima bem do caso tratado por Simmons & Tam(6), verificou-se a relação apresentada por eles de que o máximo destas curvas ocorre para tempos iguais ao tempo de detrapping (1/k) para os casos em que k não é muito grande (k < 1. 0). No caso de vantagens baixas ou com retrapping, esta relação não ocorre, embora a ordem de grandeza do tempo correspondente ao máximo de cada curva seja a mesma de 1/k.

7.2.2- Condições iniciais dadas pela eq.(VI.11)

$$\text{Ou } \rho_o = \frac{3}{4}\frac{k\tau}{1+k\tau}x^{-1/2} \quad \text{e} \quad \rho_{t_o} = \frac{3}{4}\frac{1}{1+k\tau}x^{-1/2} \quad ,$$

que leva a

$$c_1(0) = -c_2(0) = \frac{3}{4}\frac{k\tau}{1+k\tau}x^{-1/2}$$

$$Y_1(0) = \frac{1.5}{1+k\tau}$$

$$Y_2(0) = \frac{0.5}{1+k\tau}$$

$$Y_3(0) = \frac{0.3}{1+k\tau}$$

$$Y_4(0) = \frac{3/14}{1+k\tau}$$

$$Y_5(0) = \frac{1/6}{1+k\tau}$$

A Fig.(33) mostra as curvas de corrente em função do tempo com estas condições iniciais para três diferentes valores da voltagem aplicada (V > 0.5 para que o campo elétrico seja negativo em toda a amostra) e para k=1.0 e k=10.0. A corrente inicial é maior quanto maior V_1, já que, para os mesmos k e τ, a densidade

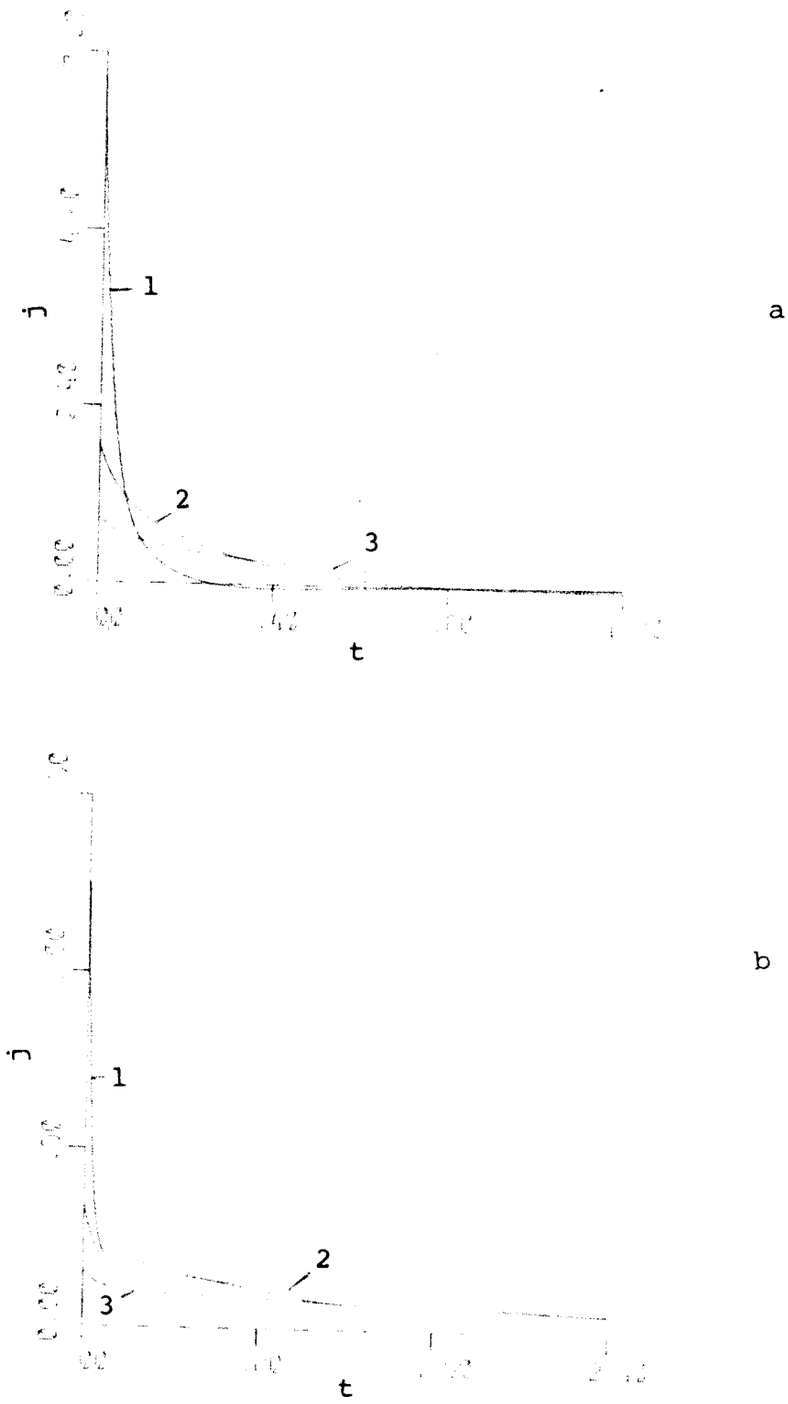


FIG.33. Corrente em função do tempo para as condições iniciais:
$\rho_o = (3/4)\ \frac{k\tau}{1+k\tau}\ x^{-1/2}$ e $\rho_{to} = (3/4)\ \frac{1}{1+k\tau}\ x^{-1/2}$.
$\tau = 0.1$.

(a) $k = 10.0$: (1) $V_1 = 10.0$, (2) $V_1 = 2.5$, (3) $V_1 = 1.0$

(b) $k = 1.0$: (1) $V_1 = 10.0$, (2) $V_1 = 2.5$, (3) $V_1 = 1.0$

de carga inicialmente livre é a mesma enquanto a intensidade do campo elétrico é tanto maior quanto maior V_1, implicando, assim, numa corrente inicial maior. Por outro lado, como a carga a ser liberada é a mesma, quanto maior a voltagem, mais depressa a amostra perde a carga em excesso, o que se reflete no cruzamento das curvas. No caso de k=10, ocorre uma inversão da corrente, a qual, acreditamos, não é real sendo, antes, decorrente do afastamento da distribuição aproximada de carga livre daquela real. Inversões também ocorrem no caso de temperatura variável logo após o máximo da corrente, as quais também serão associadas a este fator.

Analogamente ao caso das condições iniciais da seção anterior, as áreas sob as curvas da corrente são aproximadamente iguais para todas as curvas, porém um pouco diferentes de Y_{2o}.

Novamente foram feitas curvas de (j.t)vs.logt. Para o caso com retrapping (τ=0.1) e k=1, verificou-se que o tempo correspondente ao máximo destas curvas diminui à medida que a voltagem aumenta. No caso sem retrapping, porém, há inicialmente uma diminuição e depois um aumento deste tempo, conforme ilustra a tabela abaixo para o caso de k = 1.0

V	0,6	1.0	1.5	2.5	5.0	10.0
t_m	1.57	1.20	0.95	0.74	0.78	0.88

Este caso sem retrapping já foi estudado na ref.(5) resultando num aumento do tempo correspondente ao máximo à medida que a voltagem aumenta, diferentemente do que foi obtido aqui. Não é possível, porém, dizer qual é o resultado correto, já que os dois cálculos são aproximados.

7.3- TSC com voltagem aplicada

Curvas de corrente termo-estimulada em função da temperatura são apresentadas nas Fig.(34) e (35) considerando-se distribuição parabólica e linear para a carga livre, respectivamente , com a mesma condição inicial da seção 7.2.2. Algumas destas curvas de corrente, calculadas com a aproximação de distribuição parabólica, principalmente para o caso de forte retrapping, apresentam uma inversão logo após o pico, problema este, relacionado com o que foi discutido no caso de temperatura constante: só se pode esperar que as aproximações feitas aqui sejam boas se k for pequeno. Neste caso de temperatura variável, k não é constante,mas varia de acordo com a lei de Arrhenius ($k=\nu\exp(-\phi/k_BT)$); assim, do início do aquecimento, até temperaturas da ordem da temperatura do máximo, k é suficientemente pequeno para assegurar que a aproximação para a densidade de carga livre seja boa. No entanto, para temperaturas maiores k, que cresce exponencialmente com a temperatura, fica muito grande, e a aproximação se torna ruim. Observe-se, porém, que no caso sem retrapping, não há inversão para voltagens grandes (a inversão que aparece na Fig. (43.b) corresponde à curva com V=1.0), o que pode significar que,ainda que k seja grande, estes resultados podem ser considerados bons desde que não haja variações bruscas da densidade de cargas, tanto na banda de condução como nos traps, condição que, provavelmente é satisfeita para esta situação em que não há retrapping e em que V é suficientemente grande, pois dessa forma, ao sair dos traps, os portadores deixam logo o interior da amostra.

Comparando as curvas das Fig.(34) e (35) vê-se que, embora os valores das correntes correspondentes, calculadas com as aproximações de distribuição parabólica e linear para a carga livre, sejam diferentes, a posição do máximo e a largura do pico não

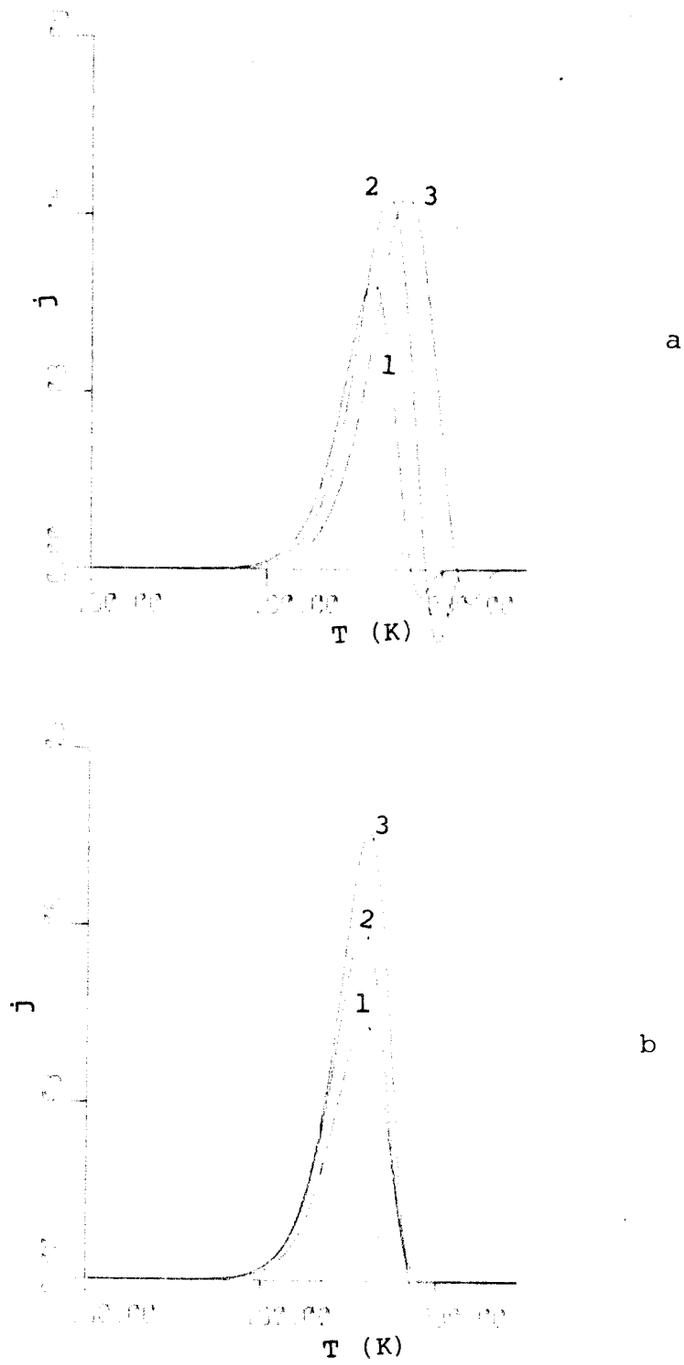


FIG.34. Corrente termo-estimulada em função da temperatura, considerando parabólica (seção 7.1) a distribuição de cargas livres. β = 0.03 K/s, ϕ = 0.65 eV, $\nu = 10^{13} s^{-1}$, $\ell^2/\mu V_o$ = 100 s.

(a) τ = 0.1 : (1) V_1 = 10, (2) V_1 = 2.5 , (3) V_1 = 1.0

(b) $\tau \to \infty$: (1) V_1 = 10 , (2) V_1 = 2.5 , (3) V_1 = 1.0

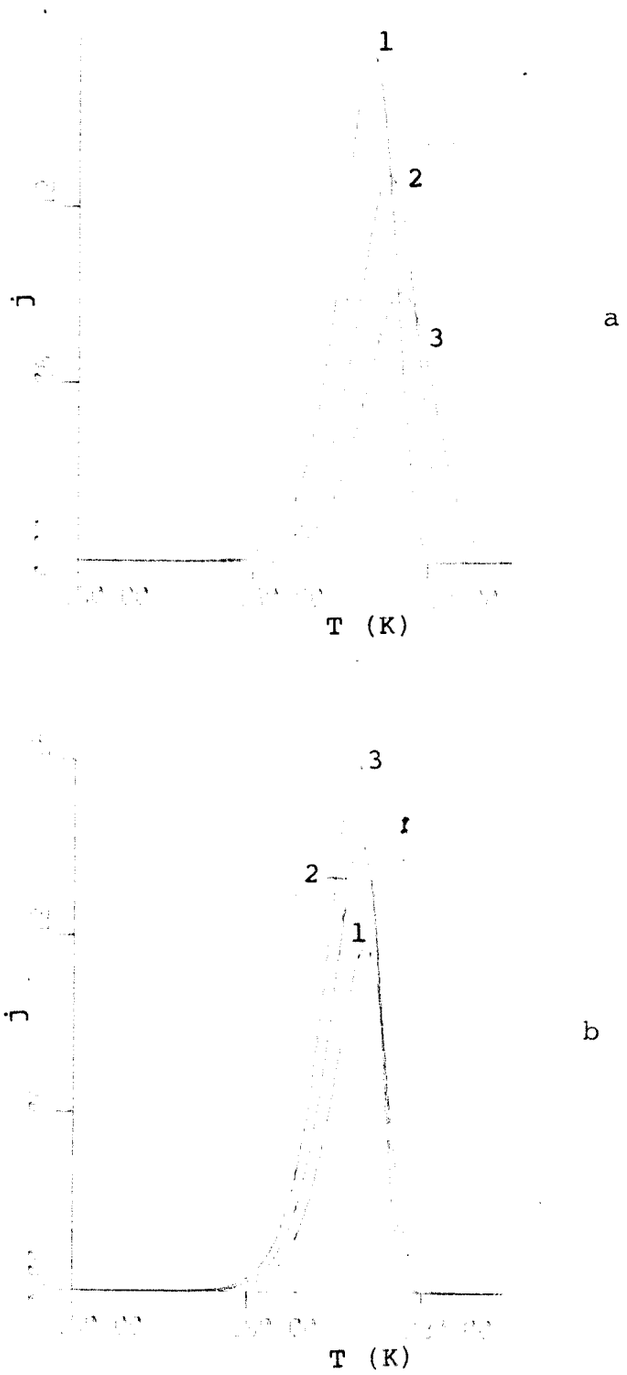


FIG.35. Corrente termo-estimulada em função da temperatura, considerando linear (apêndice C) a distribuição de cargas livres. β = 0.03K/s, ϕ = 0.65 eV, $\nu = 10^{13}s^{-1}$, $\ell^2/\mu V_o$=100s.
(a) τ = 0.1 : (1) V_1 = 10 , (2) V_1 = 2.5 , (3) V_1 = 1.0
(b) $\tau \to \infty$: (1) V_1 = 10 , (2) V_1 = 2.5 , (3) V_1 = 1.0

diferem muito (as diferenças são, em média de 2.5K para T*, 2.0K para T_1 e 3.5K para T_2). Deve-se observar ainda que nenhuma das duas aproximações dá áreas iguais sob estas curvas de corrente termo-estimulada, o que deveria ocorrer num cálculo exato.

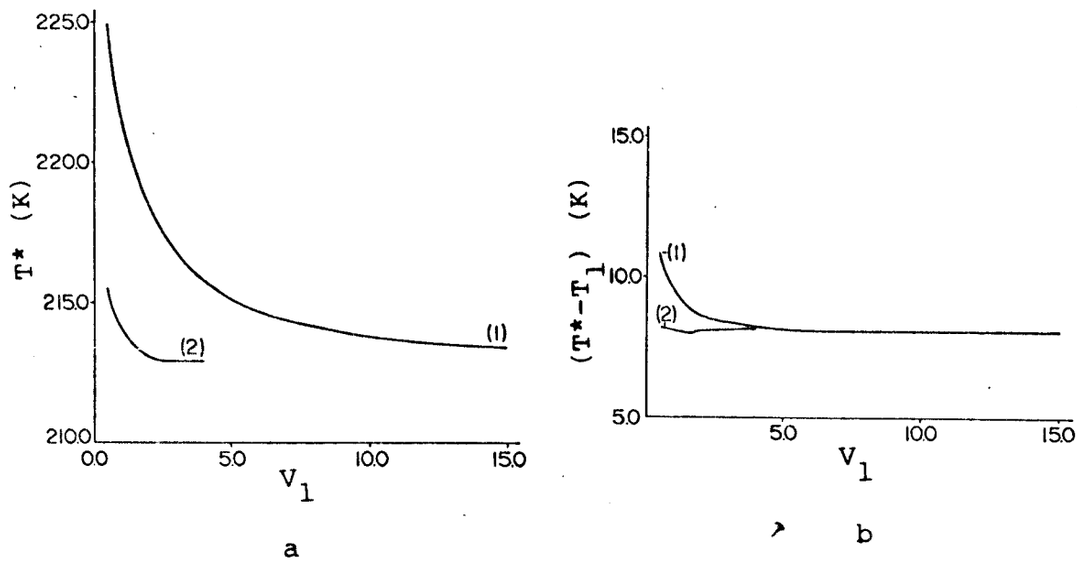


FIG.36.(a) Temperatura do máximo e (b) meia largura em função da voltagem aplicada. β=0.03 k/s, ϕ=0.65 eV, ν = $10^{13}s^{-1}$, $\ell^2/\mu V_o$ = 100 s. (1) τ = 0.1 , (2) $\tau \to \infty$

As Fig.(36.a e.b) mostram, respectivamente , as dependências da temperatura do máximo e da meia-largura (T* - T_1) com a voltagem. Ao sair dos traps os portadores dirigem-se para o eletrodo em x=0, tanto mais depressa quanto mais intenso for o campo elétrico; é compreensível, portanto, que a temperatura do máximo seja menor quanto maior a voltagem, já que, neste caso, os portadores saem da amostra mais rapidamente. Para V_1 muito grande, atinge-se um estado de saturação quando, ao sair dos traps , os portadores são imediatamente arrastados pelo campo elétrico até o eletrodo em x=0, e a corrente fica dominada exclusivamente

pelo processo de saída dos portadores dos traps. Como se poderia esperar, essa saturação ocorre para voltagens maiores quando há retrapping, já que, neste caso, os portadores demoram mais para deixar o interior da amostra. A temperatura de "saturação" é a mesma para τ pequeno que para $\tau \to \infty$, pois, se a voltagem é suficientemente grande para que o tempo de trânsito (da ordem de $\ell^2/\mu V_1'$) seja menor do que o tempo de trapping τ, os portadores são levados para x=0, sem tempo de serem recapturados.

Deve-se dizer, ainda, que o problema tratado neste capítulo foi resolvido, também aproximadamente, na referência (5) e que, neste caso de TSC, o máximo da corrente se desloca para temperaturas maiores à medida que V_1 aumenta, contrariamente ao que foi obtido aqui. Surge, então a pergunta: qual é o resultado correto ? Com base na discussão do parágrafo anterior, acreditamos que o correto é a diminuição da temperatura do máximo conforme se aumenta a voltagem aplicada.

CONCLUSÕES

Nos Capítulos IV e V calculou-se o decaimento do potencial de superfície de uma amostra em circuito aberto para dois tipos de condições iniciais: carga concentrada na superfície, no Capítulo IV e carga distribuida no volume, no Capítulo V. No primeiro caso, a solução aproximada foi comparada com a solução exata de Rudenko para a situação particular em que os traps são profundos (k=0), sendo a concordância muito boa. No caso de distribuição volumétrica de cargas, a solução aproximada para a condição inicial de distribuição linear de cargas foi comparada com a correspondente exata (ref.3) resultando, também, muito boa. Para a outra condição inicial (ρ e ρ_t proporcionais a $x^{-1/2}$), para a qual não se conhece solução exata, a verificação da solução aproximada foi feita comparando a solução obtida quando se aproxima só a distribuição de carga livre por uma linear, com uma outra em que se aproxima assim, tanto a carga livre como aquela dos traps, resultando, também, numa concordância muito boa. Conclui-se, então, que, mesmo quando a aproximação para a densidade de carga livre não é muito boa, o potencial calculado resulta bom, o que é compreensível, já que este depende somente da carga total e do primeiro momento destas.

Nos Capítulos VI e VII calculou-se, respectivamente, a corrente em curto circuito e aquela com voltagem aplicada com a carga inicialmente distribuida no volume da amostra. A corrente é uma quantidade mais sensível à forma da distribuição de cargas do que o potencial de superfície, por isso a corrente aproximada só fica bem próxima daquela exata (ou, quase exata, já que foi obtida da integração numérica das equações diferenciais parciais pelo Método das Diferenças Finitas), quando a aproximação para a distribuição de cargas livres é boa.

No caso da amostra em curto-circuito, viu-se que a posição e largura dos picos das curvas jt vs. logt praticamente coincidem no cálculo aproximado e no exato, mesmo para o caso mais drástico em que a distribuição inicial de carga é proporcional a $x^{-1/2}$ e se aproximou a carga livre por uma distribuição linear. Este tipo de curva foi escolhida por apresentar alguma estrutura (picos) em oposição às curvas de j vs. t que decaem monotonicamente. Conclui-se, portanto, que, embora o valor da corrente seja diferente, suas características são mantidas na aproximação. Com relação às curvas de correntes termo-estimuladas em curto-circuito, apesar de não ter sido feita nenhuma comparação com algum cálculo exato, acreditamos serem bons os resultados para a posição e largura dos picos já que estes devem depender mais dos processos de saída das cargas das armadilhas, isto é, dos parâmetros que as caracterizam, do que da forma exata da distribuição de cargas.

No caso com voltagem aplicada, problema tratado no Capítulo VII, a aproximação para a densidade de carga livre quando k é grande (da ordem ou maior do que o inverso do tempo de trânsito) está muito diferente da exata (embora a corrente não esteja tão diferente quanto se poderia esperar). A solução para este problema poderia, provavelmente, ser melhorada escolhendo-se outra forma para a densidade de carga livre, mais especificamente, subdividindo-se a região $0 < x < 1$ em duas regiões (bem visíveis nas figuras (30) e (31)) e considerando que a carga se move em bloco, com uma traseira bem definida, com velocidade $\mu_m E$, sendo μ_m a mobilidade modulada pelos traps e E o campo elétrico.

O ponto crítico quando se utiliza o Método de Galerkin é, portanto, a escolha da base para a expansão em série da densidade de cargas livres (ou, na notação do Capítulo II, do conjunto $\{\Psi_i(x)\}$). Em princípio, qualquer conjunto completo de funções

serve como base para esta expansão; quando bem escolhida, apenas um ou dois termos na série já são suficientes para que a solução aproximada esteja bem próxima da exata; por outro lado, quando a escolha da base é arbitrária, pode ser necessário considerar muitos termos na série o que implica em muitos coeficientes a serem determinados e, consequentemente, em mais trabalho para desacoplar as equações e, nos casos em que não se consegue soluções analíticas, em longos tempos de computação que podem, até, se equiparar com o tempo gasto nas integrações numéricas diretas do sistema de equações a derivadas parciais pelo Método das Diferenças Finitas. Isto faz com que o Método de Galerkin perca sua principal vantagem que é, justamente, a de poder gastar pouco tempo de computação.

É claro que, quando não se conhece a solução exata de algum caso particular do problema em questão, conhecimento este que sugeriria a forma da densidade de carga livre e permitiria comparar a solução aproximada com a exata naquele caso particular (como foi feito neste trabalho), algum critério deve ser estabelecido para se saber se a solução tentativa é suficientemente boa. Acreditamos que o mais indicado é fazer o cálculo considerando, consecutivamente, um, dois, três,..., termos na série : quando a solução praticamente não mudar mais, toma-se o menor número de termos que dê a solução considerada satisfatória. Este processo, simples em princípio, é, no entanto, cansativo; apesar disso teria sido interessante utilizá-lo aqui - fica como uma sugestão para trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

(1) RUDENKO, A.I. - Soviet Phys. - Solid State 14(11), 2706-09 (1973)

(2) MANY,A. & RAKAVY, G. - Phys.Rev. 126(6), 1980-88 (1962)

(3) NUNES OLIVEIRA, L. & LEAL FERREIRA,G.L. - Journal of Electrostatics, 2, 187-198 (1976)

(4) LINDMAYER,J. - J.Appl.Phys., 36(1), 196-201 (1965)

(5) SAMOČ,A.; SAMOČ,M. ; SWORAKOWSKI,J. - Phys.Stat.Sol. 36(a), 735-745(1976)

(6) SIMMONS,J.G. & TAM,M.C. - Phys.Rev.B, 7(8) (1973)

(7) SIMMONS,J.G. & TAYLOR,G.W. - Phys.Rev.B, 5(4) (1972)

(8) CARNAHAN,B. ; LUTHER,H.A.; WILKES,J.O. - Applied Numerical Methods. John Wiley & Sons (1969)

(9) SMITH,G.D. - Numerical Solution of Partial Differential Equations. Oxford University Press (1969)

(10) KANTOROVICH,L.V. & KRYLOV,V.I. - Approximate Methods of Higher Analysis, The Netherlands, P.Noordhoff LTD (1958)

(11) NORRIE,D.H. & DE VRIES,G. - An Introduction to Finite Element Analysis, Academic Press (1978)

(12) FINLAYSON,B.A. & SCRIVEN,L.E. - On the Search for Variational Principles, Internat.J.Heat Mass Transfer, 10, 799-821 (1967)

(13) BIOT,M.A. - Variational Principles in Heat Transfer. Oxford University Press (1970)

(14) CAMARGO,P.C. - Dissertação de Mestrado, IFQSC - USP (1975)

(15) STRANG,G. & FIX,G.J. - An Analysis of the Finite Element Method. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1973)

(16) SCHILLING, R.B. & SCHACHTER,H. - J.Appl.Phys., 38(2), 841-844 (1967)

(17) REISER,A. ; LOCK,M.W.B. ; KNIGHT,J. - Trans.Faraday Soc., 65, 2168-84 (1969)

(18) CAMPOS,M.S. & GIACOMETTI,J.A. - J.Appl.Phys., 52(7), 4546-52 (1981)

(19) GIACOMETTI,J.A. - Dissertação de Mestrado, IFQSC-USP (1977)

(20) Handbook of Mathematical Functions - edited by Abramowitz, M. & Stegun,A. Dover Publication.

(21) PERLMAN,M.M. & SONNONSTINE,T.J. - J.Appl.Phys. 46, 3975(1975)

(22) LAMPERT,M.A. & MARK,P. - Current Injection in solids. Academic Press (1970)

(23) SAMOČ,A. ; SAMOČ,M.; SWORAKOWSKI,J.; THOMAS,J.M. ; WILLIANS, J.O. - Phys.Stat.Sol.(a), 37, 271-278 (1976)

(24) NICHOLAS,K.H. & WOODS,J. - Brit.J.Appl.Phys. 15, 783-795 (1964)

(25) CHEN,R. - J.Electrochem.Soc., 116, 1254-57 (1969)

(26) TURNHOUT, J.Van - Thermally Stimulated Discharge of Electrets. In: Electrets, edited by G.M. Sessler. Springer-Verlag (1980)

(27) GARLICK,G.F.J. & GIBSON,A.F., Proc.Roy.Soc., 60, 574 (1948)

APÊNDICE A

Calcula-se, a seguir, o potencial de superfície de uma amostra com distribuição inicial de cargas conhecida (Capítulo V), considerando apenas um termo na série (II.4), com

$$\Psi_1(x) = 1$$

o que dá

$$\bar{\rho} = c(t)$$

Dessa forma a condição correspondente à eq.(II.5) na eq.(V.1) dá uma equação da qual se determina c(t)

$$\dot{c} + c^2 + \frac{c}{\tau} + (c-k)\int_0^1 \rho_t(x,t)\,dx = 0 \qquad \text{(A.1)}$$

Integração da eq.(III.4) usando (V.2) dá

$$\rho_t(x,t) = e^{-kt}\{\rho_{t_o}(x) + \frac{1}{\tau}\int_0^t e^{kt'}c(t')\,dt'\}$$

e a eq.(A.1) se escreve

$$\dot{c} + c^2 + \frac{c}{\tau} + (c-k)e^{-kt}\{Q_{t_o} + \int_0^t e^{kt'}c(t)\,dt'\} \qquad \text{(A.2)}$$

onde Q_{t_o} é a carga total por unidade de área inicialmente nos traps.

Seja

$$P(t) = e^{-kt}\int_0^t e^{kt'}c(t')\,dt'$$

$$S = \dot{P} \ ,$$

o que implica em

$$c = S + kP.$$

Dessa forma a eq.(A.2) se desdobra em duas

$$\dot{P} = S$$

$$\dot{S} = -(S+kP)\left[S+kP+\frac{1}{\tau} + Q_{t_o} e^{-kt} + \frac{P}{\tau}\right] + k\left(Q_{to} e^{-kt} + \frac{P}{\tau} - S\right)$$

O potencial de superfície é dado pela eq.(III.6), onde o campo elétrico $E(x,t)$ é obtido da integração da eq. de Poisson com a condição de contorno $E(0,t) = 0$. Resulta

$$V(t) = \frac{c}{2} + \frac{P}{2\tau} + (Q_{t_o} - M_{t1})\ e^{-kt}$$

onde M_{t1} é o primeiro momento das cargas presas nos traps no instante inicial.

APÊNDICE B

São apresentadas, aqui, as equações obtidas para o caso de curto-circuito, Capítulo VI, quando se considera

$$\bar{\rho} = c_1 + c_2 x + c_3 x^2$$

O procedimento é análogo ao deste capítulo, obtendo-se

$$\dot{c}_1 = -9(A-4B + \frac{10}{3} C)$$

$$\dot{c}_2 = 36(A- \frac{16}{3} B + 5C)$$

$$\dot{c}_3 = -30(A-6(B-C))$$

sendo

$$A = c_1^2 + \frac{c_2^2}{3} + \frac{c_3^2}{4} + c_1c_2 + \frac{5}{6} c_1c_3 + \frac{7}{12} c_2c_3 + \frac{c_1}{\tau} +$$

$$+ \frac{c_2}{2\tau} + \frac{c_3}{3\tau} + c_1Y_1 + c_2Y_2 + c_3Y_2 - kY_1$$

$$B = \frac{c_1^2}{2} + \frac{7}{24} c_2^2 + \frac{2}{9} c_3^2 + \frac{3}{4} c_1c_2 + \frac{2}{3} c_1c_3 + \frac{37}{72} c_2c_3 +$$

$$+ \frac{c_1}{2\tau} + \frac{c_2}{3\tau} + \frac{c_3}{4\tau} + c_1Y_2 + \frac{c_2Y_2}{2} + \frac{c_2Y_3}{2} + \frac{2}{3} c_3Y_2 + \frac{c_3Y_4}{3} - kY_2.$$

$$C = \frac{c_1^2}{3} + \frac{11}{45} c_2^2 + \frac{11}{56} c_3^2 + \frac{7}{12} c_1c_2 + \frac{11}{20} c_1c_3 + \frac{4}{9} c_2c_3 +$$

$$+ \frac{c_1}{3\tau} + \frac{c_2}{4\tau} + \frac{c_3}{5\tau} + c_1Y_3 + \frac{c_2Y_2}{3} + \frac{2}{3} c_2Y_4 + \frac{c_3Y_2}{2} + \frac{c_3Y_5}{2} - kY_3$$

$$\dot{Y}_1 = \frac{c_1}{\tau} + \frac{c_2}{2\tau} + \frac{c_3}{3\tau} - kY_1$$

$$\dot{Y}_2 = \frac{c_1}{2\tau} + \frac{c_2}{3\tau} + \frac{c_3}{4\tau} - kY_2$$

$$\dot{Y}_3 = \frac{c_1}{3\tau} + \frac{c_2}{4\tau} + \frac{c_3}{5\tau} - kY_3$$

$$\dot{Y}_4 = \frac{c_1}{4\tau} + \frac{c_2}{5\tau} + \frac{c_3}{6\tau} - kY_4$$

$$\dot{Y}_5 = \frac{c_1}{5\tau} + \frac{c_2}{6\tau} + \frac{c_3}{7\tau} - kY_5$$

E, para a corrente,

$$j = \frac{c_2}{2}\{\frac{c_1}{6} + \frac{c_2}{12} + \frac{5}{36}\, c_3 + Y_2 - Y_3\} + \frac{c_3}{3}\{\frac{c_1}{4} + \frac{c_3}{12} + Y_2 - Y_4\}$$

APÊNDICE C

O cálculo a seguir se refere ao mesmo problema resolvido no capítulo VII (onde se aproximou a distribuição de carga livre por uma distribuição parabólica) considerando linear a distribuição de carga livre.

Considera-se apenas um termo na série (II.4) com

$$\Psi_1(x) = 1 - x$$

obtendo-se

$$\bar{\rho}(x,t) = c(t)(1 - x) \tag{C.1}$$

e a condição correspondente à eq.(II.5) aplicada à eq.(VII.1),dá

$$\int_0^1 \left[E \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial x} + \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho}_2 + \frac{\bar{\rho}}{\tau} + (\bar{\rho}-k)\rho_t\right](1-x)dx = 0 \tag{C.2}$$

O campo elétrico é obtido da equação de Poisson com a condição de contorno dada pela eq.(VII.4)

$$E(x,t) = -V_1 - \frac{c}{3} + Y_2 - Y_1 + cx - \frac{cx^2}{2} + \int_0^x \rho_t dx$$

Usando esta expressão para o campo elétrico e a eq.(C.1) na eq.(C.2) obtém-se uma equação diferencial ordinária que contém ainda a carga total nos traps e seu primeiro e segundo momentos , para os quais será usada a mesma notação dos Capítulos VI e VII , Y_1, Y_2 e Y_3, respectivamente, sendo a equação diferencial para estes obtida da equação de balanço entre a banda de condução e os traps. Obtém-se, finalmente

$$\frac{dY_1}{dt} = \frac{c}{2\tau} - kY_1$$

$$\frac{dY_2}{dt} = \frac{c}{6\tau} - kY_2$$

$$\frac{dY_3}{dt} = \frac{c}{12\tau} - kY_3$$

$$\frac{dc}{dt} = c\left[-\frac{7}{8}c + \frac{3}{2}(Y_2-Y_3) - \frac{3}{2}V_1 - \frac{1}{\tau}\right] - 3(c-k)(Y_1-Y_2)$$

A corrente total é calculada a partir da eq.(VI.7), resultando

$$j(t) = -\frac{c}{2}\left(V_1 + \frac{c}{12} + Y_2 - Y_3\right)$$