

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

ESTUDO TEÓRICO SÔBRE
CARGA ESPACIAL MONOPOLAR LIVRE

PAULO CÉSAR DE CAMARGO

(Trabalho apresentado ao Instituto de
Física e Química de São Carlos ,
USP, para a obtenção do título de
Mestre em Física).

Orientador :

Dr. G.F. LEAL FERREIRA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS
SÃO CARLOS - 1975

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

UM ESTUDO TEÓRICO SOBRE
CARGA ESPACIAL MONOPOLAR LIVRE

PAULO CÉSAR DE CAMARGO



Trabalho apresentado ao Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Dr. Guilherme F. Leal Ferreira

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS
IFQSC
1 9 7 5

A meus pais

À Marli e Angela Daniele

ÍNDICE

	PÁG.
Agradecimentos.....	I
Patrocinadores.....	II
Resumo.....	III
Abstract.....	IV
Introdução.....	V
CAPÍTULO I - Solução Geral	
I-1 Formulação do problema.....	1
I-2 Procedimento de resolução do problema.....	6
I-3 Resumo de como tratar problemas de M.C.E.L.....	11
I-4 Comparação com o problema em que a distribuição toca inicialmente um dos eletrodios.....	12
CAPÍTULO II - Aplicações da Teoria Geral do M.C.E.L.	
II-1 Distribuição linear.....	15
II-2 Distribuição exponencial.....	21
II-3 Distribuição do tipo $\rho(x_0) = \frac{j}{[E_0^2 + 2jx]^{1/2}}$	23
Comparação com cálculo de Lindmayer.....	33
Gráfico comparativo para as três distribuições.....	34
CAPÍTULO III - Método Variacional	
III-1 O método.....	35
III-2 Aplicações ao M.C.E.L.....	37
Comentários gerais.....	44
Sugestões para trabalhos futuros.....	48
Bibliografia.....	49

OS MEUS AGRADECIMENTOS,

ao Prof. Guilherme F.L. Ferreira pela orientação e atitude científica transmitida,

ao Prof. Cesar Cusatis pelo apoio e estímulo durante o início da minha formação em Física,

ao Prof. Bernhard Gross pelo incentivo e sugestões,

ao colega e amigo Luis Ernesto Carrano de Almeida pelas discussões e sugestões,

ao Prof. Luiz Nunes de Oliveira pelo coleguismo, pelas críticas e revisão deste trabalho,

aos Profs. Milton F. de Souza e Sylvio Goulart Rosa Jr., pelo constante apoio e incentivo,

aos colegas e demais pessoas do Departamento de Ciências Físicas e Matemáticas pelo ótimo ambiente de trabalho,

a todos os professores responsáveis pela minha formação,

ao Sr. Valdir Cesar Zago pela confecção dos desenhos,

à Srta. Loreni B. Pereira pela solicitude e presteza no trabalho de datilografia,

à todos os que direta ou indiretamente contribuíram para a concretização deste trabalho.

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro do CNPq e UFSCAR.

RESUMO

Com hipóteses de simetria plana e que a distribuição inicial de cargas, ocupa totalmente a amostra (tocando os dois eletrodos), estudou-se o problema do movimento de carga espacial livre (M.C.E.L.) monopolar, em sólidos isolantes, submetidos a uma d.d.p. conhecida.

Utilizando o método das características, reduziu-se o problema a um sistema de duas equações diferenciais ordinárias, de 1ª ordem.

O método foi aplicado para as distribuições linear, exponencial e $\rho \sim x^{-1/2}$, sob condições de curto circuito.

São apresentados gráficos relativos à evolução temporal do perfil da densidade de cargas e da corrente externa. Estes resultados são comparados com outros obtidos por um cálculo aproximado, baseado em princípios variacionais.

ABSTRACT

Assuming planar symmetry and an arbitrary charge distribution that spreads through the sample, the one-carrier free space-charge motion is studied in insulators solids.

Using the method of characteristics we can reduce the problem to the resolution of a system of two ordinary first order differential equations.

Results are applied for linear, exponential and S.C.L. current charge distributions, under short-circuit conditions.

The charge distribution for several times and the discharge currents are presented.

The results are compared with those coming from an approximated method, based on variational principles.

INTRODUÇÃO

O problema do estudo dos efeitos não estacionários, devido a carga espacial passou a receber crescente atenção após o trabalho de A.Many e G.Rakavy (1962) ⁽¹⁾.

A ferramenta matemática (o método das características) utilizada pelos autores acima mostrou-se especialmente poderosa no tratamento dos problemas de movimento de carga espacial livre (M.C.E.L.).

Para distribuições uniformes o problema do M.C.E.L. foi resolvido de maneira exata recentemente ^{5,6,7}.

O caso de distribuições não uniformes foi também estudado por J.van Turnhout ⁽⁵⁾.

Um excelente livro que relata e discute muitos trabalhos recentes, é Current Injection in Solids, por M.A.Lampert e P. Mark ⁽³⁾.

Sob condições de circuito aberto G.F.L.Ferreira e L.N. de Oliveira ⁽⁸⁾ encontraram soluções exatas para distribuição não uniforme.

G.F.L.Ferreira e B.Gross (1973) ⁽⁹⁾ resolveram o problema de distribuições quaisquer que não toquem as placas, sob qualquer voltagem aplicada.

O passo natural após os resultados obtidos na referência (9), foi considerar o caso no qual uma distribuição qualquer, toca um dos eletrodos.

Este problema foi resolvido por L.E.C. de Almeida em sua dissertação de Mestrado 1974 ⁽²⁾.

O presente trabalho corresponde à sequência natural após (9) e (2), ou seja, considerar distribuições que toquem os dois eletrodos.

Este conjunto de trabalhos tem como idéia central o fato de que somente soluções exatas do problema de cargas espaciais, nos permitirão relacionar a corrente externa com as principais características da distribuição inicial.

Utilizando o método das características, estudaremos o problema do M.C.E.L. monopolar, para distribuições quaisquer que toquem inicialmente os dois eletrodios.

O método de cálculo utilizado aplica-se a sistemas com carga espacial livre, sob voltagem constante ou dependente do tempo. Contudo restringiremos as aplicações numéricas a situações de curto circuito.

Admitiremos simetria plana e uma d.d.p. conhecida. Não consideraremos difusão (10,11,12).

Consideraremos que os eletrodios recebem toda a carga que o dielétrico tende a liberar.

Analisando as soluções encontradas em (2) podemos observar que o estudo de meios com condutividade intrínseca (σ), não conduz a modificações significativas no método de cálculo.

O primeiro capítulo desta dissertação é dedicado ao problema geral, de distribuições quaisquer. Conseguimos como sugerido em (2) reduzir o problema a um sistema de equações diferenciais de 1ª ordem, em princípio sempre solúvel por métodos numéricos.

Mostra-se ao final do capítulo, que a solução encontrada pode cobrir casos nos quais a distribuição inicial toca somente um dos eletrodios.

No segundo capítulo fazemos aplicações da teoria geral do M.C.E.L., calculando a evolução temporal dos perfis de carga e da corrente externa, para as seguintes distribuições iniciais.

II-1 Distribuição linear

$$\rho(x,0) = a+bx$$

$$a=1, \quad b=-1$$

II-2 Distribuição exponencial

$$\rho(x,0) = e^{bx}$$

$$b=-1$$

II-3 Distribuição $x^{-1/2}$

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

Todas as integrações numéricas foram executadas através

do método Runge-Kutta de 1ª ordem, em uma calculadora HP 9810A.

Após os cálculos acima apresentamos uma tabela comparativa, dos resultados para a carga externa exata, e a calculada pela aproximação de Lindmayer⁽⁴⁾.

Ao final do segundo capítulo construímos um gráfico comparativo, da corrente externa gerada pelas distribuições acima multiplicadas por fatores, tais que, conduzam a mesma carga total inicial.

No terceiro capítulo abordamos o problema geral, através de um método aproximado bastante simples.

Ao contrário do que ocorreu em (2), não foi observada inversão da corrente. Apesar de não ter sido demonstrado somos levados a crer que distribuições monótonas, que toquem os dois eletrodos não conduzem a inversões de corrente, sob condição de curto circuito.

O método das características, tem sido intensivamente usado no estudo dos efeitos de carga espacial, como pode ser observado especialmente nas referências, (1), (2), (7), (8), (9), (13), (14), (15), (24), (25), (29), (30) e (31).

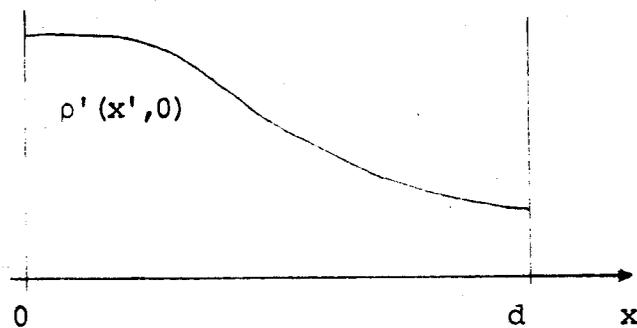
Obviamente a teoria do M.C.E.L. desenvolvida no presente trabalho, engloba os casos de amostras com níveis de armadilhas (traps), tais que, as cargas que são capturadas serão rapidamente reexcitadas, de tal maneira, que o equilíbrio entre cargas livres e presas seja estabelecido em tempo muito curto em relação aos transientes observados. Como no caso apresentado em (23), Figura 8 e discutido em (1).

CAPÍTULO I

I-1 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Admitindo simetria plana, condutividade nula, ausência de "traps" (armadilhas) e que os eletrodos estão sujeitos a uma d.d.p. $V'(t')$ conhecida, estudaremos o problema do movimento de carga espacial livre (M.C.E.L.). Consideraremos somente o caso de campos monopolares.

Seja uma distribuição de cargas que no tempo $t=0$ é dada por $\rho'(x',0)$.



A solução do problema consistirá em acharmos $\rho'(x',t')$ e $J'(t')$.

As equações básicas são:

$$\epsilon \frac{\partial E'(x',t')}{\partial x'} = \rho'(x',t') \quad \text{eq. de Poisson}$$

$$-\frac{\partial J'_c(x',t')}{\partial x'} = \frac{\partial \rho'(x',t')}{\partial t'} \quad \text{eq. da Continuidade}$$

$$J'_c(x',t') = \mu \rho'(x',t') E'(x',t') \quad \text{dens. de corrente de condução}$$

$$J'(t) = \mu \rho'(x',t') E'(x',t') + \epsilon \frac{\partial E'(x',t')}{\partial t'} \quad \text{dens. de corrente total}$$

onde,

$E'(x', t')$ → campo elétrico na posição x' , ao tempo t .
 ϵ → constante dielétrica.
 $\rho'(x', t')$ → dens. de carga na posição x' , ao tempo t .
 μ → mobilidade dos portadores.

Nossos cálculos terão como base o método das características.

Primeiramente o método das características no problema de carga espacial, foi usado por Many-Rakavy⁽¹⁾.

Recentemente L.C.Carrano de Almeida e G.F.Leal Ferreira⁽²⁾, aplicaram o método no problema de M.C.E.L., para o caso no qual a distribuição de cargas toca somente um dos eletrodos.

As equações que apresentaremos a seguir são consequência direta do método das características. (ver referências (1) e/ou (2)).

-Campo elétrico ao longo de uma linha de corrente

$$E'(x'(t')) = \frac{1}{\mu} \frac{dx'(t')}{dt'}$$

-Linha de corrente $x(t)$

$$x'(t') = x_0 + \mu E'(x_0, 0)t' + \frac{\mu}{\epsilon} \int_0^{t'} dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 J(t'_2)$$

Observe que a linha de corrente é caracterizada pela sua posição inicial x_0 e pela velocidade inicial $\mu E(x_0, 0)$.

-Densidade de carga ao longo de uma linha de corrente

$$\rho'(x', t') = \frac{\rho'(x_0, 0)}{1 + \rho'(x_0, 0)t'}$$

Como é mostrado na referência (2), podemos trabalhar em unidades reduzidas, com os seguintes fatores de conversão:

$$x = \frac{x'}{d} ; \quad \rho = \frac{\rho'}{\rho_0} ; \quad t = \frac{\mu \rho_0}{\epsilon} t'$$

$$E = \frac{\epsilon}{d\rho_0} E' \quad e \quad J = \frac{\epsilon}{\mu\rho_0^2 d} J'$$

Neste caso as equações anteriores tomam a forma:

- Equações básicas

$$\frac{\partial E(x,t)}{\partial x} = \rho(x,t) \tag{1.1}$$

$$- \frac{\partial J_c(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} \tag{1.2}$$

$$J_c(x,t) = \rho(x,t)E(x,t) \tag{1.3}$$

$$J(t) = \rho(x,t)E(x,t) + \frac{\partial E(x,t)}{\partial t} \tag{1.4}$$

- Do método das características

$$E(x,t) = \frac{dx(t)}{dt} \tag{1.5}$$

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = J(t) \tag{1.6}$$

$$x(t) = x_0 + E(x_0,0)t + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 J(t_2) \tag{1.7}$$

$$\rho(x,t) = \frac{\rho(x_0,0)}{1+\rho(x_0,0)t} \tag{1.8}$$

É interessante notar que caso a mobilidade seja dependente do tempo, poderemos tratar o problema de maneira idêntica ao caso de $\mu = \text{constante}$, observando que:

com $\mu(t) = \mu_0 f(t)$, a equação da continuidade fica

$$- \frac{\partial}{\partial x'} (\mu_0 \rho'(x',t')E'(x',t')) = \frac{\partial \rho'(x',t')}{f(t') \partial t'} ,$$

definindo t^* , tal que:

$$\frac{\partial t^*}{\partial t} = f(t'), \text{ então teremos}$$

$$- \frac{\partial}{\partial x'} (\mu_0 \rho'(x', t') E'(x', t')) = \frac{\partial \rho'(x', t')}{\partial t^*} \quad \text{ou,}$$

$$- \frac{\partial}{\partial x'} (\mu_0 \rho'(x', t^*) E'(x', t^*)) = \frac{\partial \rho'(x', t^*)}{\partial t^*}, \quad \text{assim}$$

$$J_c(x', t^*) = \mu_0 \rho'(x', t^*) E'(x', t^*), \text{ com } J(t^*) = J(t)/f(t).$$

e as equações 1.1 até 1.8 serão as mesmas que para o caso de μ constante. A única mudança é o tempo que agora será t^* e tal que,

$$t^* = \int f(t) dt = g(t) \quad \text{se } t=0, \text{ então } t^*=0.$$

Através deste procedimento pode-se, a partir da solução do problema de M.C.E.L. com mobilidade constante, obter-se diretamente a solução para o caso de uma mobilidade dependente do tempo $\mu(t)$, por simples substituição de t^* por $g(t)$.

Outra observação importante é que pela simples análise dos fatores de conversão de unidades, pode-se estabelecer o teorema geral abaixo:

TEOREMA

A carga total que circula no circuito externo é independente da mobilidade dos portadores

$$Q'_{\text{ext}}(\infty) = \int_0^{\infty} J'(t') dt' \quad \text{ou} \quad Q'_{\text{ext}}(\infty) = \int_0^{\infty} d\rho J(t) dt$$

Cálculo de $J(t)$

Substituindo (1.1) em (1.4) e integrando entre 0 e 1 com a condição de contorno:

$$\int_0^1 E(x, t) dx = V(t) \quad (1.9)$$

teremos diretamente

$$J(t) = \frac{1}{2} (E^2(1, t) - E^2(0, t)) + \dot{V}(t) \quad (1.10)$$

Sendo $V(t)$ conhecido, resta-nos determinar $E(1,t)$ e $E(0,t)$ para termos $J(t)$.

Os dados do problema são: a distribuição inicial de cargas e a condição de contorno ($V(t)$).

O problema estará resolvido, quando conseguirmos relacionar grandezas referentes ao tempo t , com grandezas definidas no tempo inicial ($t=0$). É justamente neste ponto que o método das caracte-rísticas torna-se fundamental.

-Definição das funções $y(t)$ e $z(t)$

$y(t)$ = coordenada inicial daquelas cargas que após o tempo t estarão em $x=0$.

$z(t)$ = coordenada inicial daquelas cargas que após o tempo t estarão em $x=1$.

Note que $y(t)$ e $z(t)$ não descrevem linhas de corrente.

-Exemplo ilustrativo das funções $y(t)$ e $z(t)$, para $V(t) = 0$.

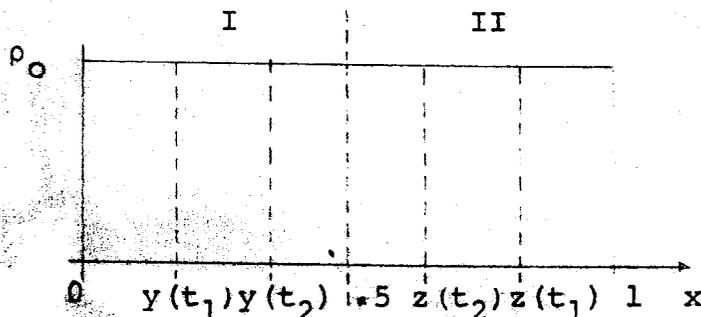
Para uma distribuição uniforme de carga (ρ_0)

- Região I

É descrita pela função $y(t)$

- Região II

É descrita pela função $z(t)$



Percebe-se imediatamente que neste como em qualquer outro caso

$y(0) = 0$; corresponde ao ponto $x=0$

$z(0) = 1$; corresponde ao ponto $x=1$

Para o caso em questão temos que $y(\infty)=z(\infty)=0,5$, isto é, para um tempo muito grande as cargas que chegam as placas em $x=0$ e $x=1$ provieram das vizinhanças de $x=0,5$.

Como o valor do campo elétrico é simétrico em relação ao ponto $x=0,5$ é fácil notar que:

$$y(t) + z(t) = 1 \text{ para todo } t.$$

A relação acima vale para qualquer distribuição simétrica em relação a $x=0,5$.

É conveniente ressaltar que a posição do plano de campo nulo somente coincide com $y(\infty)=z(\infty)$, quando a distribuição tiver simetria em relação a $x=0,5$ supondo-se que não ocorra inversão de corrente.

I-2 PROCEDIMENTO DE RESOLUÇÃO DO PROBLEMA

Dividiremos em duas partes:

- A) Cálculo de $J(t)$ como função de $y(t)$ e $z(t)$
- B) Obtenção do sistema de equações diferenciais que determinam $y(t)$ e $z(t)$

- A) Cálculo de $J(t)$ como função de $y(t)$ e $z(t)$

Integrando a equação (1.6) entre 0 e t teremos:

$$E(x(t), t) - E(x(0), 0) = \int_0^t J(t) dt \quad (1.11)$$

Aplicando as definições de $y(t)$ e $z(t)$ em (1.11) e adotando a notação simplificada

$$E(y(t), 0) = E(y) \quad \text{e} \quad E(z(t), 0) = E(z), \text{ teremos:}$$

$$E(0,t) - E(y) = \int_0^t J(t) dt \quad (1.12)$$

$$E(1,t) - E(z) = \int_0^t J(t) dt \quad (1.13)$$

Observe que para t tendendo a infinito as equações (1.11) e (1.12) reduzem-se a:

$$E(y) = E(z) = - \int_0^{\infty} J(t) dt \quad \text{se } V(t) = 0 \quad (1.13a)$$

pois, $E(0, \infty) = E(1, \infty) = 0$ desde que em $t \rightarrow \infty$ todas as cargas já se escoaram.

Para $t \rightarrow \infty$ $y(\infty) = z(\infty)$, que é o valor superior para $y(t)$ e o valor inferior para $z(t)$.

Subtraindo as equações (1.12) e (1.13) obtemos:

$$E(0,t) - E(1,t) = E(y) - E(z) \quad (1.14)$$

De posse da equação (1.14), resta-nos somente exprimir $E(1,t)$ ou $E(0,t)$ como função de $y(t)$ e $z(t)$.

-Obtenção de $E(1,t)$ em termos de $y(t)$ e $z(t)$

Integrando por partes a condição de contorno (1.9) teremos:

$$E(1,t) = \int_0^1 x \rho(x,t) dx + V(t) \quad (1.15)$$

Usando a definição das funções $y(t)$ e $z(t)$ na equação da linha de corrente (1.7),

$$0 = y + E(y)t + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 J(t_2) \quad (1.16)$$

$$e$$

$$l = z + E(z)t + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 J(t_2) \quad (1.17)$$

Subtraindo (1.7) das (1.16) e (1.17) respectivamente, teremos:

$$x(t) = x_0 - y + (E(x_0) - E(y))t \quad (1.18)$$

e

$$x(t) = l + x_0 - z + (E(x_0) - E(z))t \quad (1.19)$$

diferenciando (1.18) ou (1.19) em relação a x_0 teremos:

$$dx = (1 + \rho(x_0)t) dx_0 \quad (1.20)$$

ou $\rho(x,t)dx = \rho(x_0)dx_0$ que representa a conservação da carga entre duas linhas de corrente.

Utilizando a expressão da densidade de carga ao longo de uma linha de corrente (1.8), com as equações (1.19) e (1.20) substituídas em (1.15) teremos:

$$E(l,t) = \int_y^z [x_0 - y + (E(x_0) - E(y))t] \rho(x_0) dx_0 + V(t)$$

que pode ser integrada nos dando:

$$E(l,t) = V(y) - V(z) + E(z) [z - y - t(E(y) + E(z))] + \frac{t}{2} [E^2(y) - E^2(z)] + V(t)$$

$$\text{para } V(y) = \int_0^y E(y) dy \quad \text{e} \quad V(z) = \int_0^z E(z) dz$$

Subtraindo (1.18) de (1.19) obtemos:

$$l = z - y - t(E(y) - E(z)) \quad (1.21)$$

logo,

$$E(l, t) = V(y) - V(z) + E(z) + \frac{t}{2} [E^2(y) - E^2(z)] + V(t) \quad (1.22)$$

Com (1.14), vem diretamente que:

$$E(0, t) = V(y) - V(z) + E(y) + \frac{t}{2} [E^2(y) - E^2(z)] + V(t) \quad (1.23)$$

Substituindo (1.21) e (1.23) na equação (1.10) da corrente total, teremos finalmente:

$$J(t) = (E(z) - E(y)) \left[V(y) - V(z) + V(t) + \frac{t}{2} (E(z) + E(y) + \frac{t}{2} (E^2(z) - E^2(y))) \right] \quad (1.24)$$

Dada uma distribuição inicial $\rho(x_0)$, teremos então diretamente $\rho(y)$ e $\rho(z)$ e poderemos calcular $E(y)$, $E(z)$, $V(y)$ e $V(z)$, para a condição de contorno estabelecida.

Resta-nos ainda determinar as funções $y(t)$ e $z(t)$.

B) Obtenção das equações diferenciais para as funções $y(t)$ e $z(t)$

Derivando (1.12) e (1.13) em relação ao tempo e utilizando a equação de Poisson (1.1) teremos:

$$\frac{dE(0, t)}{dt} = \rho(y) \frac{dy}{dt} + J(t)$$

$$\frac{dE(l, t)}{dt} = \rho(z) \frac{dz}{dt} + J(t)$$

Com as equações de corrente total

$$J(t) = \rho(0,t)E(0,t) + \frac{dE(0,t)}{dt}$$

e

$$J(t) = \rho(1,t)E(1,t) + \frac{dE(1,t)}{dt}$$

obtemos:

$$\rho(0,t)E(0,t) = -\rho(y) \frac{dy}{dt} \quad (1.25)$$

e

$$\rho(1,t)E(1,t) = -\rho(z) \frac{dz}{dt} \quad (1.26)$$

Da evolução temporal da densidade de carga ao longo de uma linha de corrente vem:

$$\rho(0,t) = \frac{\rho(y)}{1+\rho(y)t}$$

e

$$\rho(1,t) = \frac{\rho(z)}{1+\rho(z)t}$$

e assim,

$$\frac{dy}{dt} = - \frac{E(0,t)}{1+\rho(z)t}$$

Substituindo $E(0,t)$ e $E(1,t)$ em função de y e z teremos:

$$\frac{dy}{dt} = - \frac{1}{1+\rho(y)t} \left\{ V(y) - V(z) + E(y) + \frac{t}{2} [E^2(y) - E^2(z)] + V(t) \right\} \quad (1.27)$$

e

$$\frac{dz}{dt} = - \frac{1}{1+\rho(z)t} \left\{ V(y) - V(z) + E(z) + \frac{t}{2} [E^2(y) - E^2(z)] + V(t) \right\} \quad (1.28)$$

Resolvendo o sistema de equações diferenciais (1.27) e (1.28), determinaremos as funções $y(t)$ e $z(t)$, para cada tempo de chegada, dos portadores, às placas.

Pode-se determinar o perfil da distribuição de cargas, para cada t fixado, utilizando

$$\rho(x,t) = \frac{\rho(x_0)}{1+\rho(x_0)t} \quad (1.8) , \text{ a definição de } y(t) \text{ ou } z(t) \text{ e res-}$$

pectivamente a expressão da linha de corrente (1.18) ou (1.19).

Fica assim conhecida, ao menos formalmente, a solução exata, para qualquer problema de M.C.E.L., quando forem dados a distribuição inicial e a d.d.p. externa para todos os tempos.

I-3 RESUMO DE COMO TRATAR PROBLEMAS DE M.C.E.L., TENDO COMO DADOS, A DISTRIBUIÇÃO INICIAL $\rho(x_0)$ QUE TOCA OS DOIS ELETRÓDIOS E A D.D.P. EXTERNA

a) Com o conhecimento de $\rho(x_0)$ teremos diretamente $\rho(y)$ e $\rho(z)$, por simples troca de x_0 por y e z respectivamente.

b) Tendo $\rho(y)$ e $\rho(z)$ calcula-se $E(y)$, $E(z)$, $V(y)$ e $V(z)$ para a condição de contorno estabelecida ($V(t)$).

c) Resolvendo numericamente o sistema de equações diferenciais (1.27) e (1.28) teremos as funções $y(t)$ e $z(t)$.

d) Com o conhecimento de $y(t)$ e $z(t)$, usando (1.24) obtemos diretamente $J(t)$.

e) O perfil da distribuição de cargas é determinado por (1.8), através da definição de $y(t)$ ou $z(t)$ e respectivamente (1.18) ou (1.19).

I-4 COMPARAÇÃO COM O PROBLEMA EM QUE A DISTRIBUIÇÃO TOCA INICIALMENTE UM DOS ELETRODIOS

O problema de M.C.E.L. quando a distribuição inicial - mente toca um dos eletrodios foi resolvido na referência (2). Encontraram-se equações que podem ser escritas como:

$$J(t) = (E(s_0) - E(y)) [P(y, s_0, t) + (s-1/2)E(s_0) + 1/2 E(y)]$$

$$E(1, t) = P(y, s_0, t) + s E(s_0) \quad (a)$$

$$E(0, t) = P(y, s_0, t) + (s-1) E(s_0) + E(y)$$

$$\frac{dy}{dt} = [P(y, s_0, t) + (s-1)E(s_0) + E(y)] \frac{(-1)}{1+\rho(y)t}$$

onde,

$$P(y, s_0, t) = V(y) - V(s_0) + \frac{t}{2} (E^2(y) - E^2(s_0))$$

s_0 = posição inicial da frente

$s = s(t)$ = posição da frente ao tempo t

As equações correspondentes para o caso em que a distribuição, inicialmente toca os dois eletrodos são:

$$J(t) = (E(z) - E(y)) \left[P(y, z, t) + \frac{1}{2} E(z) + \frac{1}{2} E(y) \right]$$

$$E(1, t) = P(y, z, t) + E(z)$$

$$E(0, t) = P(y, z, t) + E(y) \quad (b)$$

$$\frac{dy}{dt} = - \frac{E(0, t)}{1 + \rho(y) t}$$

$$\frac{dz}{dt} = - \frac{E(1, t)}{1 + \rho(z) t}$$

onde,

$$P(y, z, t) = V(y) - V(z) + \frac{t}{2} (E^2(y) - E^2(z))$$

Comparando as equações (a) com as (b), observa-se que para o tempo t_c (t_c = tempo de chegada da frente à placa), fazendo a substituição $s_0 = z$ e $s(t_c) = 1$ o conjunto de equações (a) ficará idêntico ao conjunto (b) a menos da equação diferencial para z , que não existe em (a).

Conclui-se então, que se iniciarmos com uma distribuição que toca somente um dos eletrodos, poderemos obter a solução completa do problema com o seguinte artifício:

Resolve-se o conjunto de equações (a) como indicado na referência (2), até $t = t_c$. Alcançado este tempo passamos a utilizar z no lugar de s_0 , sendo que z será dado por:

$$\frac{dz}{dt} = - \frac{E(l,t)}{1+p(z)t}$$

Podemos então conhecer a solução completa do problema do M.C.E.L.

CAPÍTULO II

APLICAÇÕES DA TEORIA GERAL DO M.C.E.L.

Neste capítulo faremos aplicações da teoria geral anteriormente desenvolvida.

Consideraremos as seguintes distribuições iniciais:

1. Distribuição linear $\rho(x) = a + bx$, com $a=1$ e $b=-1$
2. Distribuição exponencial $\rho(x) = e^{bx}$ com $b=-1$
3. Distribuição do tipo $\rho(x) = \frac{j}{[E_0^2 + 2jx]^{1/2}}$, com $E_0=0$
e $j=9/8$.

Trataremos os casos acima somente para a condição de descarga em curto circuito.

Como pode-se notar das equações (1.27, 1.28 e 1.29) a introdução de uma dada $V(t)$ não altera o procedimento de cálculo, por isso escolhemos a situação mais simples ($V=0$).

Após a obtenção dos gráficos (em unidades reduzidas) de $y \times t$, $z \times t$, $J \times t$ e $\rho(x) \times x$ para vários tempos, fazemos um gráfico comparativo, para todos os casos acima, de $J(t) \times t$, escolhendo a carga total inicial como parâmetro comum.

II-1 DISTRIBUIÇÃO LINEAR

Distribuição inicial: $\rho(x_0) = a + bx_0$

Condição de contorno: $V(t) = 0$

Seguindo o procedimento sugerido no resumo do capítulo anterior teremos:

1. $\rho(y) = b+ay$ e $\rho(z) = b+az$
2. sob a condição de contorno de $V=0$, vem:

$$E(y) = \frac{a}{2} y^2 + by - \frac{1}{2} (b + \frac{a}{3})$$

$$E(z) = \frac{a}{2} z^2 + bz - \frac{1}{2} (b + \frac{a}{3})$$

$$V(y) = \frac{a}{6} y^3 + \frac{1}{2} by^2 - \frac{1}{2} (b + \frac{a}{3}) y$$

$$V(z) = \frac{a}{6} z^3 + \frac{1}{2} bz^2 - \frac{1}{2} (b + \frac{a}{3}) z$$

3. utilizando as equações (1.27) e (1.28) com:

$$P(y,z,t) = V(y) - V(z) + \frac{t}{2} (E^2(y) - E^2(z))$$

$$E(0,t) = P(y,z,t) + E(y)$$

$$E(1,t) = P(y,z,t) + E(z)$$

assim,

$$\frac{dy}{dt} = - \frac{E(0,t)}{1+\rho(y)t} \quad e \quad \frac{dz}{dt} = - \frac{E(1,t)}{1+\rho(z)t}$$

integrando o sistema de equações diferenciais ordinárias acima, teremos $y(t)$ e $z(t)$.

4. com a equação (1.29) obtemos diretamente $J(t)$ para cada t

$$J(t) = \frac{1}{2} (E^2(1,t) - E^2(0,t))$$

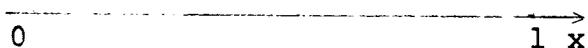
Teremos também $\rho(x,t) \times x$ para cada tempo que desejarmos, utilizando a equação (1.8)

$$\rho(x,t) = \frac{\rho(x_0)}{1 + \rho(x_0)t}, \text{ a equação da linha de corrente (1.18) } x(t) =$$

$$= x_0 - y + (E(x_0) - E(y))t \text{ e a definição da função } y.$$

A distribuição $\rho(x) = 1 - x$

$$1 \quad \rho(x)$$



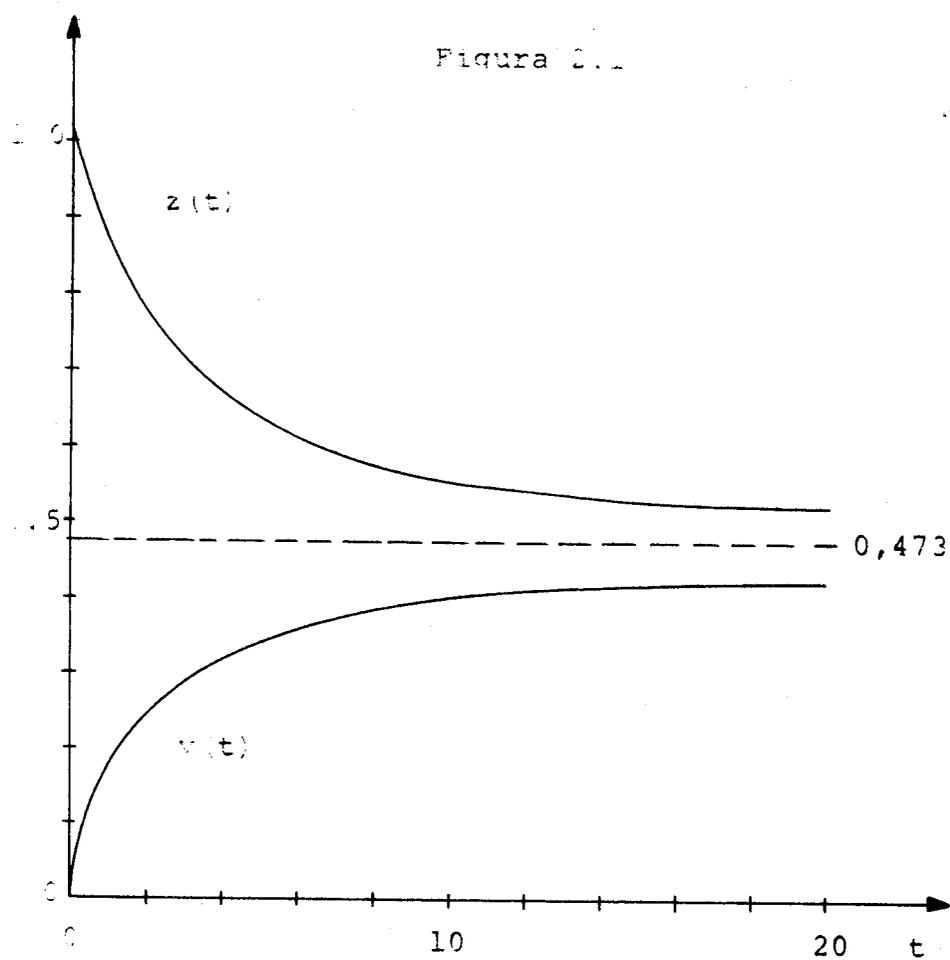
nos dará os gráficos que apresentaremos a seguir:

A Figura 2.1 ilustra as funções $y(t)$ e $z(t)$, a Figura 2.2 a densidade de corrente $J(t) \times t$ e a Figura 2.3 o perfil de densidade de corrente $\rho(x,t)$ para alguns tempos fixados.

É conveniente observar a lenta convergência de y e z para um ponto comum, de tal maneira que $y(\infty) = z(\infty)$.

A equação geral (1.13a) $E(y) = E(z) = -\int_0^t J(t)dt$ quando $t \rightarrow \infty$, pode ser verificada com boa aproximação, calculando-se $Q(t) = \int_0^t J(t)dt$ para t suficientemente grande.

Notemos do gráfico 2.2 que $Q(t)$ converge rapidamente, ao menos em relação à convergência dos y e z . Tomando-se $t=20$, como sendo um tempo suficientemente grande, teremos uma precisão de ao menos 3 algarismos significativos. Assim,



2.1 Representa as funções $y(t)$ e $z(t)$ para a distribuição inicial $c(x) = 1-x$

$$Q(20) \approx -0,0276$$

então,

$$E(y) = \frac{1}{2} y^2 + y - \frac{2}{3} = -0,0276, \text{ logo}$$

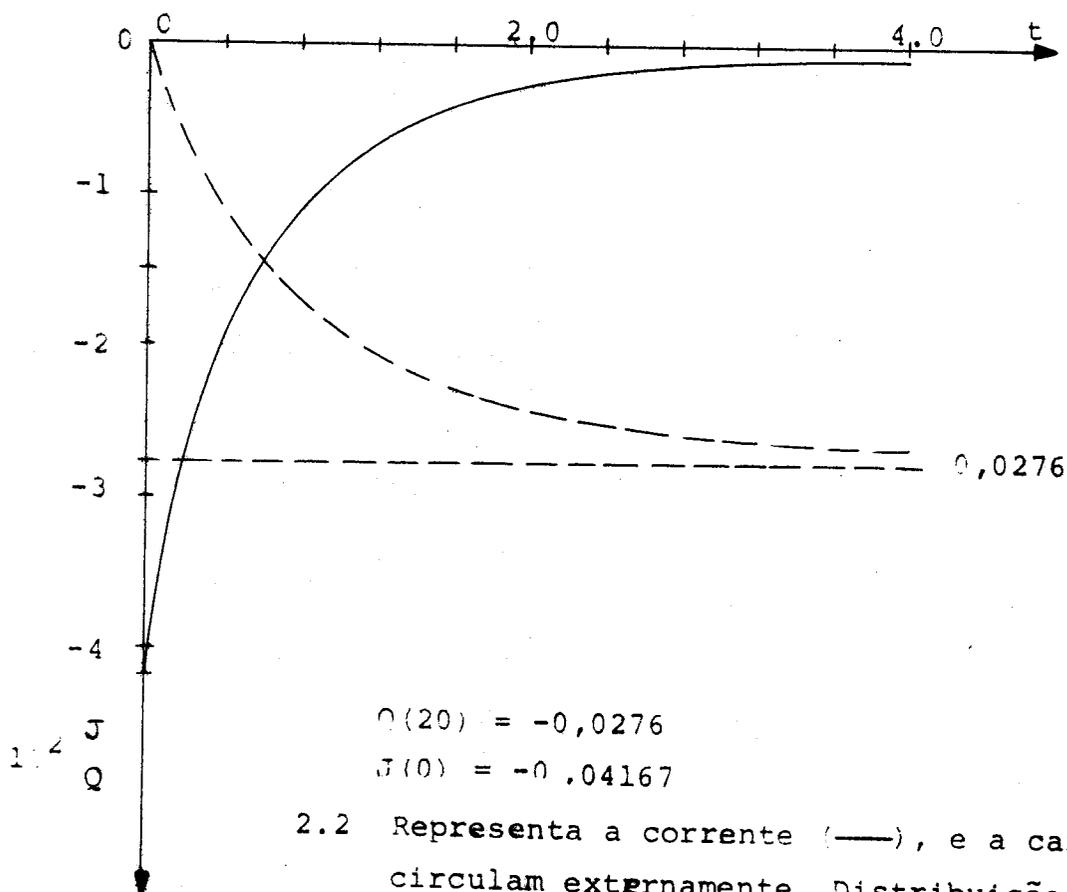
$$y(\infty) = z(\infty) \approx 0,473$$

o que concorda plenamente com a convergência observada no gráfico 2.1.

É curioso notar que apesar de $Q(t)$ ser calculado a par-

tir de valores de $y(t)$ e $z(t)$, a relação (1.13) nos dará o valor futuro (em $t \rightarrow \infty$) de y e z , utilizando $Q(t)$ para tempos não muito grandes.

Figura 2.2



O perfil da densidade de carga para vários valores do tempo é mostrado na Figura 2.3. A rápida convergência do perfil para uma distribuição quase uniforme concorda com a variação da densidade de corrente, como era esperado.

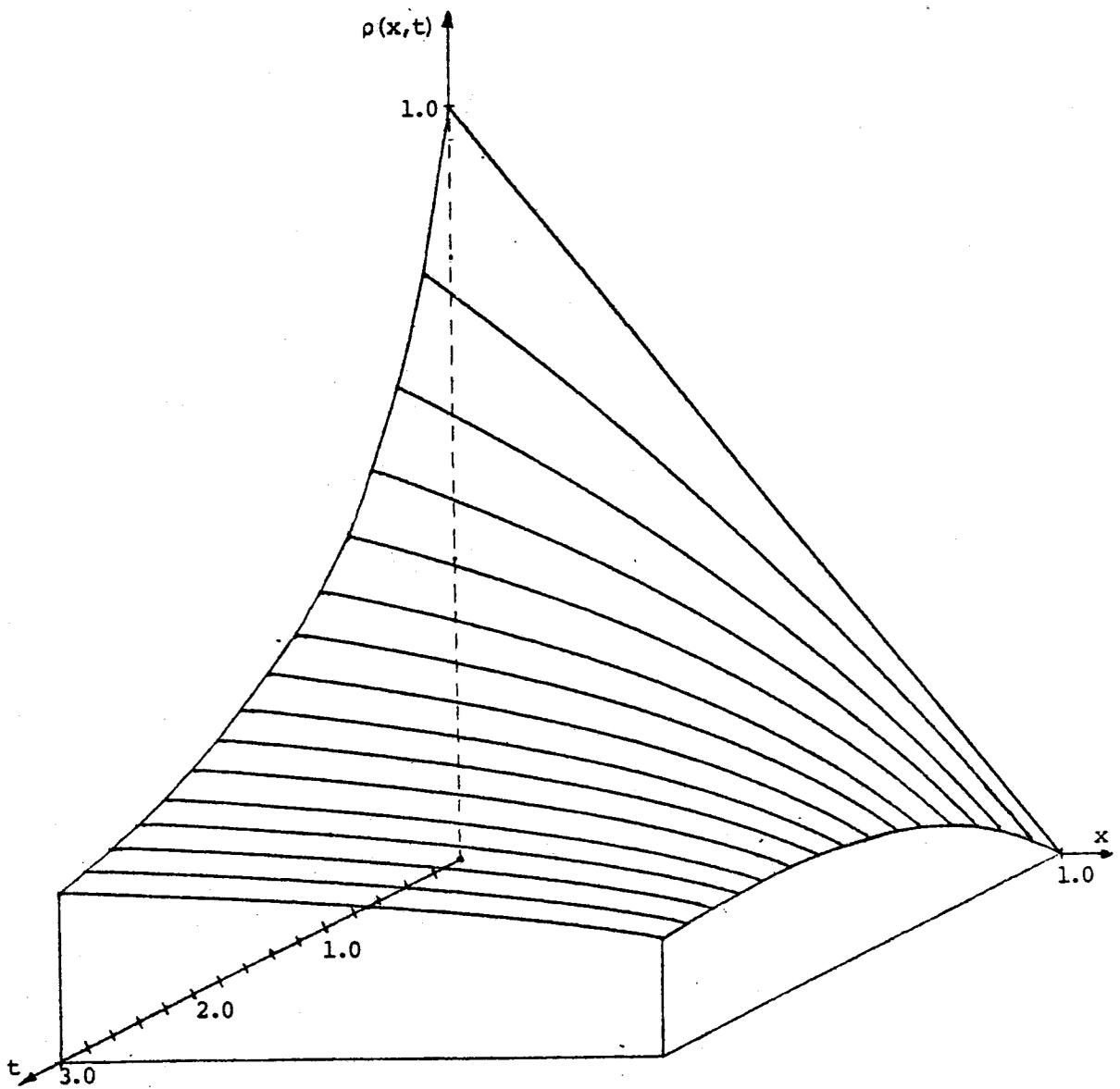


Figura 2.3

2.3 Representa a evolução da distribuição inicial $\rho(x) = 1-x$.

II.2 DISTRIBUIÇÃO EXPONENCIAL

Distribuição inicial: $\rho(x_0) = e^{bx_0}$

Condição de contorno: $V(t) = 0$

Através do procedimento seguido anteriormente obtemos:

$$\rho(y) = e^{by} \quad ; \quad \rho(z) = e^{bz}$$

$$E(y) = \frac{1}{b} e^{by} + \frac{1}{b^2} (1 - e^{-b})$$

$$E(z) = \frac{1}{b} e^{bz} + \frac{1}{b^2} (1 - e^{-b})$$

$$V(y) = \frac{1}{b^2} e^{by} + \frac{1}{b^2} (1 - e^{-b})y - \frac{1}{b^2}$$

$$V(z) = \frac{1}{b^2} e^{bz} + \frac{1}{b^2} (1 - e^{-b})z - \frac{1}{b^2}$$

$$P(y, z, t) = V(y) - V(z) + \frac{t}{2} (E^2(y) - E^2(z))$$

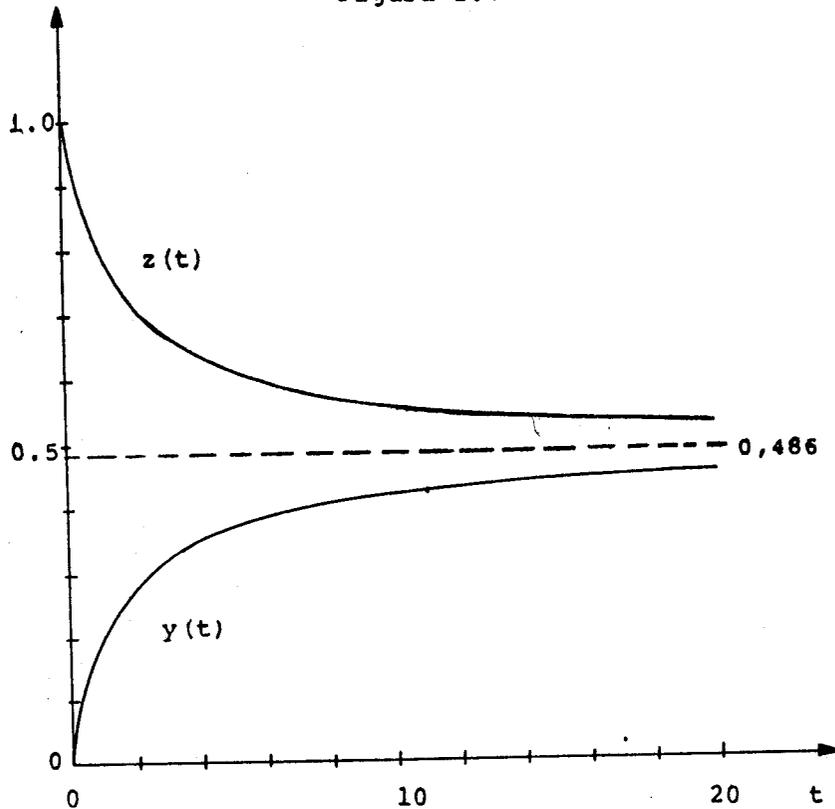
$$E(0, t) = P(y, z, t) + E(y)$$

$$E(1, t) = P(y, z, t) + E(z)$$

$$\frac{dy}{dt} = - \frac{E(0, t)}{1 + \rho(y)t} \quad e \quad \frac{dz}{dt} = - \frac{E(1, t)}{1 + \rho(z)t}$$

A solução do sistema de equações diferenciais ordinárias acima nos dará o gráfico 2.4.

Figura 2.4



2.4 Representa as funções $y(t)$ e $z(t)$ para a distribuição inicial $\rho(x) = e^{-x}$.

Teremos também a densidade de corrente $J(t) = 1/2 (E^2(1,t) - E^2(0,t))$, como é ilustrado na Figura 2.5.

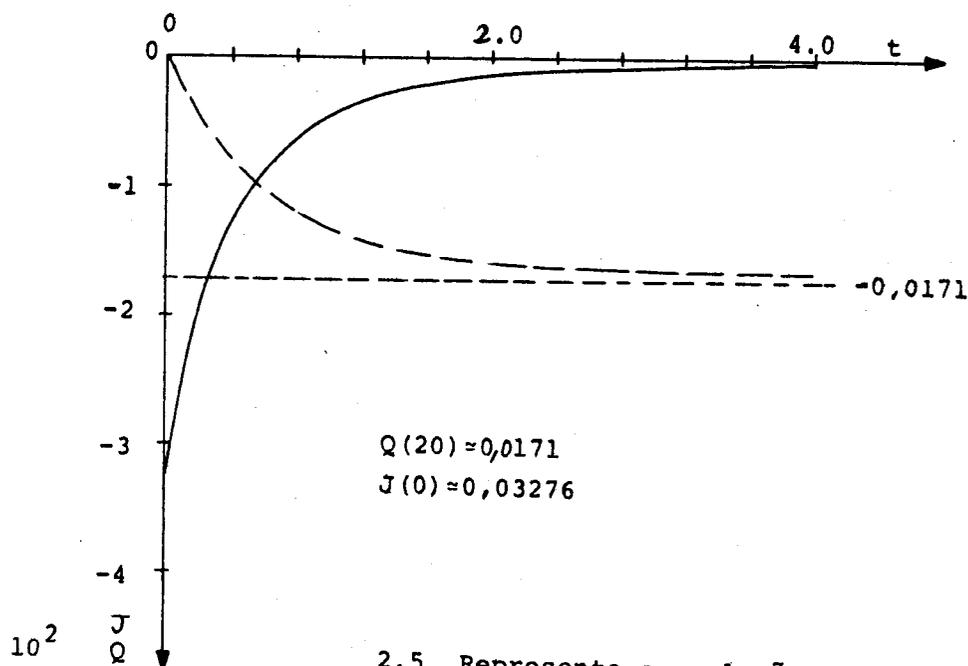
Para esta distribuição a carga externa total terá o valor,

$$Q(\infty) \approx Q(20) \approx -0,0171$$

Então a relação (1.13a) nos dará $-e^{-y} + 1 - 1/2 = 0,0171$, resultando em $z(\infty) = y(\infty) \approx 0,486$, valor que concorda bastante bem com o esperado pela observação do gráfico 2.4.

O perfil da densidade de cargas, para alguns tempos fixados, é dado na Figura 2.6. Observa-se também neste caso a rápida ten

Figura 2.5



2.5 Representa a evolução temporal da corrente (—), e da carga (---) que circulam externamente. Para a distribuição inicial $\rho(x) = e^{-x}$

dência do perfil para a distribuição praticamente uniforme.

II.3 DISTRIBUIÇÃO DO TIPO $\rho(x_0) = \frac{j}{[E_0^2 + 2jx]^{1/2}}$

Em geral a distribuição inicial de cargas não pode ser conhecida; um caso em que isto não acontece é o exemplo discutido nesta secção.

Para um material de condutividade nula e livre de traps. Sob voltagem aplicada, após a corrente elétrica através do material atingir valor estacionário, teremos:

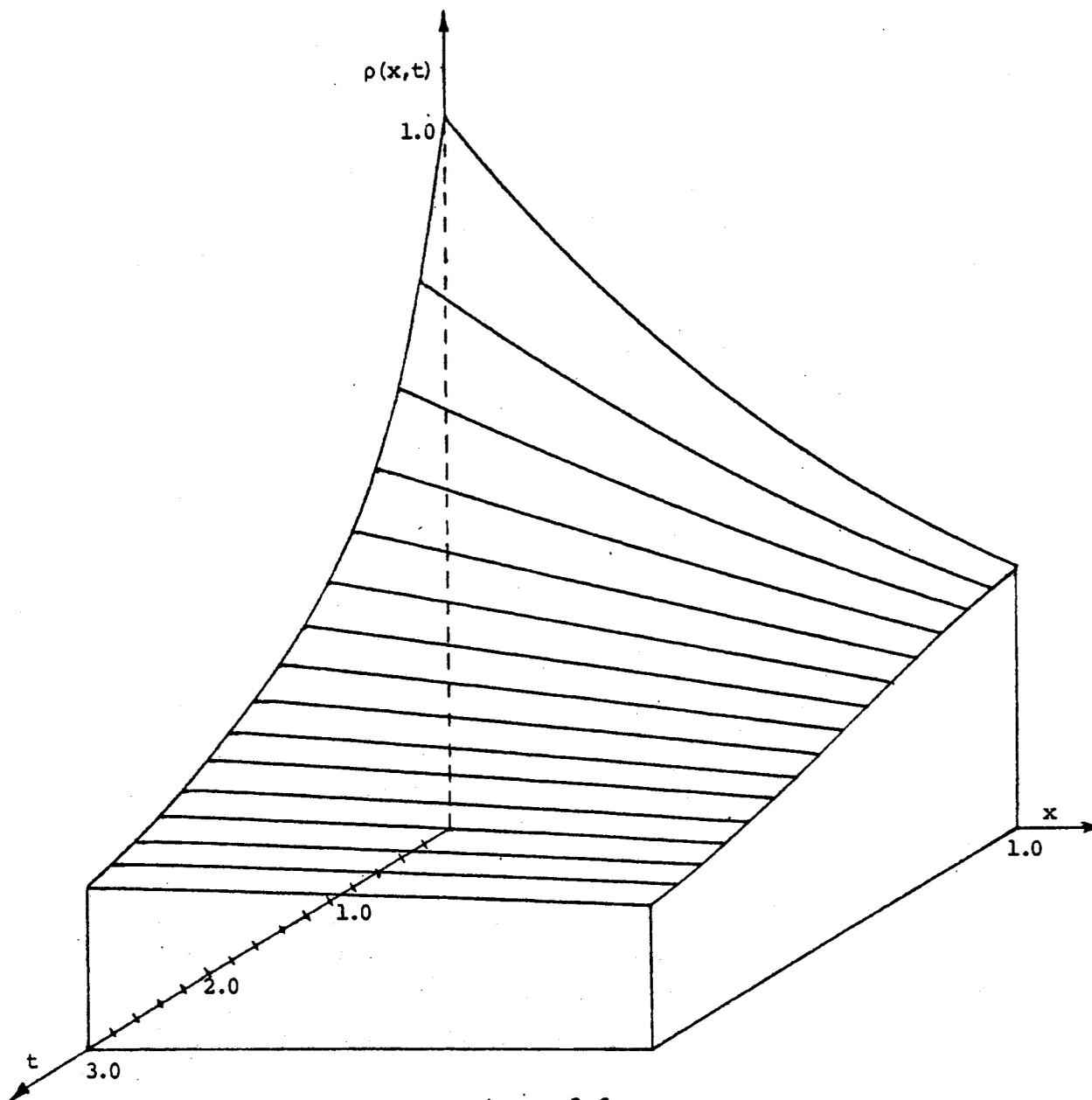


Figura 2.6

2.6 Representa a evolução do perfil da densidade de carga.
Distribuição inicial $\rho(x) = e^{-x}$.

$$j = \rho(x) E(x)$$

$$\frac{dE(x)}{dx} = \rho(x)$$

em unidades reduzidas.

Com as equações acima e fazendo a integração com a condição de contorno de $E(0)=E_0$ vem:

$$E(x) = (E_0^2 + 2jx)^{1/2}$$

e

$$\rho(x) = \frac{j}{[E_0^2 + 2jx]^{1/2}}$$

O valor de j fica determinado com a condição: $\int_0^1 E(x) dx = 1$ que nos

leva a

$$j^2 + \frac{12E_0^2 - 9}{8} j + \frac{3}{4} E_0^3 (E_0 - 1) = 0$$

Devemos considerar somente a raiz positiva da equação acima.

Determinamos assim a distribuição estacionária para qualquer valor de E_0 dado.

Consideraremos a condição $E_0=0$, ou seja, contato ôhmico em $x=0$, conseqüentemente $j=9/8$. (lei de Child para sólidos)⁽³⁾

O principal interesse no estudo deste caso, reside no fato de que a distribuição corresponde àquela estacionária, obtida pela injeção de cargas, a partir de um eletrodo ôhmico, num material sem "traps", sendo portanto ao menos em princípio, acessível à verificação experimental.

Trataremos do problema de M.C.E.L. para a distribuição

$$\rho(x_0) = \frac{j}{|E_0^2 + 2jx_0|^{1/2}} \text{ com } E_0 \text{ qualquer, contudo serão apresentados so-}$$

mente os resultados para $E_0=0$.

Através do procedimento adotado nos exemplos anteriores, para a condição de curto circuito, obtemos:

$$\rho(y) = \frac{j}{[E_0^2 + 2jy]^{1/2}} \quad ; \quad \rho(z) = \frac{j}{[E_0^2 + 2jz]^{1/2}}$$

$$E(y) = [E_0^2 + 2jy]^{1/2} - 1$$

$$E(z) = [E_0^2 + 2jz]^{1/2} - 1$$

$$V(y) = \frac{1}{3j} \{ (E_0^2 + 2jy)^{3/2} - 3jy - E_0^3 \}$$

$$V(z) = \frac{1}{3j} \{ (E_0^2 + 2jz)^{3/2} - 3jz - E_0^3 \}$$

com $E_0=0$ e $j=9/8$ a distribuição inicial torna-se $\rho(x_0)=3/4 x^{-1/2}$.

Seguindo os mesmos passos das seções II-1 e II-2 obtemos os gráficos de $y, z, J(t)$ e $\rho(x, \tau)$ que serão mostrados a seguir.

Convém observar que para esta distribuição surge uma indeterminação em $t=0$ na equação

$$\frac{dy}{dt} = - \frac{E(0, t)}{1 + \frac{3}{4} y^{-1/2} t} . \quad \text{Porém podemos facilmente levantar tal inde-}$$

terminação e encontrar os $\left. \frac{dy}{dt} \right|_{t=0} = 1$. Na integração numérica simples-

mente inicia-se de $t=0$ e um $y(0)$ muito pequeno. Deve-se ter o cuidado, ao menos para tempos pequenos, de tomar acréscimos muito

pequenos na integração numérica, porque os pontos iniciais são bastante críticos.

Como era esperado a verificação da equação (1.13a) é satisfatória.

Encontramos que a carga externa total converge para $Q(\infty) \approx -0,0443$ (ver gráfico 2.8). Este valor conduzirá a $y(\infty) = z(\infty) \approx 0,484$ que está de acordo com a convergência observada no gráfico 2.7.

A evolução do perfil de cargas é dada na figura 2.9.

- Avaliação da ordem de grandeza da mobilidade dos portadores injetados

Observando que para $t \rightarrow 1$ a corrente já começou a variar pouco, e atingiu menos de 2% do valor inicial, pode-se ter uma ideia da mobilidade dos portadores. Para isto observa-se os fatores de conversão de unidades

$$t' = \frac{\epsilon}{\mu \rho_0} t \quad \text{e} \quad J'(t') = \frac{\mu \rho_0^2 d}{\epsilon} J(t)$$

e estima-se o valor de mobilidade μ , de tal maneira que as curvas, teórica e experimental ajustem da melhor maneira possível.

- Critério para estudo da condição de contato ôhmico

Com o conhecimento de $Q(\infty) = \int_0^{\infty} J(t) dt$, e o fator de transformação de unidades

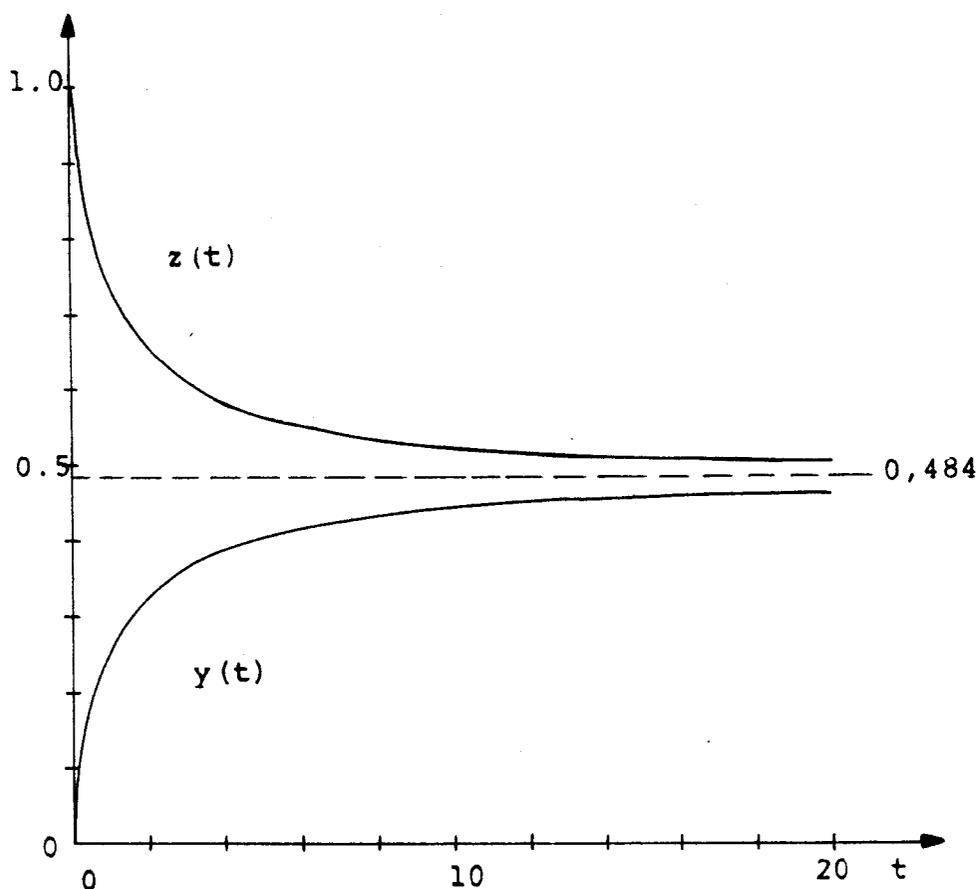
$$Q'(t') = \rho_0 d Q(t)$$

ou

$$Q'(t') = \left(\frac{\epsilon}{d}\right) VQ(t) = Q(t) \frac{C}{A} V$$

podemos obter uma indicação se a condição de contato ôhmico foi adequada. Para isso medimos $Q'(\infty)$ para vários valores de $\left(\frac{V}{d}\right)$ e traçamos o gráfico correspondente, que deve ser uma reta com coefici-

Figura 2.7



2.7 Representa as funções $y(t)$ e $z(t)$ para a distribuição $c(x) = \frac{3}{4} x^{-1/2}$.

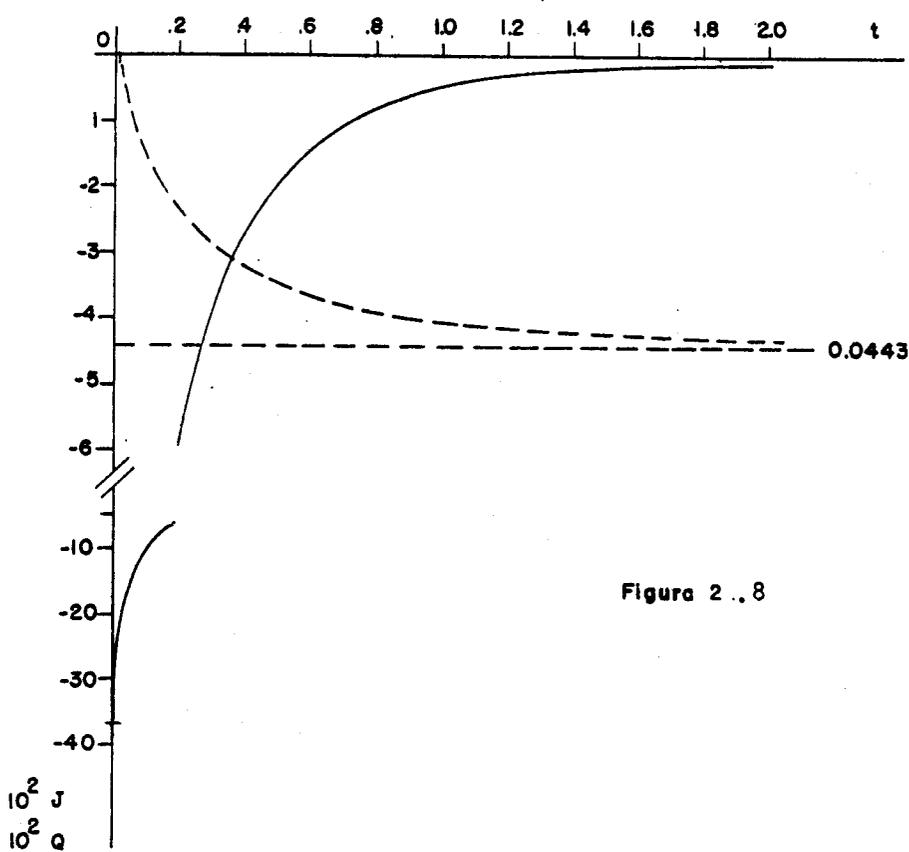


Figura 2.8

2.8 Representa a evolução temporal da corrente (—) e da carga (---) que circulam externamente. Para a distribuição inicial $\rho(x) = \frac{3}{4} x^{-1/2}$

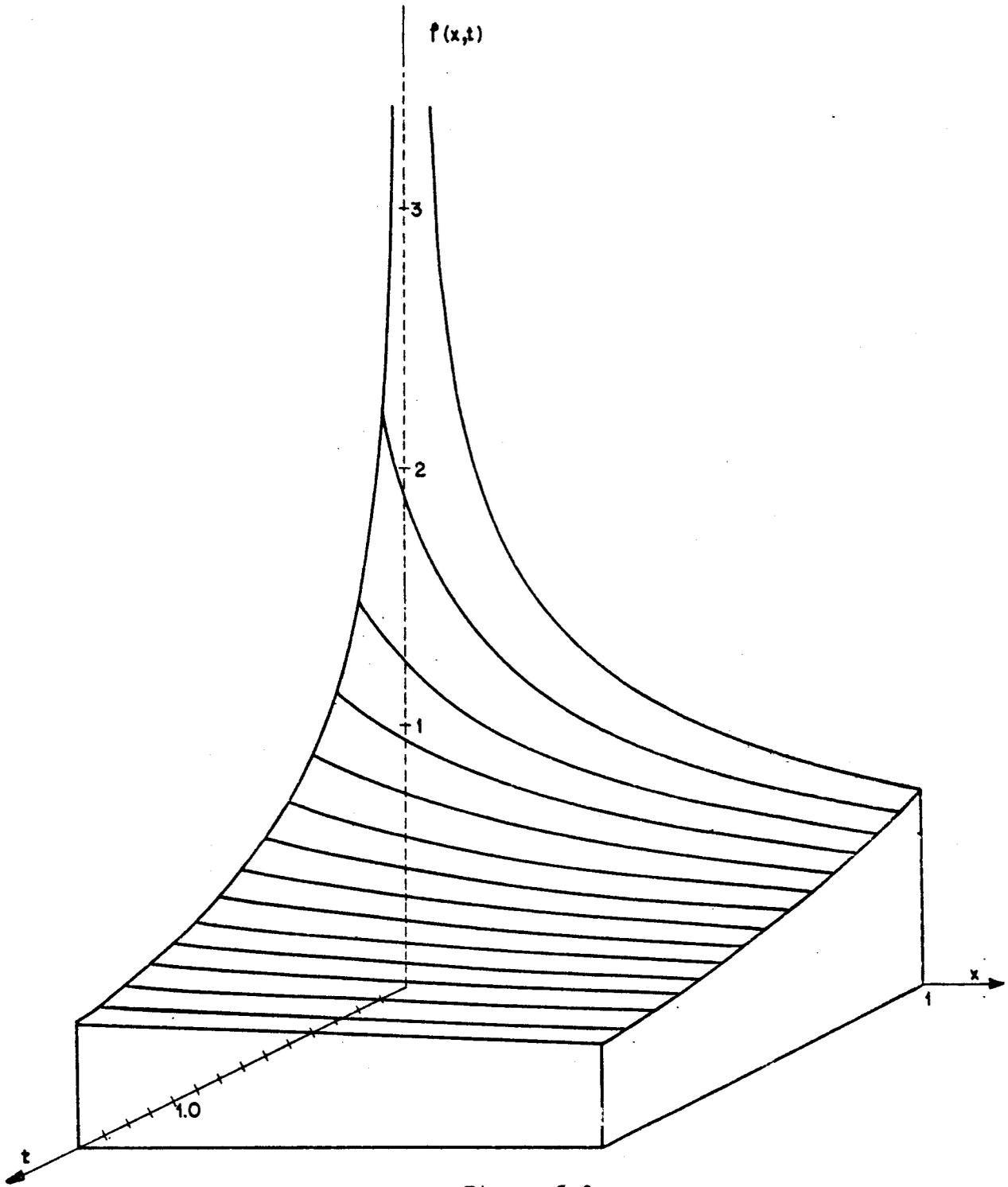


Figura 2.9

2.9 Representa a evolução do perfil da densidade de carga, para a distribuição inicial $\rho(x) = \frac{3}{4} x^{-1/2}$.

ente angular igual a $\epsilon Q(\infty)$.

$Q'(\infty)$ = carga externa total, se a amostra é posta em curto, após ter atingido o regime estacionário na injeção.

Considerando as distribuições do tipo

$$\rho(x) = \frac{j}{|E_0^2 + 2jx|^{1/2}}$$

nota-se que o maior valor para $J(0)$, bem como para carga externa total se dará com $E_0 = 0$.

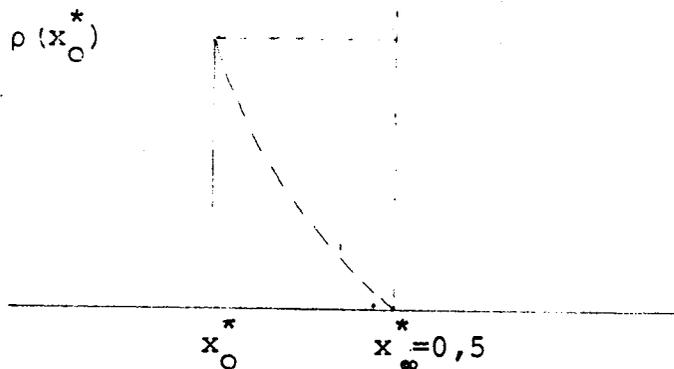
Lindmayer, citado na referência (4) faz a seguinte aproximação:

$$Q(\text{externo}) < \rho(x_0^*) (x_\infty^* - x_0^*) \quad \text{para curto circuito}$$

x_0^* = posição do plano de campo nulo no tempo $t=0$

x_∞^* = posição do plano de campo nulo no tempo $t=\infty$

$$(x_\infty^* = 0,5)$$



Apresentamos a seguir uma tabela comparativa entre os valores da carga externa, segundo a aproximação de Lindmayer e o cálculo exato.

	DISTRIBUIÇÃO	LINEAR	EXPONENCIAL	TIPO $\rho(x) = \frac{j}{ E_0^2 + 2jx ^{1/2}}$	
		$\rho(x) = 1-x$	$\rho(x) = e^{-x}$	$E_0 = 0$	$E_0 = 0,5$
Carga total que circula externamente	Aproximação Lindmayer	0,0447	0,0260	0,0625	0,0290
	Exato	0,0276	0,0128	0,0441	0,0197
Posição do plano de campo nulo em $t=0$		0,4226	0,4587	0,4444	0,4641

Comentário:

A aproximação de Lindmayer⁽⁴⁾ é facilmente entendida mostrando-se que:

$$J(t) = -\rho(x^*, t) \frac{dx^*}{dt}$$

e calculando-se a carga externa total

$$Q_{ext}(total) = \int_0^{\infty} J(t) dt = - \int_{x_0^*}^{x_{\infty}^*} \rho(x^*, t) dx^*$$

Fazendo-se a aproximação $\rho(x^*, t) = \rho(x_0^*)$, então

$$Q_{ext}(total) < \rho(x_0^*) | (x^* - x_0^*) |$$

- Comparação das correntes externas para as distribuições linear, exponencial e $\rho \sim x^{-1/2}$ escolhendo como parâmetro comum a carga total inicial. ($Q_T = 0,5$)

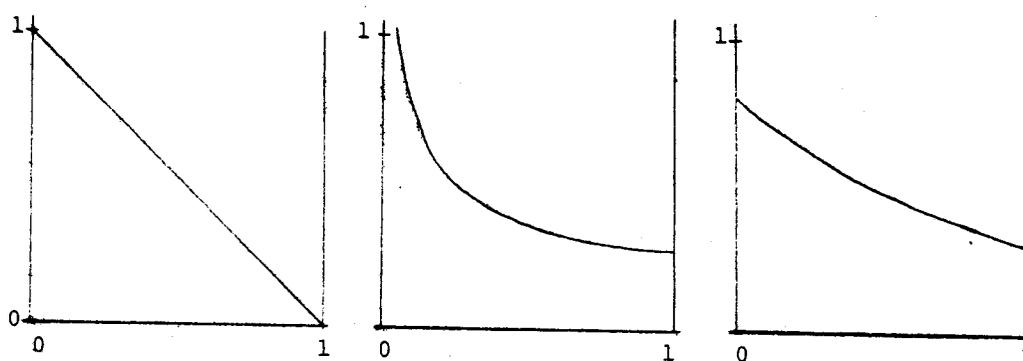
Assim, os perfis da carga inicial serão:

Linear: $\rho(x) = 1-x$

Exponencial: $\rho(x) = 0,791 e^{-x}$

Tipo $x^{-1/2}$: $\rho(x) = \frac{1}{3} \frac{3}{4} x^{-1/2}$

Distribuições Iniciais com mesma Carga Total $Q_T = 0,5$



Linear

$\rho(x) = 1 - x$

Do tipo $x^{-1/2}$

$\rho(x) = \frac{1}{4} x^{-1/2}$

Exponencial

$\rho(x) = 0,791 e^{-x}$

A construção do gráfico comparativo 2.10 é feita diretamente dos gráficos 2.2, 2.5 e 2.8, observando os fatores de conversão de j' e t' para unidades reduzidas,

$$j' = \frac{\mu \rho_0^2 d}{\epsilon} j \quad e \quad t' = \frac{\epsilon}{\mu \rho_0} t$$

Imediatamente concluímos que a transformação deve ser feita escrevendo

$$j^* = K^2 j \quad e \quad t' = t/K, \quad \text{onde,}$$

$$K=1 \rightarrow \text{linear} \quad ; \quad K=0,791 \rightarrow \text{exponencial} \quad ; \quad K=\frac{1}{3} \rightarrow \text{tipo } x^{-1/2}$$

Gráfico Comparativo - Carga Total Inicial $Q_T = 0,5$

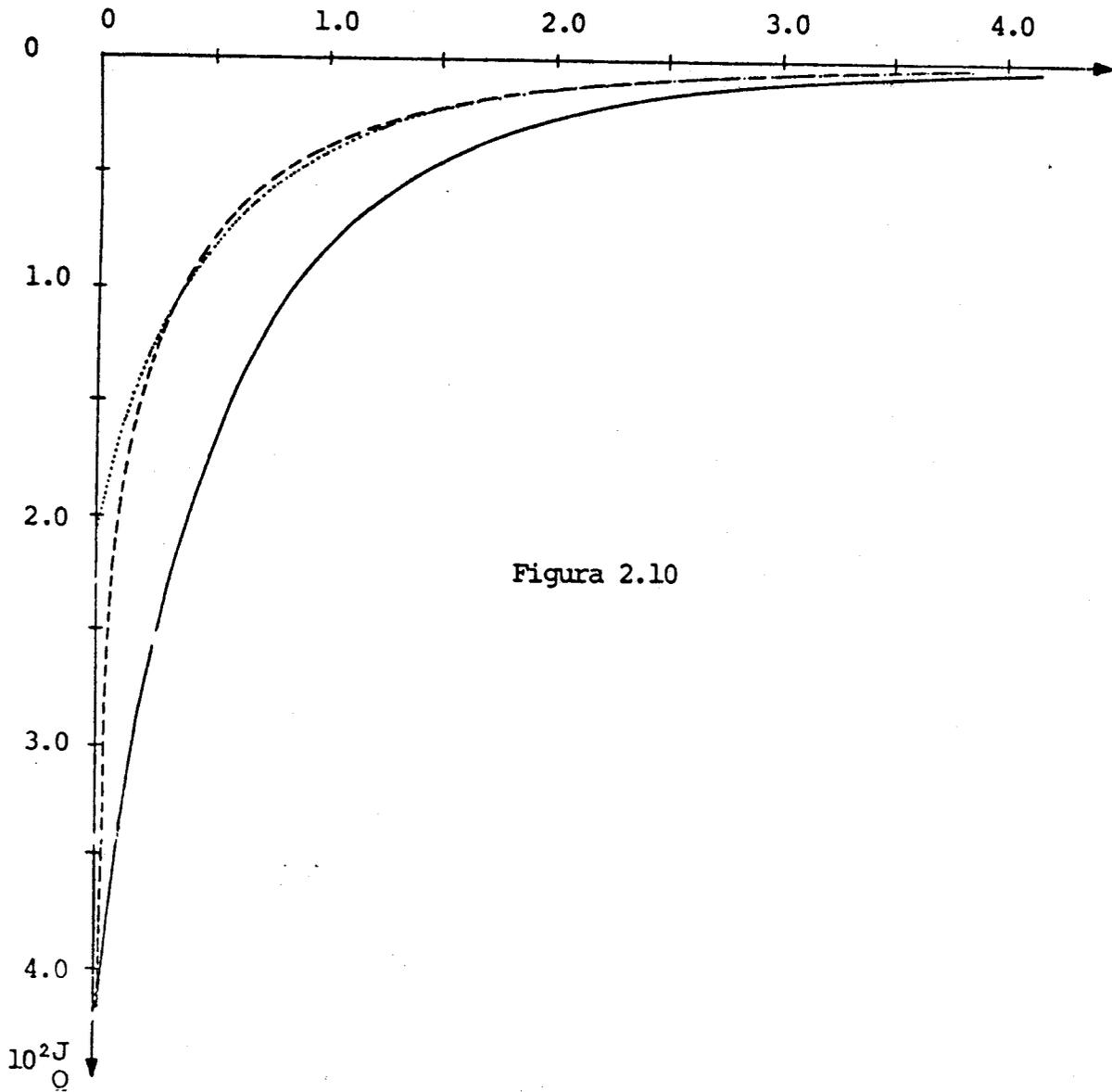


Figura 2.10

2.10 Representa a corrente externa para as distribuições

(—) Linear $\rho(x) = 1 - x$

(..) Exponencial $\rho(x) = 0,791 e^{-x}$

(---) Tipo $x^{-1/2}$ $\rho(x) = \frac{1}{4} x^{-1/2}$

CAPÍTULO III
MÉTODO VARIACIONAL

INTRODUÇÃO

Nos capítulos anteriores tratamos o problema do M.C.E.L. e encontramos soluções exatas. Podemos agora analisar cálculos aproximados, mais simples, e compará-los com os resultados exatos.

Um método particularmente simples e interessante, é o sugerido no apêndice da monografia citada na referência (26). Este cálculo baseia-se no conceito de trabalho virtual⁽²⁷⁾, trasladado para a linguagem da análise funcional⁽²⁸⁾.

Faremos uma breve descrição do método e posteriormente aplicaremos ao caso das distribuições linear e exponencial.

III-1 O MÉTODO

Consideremos, por exemplo, um campo escalar,

$$\rho = \rho(x_1, x_2, \dots, x_n, t) \quad (1)$$

função de n variáveis x_i e t , admitindo que este campo escalar seja governado pela equação,

$$G(\rho, x_i, t) = 0 \quad (2)$$

onde a relação (2) pode representar uma função ou uma equação diferencial, de um tipo bastante geral.

Multiplicando a equação (2) pela variação arbitrária (virtual) $\delta\rho$ e integrando o resultado sobre o volume V no espaço das n variáveis x_i , obtemos:

$$\int_V G(\rho, x_i, t) \delta\rho dV = 0 \quad (3)$$

onde, $dV = dx_1, dx_2 \dots dx_n$.

Para variações arbitrárias $\delta\rho$, a equação (3) não garante que (2) seja verificada em todos os pontos. Na terminologia matemática diz-se que ela é verificada em quase todos os pontos. Isto quer dizer que o conjunto de pontos para os quais ela não é verificada tem medida nula.

A equação (3) pode ser interpretada geometricamente es crevendo-se $G=\epsilon$, onde o valor ϵ de G pode ser considerado como um vetor no espaço funcional.

Podemos escrever

$$\int_V \epsilon \delta\rho dV = 0 \tag{4}$$

A integral pode ser considerada como o produto escalar no espaço funcional, dos dois vetores ϵ e $\delta\rho$.

ϵ também representa o erro da equação $G(\rho, x_1, t)=0$.

Na linguagem do espaço funcional, interpreta-se a equação $G=\epsilon$, dizendo-se que a projeção de ϵ em um vetor $\delta\rho$, desaparece para todas as orientações deste vetor.

Uma generalização imediata será escrever,

$$\int_V G(\rho, x_1, t) F(\rho) dV = 0 \tag{5}$$

onde F é uma função de ρ .

Mais geralmente F pode ser uma expressão diferencial contendo ρ .

No contexto acima abordado o método dos mínimos quadrados reduz-se a um caso particular onde $F=G$.

Assim,

$$I = \int_V \epsilon^2 dV = \int_V G^2 dV \quad .$$

Impondo a condição de mínimo, teremos

$$\delta I = \int_V G \delta G dV = 0 \tag{6}$$

III-2 APLICAÇÕES AO M.C.E.L.

As equações que regem o M.C.E.L., em unidades reduzidas, são:

$$j_c(x,t) = \rho(x,t)E(x,t) \quad (7)$$

$$\frac{\partial E(x,t)}{\partial x} = \rho(x,t) \quad (8)$$

$$\frac{\partial j_c(x,t)}{\partial x} = - \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} \quad (9)$$

Substituindo as equações (7) e (8) em (9) obtemos:

$$\rho^2 + E \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (10)$$

que é a equação diferencial que governa a variação de ρ com x e t . Seguindo o procedimento indicado na seção III-1 teremos:

$$G(\rho, x, t) = \rho^2 + E \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

$$\int_0^1 (\rho^2 + E \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t}) \delta \rho dx = 0 \quad (11)$$

Se escrevermos $\rho(x,t)$ como uma série de potências em x , tal que,

$$\rho(x,t) = \sum_{n=0}^K x^n a_n(t) \quad (12)$$

$$\delta \rho = \sum_{n=0}^K x^n \delta a_n(t)$$

poderemos com o conhecimento da Condição de Contorno que determi-

na $E(x,t)$, obter um sistema de $K+1$ equações diferenciais ordinárias.

Seja o caso de curto circuito ($V(t)=0$), então

$$E(x,t) = \sum_{n=0}^K \frac{a_n}{n+1} \left(x^{n+1} - \frac{1}{n+2} \right) \quad (13)$$

Substituindo-se (12) e (13) em (11) e levando em conta que os $\delta a_n(t)$ são arbitrários, teremos

$$\int_0^1 \left\{ \sum_{n,m}^K \left[a_n a_m \left(\frac{m+n+1}{n+1} x^{n+m} - \frac{m x^{m-1}}{(n+1)(n+2)} \right) + \overset{0}{a}_n x^n \right] \right\} \sum_n^K x^n dx = 0 \quad (14)$$

onde, $\overset{0}{a}_n = \frac{\partial a_n}{\partial t}$.

É interessante observar que a equação (14) representa a imposição, de que os momentos de ordem zero até K , de G se anulem. Este fato é consequência direta da expansão em série de potências.

Integrando e igualando cada parcela a zero, teremos como termo geral:

$$\sum_{n,m}^K \left\{ a_n a_m \left[\frac{m+n+1}{(n+1)(n+m+j)} - \frac{m}{(n+1)(n+2)(n+j-1)} \right] + \frac{\overset{0}{a}_n}{n+j} \right\} = 0 \quad (15)$$

onde, $j=1,2,3 \dots K+1$.

Cada valor de j resulta em uma equação diferencial. Podemos então construir diretamente de (15) o sistema de $K+1$ equações diferenciais ordinárias e acopladas.

A equação (15) resultará em equações do tipo

$$\sum_{n=0}^K \frac{\overset{0}{a}_n}{n+1} = A_1 (a_0, a_1, \dots, a_K) \quad j=1$$

$$\sum_{n=0}^K \frac{\overset{0}{a}_n}{n+2} = A_2 (a_0, a_1, \dots, a_K) \quad j=2$$

$$\sum_{n=0}^K \frac{a_n^0}{n+K+1} = A_{K+1}(a_0, a_1, \dots, a_K) \quad j=K+1$$

que constitui em um sistema de equações lineares nos a_n^0 e portanto pode ser separado em equações como,

$$\begin{aligned} a_0^0 &= B_1(a_0, a_1, \dots, a_K) \\ a_1^0 &= B_2(a_0, a_1, \dots, a_K) \\ a_K^0 &= B_{K+1}(a_0, a_1, \dots, a_K) \end{aligned} \quad (16)$$

Resolvendo o sistema de equações (16) para um determinado K, teremos:

$$\rho(x, t) = \sum_{n=0}^K a_n(t) x^n$$

Os valores iniciais $a_n(0)$ podem ser determinados por qualquer método de ajuste de polinômios à curvas dadas. Utilizaremos o método variacional descrito acima para tais ajustes.

Uso do método variacional para determinação dos valores iniciais $a_n(0)$.

Dada uma distribuição inicial $f(x)$, então, escreve-se

$$G = \sum_{n=0}^K x^n a_n(0) - f(x) = 0, \text{ assim, a equação (3) conduzirá a :}$$

$$\int_0^1 \left[\sum_{n=0}^K x^n a_n(t) - f(x) \right] \sum_{n=0}^K x^n \delta a_n(t) = 0 \quad (17)$$

que após integrarmos ficaremos com um sistema de equações lineares, nos $a_n(0)$, de K+1 equações e K+1 incógnitas. Resolvendo-se o sistema encontramos os $a_n(0)$.

Aplicação ao caso K=2.

Escrevendo $a_0=a$, $a_1=b$ e $a_2=c$ então,

$$\rho(x,t) = a(t) + b(t)x + c(t)x^2 \quad (18)$$

Usando (15) podemos após algumas manipulações algébricas chegar facilmente a:

$$\begin{aligned} \dot{a}(t) &= -9 \left[A - 4B + \frac{10}{3} C \right] \\ \dot{b}(t) &= 36 \left[A - \frac{16}{3} B + 5C \right] \\ \dot{c}(t) &= -30 [A - 6(B - C)] \end{aligned} \quad (19)$$

onde,

$$\begin{aligned} A &= a^2 + \frac{1}{3} b^2 + \frac{1}{4} c^2 + ab + \frac{5}{3} ac + \frac{7}{12} bc \\ B &= \frac{a^2}{2} + \frac{7b^2}{24} + \frac{2}{9} c^2 + \frac{3}{4} ab + \frac{2}{3} ac + \frac{37}{72} bc \\ C &= \frac{a^2}{3} + \frac{11}{45} b^2 + \frac{11}{50} c^2 + \frac{7}{12} ab + \frac{4}{9} bc + \frac{11}{20} ac \end{aligned}$$

Daqui para frente o problema consistirá em fixar a distribuição inicial e, então, integrarmos o sistema (19), que nos dará a evolução da distribuição $\rho(x,t)$, através do ajuste para cada t , dos parâmetros $a(t)$, $b(t)$ e $c(t)$.

Estamos interessados especialmente nos resultados relativos a corrente externa. Desde que o perfil da densidade de cargas, para todo tempo é dado por (18), então é fácil mostrar que:

$$j(t) = \frac{1}{12} \left| \frac{b^2}{2} + \frac{c^2}{3} + ab + ac + \frac{5}{6} bc \right| \quad (20)$$

- Distribuição Linear $\rho(x) = 1-x$

Os valores iniciais são obtidos de maneira trivial, pois a distribuição dada já está na forma de polinômio, assim,

$$a(0) = 1 \quad ; \quad b(0) = -1 \quad e \quad c(1) = 0$$

Integrando o sistema de equações (19), com os valores iniciais acima, obtemos o perfil da distribuição

$$\rho(x,t) = a(t) + b(t)x + c(t)x^2 \text{ para cada tempo.}$$

Utilizando (20) obtêm-se $j(t)$. O gráfico comparativo é mostrado na fig. 3.1 e observa-se uma ótima concordância com os resultados exatos.

- Distribuição exponencial $\rho(x,0) = e^{-x}$

$$\text{Aproximação } \rho(x,t) = a(t) + b(t)x + c(t)x^2$$

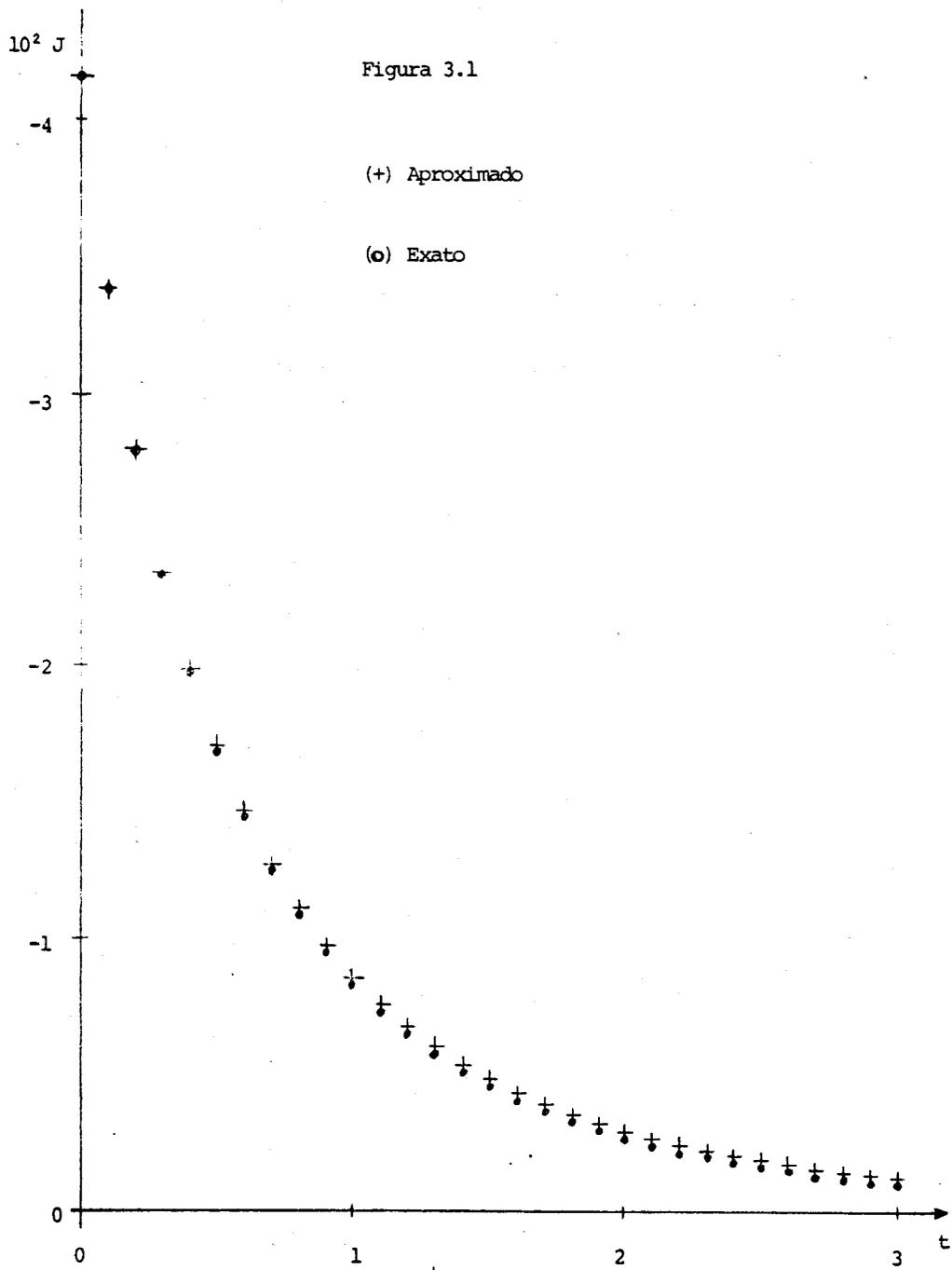
Utilizando a equação (17), onde $f(x) = e^{-x}$, encontra-se

$$a(0) \approx 0,9945$$

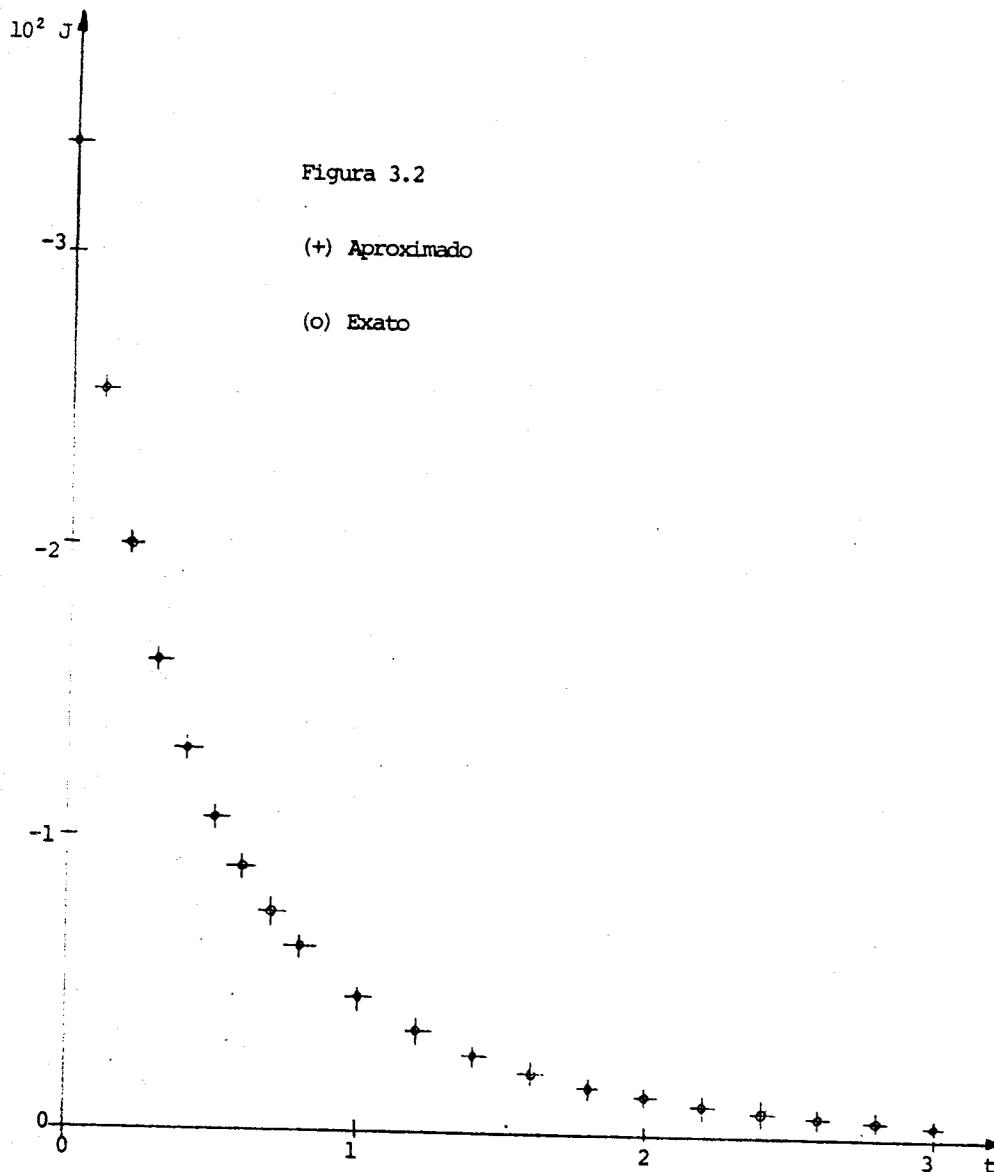
$$b(0) \approx -0,9306$$

$$c(0) \approx 0,3087$$

Integrando-se o sistema de equações (19) com os valores iniciais acima, obtemos uma excelente concordância entre o cálculo exato e o aproximado, para a corrente externa, como é ilustrado na Fig. 3.2.



3.1 Comparação entre a solução exata e a aproximação $\rho(x,t)=a(t)+b(t)x+c(t)x^2$.
Em $t = 3$, teremos: $J(\text{exato})/J(\text{aprox.}) = 0,12$



3.2 Comparação entre a solução exata ($\rho=e^{-x}$) e a aproximação $\rho(x,t) = a(t) + b(t)x + c(t)x^2$. Em $t = 3, J(\text{aprox.})/J(\text{exato})=0,003$

COMENTÁRIOS GERAIS

Procuraremos nesta secção discutir alguns aspectos gerais do presente trabalho, relacionando-o na medida do possível, com a literatura já existente.

É conhecido^(16,17) o fato de que um dielétrico, com certa distribuição interna de cargas livres, em excesso, fará circular externamente, sob condição de curto circuito, uma carga total que independe da mobilidade dos portadores, se um dos eletrodos for bloqueante para a saída destes.

Sob este aspecto o teorema estabelecido no capítulo 1 (página 5) é uma generalização de tal resultado. O teorema estabelece que a carga externa total, que circulará sob condição de curto circuito, será independente da mobilidade dos portadores, quando ambos os eletrodos aceitam toda a carga liberada pelo dielétrico. Contudo faz-se a restrição de que a mobilidade seja independente da posição.

Com relação às funções $y(t)$ e $z(t)$, é relevante ressaltar que a coordenada correspondente ao valor $y(\infty) = z(\infty)$, determina a quantidade total de carga que deverá atravessar cada um dos eletrodos.

Como exemplo citaremos o caso da distribuição inicial $\rho(x) = \frac{3}{4} x^{-1/2}$. Neste caso $y(\infty) = z(\infty) \approx 0,484$, como ficou determinado pela relação $E(y(\infty)) = E(z(\infty)) = -\int_0^{\infty} J(t) dt$.

O exemplo é ilustrado na figura que segue.

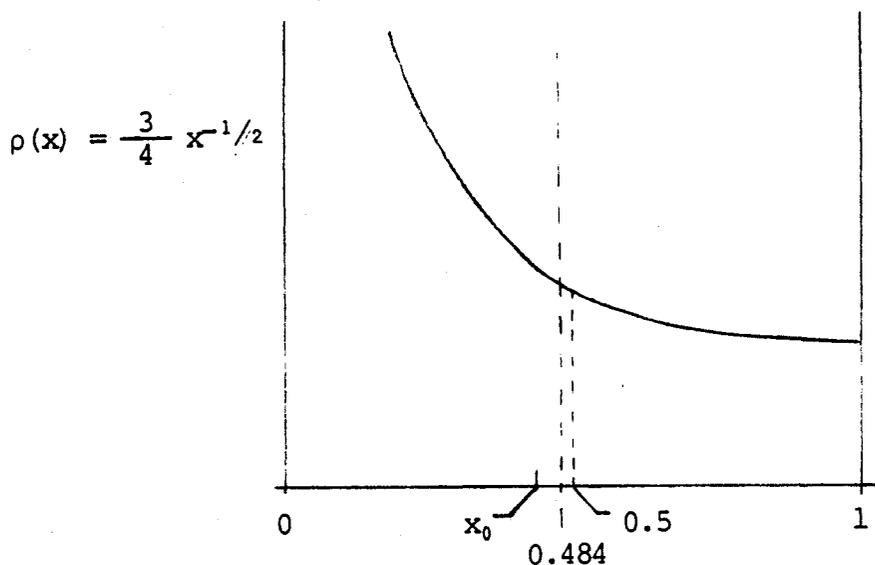
A carga contida na região 1 escoará através do eletrodo da esquerda, o restante sairá pelo eletrodo oposto.

As cargas correspondentes às regiões 1 e 2 serão:

$$Q_1 \approx 1,035$$

$$Q_2 \approx 0,465$$

Recentemente Gibbons (1974)⁽¹⁸⁾, calculou a carga que circularia externamente, sob condição de curto circuito, para a distri-



$x_0 = 4/9$, posição do plano de campo nulo inicial.

buição $\rho \sim x^{-1/2}$. Gibbons supôs que toda a carga à esquerda do plano de campo nulo inicial ($x_0 = 4/9$), escoaria pelo eletrodo em $x = 0$ e a carga à direita sairia pelo eletrodo em $x = 1$.

O resultado obtido por Gibbons, está em contradição com o teorema geral que estabelece, que na ausência de difusão, a medida da corrente e cargas externas é nula, se, como está implícito no cálculo de Gibbons, o plano de campo nulo (x_0) permanecer imóvel (4), (19), (20) e (21). Este fato foi comentado por Gross (22) (1974).

Na carta ao editor (22) Gross sugere que no caso de distribuições altamente assimétricas, como $\rho \sim x^{-1/2}$, podemos em primeira aproximação admitir que toda a carga move-se para a esquerda. Os valores exatos da carga que escoará através de cada um dos eletrodos são dados no exemplo acima (Q_1 e Q_2).

Observando os resultados obtidos para $y(\infty) = z(\infty)$, das várias distribuições, pode-se notar que os portadores que inicialmente estiverem entre a posição do plano de campo inicial nulo, e a posição determinada por $y(\infty) = z(\infty)$, movem-se inicialmente para a direita, mas, terminam por sair através do eletrodo em $x = 0$.

Com relação às aplicações da teoria geral do M.C.E.L. ,

o exemplo de maior interesse é aquele da distribuição inicial, determinada pela condição de contacto ôhmico, para a injeção de portadores. ($\rho(x) \sim x^{-1/2}$)

Por exemplo, o trabalho de A. Many, S.Z. Weisz e M. Simhony (1962) ⁽²³⁾, mostra que a condição de contacto ôhmico foi bastante satisfatória em experimentos com Iôdo.

Discutiremos brevemente a possibilidade de medir-se a corrente externa de descarga, sob condições de curto circuito, em tal experimento.

As correntes estacionárias de injeção obtidas na referência (23) foram da ordem de 10^{-5} A/cm². Em unidades reduzidas sabe-se que $j(\infty) = 9/8$ ⁽³⁾ (estacionário), e a corrente inicial de descarga é 1/3 deste valor, portanto, em princípio susceptível a medida com os mesmos instrumentos.

O tempo para o qual praticamente toda a carga externa já escoou, pode ser tomado como $t=4$ quando a corrente externa é da ordem de 0,001% do valor inicial. Assim, para uma das medidas que é mostrada na figura 8 da referência (23) teremos:

$$d = 7,2 \times 10^2 \text{ cm}$$

$$\mu = 0,7 \text{ cm}^2/\text{V.s}$$

$$v = 400 \text{ V}$$

$$j'(\infty) \approx 10^{-5} \text{ A/cm}^2$$

Com estes dados devemos esperar que a corrente externa inicial, devida à descarga em curto circuito seja $J'(0) \approx \frac{1}{3} 10^{-5}$ A/cm². O tempo para que praticamente toda a carga medida externamente já escoou será ($t=4$) $t' = d^2/\mu v t$; $t' \approx 74 \mu\text{s}$ e portanto perfeitamente mensurável através do esquema experimental utilizado em (23).

Um exemplo da corrente externa, sob curto circuito, gerada pela distribuição do tipo

$$\rho(x) = \frac{j}{|E_0^2 + 2jx|^{1/2}}, \quad \text{com } E_0 = 0,5 \text{ e } j = 0,808 \text{ pode ser encon-}$$

trado na referência (24). Paralelamente Zahn (1975) (25) resolveu o problema acima por outro método de integração apresentando resultados relativos à evolução do perfil de cargas e do campo elétrico para condições de curto circuito e de circuito aberto.

A comparação entre os dois métodos será discutida em publicação futura.

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Reestudar o problema da inversão de corrente ⁽²⁾, agora sob voltagem aplicada. Investigar a possibilidade da ocorrência de dupla inversão quando a distribuição toca inicialmente um dos eletrodios.

- Estudo da possibilidade de determinar-se as principais características da distribuição inicial de cargas (carga total , primeiro momento, etc.) através da medida da corrente externa.
O método variacional discutido no capítulo III, parece ser bastante promissor na indicação de tais características.

- Aplicar a teoria geral exata do M.C.E.L. para o cálculo da corrente externa devida a outras distribuições de carga, que possam ser inicialmente conhecidas. Comparar com resultados experimentais, se possível variando a mobilidade dos portadores com o tempo.

- Aplicar o método variacional no estudo de meios com condutividade intrínseca e também ao caso de distribuições tais que uma parte das cargas permanece presa em armadilhas profundas.

BIBLIOGRAFIA

- (1) A.Many and G.Rakavy - Phys.Rev. 126,1980(1962).
- (2) L.E.C. de Almeida - Dissertação de Mestrado (1974)-IFQSC/USP-São Carlos.
- (3) Lampert,M.A. and Mark,P. - Current Injection in Solids - Academic Press (1970)- pg.45.
- (4) Lindmayer,J. - J.Appl.Phys. 36,196(1965).
- (5) J.van Turnhout - Electrets - Edited by M.M.Perlman The Electrochemical So.Inc. pg.230.
- (6) H.Wintle - J.Appl.Phys. 42,4724(1971).
- (7) Ferreira,G.F.L. and B.Gross - Revista Brasileira de Física 2, 205(1972).
- (8) L.N. de Oliveira e G.F.L.Ferreira - Exact Solution with Non - uniform Charge Distributions in Open Circuit. (não publicado)
- (9) Ferreira,G.F.L. and Gross,B. - J.Nonmetals,1,129(1973).
- (10) J.van Turnhout - Tese- Univ.Leiden, Secção 5-5 (1972).
- (11) Chilling,R. and sehachter,H. - J.Appl.Phys. 38,841(1967).
- (12) Adirovich,E.I. and Dubrovskii,L.A. - Sov.Phys.-Dokl, 10,932 (1966).
- (13) Weis,S.Z.; Cobas,A.; Trester,S.; Many A. - J.Appl.Phys. 39,2296, (1968).
- (14) Zahn,M. and Pao, Shing-Chong - J. of Electrostatics (1975) (a ser publicado I).
- (15) Zahn,M. and Pao, Shing-Chong - J. of Electrostatics (1975) (a ser publicado II).
- (16) Gross,B.- J.Appl.Phys., 43,2449(1972).
- (17) Gross,B. - J.Electrochem.Soc.115,376(1968).
- (18) Gibbons,D.J. - (1974) J.Phys.D: Appl.Phys. 7,433.

- (19) Gross, B. and Perlman, M.M. - J. Appl. Phys. 43, 853 (1972).
- (20) Dreyfus, G. and Lewiner, J. - Phys. Rev. B 8, 3032 (1973).
- (21) Gross, B.; Ferreira, G.F.L.; de Oliveira, L.N.; Dreyfus, G. and Lewiner, J. - Phys. Rev. B (15 May, 1974).
- (22) Gross, B. - (1974) - J. Phys. D: Appl. Phys. L 103 (Letter to the Editor).
- (23) Many, A.; Weisz, S.Z. and Simhony, M. - Phys. Rev. 126, 1989 (1962).
- (24) Camargo, P.C. e Ferreira, G.F.L. - Apresentado no Simpósio Internacional de Dielétricos e Eletretos, São Carlos, S.P. 01-08 setembro 1975. Será publicado pelos An. Acad. Brasil. Ci.
- (25) Zahn, M. - Transient Electric Field and space Charge Behavior for Unipolar Ion conduction in Discharging Dielectrics - Trabalho apresentado na Conference on Dielectrics Materials, Measurements and Applications - Cambridge 21-25 July 1975.
- (26) Biot, M.A. - Variational Principles in Heat Transfer, Oxford Mathematical Monographs. (1970), pg. 176.
- (27) Goldstein, H. - Classical Mechanics, Addison-Wesley (1950), Seção 1-4.
- (28) Stark gold, Ivan Boundary Value Problems of Mathematical Phys. Macmillan series in Adv. Math. and Theor. Phys. cap. 8, vol. II.
- (29) L.N. de Oliveira - Dissertação (1975) - IFQSE/USP-São Carlos.
- (30) Rudenko, A.I. - Soviet Phys., Solid State 14, 2706 (1973).
- (31) Zahn, M.; Tsang, Cheung Fung; Pao Shing-Chong - J. Appl. Phys. 45, 2432 (1974).