



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA CHEMICKÁ

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ A SPOTŘEBNÍ CHEMIE

FACULTY OF CHEMISTRY

INSTITUTE OF PHYSICAL AND APPLIED CHEMISTRY

UŽITÍ FRAKTÁLNÍ TEORIE K URČENÍ HUSTOTY ENERGETICKÝCH STAVŮ V ORGANICKÝCH POLOVODIČÍCH

USING OF FRACTAL THEORY FOR THE DETERMINATION OF DENSITY OF ENERGETIC
STATES IN ORGANIC SEMICONDUCTORS

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

PAVEL FLORIÁN

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

prof. Ing. OLDŘICH ZMEŠKAL, CSc.

BRNO 2012



Vysoké učení technické v Brně
Fakulta chemická
Purkyňova 464/118, 61200 Brno 12

Zadání bakalářské práce

Číslo bakalářské práce: **FCH-BAK0685/2011** Akademický rok: **2011/2012**
Ústav: Ústav fyzikální a spotřební chemie
Student(ka): **Pavel Florián**
Studijní program: Chemie a chemické technologie (B2801)
Studijní obor: Spotřební chemie (2806R002)
Vedoucí práce **prof. Ing. Oldřich Zmeškal, CSc.**
Konzultanti:

Název bakalářské práce:

Užití fraktální teorie k určení hustoty energetických stavů v organických polovodičích

Zadání bakalářské práce:

1. Fraktální teorie proudů omezených prostorovým nábojem
2. Volt-ampérové charakteristiky struktur s organickými polovodiči
3. Stanovení energetického rozdělení hustoty stavů v organických polovodičích
4. Diskuse zpracovaných výsledků

Termín odevzdání bakalářské práce: 4.5.2012

Bakalářská práce se odevzdává ve třech exemplářích na sekretariát ústavu a v elektronické formě vedoucímu bakalářské práce. Toto zadání je přílohou bakalářské práce.

Pavel Florián
Student(ka)

prof. Ing. Oldřich Zmeškal, CSc.
Vedoucí práce

prof. Ing. Miloslav Pekař, CSc.
Ředitel ústavu

V Brně, dne 31.1.2012

prof. Ing. Jaromír Havlica, DrSc.
Děkan fakulty

ABSTRAKT

Bakalářská práce se věnuje základům fraktální fyziky a jejich využití při studiu elektrických a dielektrických vlastností organických polovodičů.

Teoretická část práce obsahuje základní rovnice fraktální fyziky a jejich aplikace na elektrické veličiny (elektrický náboj, hustota elektrického náboje, intenzita elektrického pole, elektrický potenciál).

Praktická část práce obsahuje výsledky měření volt-ampérových charakteristik vzorků organických polovodičů a určení jejich fyzikálních parametrů (poloha Fermiovy energie, koncentrace nosičů náboje v látce) stanovených pomocí fraktálních vztahů odvozených v teoretické části práce.

ABSTRACT

Bachelor's thesis deals with the basics of fractal physics and its use in research of electrical and dielectric properties of organic semiconductors.

Theoretical part contains the basic fractal physics equations and their applications to electrical parameters (Fermi level, density of electric charge). Practical work includes the results of measurements of Amper-Volt characteristics of samples of organic semiconductors, and determines their physical parameters (Fermi level, concentration of charge carriers in substance).

KLÍČOVÁ SLOVA

Fraktální fyzika, organické polovodiče, transport elektrického náboje, elektrická vodivost, blokující a injekční kontakt, fotovoltaický článek.

KEYWORDS

Fractal physics, organic semiconductors, transport of electrical charge, electric conductivity, blocking and injection contact, photovoltaic cell.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracoval samostatně a že všechny použité literární zdroje jsem správně a úplně citoval. Bakalářská práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a může být využita ke komerčním účelům jen se souhlasem vedoucího bakalářské práce a děkana FCH VUT.

podpis studenta

Děkuji vedoucímu bakalářské práce prof. Ing. Oldřichu Zmeškalovi, CSc. za vedení při psaní a zpracování práce, za cenné rady a velkou trpělivost. Dále bych chtěl poděkovat příslušníkům své rodiny za to, že mi umožnili studovat na fakultě chemické.

Obsah:

1	ÚVOD	5
2	TEORETICKÁ ČÁST.....	6
2.1	Úvod do problematiky.....	6
2.2	Ohmický proud.....	6
2.2.1	Klasický přístup:	6
2.2.2	Fraktální definice elektrických veličin	8
2.3	Proudy omezené prostorovým nábojem (SCLC)	10
2.3.1	Klasický přístup:	10
2.3.2	Profily fyzikálních parametrů vzorků v závislosti na tloušťce vzorku	12
2.3.3	Fraktální přístup	13
2.4	Proudy omezené prostorovým nábojem za reálných podmínek	14
2.4.1	Monoenergetické pasti	14
2.4.2	Exponenciální rozdělení místních stavů.....	15
2.5	Povrchová (gapová) konfigurace elektrod	18
2.5.1	Monoenergeticky a exponenciálně distribuovaná energie pastí.....	18
2.6	Závěr	20
3	EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST.....	22
3.1	Studované materiály	22
3.1.1	PEDOT	22
3.1.2	TiO ₂	22
3.1.3	ITO	22
3.1.4	Metal-ftalocyaniny	23
3.1.5	ZnPc	23
3.1.6	CuPc	23
3.1.7	Fulleren.....	24
3.1.8	PCBM.....	24
3.2	Uspořádání měřených vzorků	25
3.3	Metody měření	26
3.3.1	VA charakteristiky	26
3.3.2	Impedanční spektroskopie.....	26
3.3.3	Automatizované měření volt-ampérových charakteristik	26
3.3.4	Automatizované měření impedančních spekter	27
3.4	Vyhodnocení experimentálních dat.....	29
3.4.1	Výpočet intenzity elektrického pole.....	29

3.4.2	Výpočet hustoty elektrického proudu a hustoty nosičů elektrického náboje	29
3.4.3	Logaritmické vyjádření vztahů koncentrace nosičů náboje	30
3.4.4	Výpočet závislosti změny Fermiovy hladiny na přírůstku nosičů elektrického náboje 30	
4	VÝSLEDKY A DISKUZE	32
4.1	Výsledky měření	32
4.2	Zpracování experimentálních dat	32
4.2.1	Detailní vyhodnocení V-A charakteristik	32
4.3	Souhrnné výsledky	35
4.3.1	Souhrnné výsledky – aktivní materiál (SD)	36
4.3.2	Souhrnné výsledky – horní elektroda (SD)	39
4.3.3	Souhrnné výsledky – aktivní materiál (BG)	42
4.3.4	Souhrnné výsledky – horní elektroda (BG)	45
5	Závěr	49
6	Seznam použité literatury	50
7	Příloha	52
7.1	Odvození vztahů použitých v bakalářské práci	52
7.1.1	Odvození hustoty náboje z fraktálního vztahu pro potenciál	52
7.1.2	Odvození vztahu mezi hustotou prostorového náboje a napětím	53
7.1.3	Odvození vztahu mezi hustotou energie, proudovou hustotou a napětím	53
7.1.4	Odvození vztahu mezi entropií a napětím	54

1 ÚVOD

S postupným vývojem polovodičových elektronických součástek vznikla potřeba co možná nejuniverzálněji definovat jejich elektrické a dielektrické vlastnosti pro usnadnění průmyslového návrhu těchto součástek. V polovodičích a izolantech ale nejsou volt-ampérové charakteristiky lineární, protože jejich kontakty nejsou ohmické, ale injekční nebo blokující. V případě injekčních kontaktů protéká polovodičem tzv. proud omezený prostorovým nábojem (SCLC). Teorie nelineárních volt-ampérových charakteristik byla v minulosti popisována pomocí diferenciálních rovnic [1]. Pro zobecnění a usnadnění výpočtů začaly být používány rovnice odvozené z fraktální fyziky platící díky jejich nezávislosti na prostorové dimenzi pro všechny tvary a konfigurace elektrod [2], [3].

V současnosti také se zkoumá možné využití organických polymerů, např. PPV, P3HT, DPP a jeho derivátů, ftalocyaninů, fullerenů a jejich derivátů jako alternativních polovodičů pro výrobu polovodičových součástek a pro použití ve fotovoltaice. V současnosti mají polovodičové solární články nízkou účinnost fotovoltaiické přeměny (přeměna sluneční energie na elektrickou), ale jejich použití v budoucnosti je perspektivní díky nízkým výrobním nákladům. Teoretická část práce obsahuje rešerši dané problematiky a odvození základních rovnic transportu [4] a polarizace elektrického náboje.

2 TEORETICKÁ ČÁST

2.1 Úvod do problematiky

Pro charakterizaci elektrického proudu, rozložení elektrického náboje a intenzity elektrického pole v polovodičích a materiálech s nízkou elektrickou vodivostí je nutná znalost jejich parametrů, jako je hustota volných nosičů elektrického náboje, koncentrace a energetická distribuce lokalizovaných stavů energie elektronů (nábojových pastí) v zakázaném pásu (vodivostní mezeře) polovodiče. O charakterizaci rozložení náboje v polovodičích měla v polovině 70. let zájem jen akademická sféra. Počet publikací na tohle téma vzrostl na začátku 80. let díky problému rychle rostoucí poptávky po metodách charakterizace lokalizovaných stavů v amorfních a polykrystalických polovodičích [5]. V praxi je možno charakterizovat parametry nábojových pastí jednoduchými metodami [2]. V současné době se ke studiu a popisu lokalizovaných energetických stavů elektronů používá metoda založená na studiu proudů omezených prostorovým nábojem (SCLC). Tato metoda je studována více, než 30 let [1], [2].

Rovnice popisující SCLC jsou závislé na konfiguraci elektrod (planární, cylindrické, sférické). Mnozí autoři vědeckých prací prezentují rovnice pro různé typy zařízení s rozdílnými konfiguracemi elektrod. V současnosti se často používají tenkovrstvé tranzistory (FET) a solární články „sendvičového“ typu, kde je důležitá povrchová konfigurace elektrody. Spektroskopický charakter volt-ampérových charakteristik proudů omezených prostorovým nábojem [2], [3] umožňuje charakterizaci elektronové struktury lokálních stavů a zjistit detailní informace o transportu náboje. Volt-ampérová charakteristika umožňuje stanovit energetické stavy elektronů ve struktuře vzorku umožňující zjistit detailní informace o přesunu nosičů elektrického náboje. Bohužel pro povrchovou konfiguraci elektrod (FET) není teorie SCL proudů ještě plně vyvinutá. Pro popis proudů omezených prostorovým nábojem se používá Stöckmanem [6] objevená rovnice, jež byla později upravena pro tři častá uspořádání elektrod znázorněná na *Obr. 2*. Jako teorii proudů omezených prostorovým nábojem (SCLC) a jejich teplotně modulovaných (TM SCLC) spektroskopických verzí pro „sendvičové“ uspořádání vzorků může být dobré najít transformaci těchto vztahů pro tyto případy FET struktur a obecně pro ostatní odlišné tvary elektrod. Tato práce se pokouší najít obecné řešení rovnic pro proudy omezené prostorovým nábojem pomocí El-Naschie teorie [7].

2.2 Ohmický proud

2.2.1 Klasický přístup:

Pro homogenní rovinný vzorek polovodiče s vodivostní mezerou je koncentrace tepelně generovaných volných elektronů popsána v rámci Boltzmanova rozdělení dle vzorce

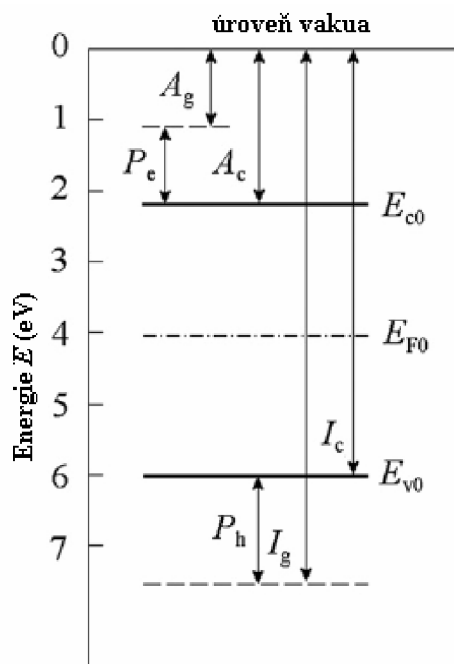
$$n_{f0} = N_c \exp\left(\frac{E_{c0} - E_{F0}}{k_B T}\right), \quad (1)$$

kde N_c je efektivní hustota elektronů v pásmu, E_{c0} je energie okraje valenčního pásma vzorku a E_{F0} je energie Fermiovy hladiny (průměr horní a dolní meze vodivostní mezery (zakázaného pásu)), k_B je Boltzmanova konstanta a T termodynamická teplota. Hodnoty E_{c0} a E_{F0} jsou v rámci vzorku konstantní. A proto platí Ohmův zákon

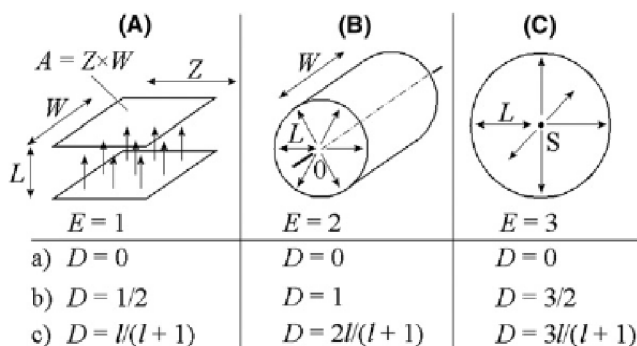
$$I_\Omega = e\mu n_{f0} F_L A = j_\Omega A, \quad (2)$$

kde I_Ω je ohmický proud, $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ C elementární náboj, μ je efektivní pohyblivost elektronů, n_{f0} hustota volných elektronů, F_L elektrická síla působící na elementární náboj, A je

plocha průřezu elektrického vodiče a j_{Ω} je plošná hustota elektrického proudu. Elektrické pole závisí na fraktální dimenzi vzorku, která závisí na jeho tvaru. A proto by měl být výraz pro intenzitu elektrického pole F definován nezávisle na tvaru vzorku pomocí fraktální analýzy.



Obr. 1: Energetické schéma elektronových stavů v molekule: A_g je energie elektronové afinity molekuly, A_c je energie elektronové afinity elektrodu a P_e je polarizační energie elektrodu pevné látky, I_g je ionizační energie molekuly, I_c je ionizační energie elektrodu, P_h je polarizační energie děr pevné látky a E_{F0} je energie Fermiovy hladiny.



Obr. 2: Tři geometrie průtoku elektrické energie: (A) planparalelní (B) válcový (C) ve tvaru koule a jejich fraktální dimenze pro (a) ohmický režim (b) monoenergetický prostorový náboj (c) skutečný prostorový náboj s exponenciální distribucí lokalizace stavů energie.

Pro elektrický proud v případě planparalelního uspořádání elektrod (A) platí pro elektrický proud vztah $I = ZWj$, pro případ válcového uspořádání elektrod platí vztah $I = 2\pi LWj$ a pro kulovité uspořádání elektrod platí: vztah $I = 4\pi L^2 j$, kde I je elektrický proud a j je plošná hustota elektrického proudu. Součin $A \cdot j$ je ve všech případech konstantní a hustota elektrického proudu j je ekvivalentní součinu intenzity elektrického pole F a hustoty elektrického náboje ρ . Pro případ proudů omezených prostorovým nábojem a planparalelního uspořádání elektrod platí mezi F a ρ nepřímá úměra v důsledku zachycování elektrického náboje do pastí a v případě proudu omezeného prostorovým nábojem je vstřikovaný elektrický náboj rozprostírán a ρ tedy klesá s délkou L při konstantní hustotě elektrického pole po celé délce. Při výpočtech F a ρ z fraktálních rovnic (viz. kap 2.2.2) je hodnota L ekvivalentní hodnotě poloměru r .

2.2.2 Fraktální definice elektrických veličin

Hustotu elektrického náboje lze definovat pomocí teorie založené na fraktálech [8] a El Naschieho teorie fyzikálních polí jako [8], [10]

$$\rho(r) = Kr^{D-E} = \frac{N(r)}{r^E}, \quad (3)$$

kde E je dimenze euklidovského prostoru, $N(r)$ je počet sledovaných prvků v poloměru r . D je fraktální dimenze závislá na tvaru a konfiguraci zdroje sledovaných prvků.

Hustotu elektrického náboje proto možné definovat jako

$$\rho_c(r) = e\rho(r) = eKr^{D-E}, \quad (4)$$

kde e je elementární náboj a K je počet elementárních nábojů v jednotce objemu. Celkový náboj je proto možné spočítat rovnicí:

$$Q(r) = \int_{V^*} \rho_c dV^* = \int_{r^E} Kr^{D-E} d(r^E) = \frac{eKEr^D}{D}, \quad (5)$$

kde $dV^* = d(r^E)$ je elementární objem v E -dimenzionálním prostoru. Průměrná hodnota hustoty elektrického náboje udává podíl elektrického náboje a objemu, který zaujímá.

Pro intenzitu elektrického pole F potom platí:

$$\text{div} \mathbf{F} = \frac{\rho_c(r)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}, \quad (6)$$

kde \mathbf{F} je vektor intenzity elektrického pole, ε_0 permitivita vakua a ε_r relativní permitivita.

Pro závislost hustoty elektrického pole F na poloměru r a hustotě náboje ρ platí vztah

$$\frac{D}{D-E+1} \frac{dF_r}{dr} = \frac{\rho_c(r)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}. \quad (7)$$

Závislost vektoru intenzity elektrického pole \mathbf{F} na elektrickém potenciálu V se dá popsat rovnicí

$$\mathbf{F} = -\text{grad} V. \quad (8)$$

Tabulka 1: Parametry fraktální struktury pro různé okrajové podmínky

$Q(r) =$	$\rho_c(r) =$	$F_r(r) =$	$V_r(r) =$
$eK \frac{Er^D}{D}$	eKr^{D-E}	$eK^* \frac{r^{D-E+1}}{D}$	$-eK^* \frac{r^{D-E+2}}{D(D-E+2)}$
$eKEr^D$	$eKDr^{D-E}$	$eK^* r^{D-E+1}$	$-eK^* \frac{r^{D-E+2}}{D-E+2}$
$eKE(D-E+2)r^D$	$eKD(D-E+2)r^{D-E}$	$eK(D-E+2)r^{D-E+1}$	$-eK^* r^{D-E+2}$

$$K^* = K / \varepsilon_0 \varepsilon_r$$

Tabulka 2: Pozorované fraktální dimenze fraktálů D v třídímním prostoru a k nim příslušející vlastnosti elektrického pole

D	$E = 3$	Charakteristika:	
0	$D=0$	$Q = \text{konst.}$	Bodový náboj
$E-2$	$D=1$	$V_r = \text{konst.}$	Ekvipotenciální pole
$E-1$	$D=2$	$F_r = \text{konst.}$	Homogenní intenzita pole
E	$D=3$	$\rho = \text{konst.}$	Homogenní hustota náboje

Intenzita elektrického pole F_r je podíl působící elektrické síly a elektrického náboje na určitém místě. Elektrický potenciál V_r je ekvivalentní potenciální energii jednotkového elektrického náboje na určitém místě.

Ze vztahů (6) a (8) vyplývá vztah mezi ρ a V

$$\Delta V = -\text{div} \mathbf{F} = -\frac{\rho_c(r)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}, \quad (9)$$

kde Δ je Laplace operátor. Tato rovnice může být přepsána jako

$$\frac{D}{D-E+1} \frac{d^2 V}{dr^2} = -\frac{\rho_c(r)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}. \quad (10)$$

Z hustoty elektrického náboje ρ je možné určit intenzitu elektrického pole F a elektrický potenciál V odvozením ze vztahů (9) a (10)

$$F_r = \frac{eK}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{r^{D-E+1}}{D}, V_r = -\frac{eK}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{r^{D-E+2}}{D(D-E+2)}. \quad (11)$$

Z rovnic (11) pak získáme vztah

$$F_r = -\frac{(D-E+2)V_r}{r}. \quad (12)$$

Tabulka 1: shrnuje parametry fraktální struktury pro různé okrajové podmínky, Tabulka 2 udává fraktální dimenze D v trojrozměrném prostoru elektrických polí s různými vlastnostmi. Fraktální rozměry různých konfigurací elektrod jsou shrnuty na Obr. 2. Proto pro náš rovinný vzorek a ohmický proud, můžeme nalézt $E = 1$ (jednorozměrné siločáry násobené plochou vzorku) a $D = E - 1 = 0$. Působící elektrické pole (12) vzhledem k místu s nulovým potenciálem lze zapsat jako

$$F_L = (V_0 - V_L) / L = U_L / L, \quad (13)$$

kde L je vzdálenost elektrod a U_L aplikované napětí.

2.3 Proudly omezené prostorovým nábojem (SCLC)

2.3.1 Klasický přístup:

V izolantech a polovodičích s vodivostní mezerou nastává situace, kdy je přítomna malá koncentrace tepelně generovaných volných elektronů. Volné elektrony mohou být transportovány z vnějších zdrojů nebo být generovány fotoelektrickým jevem. Efektivní injekce nábojů potřebuje vstřikovací kontakt, jež má vyšší koncentraci nosičů náboje ($n_f(x) > n_{f0}$), než vzorek polovodiče, nebo izolantu. Tento tzv. ohmický kontakt neomezuje proudovou hustotu ve vzorku. Tato podmínka je formulována vztahem

$$n_f(0) \rightarrow \infty, F(0) = 0 \quad (14)$$

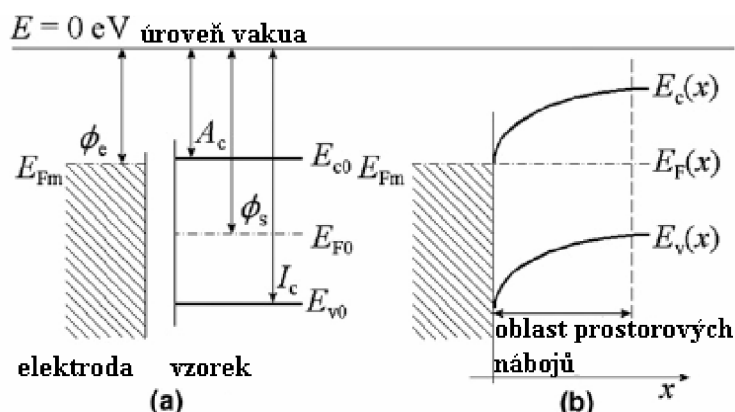
Při ohmickém kontaktu je volt-ampérová charakteristika superlineární (tzn. její druhá derivace je kladná) a závisí na mnoha faktorech. Za předpokladu, že je vzorek připojen na rovinnou elektrodu platí, že kovy jsou charakterizovány svou pracovní funkcí Φ_e , což je energetický rozdíl mezi Fermiovy hladinou elektronů E_{FM} a jejím snížením vlivem intenzity elektrického pole. (viz Obr. 3). Ve vzorku je Fermiovy energetická mez E_{F0} je lokalizována v zakázaném pásu energií a pracovní funkce Φ_e je definována stejně, jako u kovu. Prochází-li elektrický proud přes kontakt mezi elektrodou a izolantem, probíhá transport elektronů difuzí a pracovní funkce přechodu elektroda-vzorek je definována jako $\Delta\Phi = \Phi_s - \Phi_e$. Pokud je energetická úroveň Fermiovy hladiny konstantní pro celý systém, je dosaženo termodynamické rovnováhy. To znamená, že koncentrace nosičů náboje ve vzorku se v jeho různých částech liší. Zajímavá je situace, kdy $\Phi_s \gg \Phi_e$ nebo $\Phi_s \ll \Phi_e$. V prvním případě je koncentrace děr na rozhraní injekční elektroda-vzorek mnohem větší než ve vzorku, v druhém případě je prostorový náboj nadbytečných elektronů lokalizován v blízkosti rozhraní vzorku a injekční elektrody. Pro energetický rozdíl $\Delta\Phi = \Phi_s - \Phi_e$ platí, že čím má kladnější hodnotu, tím vyšší je měrná elektrická vodivost vzorku. Jako srovnávací hodnota $\Delta\Phi$ se bere hodnota přechodu elektroda-vzorek v případě vstříknutí jednoho elektronu. Pro koncentraci nosičů náboje platí rovnice:

$$n_f(x) = N_c \exp\left(\frac{E_c(x) - E_F(x)}{k_B T}\right) \quad (15)$$

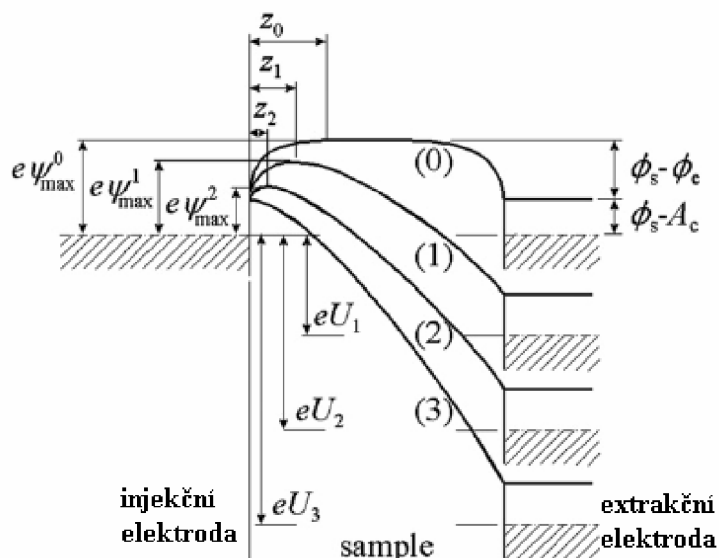
Budeme-li mít systém skládající se z planparalelního vzorku s vodivostní mezerou a dvou elektrod, jedna z nich bude dodávat nosiče náboje (vstřikovací kontakt) a druhá bude sloužit, jako výstupní elektroda (extrakční kontakt). Pokud je systém zaměřený tak, aby usnadnil transport nosičů náboje, výsledný proud bude záviset na prostorovém náboji nacházejícím se v blízkosti injekčního kontaktu.

Protože vzhledem k tomu, že hustota aplikovaného $n_f(x)$ náboje klesá s rostoucí vzdáleností od bodu $x = 0$ (rozhraní elektroda-vzorek), a dosahuje téměř n_{f0} na pozici $x = z_0$. Na Obr. 4 je vidět křivka potenciálů vnitřního elektrického pole vytvořeného kumulovaným prostorovým nábojem. Pokud aplikujeme externí napětí $U_L = U_1$, elektrické pole vytvořené kumulovaným prostorovým nábojem má na pozici $x = z_1$ stejnou hodnotu a opačné znaménko, což znamená, že se zde efektivní intenzita pole se rovná nule. Bod z_1 , kde $d\Psi/dx = 0$ je nazýván virtuální pracovní elektrodou. Za rovnovážných podmínek ($x > z_1$) má intenzita pole tendenci poslat zpět na kontakt všechny elektrony, které překračují povolenou hodnotu proudu omezeného prostorovým nábojem v izolantu nebo polovodiči. U virtuální pracovní elektrody je možné předpokládat, že jsou elektrony vypouštěny bez počáteční rychlosti. Pokud je aplikované elektrické napětí U_L zvýšeno například na U_2 nebo U_3 , znamená to, že se elektronová hustota na virtuálním injekčním kontaktu také zvýší a může procházet větší proud omezený

prostorovým nábojem. Čím vyšší je aplikované napětí U_L , tím menší je vzdálenost mezi virtuální katodou a kontaktem.



Obr. 3: Systém vzorku s elektrodami, který slabě vede elektrický proud před kontaktem (a) a po kontaktu (b) při termodynamické rovnováze I_c . Procházející elektrický proud závisí na ionizační energii, energie A_c závisí na elektronové afinitě molekuly na pevném vzorku.



Obr. 4: Energetické schéma ohmického kontaktu systému elektroda–vzorek s nízkou elektrickou vodivostí. Případ (0) je beze sklonu napětí a případy (1)–(3) jsou se sklonem aplikovaného elektrického napětí. Křivky ukazují elektrický potenciál napříč vzorkem a tím i vliv aplikovaného elektrického napětí na šířku akumulovaného regionu w a výšku napěťové bariéry ψ_{max} , Φ_e a Φ_s jsou pracovní funkce elektrody a vzorku, respektive A_c je elektronová afinita molekuly v pevném vzorku. V tomhle případě $\Phi_e < \Phi_s$.

Současným problémem SCLC je matematický postup při řešení soustavy dvou lineárních rovnic

(I) Proudová rovnice

$$j = e\mu \left[n_f(x)F(x) - \frac{kT}{e} \frac{dn_f(x)}{dx} \right] \quad (16)$$

(II) Poissonova rovnice

$$\frac{dF(x)}{dx} = -\frac{e}{\epsilon_0\epsilon_r} [n_{sx} - n_{s0}]. \quad (17)$$

Ve výše uvedených rovnicích je $n_s(x) = n_t(x) + n_f(x)$ celková hustota elektrického náboje po aplikaci elektrického napětí a $n_{s0} = n_{t0} + n_{f0}$ je hustota elektrického náboje po dosažení termodynamické rovnováhy (celkové hustoty náboje jsou součty hustot náboje v pastích a hustot volných nábojů).

Za předpokladu, že injekce elektrického náboje je dostatečně vysoká a potom koncentraci tepelně generovaných nosičů náboje můžeme zanedbat. Také bude zanedbáváno zvýšení elektrického proudu o difuzní proud, další zjednodušení bude provedeno zanedbáním nehomogenity vzorků a závislosti přepětí na $k_B T/e$. Pro tyto případy dostáváme rovnici částečného řešení SCLC Volt-ampérových charakteristik.

$$F(x) = \left(-\frac{2j}{\mu\epsilon_0\epsilon_r} \right)^{1/2} x^{1/2}. \quad (18)$$

Protože $F(x) = d\psi/dx$ a $U_L = \Psi_0 - \Psi_1$ kde Ψ_0 a Ψ_1 jsou virtuální elektrostatické potenciály na katodě a anodě nakonec závislost přejde na tvar

$$j = \frac{9}{8} \mu\epsilon_0\epsilon_r \frac{U_L^2}{L^3}. \quad (19)$$

2.3.2 Profily fyzikálních parametrů vzorků v závislosti na tloušťce vzorku

Základní rovnice popisující volt-ampérovou charakteristiku v izolantech pro případ planparalelního vzorku je často nazývána základním pravidlem a má tvar

$$F(x) = \frac{3}{2} \left(\frac{U_L}{L} \right) \left(\frac{x}{L} \right)^{1/2}. \quad (20)$$

A s rovnicí (17) dává rovnici

$$n_f(x) = \frac{3\epsilon_0\epsilon_r}{4e} \left(\frac{U_L}{L^2} \right) \left(\frac{x}{L} \right)^{-1/2} \quad (21)$$

A nakonec dosazením rovnice (21) do rovnice (15) dostaneme vztah

$$E_F(x) = E_c(x) + kT \ln \left[\frac{3\epsilon_0\epsilon_r}{4N_c e} \left(\frac{U_L}{L^2} \right) \left(\frac{x}{L} \right)^{-1/2} \right]. \quad (22)$$

Z výše uvedených rovnic, kde jsou jen částečné případy obecného řešení, dostáváme následující závěry:

(I) Na kolektoru ($x = L$), se elektrické pole liší od průměrné hodnoty o U_L/L o faktor 3/2 a koncentrace nosičů náboje o faktor 3/4.

(II) Při zvýšení úrovně injekce (Při zvyšování elektrického napětí) se postavení kvazi-Fermiových hladin přesouvá z Fermiovy hladiny při termodynamické rovnováze k vodivostnímu a valenčnímu pásu energií.

V rovnici (20) rovnost $x = L$ znamená, že $F_L = (3/2)(U_L/L)$, výraz této závislosti může být napsán také pomocí fraktálních parametrů. Je velmi užitečné zavést parametr $\gamma = d(\ln U_L)/d(\ln j)$, jako převrácenou hodnotu derivace volt-ampérové charakteristiky (závislosti J na U) v logaritmických souřadnicích (hodnoty γ jsou ve vztahu s energetickými stavy [2]). Parametr γ lze zapsat pomocí fraktální dimenze D vztahem $\gamma = (E - D)/D$. Pro případ bez pastí na volné elektrony, jednoduchý monoenergetický level a exponenciální distribuci pastí, kdy γ je konstantní máme v prostoru SCLC fraktál s konstantní dimenzí.

2.3.3 Fraktální přístup

Z teorie polovodičů [2] a použitím rovnic (12) a (13) vyplývá pro elektrické pole následující rovnice:

$$F_L = (2 - E\gamma)U_L / L \quad (23)$$

Pomocí parametrů fraktálních struktur [2] a porovnáním rovnic (12) a (13) lze parametr γ zapsat jako $\gamma = (E - D)/E$. Prostorový náboj v polovodiči je tvořen, když fraktální dimenze $D \in \langle 0, E \rangle$, tj. koeficient γ , je v rozsahu $\gamma \in \langle 0, 1 \rangle$. Parametr γ může být definován pomocí Fischerovy škály, která spojuje anomální dimenze $\eta = E - D = \gamma E$ a dimenze korespondující s náhodným pohybem náboje $\nu = D$. Pomocí rovnic (4) a (11) můžeme definovat hustotu energie w jako

$$w = \rho_e V_r = -[D(D - E + 2)] \frac{\epsilon_0 \epsilon_r V_r^2}{r} \quad (24)$$

a tok energie jako

$$i = \rho_e F_r = \frac{\rho_e^2 r}{D \epsilon_0 \epsilon_r} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r F_r^2}{r} = (D - E + 2)w, \quad (25)$$

hustotu energie lze přepsat do tvaru

$$w = en_{sL} U_L = \frac{E(1 - \gamma)(2 - E\gamma)\epsilon_0 \epsilon_r U_L^2}{L^2}. \quad (26)$$

Tok energie okamžitě koreluje s proudovou hustotou

$$j = \mu i = \mu \rho_e F_r = \frac{\mu \epsilon_0 \epsilon_r (1 - \gamma)(2 - E\gamma)^2 U_L^2}{L^3}, \quad (27)$$

kde $\rho_e = en_{Fl}$ je hustota elektrického náboje.

2.4 Proudý omezený prostorovým nábojem za reálných podmínek

2.4.1 Monoenergetické pasti

V reálných případech vzorků místní energetické stavy ovlivňují koncentraci volných nosičů elektrického náboje, v důsledku čehož lze soustavu rovnic (16) a (17) řešit jen v případě, že známe závislost mezi hustotou volných a lokalizovaných nosičů náboje. Pokud máme situaci v ustáleném stavu mezi hustotou volných a lokalizovaných nosičů elektrického náboje, jsou tyto dva parametry spolu postaveny na stavech kvazi-Fermiovy energetických hladin (Fermiovy energetická hladina je rozštěpená na dvě hodnoty), hustota volných nosičů náboje je dána rovnicí (15) a hustota náboje chyceného v pastích je dána Fermi-Diracovou statistikou.

$$n_t(x) = N_t f[E_F(x) - E_t] \quad (28)$$

, kde

$$f[E_F(x) - E_t] = \left[1 + \exp\left(\frac{E_F(x) - E_t}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (29)$$

je Fermi-Diracova funkce a N_t je koncentrace lokálních stavů. Je vhodné zavést parametr celkového volného poměru $\Theta \approx 1$

$$\Theta = \frac{n_f(x)}{n_s(x)} = \frac{n_f(x)}{n_f(x) + n_t(x)} \quad (30)$$

Kombinací rovnic (28) a (30) dostaneme rovnici

$$\frac{1}{\Theta} = 1 + \frac{n_t(x)}{n_f(x)} = 1 + \frac{N_t}{N_c \exp\left(\frac{E_c(x) - E_F(x)}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{E_F(x) - E_t}{kT}\right) \right]} \quad (31)$$

Povšimněme si, že současné SCLC volt-ampérové charakteristiky závisí na poloze kvazi-Fermiových energetických hladin v okolí sběrné elektrody $E_F(L)$, které respektují energii z distribuce místních stavů [1]. U vzorku s místními stavy se hodnota energie místních stavů nachází nad horní kvazi-Fermiovy hladinou, $E_F(L) > E_t$ a vzorek má všechny elektronové pasti mělké. Z rovnice (31) vyplývá, že parametr Θ prakticky nezávisí na pozici E_F a následně i na aplikovaném napětí U_L na vzorku

$$\Theta = \frac{N_c}{N_t} \exp\left(\frac{E_t - E_c}{k_B T}\right) < 1 \quad (32)$$

Při řešení rovnic (16) a (17) můžeme dostat zanedbatelný difuzní proud

$$j = \frac{9}{8} \mu \epsilon_0 \epsilon_r \Theta \frac{U_L^2}{L^3} \quad (33)$$

I když je přímo úměrný druhé mocnině přiloženého napětí, je však menší než SCLC proud (Rovnice (19)). Parametr Θ závisí na koncentraci místních stavů N_t . Výsledky fraktální dimenze v SCLC režimu pro různé konfigurace elektrod a monoenergetické stavy jsou uvedeny na Obr. 2.

Pro $\Theta \approx 1$ se vzorek může chovat jako izolátor nebo polovodič bez pastí volných nosičů elektrického náboje a měl by odpovídat proudům omezených prostorovým nábojem (Rovnice

(19)). Napětí, při kterém dojde k vyplnění všech pastí, se obvykle nazývá “limitní napětí zaplnění pastí“ (U_{TFL} , Zde $\gamma \rightarrow 0$) a lze dokázat, že platí

$$U_{\text{TFL}} = \frac{eN_t L^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r}, \quad (34)$$

kde N_t je celková koncentrace místních stavů.

2.4.2 Exponenciální rozdělení místních stavů

Dále budeme věnovat pozornost vzorkům s exponenciálním rozdělením energií $h(E)$ místních energetických stavů. Vzhledem k poměrně přímočarému odvození rovnic popisujících distribuci energie místních stavů může být obtížné do nich dosadit experimentální data, a nemáme žádné fyzické zdůvodnění tohoto tvaru stavové funkce DOS. Tak jsme převzali

$$h(E) = H_t \exp\left(\frac{E - E_c}{k_B T_c}\right), \quad (35)$$

kde T_c je teplota exponenciální distribuce $T_c > T$.

V reálném vzorku polovodiče můžeme očekávat, že místní energetické stavy ovlivní koncentraci volných nosičů elektrického náboje. Podobně, jako v případě monoenergetických stavů může být soustava rovnic (16) a (17) řešena jen v případě, že je známa závislost mezi hustotou volného elektrického náboje a lokalizovaných nosičů náboje. V ustáleném stavu na sobě tyto dva parametry spolu souvisí přes kvazi-ustálený stav kvazi-Fermiových mezí, hustota volných nosičů je dána rovnicí (15) a hustota pastí nosičů náboje Fermi-Diracovou statistikou

$$n_t(x) = \int_{E_L}^{E_U} h(E, x) f[E_F(x) - E] dE, \quad (36)$$

kde

$$f[E_F(x) - E] = \left[1 + \exp\left(\frac{E_F(x) - E}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (37)$$

je Fermi-Diracova funkce a $h(E, x)$ je hustota stavové (DOS) funkce, tj. funkce popisující energetické stavy a rozmístění místních stavů, mezi dolní a horní hranicí (v intervalu E_L a E_U). Je vhodné zavést parametr celkového poměru $\Theta \approx 1$, který vyjadřuje poměr náboje v pastích a volných nosičů elektrického náboje (30).

Kombinací rovnic (30), (35) a (36) dostaneme

$$\frac{1}{\Theta} = \frac{n_t(x)}{n_f(x)} = 1 + \int_{E_L}^{E_U} \frac{h(E) dE}{N_b \exp\left(\frac{E_c(x) - E_p(x)}{k_B T}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{E_F(x) - E}{k_B T}\right) \right]} \quad (38)$$

Současné SCLC volt-ampérové charakteristiky závisí na pozici kvazi-Fermiových hladin v okolí sběrné elektrody elektrody $E_F(L)$, a distribuci energie místních stavů [1]. U vzorku s místními stavy nacházejícími se nad kvazi-Fermiovými hladinami, jsou všechny pasti mělké.

Z rovnice (31) vyplývá, že parametr Θ je prakticky nezávislý na poloze E_F a následně i na napětí na vzorku ($E > E_c$)

$$\Theta = \frac{Nb}{\int_{E_L}^{E_U} h(E) \exp\left(\frac{E - E_c}{k_B T}\right) dE} < 1 \quad (39)$$

Rovnice popisující intenzitu elektrického pole a hustotu lokalizovaného elektrického náboje byly odvozeny jako

$$F(L) = \left(\frac{2l+1}{l+1}\right) \frac{U_L}{L} \quad (40)$$

a

$$n_t(L) = \left(\frac{2l+1}{l+1}\right) \left(\frac{l}{l+1}\right) \frac{\varepsilon U_L}{eL^2}, \quad (41)$$

kde $l = T_c/T > 1$ (značí, že exponenciální distribuce je $\gamma = \frac{1}{l+1}$ nezávislá na napětí) Pro exponenciální distribuci lokálních stavů mohou být volt-ampérové charakteristiky pro „sendvič“ vzorky psány ve formě [1]

$$j = \mu e N_c \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{eH_t}\right)^l \left(\frac{l}{l+1}\right)^l \left(\frac{2l+1}{l+1}\right)^{l+1} \frac{U_L^{l+1}}{L^{2l+1}} \quad (42)$$

Tabulka 3: SCLC volt-ampérové charakteristiky izolátorů a polovodičů s mělkými pastmi a distribuovanou energií pastí.

Geometrie toku elektrického proudu		Mělké pasti: $\Theta = N_c / N_t \exp[(E_t - E_c)/kT]$ $D = E/2$	Exponenciální distribuce pastí: $h(E) = H_t \exp[(E - E_c)/kT_c]$, $l = T_c / T > 1$ $D = El/(l+1)$
		$j = \mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta \frac{E(4-E)^2}{8} \frac{U_L^2}{L^3}$	$j = e \mu \mu_c \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r El}{eH_t(l+1)}\right]^l \left(2 - \frac{E}{l+1}\right)^{l+1} \frac{U_L^{l+1}}{L^{2l+1}}$
Planparalelní	$E = 1$	$j = \frac{9}{8} \mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta \frac{U_L^2}{L^3}$	$j = e \mu \mu_c \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r El}{eH_t(l+1)}\right]^l \left(\frac{2l+1}{l+1}\right)^{l+1} \frac{U_L^{l+1}}{L^{2l+1}}$
Válcovitá	$E = 2$	$j = \mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta \frac{U_L^2}{L^3}$	$j = e \mu \mu_c \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r El}{eH_t(l+1)}\right]^l \left(\frac{2l}{l+1}\right)^{l+1} \frac{U_L^{l+1}}{L^{2l+1}}$
Kulovitá	$E = 3$	$j = \frac{3}{8} \mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta \frac{U_L^2}{L^3}$	$j = e \mu \mu_c \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r El}{eH_t(l+1)}\right]^l \left(\frac{2l-1}{l+1}\right)^{l+1} \frac{U_L^{l+1}}{L^{2l+1}}$

Využití parametrů fraktální struktury a $\gamma = 1/l+1$ je možné přepsat rovnici (27) do formy

$$j = \mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta \left(\frac{El}{l+1}\right) \left(\frac{2l+2-E}{l+1}\right)^2 \frac{U_L^2}{L^3}. \quad (43)$$

Použitím výrazu pro volné nosiče elektrického náboje (rovnice (15) a (35)), $n_{\text{NL}} = N_b (n_{\text{SL}}/H_t)^l$ můžeme dostat výraz

$$j = \mu e N_c \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{e H_t} \right)^l \left(\frac{l}{l+1} \right)^l \left(\frac{2l+1}{l+1} \right)^{l+1} \frac{U_L^{l+1}}{L^{2l+1}} \quad (44)$$

Integrál ve jmenovateli rovnice (53) lze řešit pouze tehdy, pokud je DOS funkce specifikovaná dopředu, tedy žádná obecná rovnice popisující SCL volt-ampérové charakteristika v tomto případě neexistuje. Dají se však získat přibližná řešení pro typickou distribuci použitím přiblížení k nulové teplotě, tj. nahrazením Fermi-Diracovy funkce (37)

$$f[E_F(x) - E] = \left[1 + \exp\left(\frac{E_F(x) - E}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad \text{výrazem } f(E_F - E) = \chi(E_F - E). \quad (45)$$

Rovnice (44) představuje obecnou rovnici SCL proudu v polovodiči s exponenciálním rozdělením lokalizovaných stavů v závislosti na energii (nezávisle na geometrii elektrody). Přesná řešení pro planparalelní, válcové a sférické geometrie elektrod nejsou jednoduchá. Byla odvozena Lampertem a Markem [1]. Rovnice (44) umožňuje psát tato řešení pro různé hodnoty euklidovské dimenze E velmi jednoduše. Výsledky jsou uvedeny pro polovodič s mělkými pastmi a pastmi distribuovanými exponenciálně v závislosti na energii (viz Tabulka 3).

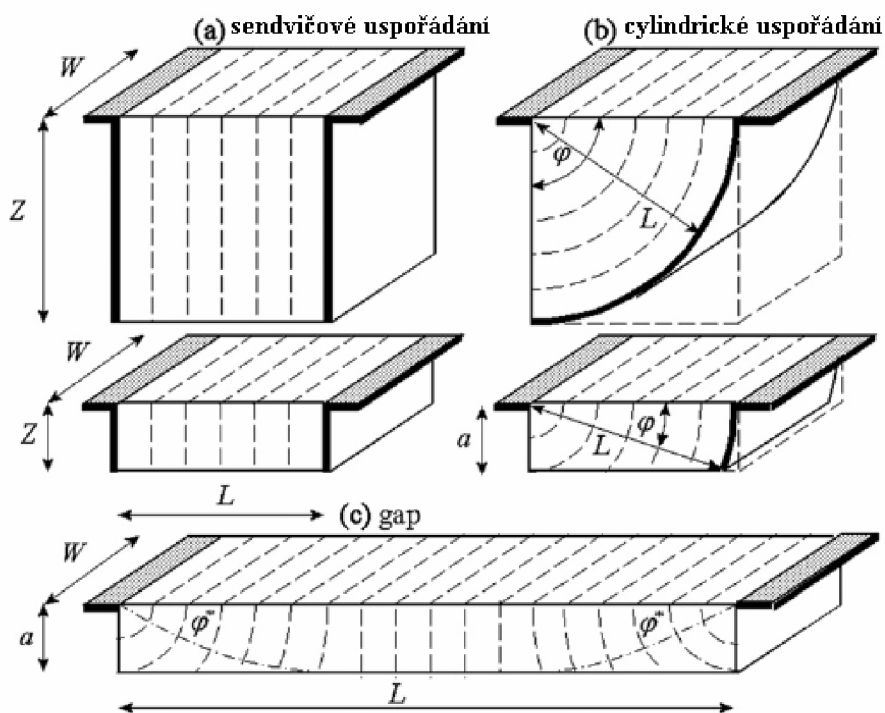
2.5 Povrchová (gapová) konfigurace elektrod

V současnosti je velký zájem o tvorbu tenkovrstvých tranzistorů s elektrickým proudem tekoucím v odporovém i SCLC režimu. V tomto případě jsou dvě elektrody (injekční a extrakční) ve vzdálenosti L (délka kanálu) aplikovány na vrstvu (a naopak). Kvůli specifickému profilu elektrického pole se v těchto vzorcích výrazy pro proudy omezené prostorovým nábojem liší od výrazů na jiných vzorcích.

2.5.1 Monoenergeticky a exponenciálně distribuovaná energie pastí

Tento problém byl řešen jen pro případ bez pastí nebo pro elektrický proud ovlivněný mělkými pastmi. Rovnice (33) by měla být v tomto případě upravena na tvar

$$I_G = \frac{2}{\pi} \mu \epsilon_0 \epsilon_r \Theta \frac{U_L^2}{L^2} W \quad (46)$$



Obr. 5: Geometrie vzorku diskutovaná v tomto dokumentu: (a) tlustý a tenký sendvič (planparalelní uspořádání), (b) cylindrická struktura $\varphi = \pi/2$ s a tenký $\varphi = \arctan(a/L)$ cylindrický segment struktury. (c) mezerová (filmová) struktura $(\pi/2) > \varphi > \arctan(2a/L)$, kde W je šířka kanálu (viz případ (c)).

Problém byl vyřešen pro limit tloušťky ($a \rightarrow 0$). V TF FET experimentech je aktivní tenký film obvykle uložený do elektrodového systému, nebo do tenkých kovových elektrod, jež jsou uloženy na polovodičové tenké vrstvě. Zde se tloušťka filmu a liší od vzdálenosti elektrod L . Na základě této analýzy byl vytvořen analytický model FET, který jde nad rámec obvyklých postupných aproximací kanálů. Později, byly řešeny proudy omezené prostorovým nábojem v tenkých vrstvách s konfigurací elektrod na Obr. 5 a došli k výrazu podobnému rovnici (75) s koeficientem 0,57 místo $2/\pi = 0,63$. V uvedeném případě je hodnota celkového proudu (viz. kap 2.2) nezávislá na tloušťce filmu, protože snížení tloušťky vrstvy je kompenzováno zvýšenou injekcí volných nábojů.

Výsledky pro „sendvičovou“ část struktury (planparalelního) vzorku byly popsány v odstavcích pro případ monoenergetických pastí ($\gamma = 1/2$) nebo exponenciální distribuci pastí.

($\gamma = (E - D)/E = 1/(L + 1)$). Nakonec byly vypočteny vztahy pro jednorozměrný případ ($E = 1$), v nichž fraktální dimenze D nabývá hodnot v intervalu $D \in \langle 0, 1 \rangle$, ohmický případ je charakterizován fraktální dimenzí $D = 0$ (viz. kap 2.2), případ proudů omezených prostorovým nábojem a monoenergetických mělkých pastí byl charakterizován fraktální dimenzí $D = 1/2$ (kapitoly 2.3 a 2.4) a případ exponenciální distribuce energie pastí jako $D = 1/(L + 1)$, a pole pastí tvořících hranici $D = 1$ (kap. 2.4). Základ výše uvedených výrazů je možné použít pro proudy v systému s planparalelním uspořádáním elektrod, $I_B^M = Aj = ZWj$ kde j je hustota elektrického proudu z rovnice (33)

Podobně lze pro proud v izolátoru s exponenciálně distribuovanou energií pastí psát

$$I_B^E = jA = \frac{\mu\epsilon_0\epsilon_r\Theta(1-\gamma)(2-\gamma)^2U_L^2}{L^3}ZW \quad (47)$$

(viz rovnice (27) pro hustotu elektrického proudu; zde $E = 1$).

Podobná situace existuje u válcových struktur vzorků. Finální výrazy pro proudy mohou být

vyjádřeny pro dvojrozměrný (válcový) případ ($E = 2$) jako

(i) pro izolátory s monoenergeticky distribuovanou energií pastí

$$I_C^M = \varphi LWj = \mu\epsilon_0\epsilon_r\Theta\frac{U_L^2}{L^3}\varphi LW, \quad (48)$$

(ii) a pro exponenciálně distribuovanou energií pastí

$$I_C^E = \varphi LWj = \frac{8\mu\epsilon_0\epsilon_r\Theta(1-\gamma)^3U_L^2}{L^3}\varphi LW, \quad (49)$$

kde φ (viz Obr. 5) je úhel, pod kterým proud teče proud z rozhraní kontaktu do vzorku (pro plně válcový případ $\varphi = 2\pi$). Kombinací rovnic (33) a (48) získáváme pro monoenergetické pastí rovnici

$$\frac{I_B^M}{I_C^M} = \frac{9}{8} \frac{a}{(\varphi L)}, \quad (50)$$

Kombinací rovnic (47) a (49) můžeme získat pro izolátory s exponenciální distribucí energie pastí výraz

$$\frac{I_B^E}{I_c^E} = \frac{(2-\gamma)^2}{8(1-\gamma)} \frac{a}{(\varphi L)}. \quad (51)$$

Pro velmi tenké vzorky, tj. pro velmi malé úhly, $\varphi = \arctan(a/L) \rightarrow 0$, $a/L \rightarrow 0$ a výraz pro proud je podobný k případu prezentovanému na Obr. 5c.

Tento případ struktury mezery vzorku představuje kombinaci dvou válcových případů. Konečný výraz pro proud závisí na typu rozhraní vzorku (např.: hranový kontakt, koplanární pásový kontakt, kolmá rovina).

V tomto případě je úhel $\varphi^* = \arctan[a/(L/2)]$ a rovnice (48) a (49) lze přepsat jako

$$I_G^M = \varphi^* LWj = \mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta \frac{U_L^2}{L^2} \arctan\left(\frac{2a}{L}\right) W, \quad (52)$$

$$I_G^E = \varphi^* LWj \approx \frac{8\mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta (1-\gamma)^3 U_L^2}{L^2} \arctan\left(\frac{2a}{L}\right) W. \quad (53)$$

V těchto rovnicích výrazy

$$\arctan(2a/L) = \zeta_G^M \text{ a } 8(1-\gamma)^3 \arctan(2a/L) = \zeta_G^E \quad (54)$$

mohou být použity jako násobící faktor (viz. výraz $2/\pi$ v rovnici (46))

Použitím rovnice (53) můžeme zavést výraz pro elektrický proud ve vodivostním pásu vzorku izolantu nebo polovodiče s exponenciální distribucí energie pastí (zde $E = 1$)

$$I_G^E = \mu N_c \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{e H_t} \right)^l \left(\frac{2l}{l+1} \right)^{2l+1} \frac{U_L^{(l+1)}}{L^{(2l+1)}} \arctan\left(\frac{2a}{L}\right) W. \quad (55)$$

2.6 Závěr

Vztažením fraktálních výpočtů nezávislých na euklidovském rozměru na proudy omezené prostorovým nábojem (SCLC) v izolantech bez pastí nebo širokopásmových polovodičích a materiálech s monoenergetickými pastmi a pastmi s exponenciální distribucí energie byly odvozeny obecné rovnice SCLC proudů. Násobek výrazu z volt-ampérové charakteristiky může být předpovězen použitím Fischerovy stupnice a El-Naschieho teorie jako

$$\zeta_E = \nu(2-\eta)^2 = E(1-\gamma)(2-\gamma E)^2, \quad (56)$$

kde $\nu = D = E(1-\gamma)$ je fraktální rozměr náhodného rozmístění a $\eta = \gamma E$ je anomálie dimenze.

To nám umožňuje psát jednu společnou rovnici nezávisle na konfiguraci elektrody pouze se změnou fraktálního rozměru D a Euklidovského rozměru E . Spojením dvou válcových případů bylo možné odvodit výraz pro prostorovým nábojem omezené proudy v izolantu s monoenergetickými pastmi pro případ vzorků s povrchovou (gapovou) elektrodovou konfigurací v podobě

$$I_G^M = \varphi^* LWj \approx aWj \approx \mu \varepsilon_0 \varepsilon_r \Theta \frac{U_L^2}{L^2} \arctan\left(\frac{2a}{L}\right) W, \quad (57)$$

kde μ je pohyblivost volných nosičů náboje, $\varepsilon_0 \varepsilon_r$ je permitivita materiálu, Θ je parametr totálního průměru, U_L je aplikované napětí, L je vzdálenost obou elektrod, W je šířka obdélníku elektrody a je tloušťka vzorku. Pro případ izolátoru bez pastí platí, že $\Theta = 1$.

Pro izolátor s exponenciální distribucí energie pastí je proud definován rovnicí

$$I_G^E = \varphi^* LWj \approx \frac{8\mu\epsilon_0\epsilon_r(1-\gamma)^3 U_L^2}{L^2} \arctan\left(\frac{2a}{L}\right) W, \quad (58)$$

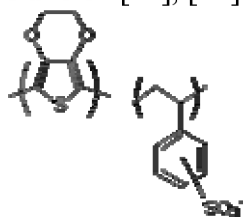
kde γ je převrácená hodnota strmosti volt-ampérové charakteristiky v logaritmických souřadnicích, tento experimentální parametr může být vyjádřen jako $\gamma = (E - D)/E$ kde D je fraktální dimenze rozdělení náboje v prostoru vzorku a E je topologická (Euklidovská) dimenze kontaktu.

3 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

3.1 Studované materiály

3.1.1 PEDOT

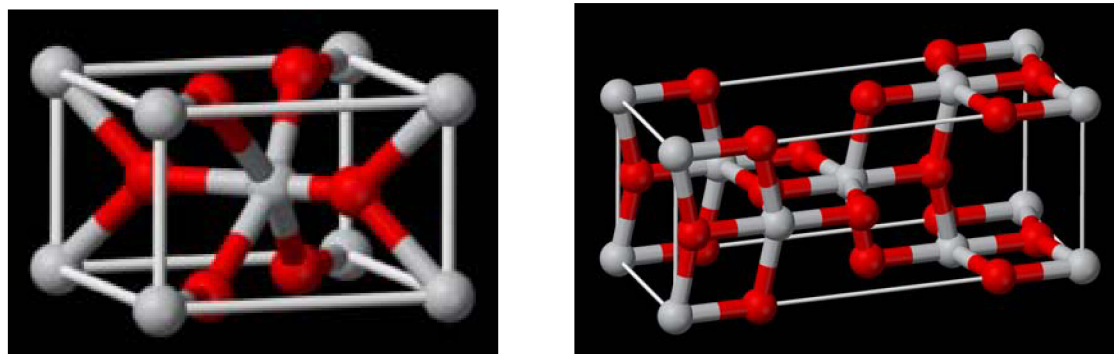
PEDOT je makromolekulární sůl 3,4-ethylenedioxythiofenu a styrenesulfonátu nazývaná také Poly(3,4-ethylenedioxythiofen)poly(styrenesulfonát). PEDOT je transparentní, elektricky vodivý a má vysokou houževnatost. Používá se například pro výrobu fotografických filmů a jako prostředek proti výbojům statické elektřiny a také, jako anoda v organických solárních článcích [11], [12].



Obr. 6: Struktura PEDOT

3.1.2 TiO₂

Oxid titaničitý TiO₂ nazývaný také titanová běloba je bílá, krystalická látka, vyskytující se nejčastěji v krystalických formách anatasu a rutilu. TiO₂ se používá jako pigment, UV absorbér do opalovacích krémů, potravinářské barvivo, fotokatalyzátor (anatas reaguje na UV záření a oxiduje organické látky na CO₂) a polovodič. Vyrábí se redukcí v přírodě se vyskytujících rud s obsahem TiO₂ koksem, následuje oxidace chlorem na TiCl₄ a oxidace TiCl₄ čistým kyslíkem [12], [13].



Obr. 7: Krystal rutilu (vlevo) a anatasu (vpravo) [13], [14]

3.1.3 ITO

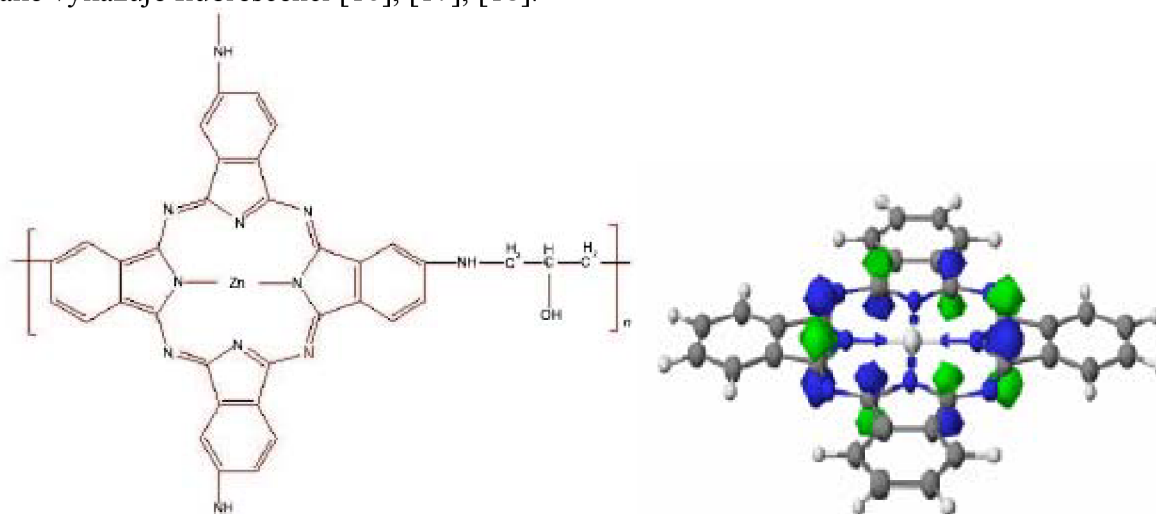
ITO je směs asi 90% oxidu inditého In₂O₃ a 10% oxidu cíničitého SnO₂. ITO je průhledný, až mírně nažloutlý, elektricky vodivý materiál. Používá se k výrobě LCD displejů, plazmových displejů, světelných diod, organických solárních článků (slouží, jako anoda), optických povlaků a infračervených reflexních nátěrů a také, jako katoda v organických solárních článcích [12], [15].

3.1.4 Metal-ftalocyaniny

Metal-ftalocyaniny jsou koordinační sloučeniny ftalocyaninu s kovem. Často jsou používány, jako barviva a pigmenty. Ftalocyanin se vyrábí reakcí kyseliny ftalové a ftalonitrilu na ftalanhydrid a následným zahřátím. Metal-ftalocyaniny se vyrábí reakcí ftalocyaninu se solí daného kovu. Do metal-ftalocyaninů patří například ZnPc, CuPc a AlPc [16].

3.1.5 ZnPc

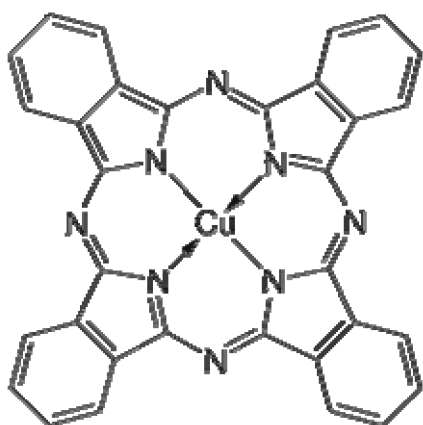
Ftalocyanin zinku, zkráceně ZnPc je koordinační sloučenina zinku a ftalocyaninu. Má vynikající fyzikální a chemickou stabilitu. Používá se jako polovodič. Velmi často se používá směs jeho epoxyderivátu s fullerenem C_{60} v tenké vrstvě, připravené z organických rozpouštědel (např. směsi fenolu a N,N-dimethyl formamidu) na skle ITO. Zn-ftalocyanin také vykazuje fluorescenci [16], [17], [18].



Obr. 8: Struktura epoxy derivátu ZnPc

3.1.6 CuPc

Ftalocyanin mědi, zkráceně CuPc nazývaný také ftalocyaninová modř BN je zeleno-modrá krystalická látka odolávající vlivu světla, kyselin i alkálií. CuPc se používá jako pigment, k výrobě inkoustů, nátěrů a plastů a při výzkumu organických solárních článků [19].



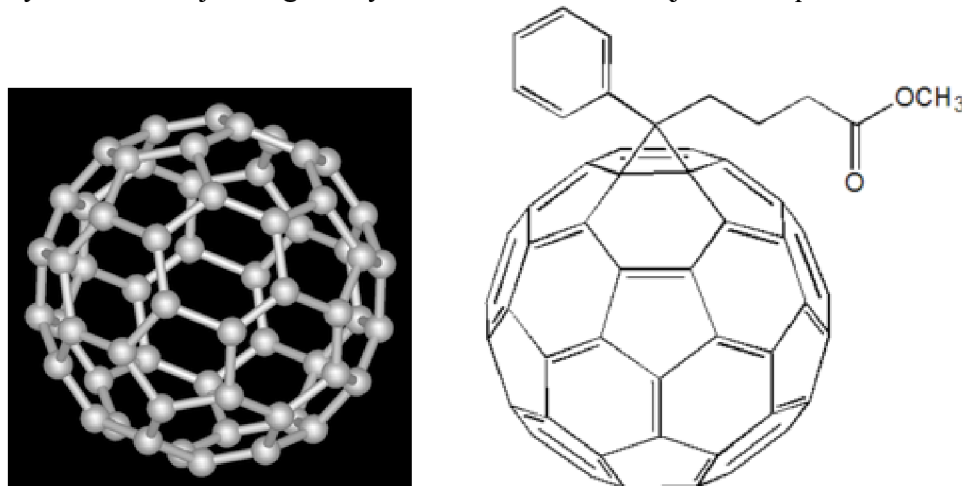
Obr. 9: Struktura ftalocyaninové modři

3.1.7 Fulleren

Fullereny jsou molekuly tvořené atomy uhlíku, jež jsou prostorově uspořádány do útvarů skládajících se z pětiúhelníků, nebo šestiúhelníků. Fulleren obsahující 60 atomů uhlíku C_{60} je tvrdší, než diamant, známy jsou také fullereny C_{80} , C_{82} , C_{36} , C_{20} a metalfullereny (s atomy kovů uvnitř dutin). Mezi časté způsoby přípravy fullerenu patří pyrolýza organických sloučenin laserem, vypařování grafitu v elektrickém oblouku a koncentrace slunečního světla na grafit [20].

3.1.8 PCBM

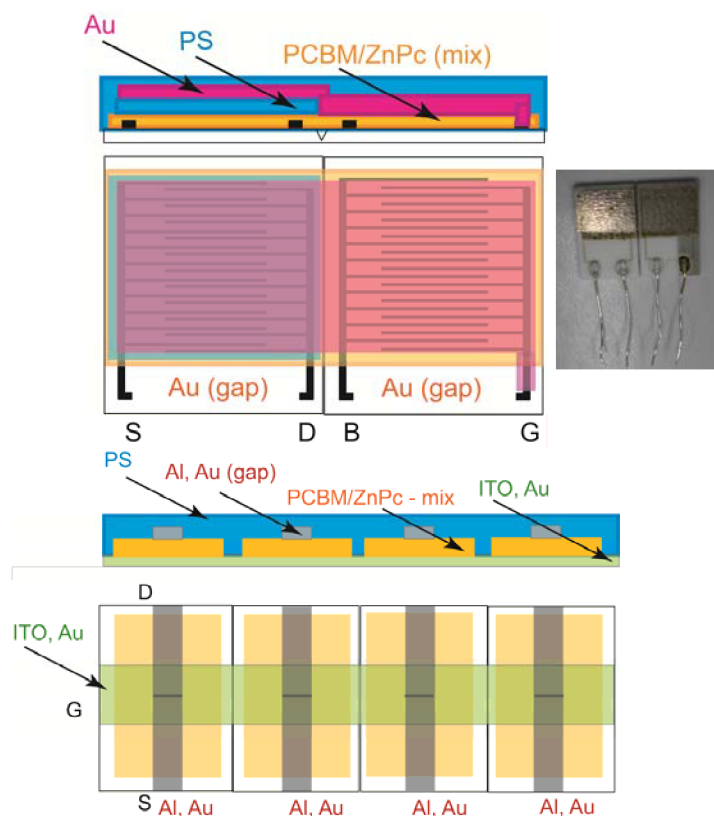
PCBM je zkratka pro derivát fullerenu C_{60} fenyl- C_{61} -methylester kyseliny máselné. Možné využití PCBM je v organických solárních článcích (jako akceptor elektronů-anody) [21].



Obr. 10: Molekula Fullerenu C_{60} , Molekula Fenyl- C_{61} -methylesteru kyseliny máselné

3.2 Uspořádání měřených vzorků

Na Obr. 11 vlevo nahoře je zobrazeno uspořádání vzorku organického polovodiče s keramickou podložkou s interdigitálními Au elektrodami, na ní je nanesena vrstva fotoaktivního materiálu (směs PCBM/ZnPc) a nahoře je napařena tenká (transparentní) Au vrstva. Vlevo je gapová konfigurace, vpravo sendvičová konfigurace. Jako materiál ke krytí fotoaktivní vrstvy a kontaktů byl použit polystyren (PS). Na Obr. 11 vpravo nahoře je fotografie měřeného vzorku.



Obr. 11 Zobrazení gapové (SD) a sendvičové (BG) struktury (Au–PCBM/ZnPc–Au) na keramické podložce (obrázek nahoře vlevo), (ITO–PCBM/ZnPc–Al) struktury (obrázek dole) vzorků organických polovodičů a jejich skutečný vzhled (obrázek nahoře vpravo).

Na Obr. 11 dole obrázku je vyobrazeno uspořádání vzorku organického polovodiče s ITO nebo Au elektrodou na skleněné podložce, na ní je vrstva fotoaktivního materiálu (směs PCBM/ZnPc), katodu tvoří kovové kontakty ze zlata nebo hliníku. Jako materiál ke krytí fotoaktivní vrstvy a kontaktů byl opět použit polystyren (PS).

3.3 Metody měření

3.3.1 VA charakteristiky

Volt-ampérová charakteristika je graficky znázorněná závislost elektrického proudu protékajícího vzorkem na elektrickém napětí mezi oběma elektrodami vzorku. Může být vynesena v lineárních, semilogaritmických (jedna osa je v logaritmickém měřítku a druhá v lineárním) a logaritmických souřadnicích (obě osy jsou v logaritmických souřadnicích).

3.3.2 Impedanční spektroskopie

Impedanční spektroskopie (IS), někdy nazývaná také dielektrická spektroskopie je metoda založená na měření dielektrických vlastností média v závislosti na frekvenci elektrického proudu. Měření se provádí pomocí střídavého elektrického napětí o proměnné frekvenci a výstupem je obvykle graf závislosti permitivity nebo impedance na frekvenci střídavého proudu.

Možné využití impedanční spektroskopie je při charakterizaci elektrochemických vlastností, zjišťování informací o mechanismu elektrochemických reakcí a testování palivových článků. Impedance je odpor vůči toku střídavého proudu v komplexních systémech, zahrnující odpor vůči stejnosměrnému proudu a uložení elektrické energie ve formě elektrického náboje (dielektrické vlastnosti).

Existuje řada dielektrických mechanismů, při nichž dochází k periodickému hromadění a vybíjení elektrického náboje, jako například elektronická polarizace, atomová polarizace, dipól relaxace, iontová relaxace a elektrická relaxace. Každý dielektrický mechanismus má svou charakteristickou frekvenci, jež se v grafu projeví nárůstem permitivity [22].

3.3.3 Automatizované měření volt-ampérových charakteristik

Měření volt-ampérových charakteristik vzorků bylo provedeno na elektrometru Keithley 6517A programem Electrical Measurement Analyzer 1.3.49. okno programu je na Obr. 12.

a) Nastavení parametrů programu

Okno programu je na Obr. 12, nastavení pro jednorázové měření se provádí tak, že se zaškrtně políčko *Electrometer* (Keithley 6517A) a nastaví se parametry v sekci **Keithley 6517A** následujícím způsobem: *Electrometer* nastavíme na *Current*, *Limit current* na (*Auto*), v parametru *Source min* nastavíme počáteční napětí, v parametru *Source max* nastavíme konečné napětí, parametr *Restore* (výběr konfigurace elektrometru) necháme na hodnotě 0, v parametru *Number of Steps* nastavíme počet kroků měření, volbou *Add* nastavíme lineární rozdíl mezi kroky měření (*Multiply* je logaritmický krok měření) a v sekci **Common** parametrem *Relaxation* nastavíme relaxační čas mezi nastavením elektrického napětí a změřením proudu (čas jednoho kroku) na 4 s.

b) Popis jednorázového měření

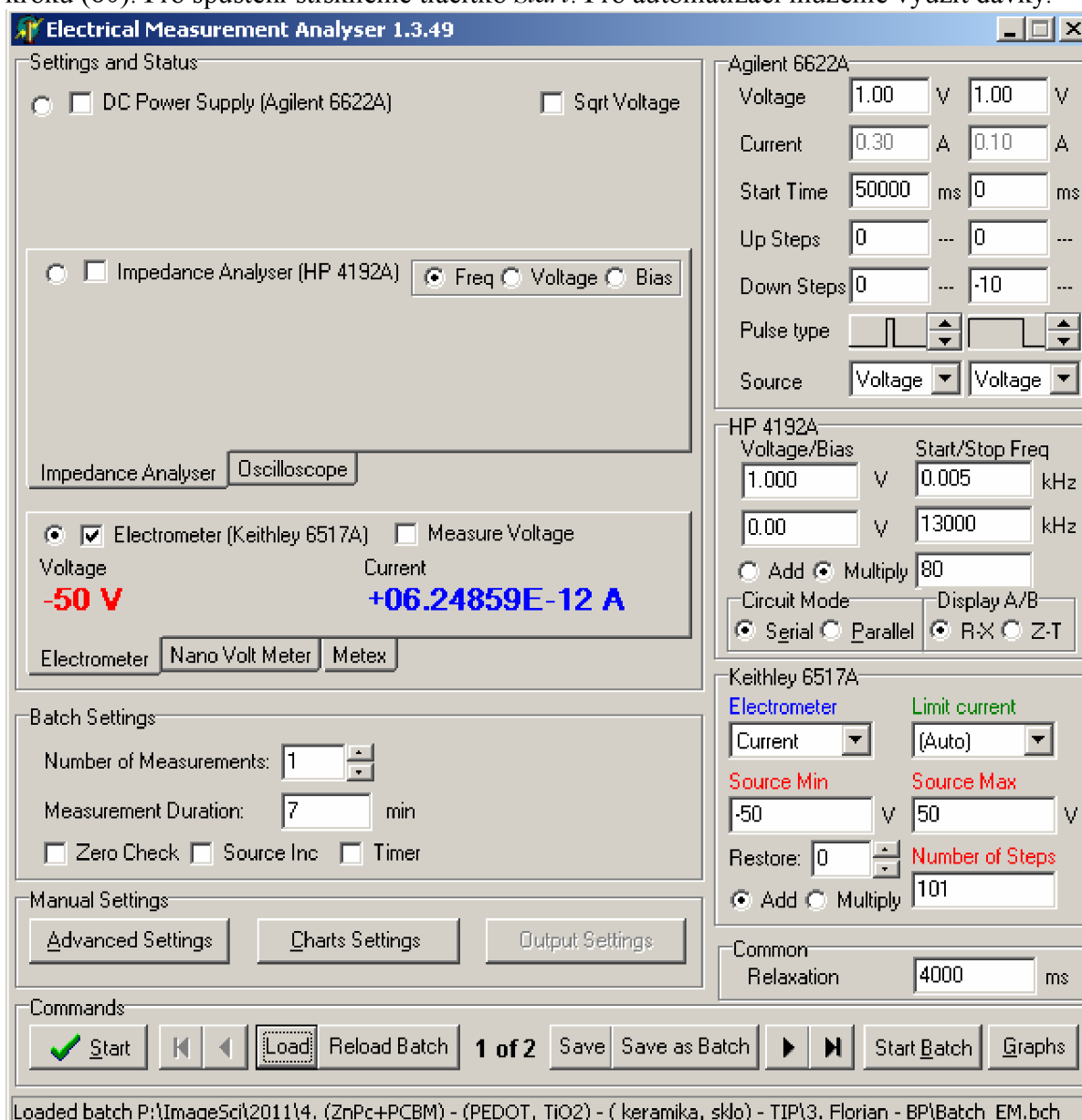
Měření za tmy mohlo být prováděno tak, že by byly na elektrody měřeného vzorku připojeny měřící elektrody elektrometru Keithley 6517A, vzorek uložen do tmy, spuštěn program Electrical Measurement Analyzer 1.3.49, nastaveny jeho parametry a spuštěno měření tlačítkem *Start*. Potom počkáme na ukončení měření a data uložíme ve formátu CSV pro další zpracování v programu Microsoft Excel. Měření byla prováděna několikrát za sebou a k automatizaci nastavení parametrů byla použita dávka.

c) Měřicí dávky

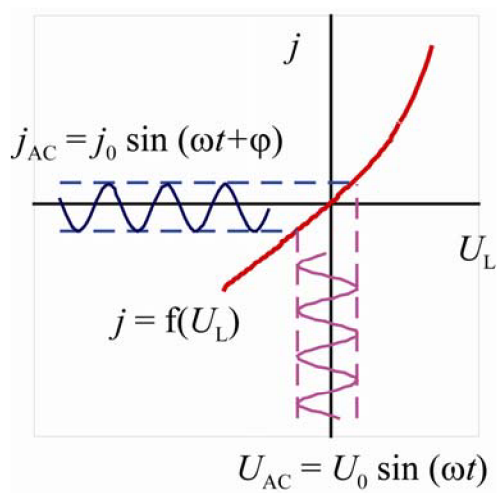
Pro načtení parametrů pomocí dávky bylo použito tlačítko *Load* v dolní části okna programu a v souborovém dialogu zvolen soubor s dávkou.

3.3.4 Automatizované měření impedančních spekter

Měření impedančních spekter je podobné měření volt-ampérových charakteristik. V okně programu zaškrtneme políčko Impedance Analyser (HP 4192A). Potom nastavíme parametry v sekci **HP 4192A** na požadované hodnoty. Parametry *Voltage/Bias* nastavíme střídavou a stejnosměrnou složku napětí a parametry *Start/Stop Freq* nastavíme počáteční a koncovou frekvenci: Parametrem *Multiply* nastavíme logaritmickou změnu kroků a nastavíme počet kroků (80). Pro spuštění stiskneme tlačítko *Start*. Pro automatizaci můžeme využít dávky.



Obr. 12: Program Electrical Measurement Analyser 1.3.49 s nastaveními pro měření



Obr. 13: Princip metody měření impedančních spekter, viz text

Na Obr. 13 je vyobrazeno měření impedančních spekter. Na vzorek vkládáme střídavé napětí o určité úhlové frekvenci ω a amplitudě U_0 . Ze závislosti napětí U_{AC} a proudu j_{AC} na čase, určíme amplitudu (maximum) impedance Z a fázový posun φ (rozdíl fází j_{AC} a U_{AC}).

3.4 Vyhodnocení experimentálních dat

Matematický aparát odvozený v teoretické části může být použit k určení rozložení hustoty lokalizovaných stavů v zakázaném pásu polovodiče, tj. přibližně závislosti přírůstku koncentrace nosičů na změně polohy Fermiovy hladiny.

3.4.1 Výpočet intenzity elektrického pole

Pro výpočet intenzity elektrického pole jsme použili vztah (23), ve kterém koeficient $\gamma = (E - D)/E$ nabývá hodnot v intervalu $\gamma \in \langle 0, 1 \rangle$ a dá se odvodit ze vztahů (11) dosazením F_r do druhého vztahu pro V_r

$$V_r = \frac{F_r \cdot r}{(D - E + 2)} \quad (59)$$

a následnou úpravou na vztah

$$F_L = (2 - E\gamma) \frac{U_L}{L}, \quad (60)$$

kde

$$\gamma = \frac{d \ln U}{d \ln j}, \quad (61)$$

resp. převrácená hodnota tohoto koeficientu je strmost volt-ampérové charakteristiky

$$m = \frac{d \ln j}{d \ln U} = \frac{1}{\gamma}. \quad (62)$$

Vztah (60) vyjadřuje, že intenzita elektrického pole F_L je přímo úměrná přivedenému elektrickému napětí U_L a nepřímo úměrná délce průtoku elektrického proudu L .

3.4.2 Výpočet hustoty elektrického proudu a hustoty nosičů elektrického náboje

Ze vztahu (16) jsme odvodili při zanedbání členu, jež vyjadřuje difúzní proud vztah pro výpočet proudové hustoty

$$j = e\mu n_{FL} F_L. \quad (63)$$

Vztah vyjadřuje přímou úměru mezi hustotou elektrického proudu j a součinem intenzity elektrického pole F_L , hustoty volných nosičů elektrického náboje n_{FL} a pohyblivosti materiálu μ .

Vztah

$$n_{sL} = E(1 - \gamma)(2 - E\gamma) \cdot \frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{eL^2} \cdot U_L, \quad (64)$$

který byl dále použit pro výpočet celkové hustoty nosičů náboje byl odvozen ze vztahu (23) přesunutím e a U_L na pravou stranu. Ze vztahu je patrná přímá úměra mezi koncentrací

volných nosičů elektrického náboje n_{FL} a součinem připojeného napětí U_L^2 a nepřímá úměra mezi n_{FL} a délkou L^3 . Intenzita elektrického pole je podíl U_L/L .

Dosažením vztahu (60) do vztahu (63) jsme získali vztah

$$j = e\mu n_{\text{FL}}(2 - E\gamma)\frac{U_L}{L}, \quad (65)$$

který jsme dále upravili pro výpočet proudové hustoty v následujícím kroku.

Pro výpočet proudové hustoty jsme nakonec použili vztah

$$j = \frac{\mu\epsilon_0\epsilon_r}{L^3} E(1 - \gamma)(2 - E\gamma)^2 U_L^2, \quad (66)$$

použitý pro výpočet celkové hustoty elektrického proudu lze odvodit aproximací $n_{\text{SL}} \approx n_{\text{FL}}$ pro vysoká napětí a dosažením vztahu (64) do vztahu

$$j = e\mu n_{\text{FL}}(2 - E\gamma)\frac{U_L}{L}. \quad (67)$$

3.4.3 Logaritmické vyjádření vztahů koncentrace nosičů náboje

Vztah pro výpočet hustoty nosičů elektrického náboje (64) byl upraven na logaritmický tvar

$$\ln n_{\text{SL}} = \ln[E(1 - \gamma)(2 - E\gamma)] + \ln \frac{\epsilon_0\epsilon_r}{eL^2} + \ln U_L, \quad (68)$$

jenž byl použit k sestrojení závislosti na napětí.

Pro koncentraci nosičů elektrického náboje platí vztah

$$n_{\text{SL}} = \int_{E_F}^{\infty} g(E)f(E - E_F)dE \quad (69)$$

a pro koncentraci volných nosičů elektrického náboje také platí vztah

$$n_{\text{FL}} = \int_{E_c}^{\infty} g(E)f(E - E_F)dE. \quad (70)$$

3.4.4 Výpočet závislosti změny Fermiovy hladiny na přírůstku nosičů elektrického náboje

Pro planární uspořádání (sendvičová struktura, $E = 1$) platí pro hustotu volných nosičů elektrického náboje vztah

$$n_{\text{FL}} = \frac{j}{e\mu} \frac{1}{2 - \gamma} \frac{L}{U_L}, \quad (71)$$

Který je možno zlogaritmovat na tvar

$$\ln n_{\text{FL}} = \ln j - \ln U_L + \ln \frac{L}{e\mu} + \ln \frac{m}{2m - 1} \approx \frac{E_F}{kT}, \quad (72)$$

který umožňuje z proudu a napětí volt-ampérové charakteristiky stanovit polohu Fermiovy hladiny.

Pro výpočet podílu diferenciálů koncentrace nosičů elektrického náboje a energie Fermiovy hladiny byl použit následující vztah

$$\frac{dn_{sL}}{dE_F} = \frac{dn_{sL}}{d \ln n_{fL}} = \frac{n_{sL} d \ln n_{sL}}{d \ln n_{fL}} \approx g(E) \quad , \quad (73)$$

který byl zlogaritmován na tvar

$$\ln \left[\frac{dn_{sL}}{dE_F} \right] \approx \ln \left[\frac{dn_{sL}}{d \ln n_{fL}} \right] = \ln n_{sL} + \ln \left[\frac{d \ln n_{sL}}{d \ln n_{fL}} \right] \approx \ln g(E) \quad . \quad (74)$$

Tento vztah umožňuje z koncentrace zachycených nosičů náboje stanovit hustotu stavů v zakázaném pásu polovodiče.

4 VÝSLEDKY A DISKUZE

4.1 Výsledky měření

S naměřenými daty byly provedeny výpočty dle výše uvedených vzorců a vytvořeny následující grafy závislostí:

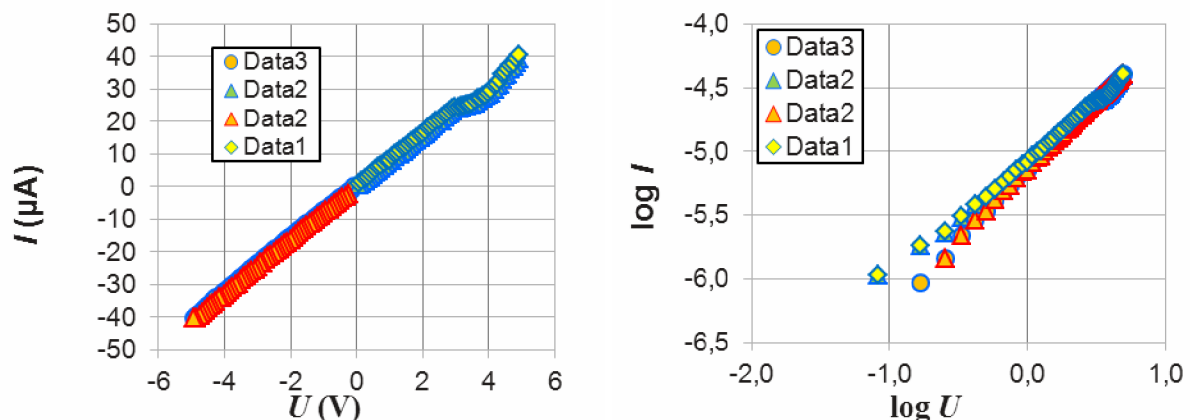
- volt-ampérové charakteristiky v lineárním a logaritmickém měřítku,
- závislosti parametru $m=1/\gamma$ na napětí a předexponenciálního faktoru A na napětí, závislost $m=1/\gamma$ na předexponenciálním faktoru A rovnice $I = A \cdot U^m$.
- závislost dekadického logaritmu hustoty nosičů elektrického náboje (n_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F .
- závislost dekadického logaritmu hustoty nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F .

Pro sestavení grafů byly použity tři sady dat ze tří měření: v sadě Data1 byly výsledky měření pro kladné hodnoty napětí, v Data2 pro kladné i záporné hodnoty napětí a v Data3 jen pro záporné hodnoty napětí. Rozsah napětí byl pro trojici měření zvolen 5 V až -5 V, nebo 50 V až -50 V. V grafech byly porovnány výsledky pro kladná napětí z Data1 a Data2 a pro záporná napětí z Data2 a Data3.

4.2 Zpracování experimentálních dat

4.2.1 Detailní vyhodnocení V-A charakteristik

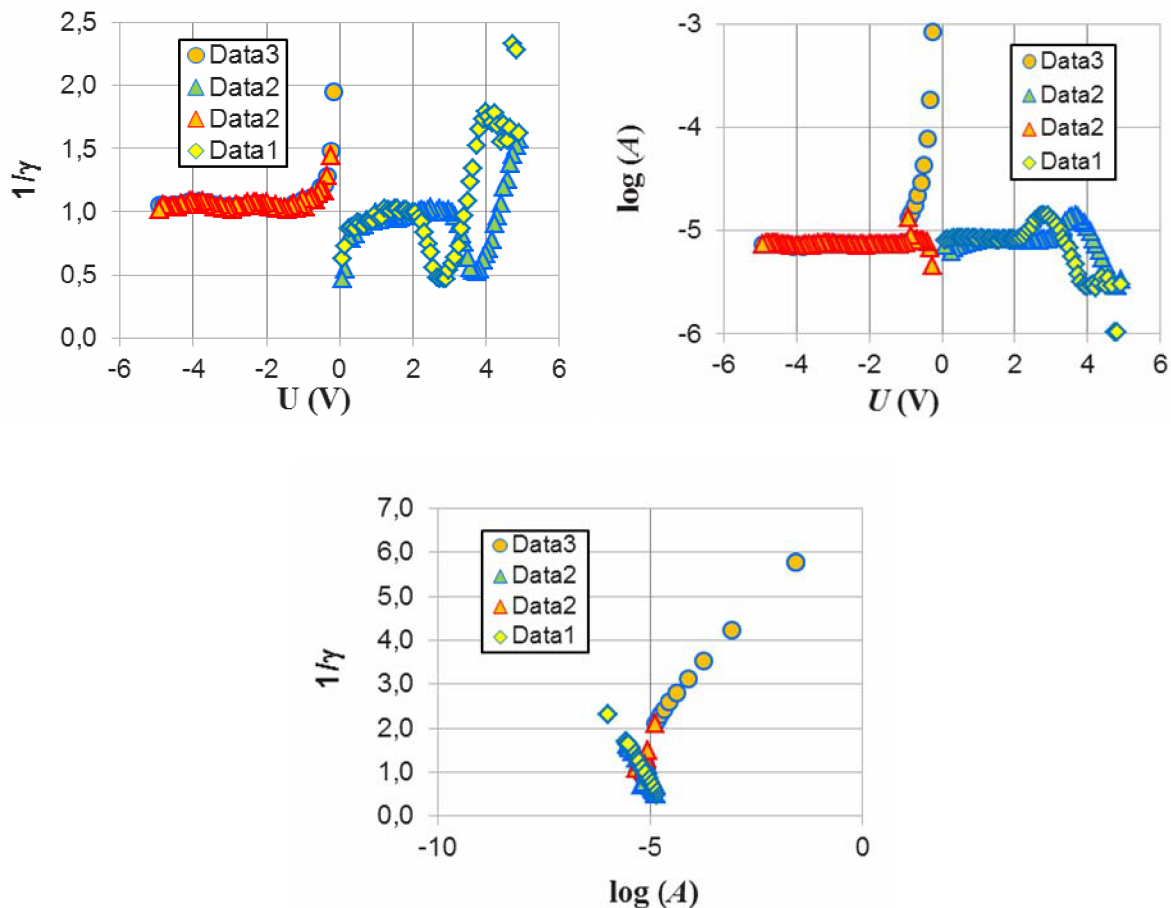
a) Vzorek materiálu ZnPc se zlatými elektrodami a sendvičovou elektrodovou konfigurací (BG)



Obr. 14: Lineární (vlevo) a logaritmické (vpravo) volt-ampérové charakteristiky

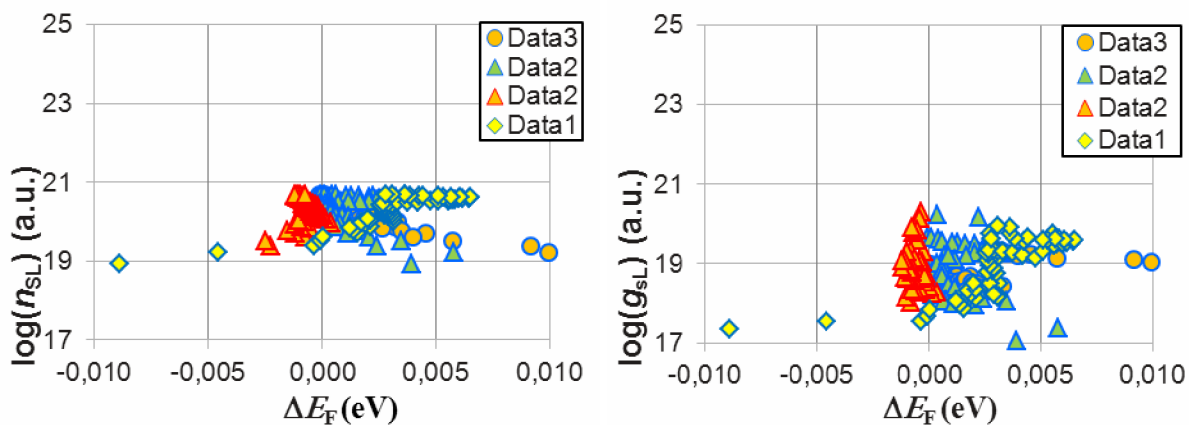
Na lineární volt-ampérové charakteristice (Obr. 14) je vidět, že změřené závislosti proudů na napětí pro kladná i záporná napětí jsou téměř lineární a obě směrnice jsou téměř stejné, což potvrzuje ohmický režim.

Na logaritmické volt-ampérové charakteristice je vidět, že její směrnice je přibližně rovna jedné a nebyly proto na ní prokázány SCLC proudy.



Obr. 15: Závislost strmosti logaritmicke závislosti V - A charakteristiky $1/\gamma$ na napětí U (vlevo nahoře), závislost předexponenciálního faktoru A na napětí (vpravo nahoře) a závislost $1/\gamma$ na předexponenciálním faktoru A (dole).

V grafu na Obr. 15 je uvedena závislost strmosti volt-ampérové charakteristiky $1/\gamma$ na napětí U . Je vidět, že se parametr $1/\gamma$ pohybuje kolem 1 (ohmický režim) a v oblasti kolem nulového napětí je v záporné části vyšší (SCLC režim) a v propustném směru nižší (proudová bariéra). V propustném směru ve vyšších napětích závislost kolísá. Na grafu závislosti předexponenciálního faktoru A na napětí U je vidět, že $1/\gamma$ je řádu 10^{-5} .



Obr. 16: Závislosti $\log(n_{sL})$ na ΔE_F (vlevo) a závislosti $\log(g_{sL})$ na ΔE_F (vpravo).

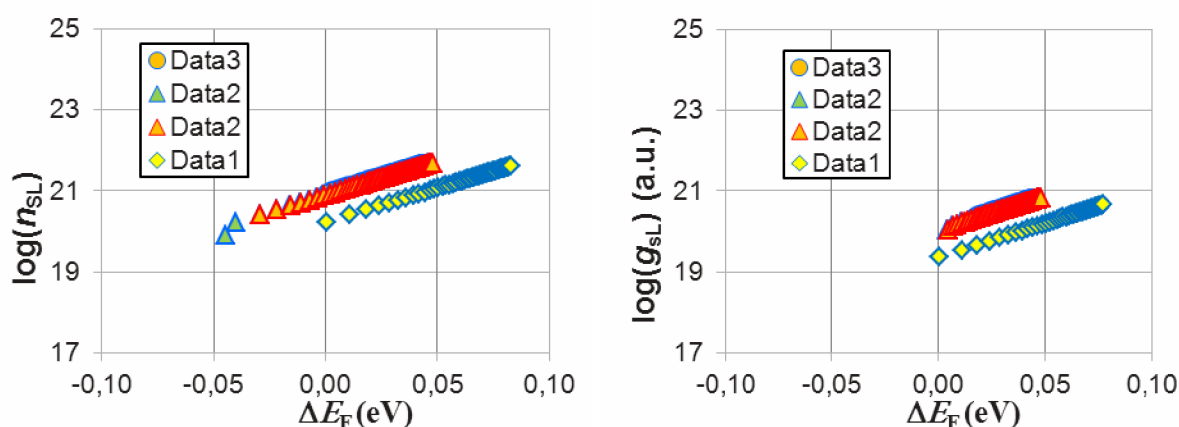
V grafu závislosti $\log(n_{sL})$ na ΔE_F (Obr. 16) lze vidět, že se Fermiova hladina téměř nepohybuje (ohmický režim). Posuv Fermiovy hladiny ve směru kladné osy je větší (asi propustný režim), posuv v záporném směru menší (asi závěrný režim). Rozptyl dat je velmi velký. Svislá osa je relativní, protože není známa permitivita materiálu.

Z grafu závislosti $\log(g_{sL})$ na ΔE_F lze zjistit pro experiment Data2 větší rozptyl dat jak v kladné tak i záporné části.

Pro záporná napětí je posuv ΔE_F menší (bariéra) než pro kladná napětí (SCLC).

b) Vzorek materiálu ZnPc se zlatými elektrodami a gapovou elektrodovou konfigurací (SD)

Pro tuto strukturou jsou již uvedeny pouze finální výsledky, tj. závislost koncentrace nosičů na posuvu Fermiovy hladiny a odpovídající závislost koncentrace (opět v relativních jednotkách – určená pro stejnou hodnotu permitivity jako u předcházejícího vzorku)



Obr. 17: Závislosti $\log(n_{sL})$ na ΔE_F (vlevo) a závislosti $\log(g_{sL})$ na ΔE_F (vpravo).

V grafu závislosti $\log(n_{sL})$ na ΔE_F (Obr. 17) lze zjistit, že pro závěrný i propustný směr jsou závislosti téměř totožné a stoupající, pro propustný směr je hodnota pro $\log(n_{sL})$ Data2 větší, než pro Data1. Posuv Fermiovy hladiny je větší než u sendvičové struktury.

Na grafu závislosti $\log(g_{sL})$ na ΔE_F lze zjistit stoupající závislost $\log(g_{sL})$ na hodnotě Fermiovy hladiny, pro propustný směr je hodnota pro $\log(n_{sL})$ Data2 větší než pro Data1. Ke změně došlo asi formováním vzorku při opakovaném měření.

4.3 Souhrnné výsledky

V této kapitole jsou uvedeny volt-ampérové charakteristiky pro záporná a kladná napětí a závislosti $\log(g_{SL})$ na ΔE_F pro vzorky organických polovodičů, jejichž konfigurace jsou uvedeny níže v tabulce (Tabulka 4).

Grafy jsou vypracovány z pohledu kontaktů (v jednom grafu jsou křivky pro různé materiály kontaktů – kap. 4.3.1 a 4.3.3) a z pohledu materiálů (v jednom grafu jsou křivky pro různé kontakty – kap. 4.3.2 a 4.3.4) pro SD (gapové) a BG (sendvičové) konfigurace elektrod.

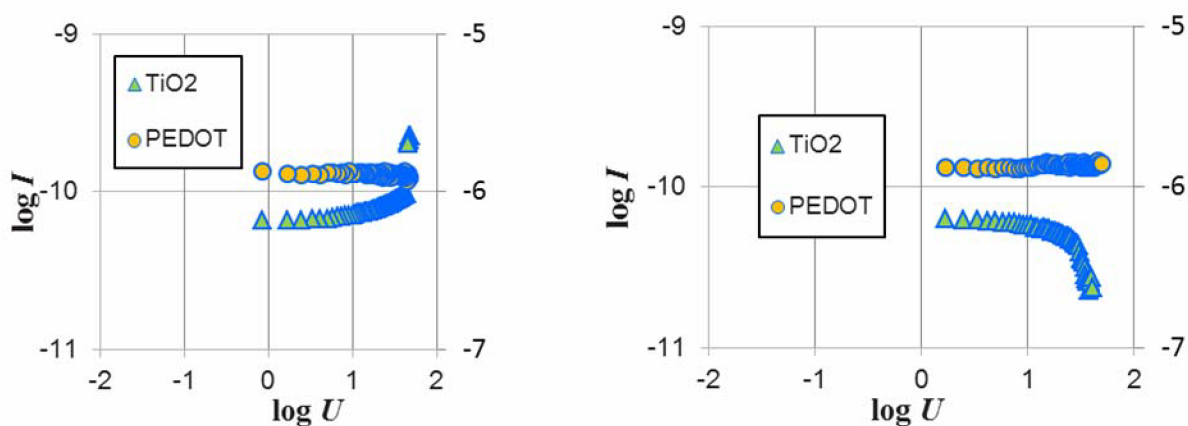
Tabulka 4: Souhrn měřených vzorků, a údajů o použitých materiálech, typech kontaktů a elektrodové konfiguraci.

Poř. číslo	podložka	ZnPc/PCBM	měřené struktury	Donor/akceptor
1	keramika	ZnPc - 3 vrstvy	SD, BG	Au
2	keramika	PCBM - 3 vrstvy	SD, BG	Au
3	keramika	ZnPc/PCBM - 3 vrstvy	SD, BG	Au
4	keramika	ZnPc - 3 vrstvy	SD, BG	TiO ₂ URH
5	keramika	PCBM - 3 vrstvy	SD, BG	TiO ₂ URH
6	keramika	ZnPc/PCBM - 3 vrstvy	SD, BG	TiO ₂ URH
7	keramika	ZnPc - 3 vrstvy	SD, BG	PEDOT
8	keramika	PCBM - 3 vrstvy	SD, BG	PEDOT
9	keramika	ZnPc/PCBM - 3 vrstvy	SD, BG	PEDOT

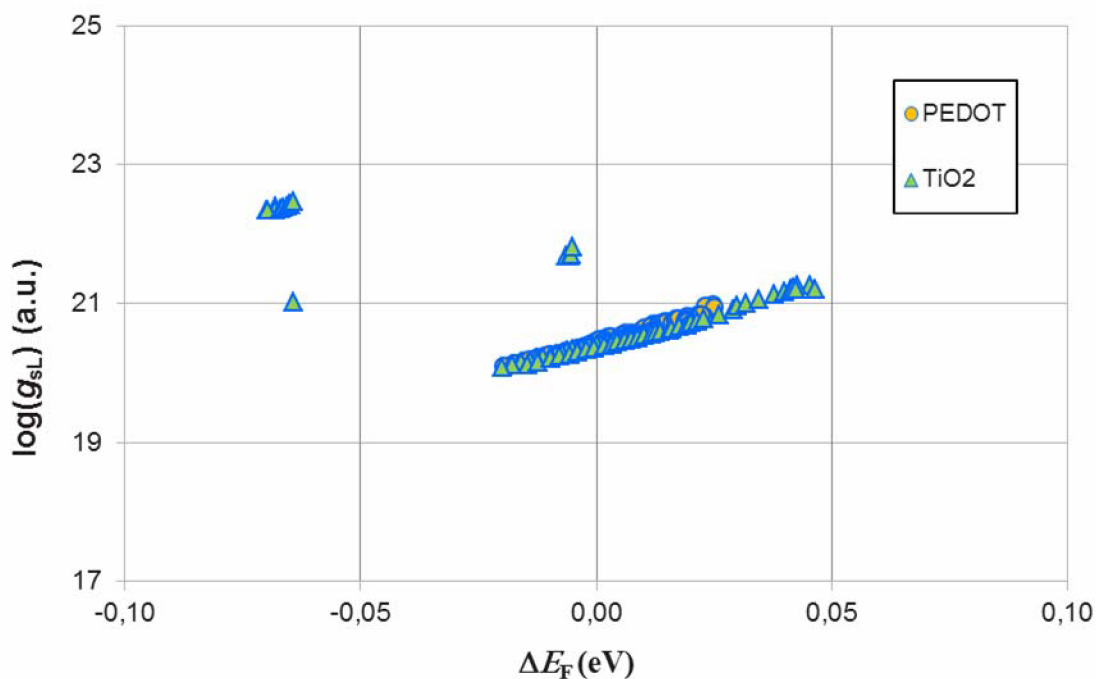
4.3.1 Souhrnné výsledky – aktivní materiál (SD)

a) ZnPc pro různé kontakty

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmickém měřítku (Obr. 18) je vidět, že proud v propustném, ani závěrném směru na obou elektrodách se stoupajícím napětím neroste lineárně, protože směrnice závislosti je menší, než 1. Pro PEDOT elektrodu protéká proud o 4 řády větší pro TiO₂ elektrodu. Pokles proudu se zvyšujícím se napětím pro TiO₂ elektrodu (obrázek vpravo) je způsoben tím, že při nulovém napětí procházel materiálem elektrický proud. Pro Au elektrodu byl zjištěn zkrat a proto její volt-ampérová charakteristika není uvedena.



Obr. 18: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku pro propustný směr (vlevo) a závěrný směr (vpravo) pro materiál ZnPc. Levá osa odpovídá TiO₂, pravá osa PEDOT.



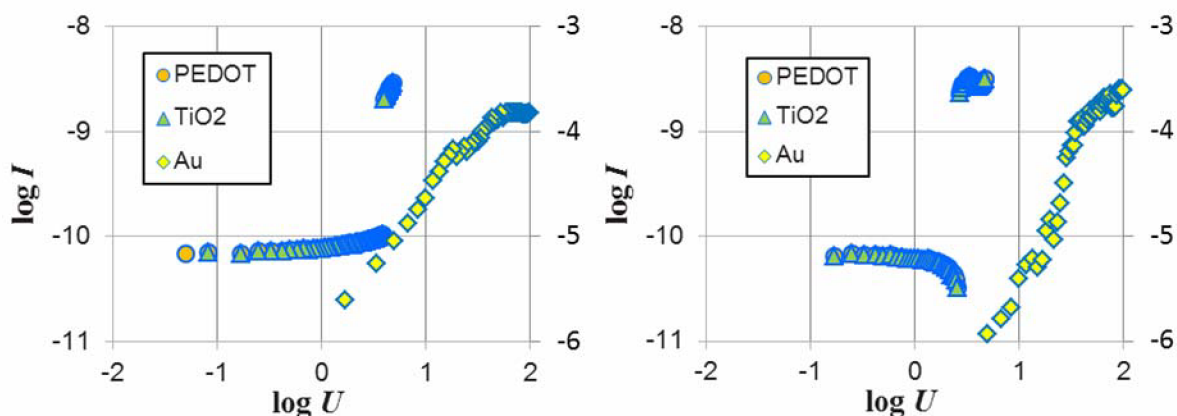
Obr. 19: Závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro materiál ZnPc a různé elektrody.

Na Obr. 19 je vidět, že téměř stejná hustota elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče je při použití PEDOT i TiO₂ elektrody.

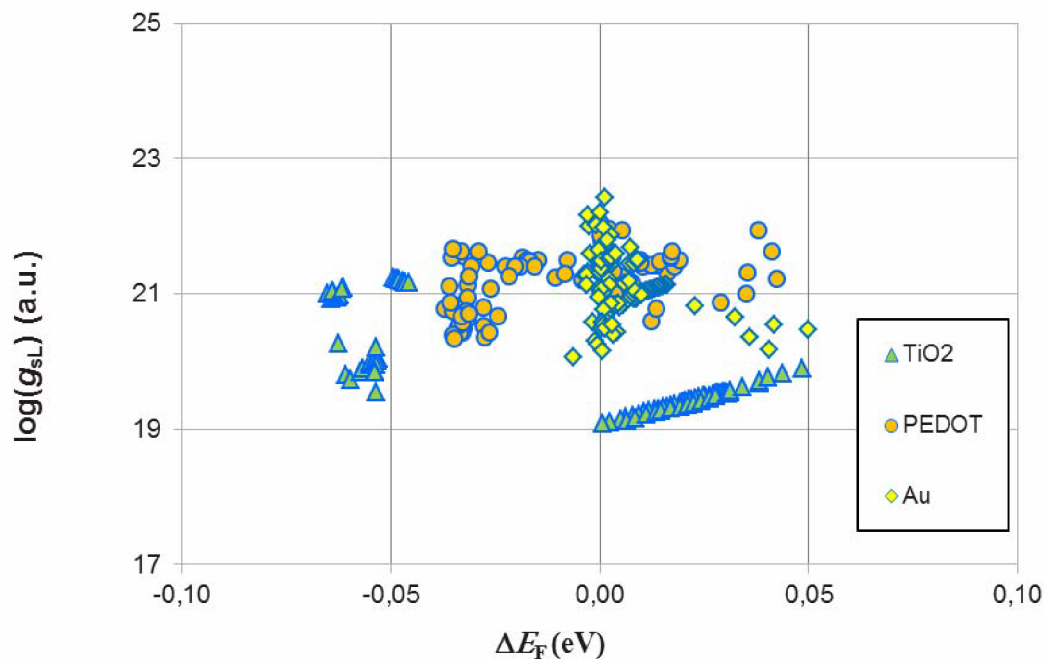
Také je vidět, že posun Fermiovy hladiny je větší při použití TiO₂ elektrody než u PEDOT elektrody.

b) PCBM pro různé kontakty

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřítcích (Obr. 20) je vidět, že největší proud protéká zlatou elektrodou (osa vpravo) a závislosti elektrod z TiO₂ a PEDOT jsou pro závěrný směr i pro propustný směr téměř totožné (osa vlevo). Pro napětí blízké 5 V nastává zvýšení vodivosti. Pokles proudu se zvyšujícím se napětím pro TiO₂ a PEDOT elektrodu je způsoben tím, že při nulovém napětí procházel materiálem elektrický proud.



Obr. 20: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro materiál PCBM a různé elektrody. Levá osa odpovídá PEDOT a TiO₂, pravá osa Au.



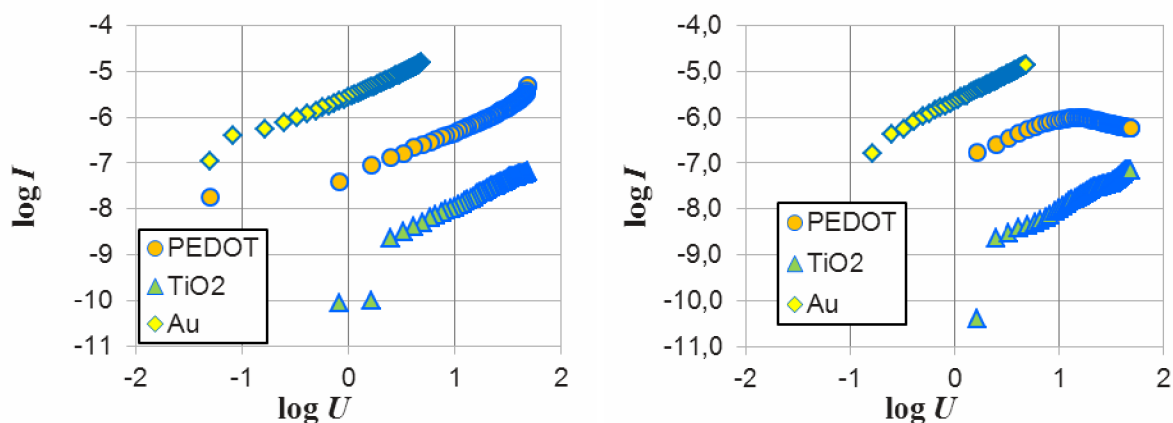
Obr. 21: Závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro materiál PCBM a různé elektrody.

Na Obr. 21 je vidět, že největší hustota elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče je při použití zlaté elektrody a hustoty stavů u PEDOT elektrody jsou větší, než u TiO₂ elektrody.

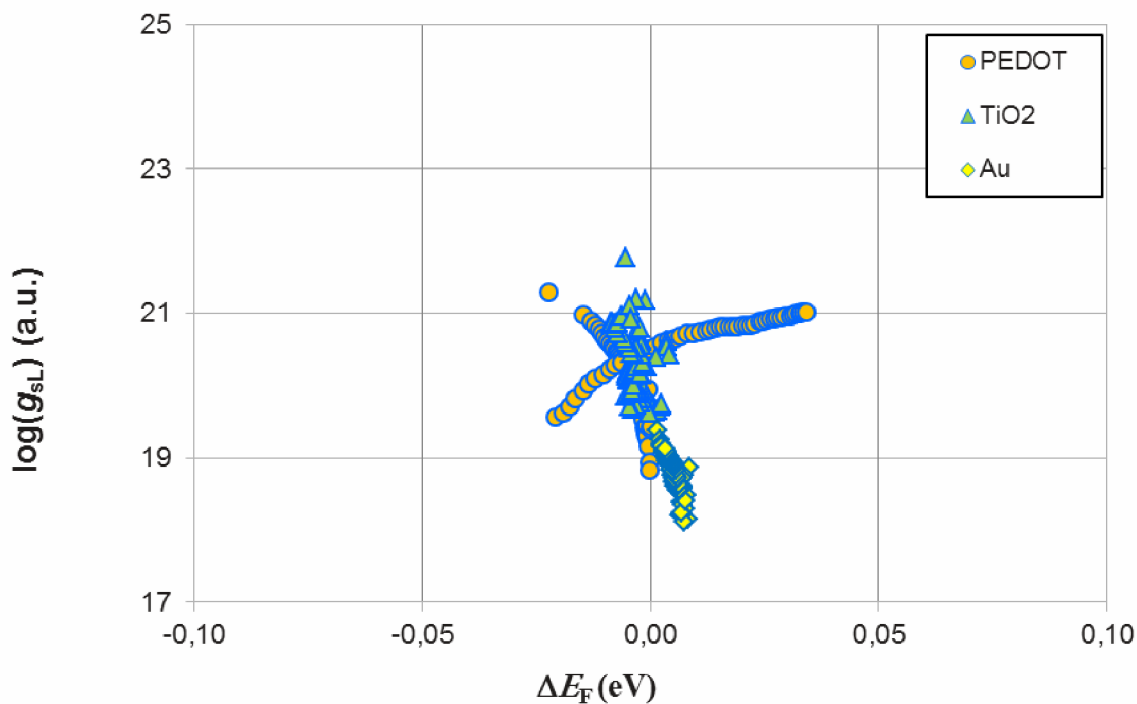
Také je vidět, že největší posun Fermiovy hladiny nastává pro kladná napětí při použití při použití TiO₂ a PEDOT elektrod, pro zlatou elektrodu se Fermiova hladina neposouvá (ohmický proud).

c) Směs ZnPc - PCBM pro různé kontakty

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících na Obr. 22 je vidět, že největší proud protéká zlatou elektrodou, následuje PEDOT a nejmenší TiO₂ elektrodou. Závislosti jsou pro TiO₂ a Au lineární, pro PEDOT je závislost nelineární.



Obr. 22: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro směs materiálů ZnPc a PCBM a různé elektrody.



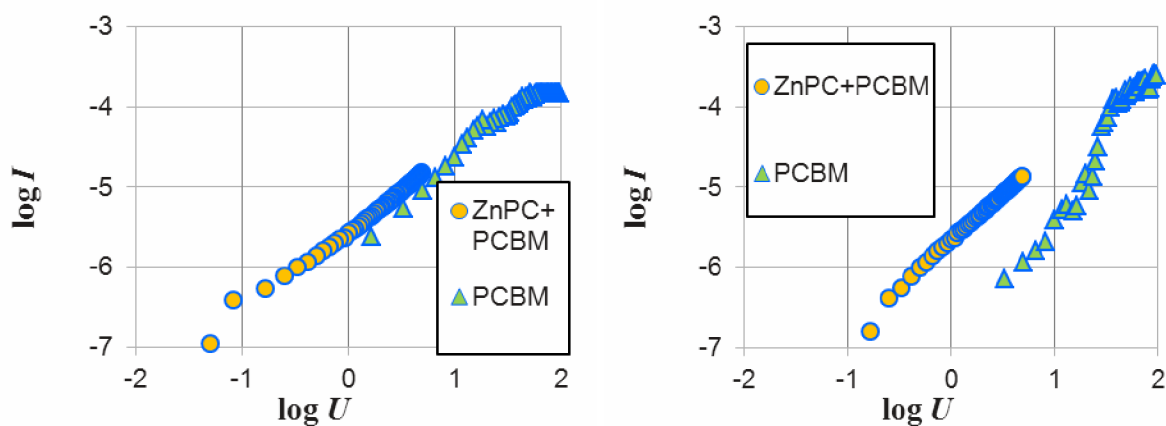
Obr. 23: Závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro směs materiálů ZnPc a PCBM a různé elektrody.

Na Obr. 23 je vidět, že hustoty elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče jsou u PEDOT větší než pro TiO₂ a Au elektrody. Také je vidět, že největší posun Fermiovy hladiny nastává v propustném i závěrném směru u PEDOT elektrody.

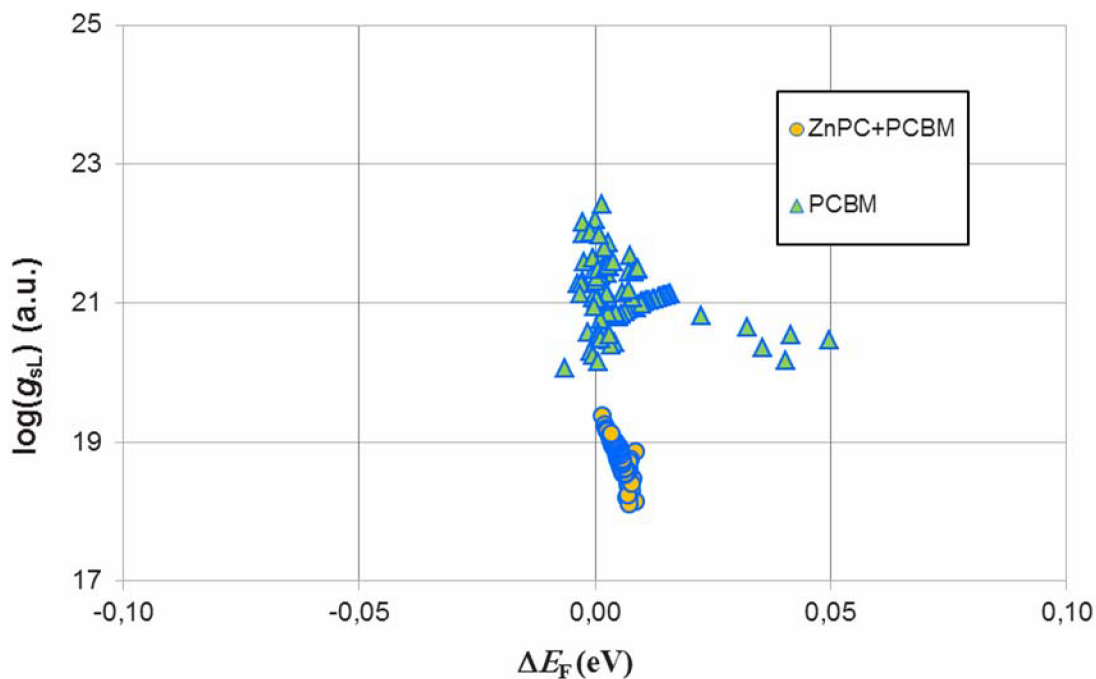
4.3.2 Souhrnné výsledky – horní elektroda (SD)

a) Au elektroda pro různé materiály

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících (Obr. 24) je vidět, že proud v propustném i závěrném směru pro PCBM a směs ZnPC/PCBM stoupá lineárně a že směrnice závislosti je blízká 1, což naznačuje ohmický režim. Vodivost obou materiálů je podobná. U materiálu ZnPC byl zjištěn zkrat a proto jeho volt-ampérová charakteristika nebyla uvedena.



Obr. 24: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro Au elektrodu a různé materiály.

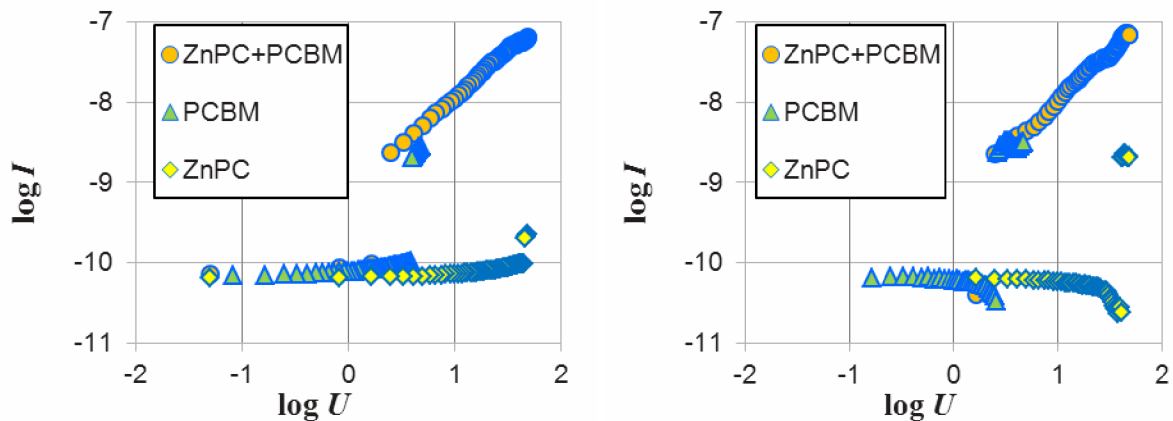


Obr. 25: Závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro Au elektrodu a různé materiály.

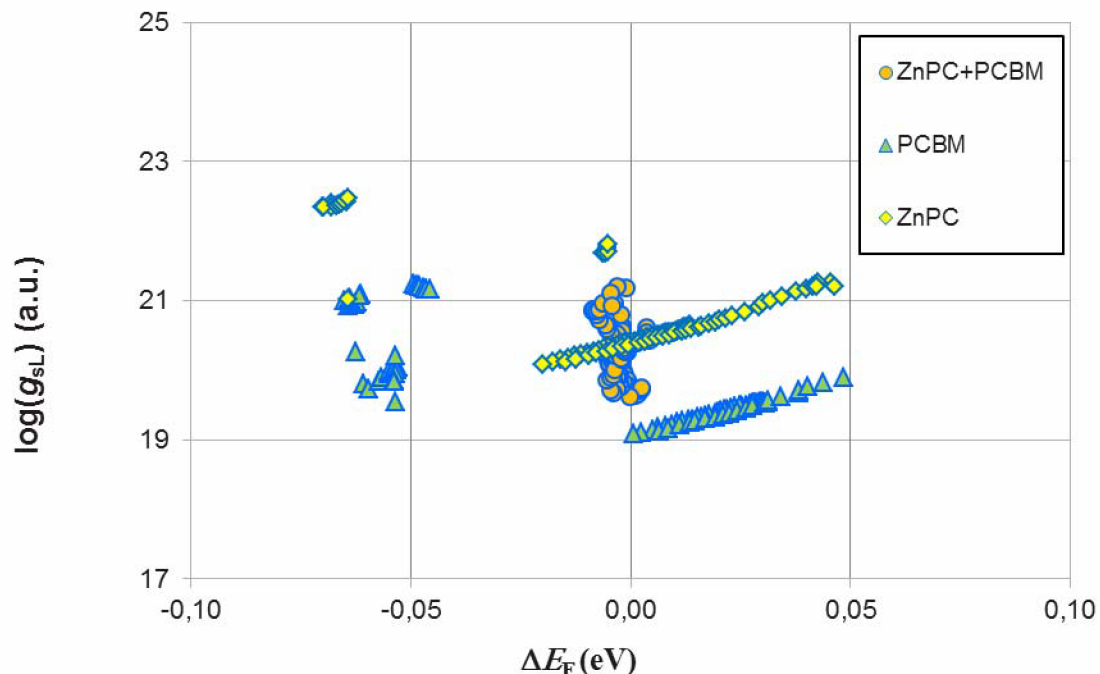
Na Obr. 25 je vidět, že hustota elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče je větší u PCBM, než u směsi ZnPc/PCBM. Také je vidět, že posun Fermiovy hladiny je pro obě polarity napětí velmi malý. Pro PCBM dochází většímu posunu Fermiovy hladiny.

b) TiO_2 elektroda pro různé materiály

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřítcích na Obr. 26 je vidět, že proud pro obě polarity napětí u ZnPc a PCBM se zvětšujícím se napětím stoupá velmi málo (bariéra), u směsi ZnPc/PCBM je závislost lineárně stoupající. Největší proud protéká směsí ZnPc/PCBM.



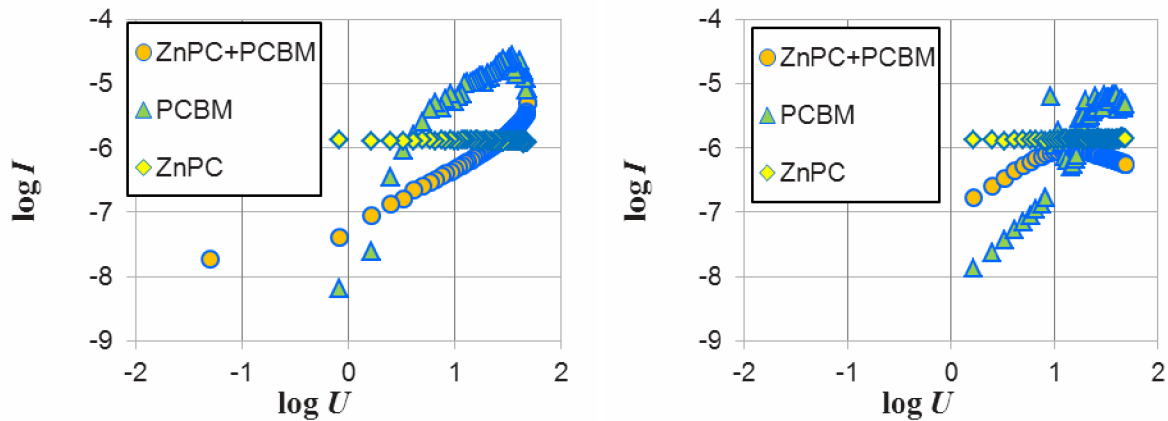
Obr. 26: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro TiO_2 elektrodu a různé materiály.



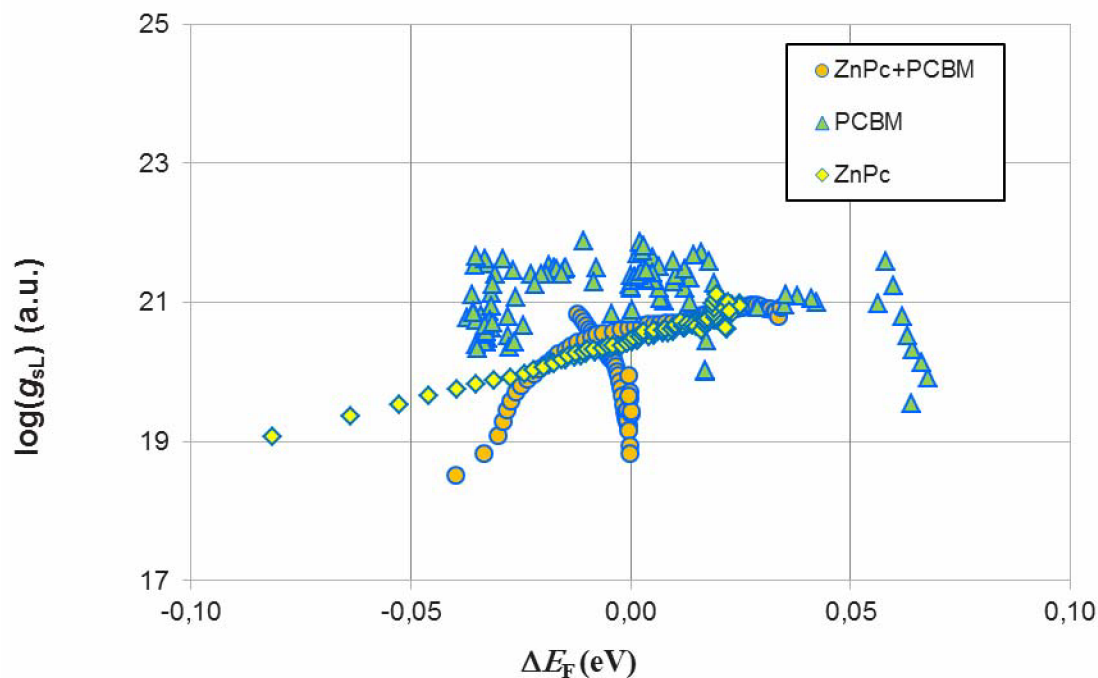
Obr. 27: Závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro TiO_2 elektrodu a různé materiály.

Na Obr. 27 je vidět, že hustoty elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče jsou u všech tří materiálů téměř stejné. Také je vidět, že posun Fermiovy hladiny nastávající pro kladná napětí při použití materiálů ZnPc a PCBM je 0,05 eV, v závěrném směru 0,06 eV a nejmenší posun je u jejich směsi.

c) PEDOT elektroda pro různé materiály



Obr. 28: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro PEDOT elektrodu a různé materiály.



Obr. 29: Závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro PEDOT elektrodu a různé materiály.

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících (Obr. 28) je vidět, že se proud u ZnPc v propustném, závěrném směru má limitní hodnotu 10^{-6} A. U PCBM a směsi ZnPc/PCBM jsou závislosti lineárně stoupající. Nelze určit, který z materiálů má větší elektrickou vodivost.

Na Obr. 29 je vidět, že největší hustotu elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče má PCBM, následuje ZnPc a nejmenší ji má směs ZnPc/PCBM.

Také je vidět, že největší posun Fermiovy hladiny nastává v závěrném směru při použití ZnPc (0,08 eV), v propustném směru u PCBM (0,07 eV).

V Tabulka 6 jsou uvedeny polohy Fermiovy hladiny za termodynamické rovnováhy pro různé kombinace aktivní vrstvy a kontaktu, které byly využity pro výpočet energetické osy. Koncentrace prostorového náboje a přírůstek koncentrace prostorového náboje byla vztažena k referenční hodnotě 10^{20} m^{-3}

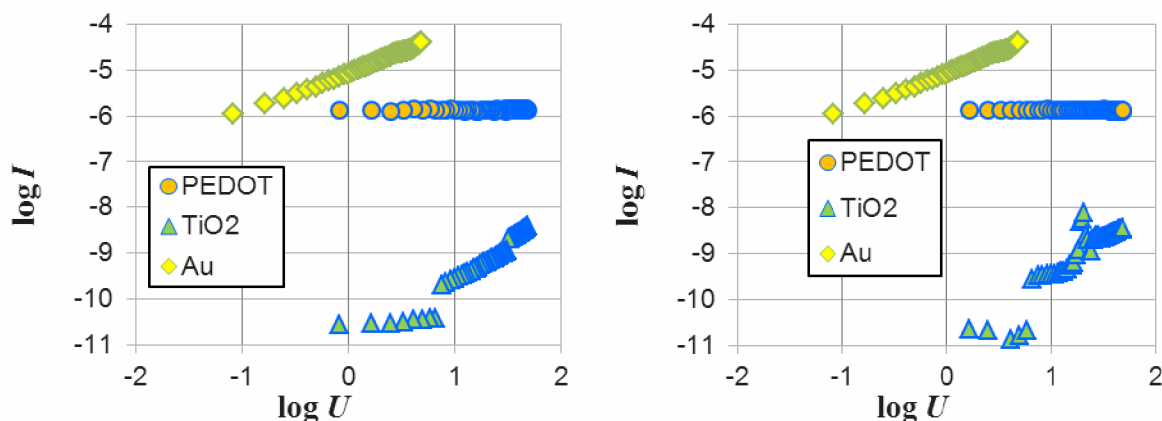
Tabulka 5: Poloha Fermiovy hladiny za termodynamické rovnováhy pro různé měřené struktury

	Au	TiO ₂	PEDOT
ZnPc	-0,197 eV	-0,682 eV	-0,427 eV
PCBM	-0,330 eV	-0,600 eV	-0,400 eV
ZnPc/PCBM	-0,327 eV	-0,532 eV	-0,439 eV

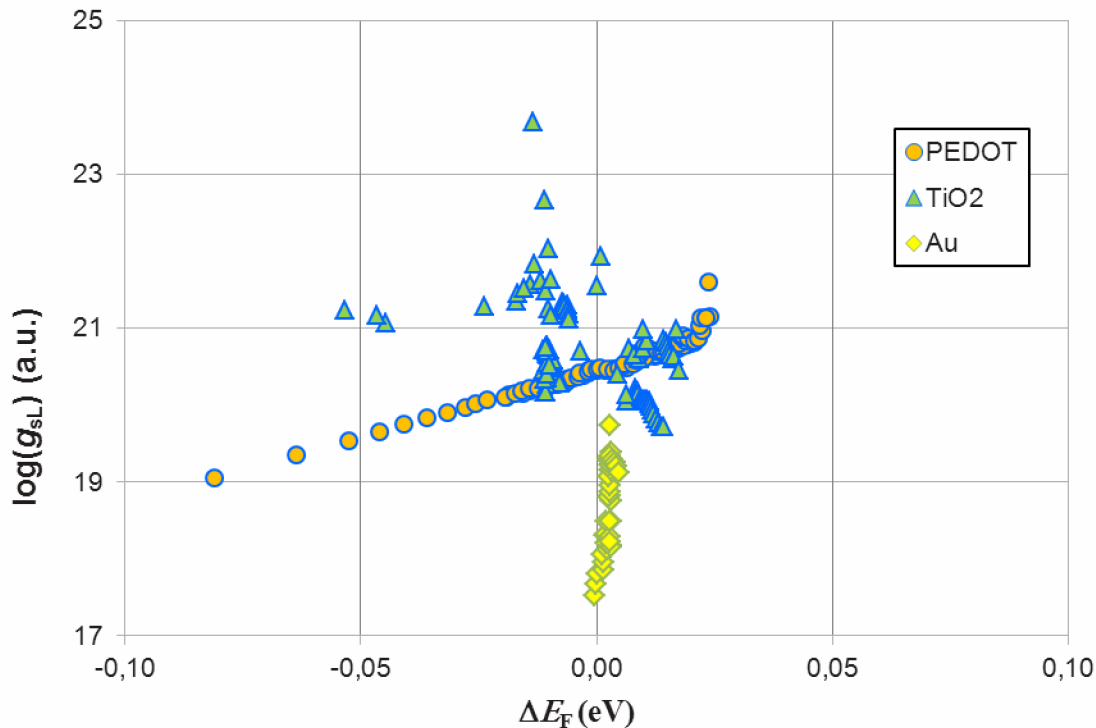
4.3.3 Souhrnné výsledky – aktivní materiál (BG)

a) ZnPc pro různé kontakty

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmickém měřítku na Obr. 30 je vidět, že proud v propustném, i závěrném směru na zlaté elektrodě se stoupajícím napětím lineárně roste se směrnicí závislosti kolem jedné, což vypovídá o ohmickém režimu, limitní proud pro PEDOT je 10^{-6} A. Největší vodivost má zlatá elektroda, následuje PEDOT a nejmenší vodivost má TiO₂ elektroda. Všechny elektrody mají pro kladná i záporná napětí téměř totožné závislosti.



Obr. 30: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku pro propustný (vlevo) a závěrný směr (vpravo) směru pro materiál ZnPc a různé elektrody.



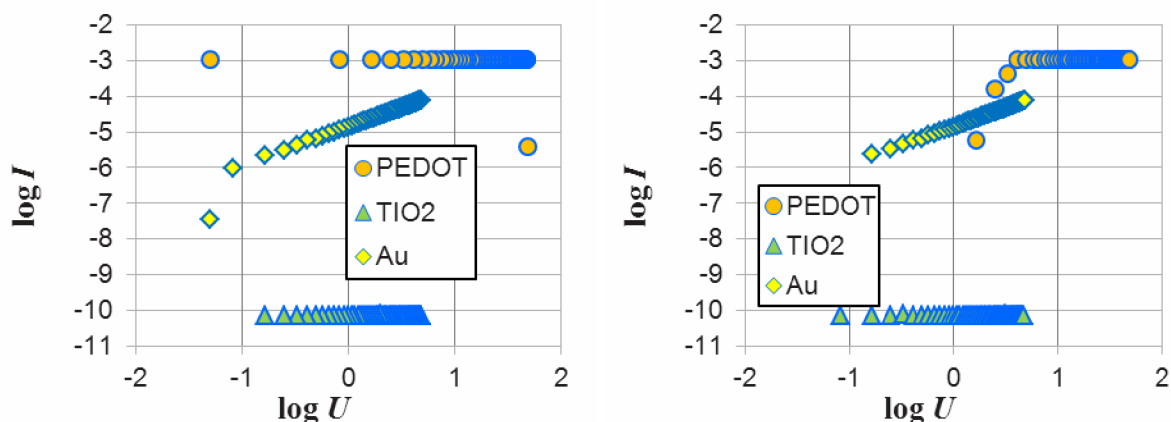
Obr. 31: Závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro materiál ZnPc a různé elektrody.

Na Obr. 31 je vidět, že hustota elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče je při použití PEDOT elektrody téměř stejná, jako u TiO₂ elektrody, nejmenší hustota je u Au elektrody (o tři řády nižší, než u PEDOT elektrody).

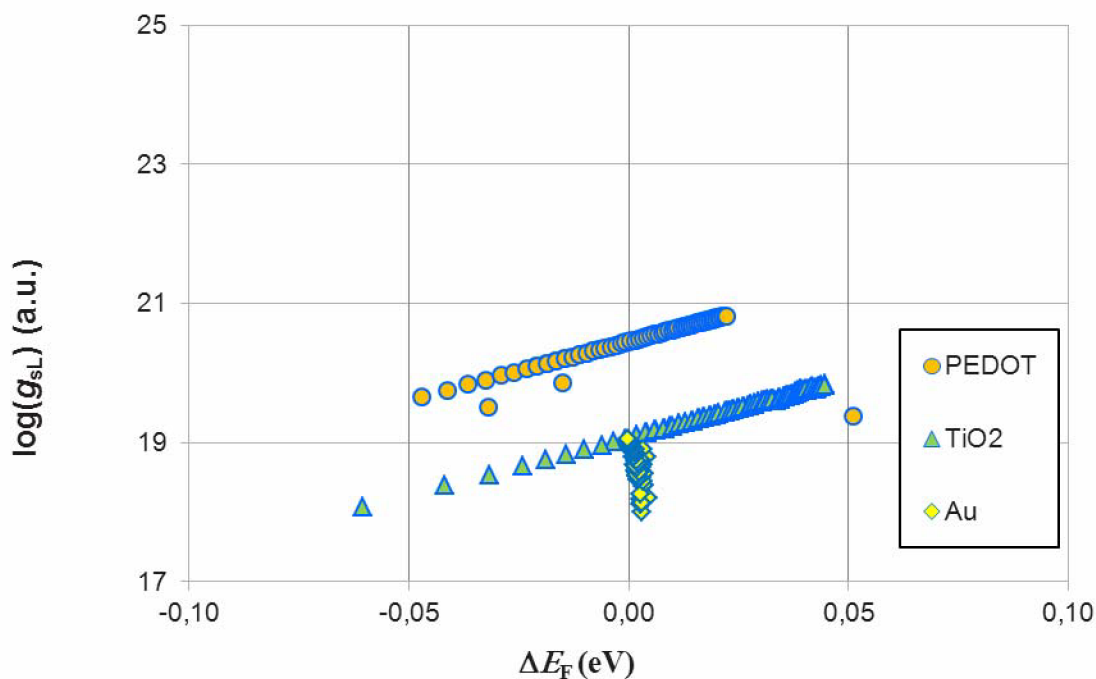
Také je vidět, že největší posuny Fermiovy hladiny elektronů jsou pro kladná i záporná napětí při použití PEDOT elektrody (0,03 eV a 0,08 eV).

b) PCBM pro různé kontakty

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících na Obr. 32 je vidět, že největší proud protéká PEDOT elektrodou, která má limitní proud 10^{-3} A, což může být limit měřícího přístroje. Závislost je u zlaté elektrody lineární se směrnici blízkou 1, což naznačuje ohmický režim. U TiO₂ elektrody se při napětí blízkém 5 V nastává zvýšení vodivosti.



Obr. 32: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro materiál PCBM a různé elektrody.

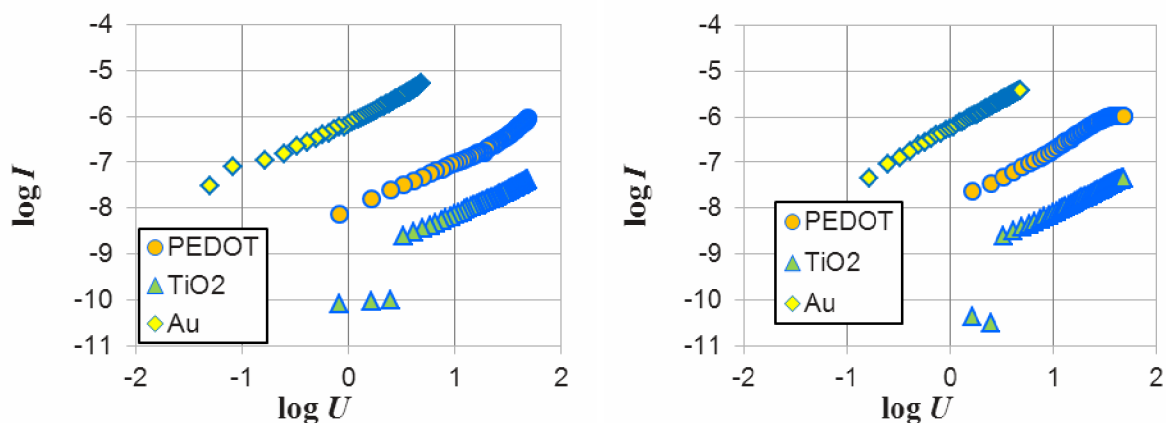


Obr. 33: závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro materiál PCBM a různé elektrody.

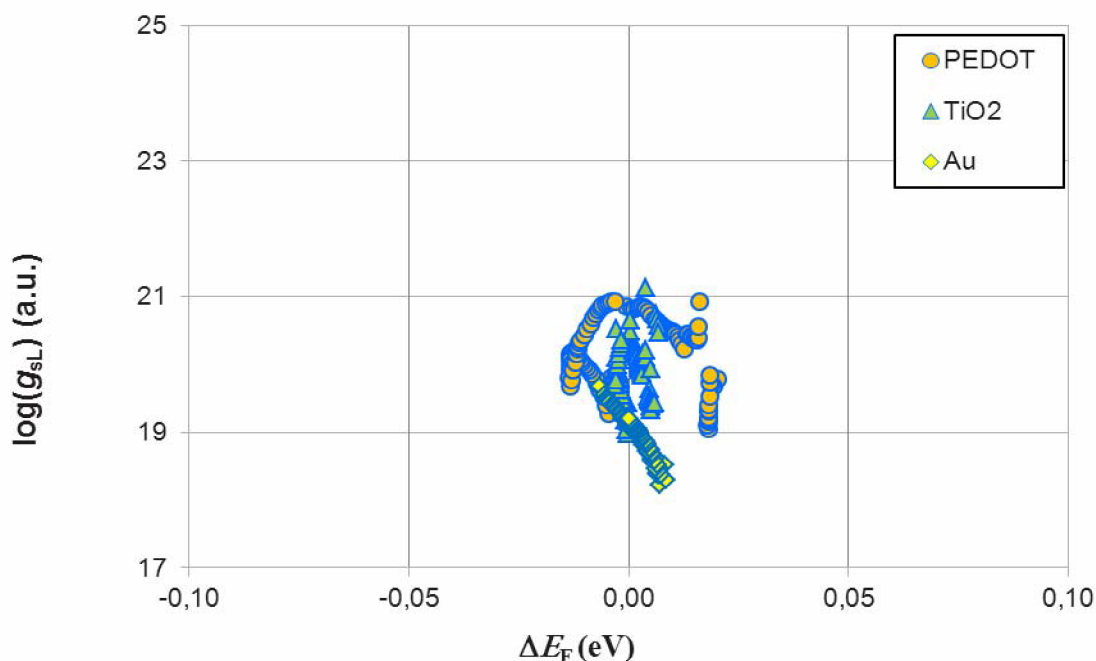
Na Obr. 33 je vidět, že největší hustota elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče je při použití PEDOT elektrody, následuje TiO_2 a nejmenší hustotu stavů má zlatá elektroda. Také je vidět, že největší posun Fermiovy hladiny nastává v závěrném i propustném směru při použití TiO_2 elektrody (0,06 eV v závěrném a 0,05 eV v propustném směru).

c) Směs ZnPc - PCBM pro různé kontakty

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících na Obr. 34 je vidět, že největší proud protéká zlatou elektrodou, následuje PEDOT a nejmenší proud protéká TiO_2 elektrodou.



Obr. 34: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro směs materiálů ZnPc a PCBM a různé elektrody.



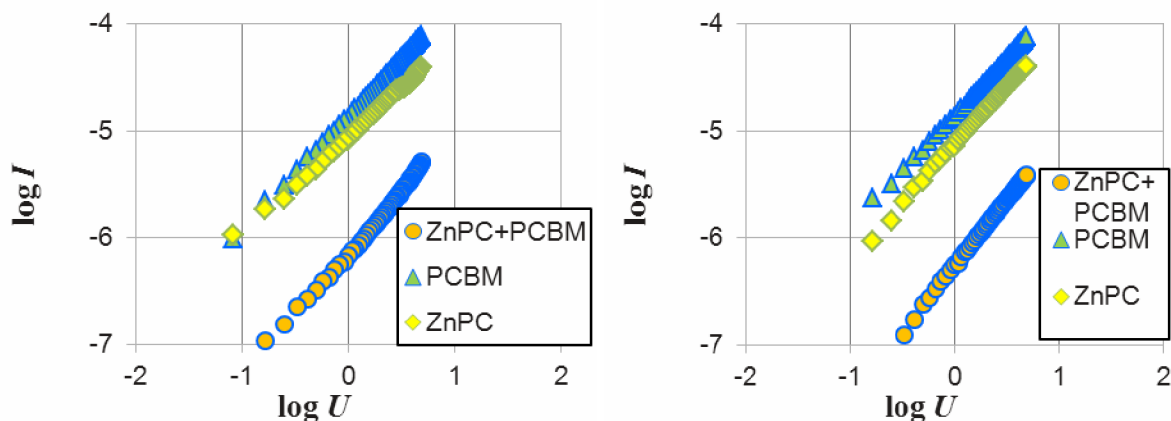
Obr. 35: závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sl}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro směs materiálů ZnPc a PCBM a různé elektrody.

Na Obr. 35 je vidět, že hustoty elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče jsou u PEDOT a TiO_2 elektrod téměř stejné a větší, než u zlaté elektrody. Také je vidět, že největší posun Fermiovy hladiny nastává pro kladná i záporná napětí u PEDOT elektrody.

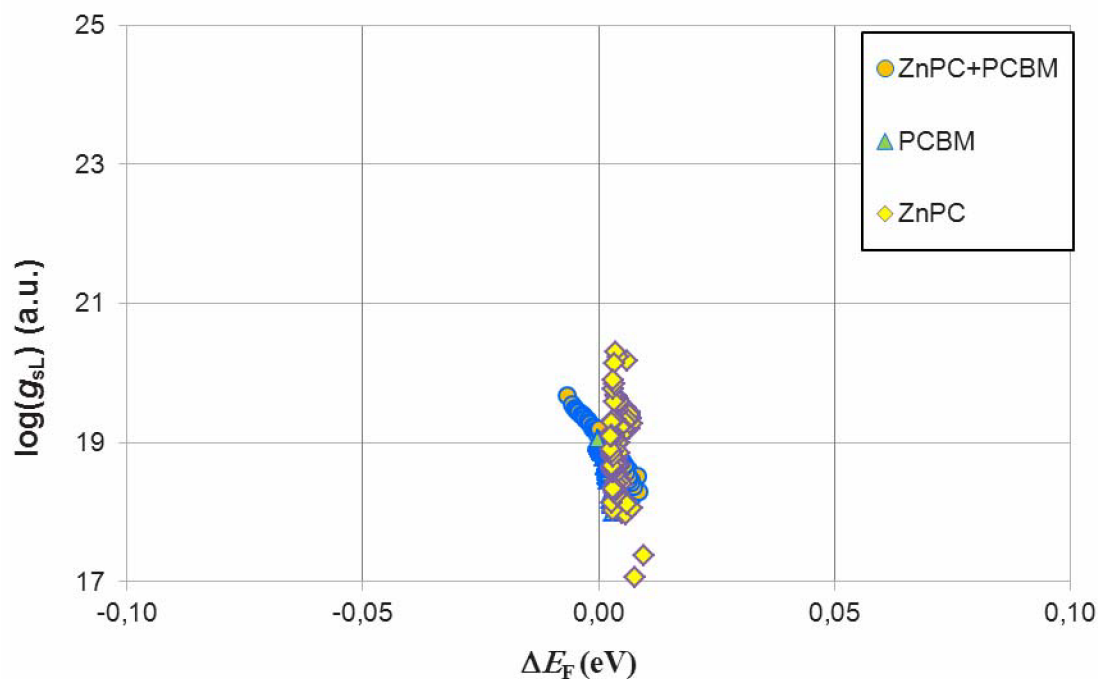
4.3.4 Souhrnné výsledky – horní elektroda (BG)

a) Au elektroda pro různé materiály

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících na Obr. 36 je vidět, že se proud pro kladná i záporná napětí u všech materiálů stoupá lineárně s napětím a směrnice závislosti je blízká jedné, což naznačuje ohmický režim. Vodivost ZnPC a PCBM materiálů je podobná a větší, než u jejich směsi.



Obr. 36: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro Au elektrodu a různé materiály.



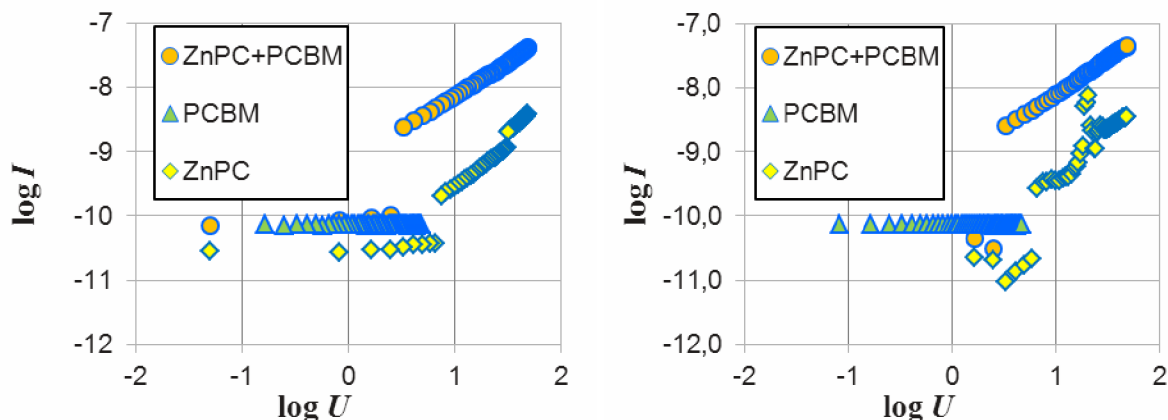
Obr. 37: závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro Au elektrodu a různé materiály.

Na Obr. 37 je vidět, že hustota elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče je největší u ZnPc, následuje jejich směs a nejmenší u PCBM.

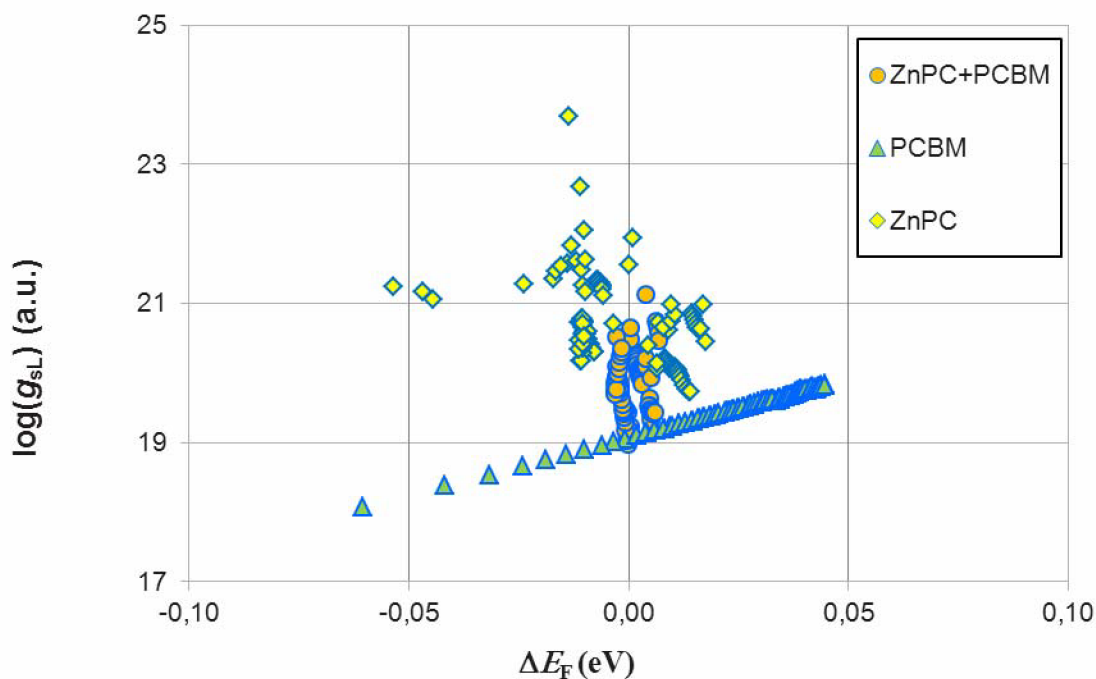
Také je vidět, že největší posun Fermiovy hladiny pro kladná i záporná napětí je u směsi ZnPc/PCBM (0,01 eV).

b) TiO_2 elektroda pro různé materiály

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících na Obr. 38 je vidět, že jsou v propustném i závěrném směru téměř stejné. Při napětí do 5 V roste proud se stoupajícím napětím se směrnici blízkou 0 a po dosažení hranice 5 V roste se směrnici blízkou 1, což naznačuje ohmický režim. Největší proud protéká u směsi ZnPc/PCBM, následuje PCBM a nejmenší u ZnPc.



Obr. 38: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro TiO_2 elektrodu a různé materiály.



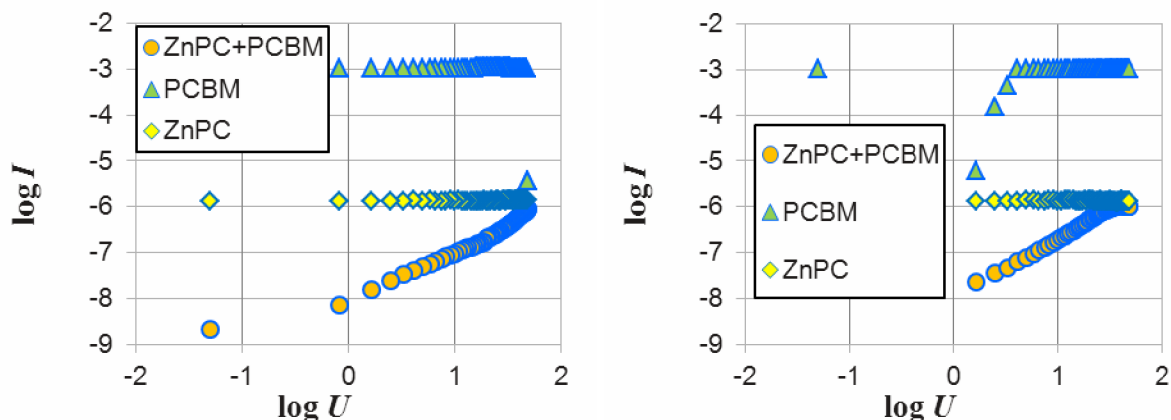
Obr. 39: závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro pro TiO_2 elektrodu a různé materiály.

Na Obr. 39 je vidět, že hustoty elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče jsou největší u ZnPC a nejmenší u PCBM.

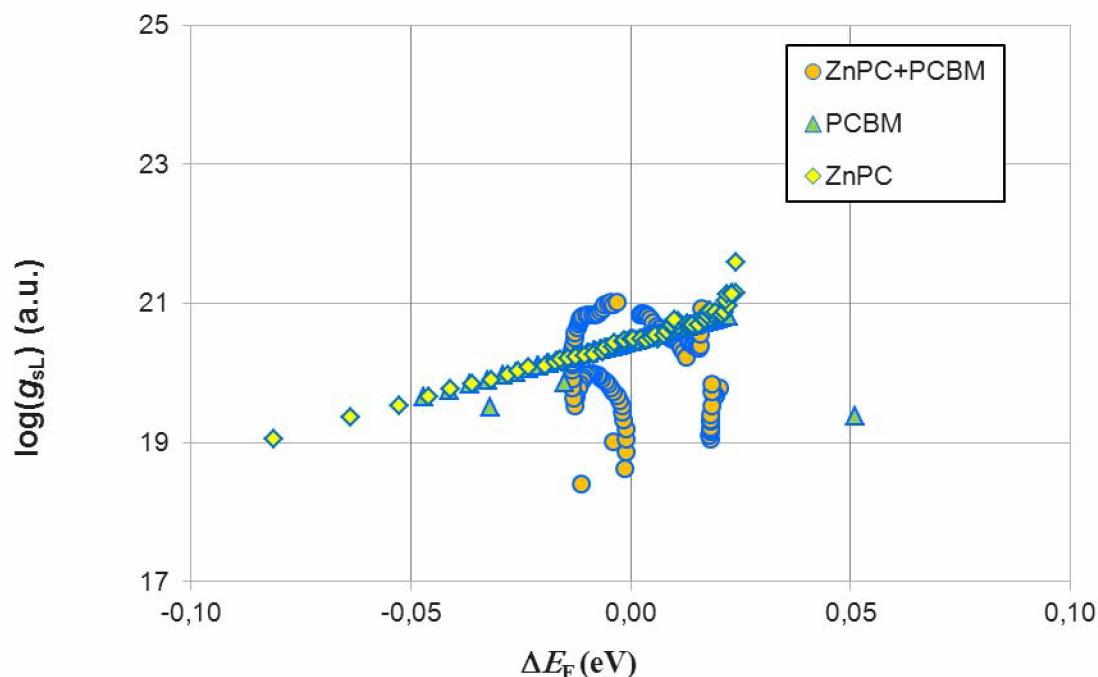
Také je vidět, že posun Fermiovy hladiny je největší pro kladná i záporná napětí (0,05 eV) při použití materiálu PCBM, následuje ZnPC a nejmenší posun je u jejich směsi.

c) PEDOT elektroda pro různé materiály

Na volt-ampérových charakteristikách v logaritmických měřících na Obr. 40 je vidět, že se proud u ZnPC pro kladná i záporná napětí má limitní hodnotu 10^{-6} A a u PCBM 10^{-3} A. U směsi ZnPC/PCBM jsou závislosti stoupající. Největší elektrickou vodivost má PCBM s limitní hodnotou proudu 10^{-3} A následuje ZnPC s limitní hodnotou proudu 10^{-6} A nejmenší ji má jejich směs.



Obr. 40: Volt-ampérové charakteristiky v logaritmickém měřítku v propustném (vlevo) a závěrném (vpravo) směru pro PEDOT elektrodu a různé materiály.



Obr. 41: závislosti logaritmu koncentrace nosičů náboje v zakázaném pásu polovodiče (g_{sL}) na změně hodnoty Fermiovy hladiny ΔE_F pro PEDOT elektrodu a různé materiály.

Na Obr. 41 je vidět, že všechny tři materiály mají podobnou hustotu elektronových stavů v zakázaném pásu polovodiče. Také je vidět, že největší posun Fermiovy hladiny nastává pro záporná napětí při použití ZnPc (0,08 eV), pro kladná napětí také u PCBM (0,03 eV).

V Tabulka 6 jsou uvedeny polohy Fermiovy hladiny za termodynamické rovnováhy pro různé kombinace aktivní vrstvy a kontaktu, které byly využity pro výpočet energetické osy. Koncentrace prostorového náboje a přírůstek koncentrace prostorového náboje byla vztažena k referenční hodnotě 10^{20} m^{-3}

Tabulka 6: Poloha Fermiovy hladiny za termodynamické rovnováhy pro různé měřené struktury

	Au	TiO ₂	PEDOT
ZnPc	-0,300 eV	-0,614 eV	-0,427 eV
PCBM	-0,287 eV	-0,600 eV	-0,255 eV
ZnPc/PCBM	-0,363 eV	-0,54 eV	-0,462 eV

5 ZÁVĚR

Z výše uvedených grafů lze určit pro gapové (SD) konfigurace elektrod následující:

- a) Z použitých fotoaktivních materiálů má největší elektrickou vodivost ZnPc, následuje PCBM a nejmenší elektrickou vodivost má směs ZnPc/PCBM. Materiály ZnPc a PCBM mají podobný rozsah hodnot hustoty elektronových stavů (g_{SL}) v zakázaném pásu polovodiče, směs ZnPc/PCBM má menší rozptyl hodnot v porovnání s nimi. V materiálech ZnPc a PCBM nastávají větší posuny Fermiových hladin, než u jejich směsi.
- b) Z použitých elektrod byla jednoznačně nejvodivější zlatá, následovala ji PEDOT a nejmenší vodivost měla TiO_2 elektroda. TiO_2 a PEDOT elektrody mají podobný rozsah hodnot hustoty elektronových stavů (g_{SL}) v zakázaném pásu polovodiče a zlatá elektroda ho má proti nim nižší. U TiO_2 a PEDOT elektrody nastávají větší posuny Fermiových hladin, než u zlaté elektrody (ohmický kontakt).

Pro sendvičové (BG) konfigurace elektrod následující

- a) Z použitých fotoaktivních materiálů má největší elektrickou vodivost PCBM, následuje ZnPc a nejmenší elektrickou vodivost má směs ZnPc/PCBM. Materiál ZnPc má největší rozsah hodnot i průměrnou hodnotu hustoty elektronových stavů (g_{SL}) v zakázaném pásu polovodiče, následuje směs ZnPc/PCBM a PCBM. V materiálech ZnPc a PCBM nastávají větší posuny Fermiových hladin než u jejich směsi.
- b) Z použitých elektrod byla jednoznačně nejvodivější zlatá, následovala ji PEDOT a nejmenší vodivost měla TiO_2 elektroda. TiO_2 a PEDOT elektrody mají podobný rozsah hodnot hustoty elektronových stavů (g_{SL}) v zakázaném pásu polovodiče a zlatá elektroda ho má proti nim nižší. U TiO_2 a PEDOT elektrody nastávají větší posuny Fermiových hladin, než u zlaté elektrody (ohmický kontakt).

6 SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] LAMPERT A. M.; MARK P. *Current injection in solids*. New York: Academic Press; 1970.
- [2] SCHAUER F.; NESPUREK S.; ZMESKAL O. The bulk trap spectroscopy of solids by temperature modulated space-charge-limited currents (TMSCLC): Application to real crystalline and amorphous semiconductors. *J Phys C: Solid State Phys* 1986;19:7231–46
- [3] ZMESKAL O.; SCHAUER F.; NESPUREK S. The bulk trap spectroscopy of solids by temperature modulated space-charge-limited currents (TMSCLC) in the steady state. *J Phys C: Solid State Phys* 1985;18:1873–84
- [4] ZMEŠKAL, O.; NEŠPŮREK, S.; WEITER, M. Space-charge-limited currents: An E-infinity Cantorian approach. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2007. 34(2). p. 143 - 156. ISSN 0960-0779
- [5] MOTT N. F.; DAVIS E. A. Electron processes in non-crystalline materials. Oxford: Clarendon Press; 1979.
- [6] STOCKMANN F. An exact evaluation of steady-state space-charge limited currents for arbitrary trap distribution. *Phys Status Solidi A* 1981;64:475–83.
- [7] EL NASCHIE MS. Non-Euclidean spacetime structure and two-slit experiment. *Chaos, Solitons & Fractals* 2005;26:1–6
- [8] MANDELROT BB. *Fractal geometry of nature*. New York: W.H. Freeman and Co.; 1983
- [9] ZMEŠKAL, O.; NEŽÁDAL, M.; BUCHNÍČEK, M. Fractal-Cantorian Geometry, Hausdorff Dimension and the Fundamental Laws of Physics. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2003. 17(1). p. 113 - 119. ISSN 0960-0779
- [10] ZMEŠKAL, O.; NEŽÁDAL, M.; BUCHNÍČEK, M. Field and Potential of fractal-Cantorian structures and El Naschie's infinite theory. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2004. 19(4). p. 1013 - 1022. ISSN 0960-0779
- [11] PEDOT:PSS - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-01-23]. Dostupné z: <http://en.wikipedia.org/wiki/PEDOT:PSS>
- [12] Polymerové (plastové) solární články - nový směr vývoje | Automatizace.HW.cz. [online]. [cit. 2012-02-07]. Dostupné z: <http://automatizace.hw.cz/polymerove-plastove-solarni-clanky-novy-smer-vyvoje>
- [13] Titanium dioxide - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-01-23]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Titanium_dioxide
- [14] Anatase - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-04-11]. Dostupné z: <http://en.wikipedia.org/wiki/Anatase>
- [15] Indium tin oxide - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-01-23]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Indium_tin_oxide
- [16] Phthalocyanine - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-01-23]. Dostupné z: <http://en.wikipedia.org/wiki/Phthalocyanine>
- [17] WorldSciNet. [online]. [cit. 2012-04-13]. Dostupné z: <http://www.worldscinet.com/jpp/10/1010/S10884246061010.html>
- [18] CHEN, Jingwei, Jue SHEN a Jiancheng ZHANG. Photovoltaic Properties of ZnPc-Epoxy Derivative Doped with C60. *Journal of Materials Sciences and Technology*. 2006, 22(4). Dostupné z: <http://www.jmst.org/EN/article/downloadArticleFile.do?attachType=PDF&id=7809>
- [19] Phthalocyanine Blue BN - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-01-23]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Phthalocyanine_Blue_BN

- [20] Fullereny - Wikipedie. [online]. [cit. 2012-01-23]. Dostupné z: <http://cs.wikipedia.org/wiki/Fullereny>
- [21] Phenyl-C61-butyric acid methyl ester - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-01-23]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Phenyl-C61-butyric_acid_methyl_ester
- [22] Dielectric spectroscopy - Wikipedia, the free encyclopedia. [online]. [cit. 2012-02-15]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Dielectric_spectroscopy

7 PŘÍLOHA

7.1 Odvození vztahů použitých v bakalářské práci

7.1.1 Odvození hustoty náboje z fraktálního vztahu pro potenciál

Vztah (4) pro hustotu nosičů náboje elektrického pole, se dá zpětně odvodit z fraktálního vztahu pro výpočet potenciálu fyzikálního pole (11) následujícím postupem.

Nejdříve definujeme Laplaceův operátor potenciálu V

$$\Delta V = -\operatorname{div} \mathbf{F} = -\frac{\rho_c(\mathbf{r})}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}, \quad (75)$$

resp.

$$\Delta V = -\frac{eK}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{1}{D(D-E+2)} \left[\frac{\partial^2 r^{D-E+2}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 r^{D-E+2}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 r^{D-E+2}}{\partial z^2} + \dots \right], \quad (76)$$

kde $r^{D-E+2} = (x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E+2)/2}$.

Následně vypočítáme první parciální derivaci pro x

$$\frac{1}{D(D-E+2)} \frac{\partial^2 (x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E+2)/2}}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{x(x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E)/2}}{D} \right] \quad (77)$$

a z ní druhou parciální derivaci

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{x(x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E)/2}}{D} \right] &= \\ &= \frac{(x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E)/2}}{D} + \frac{(D-E)x^2}{D} (x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E-2)/2} \end{aligned} \quad (78)$$

Obdobně provedeme výpočet i pro další souřadnice E -rozměrného euklidovského prostoru, např. pro y

$$\begin{aligned} \frac{1}{D(D-E+2)} \frac{\partial^2 (x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E+2)/2}}{\partial y^2} &= \\ &= \frac{(x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E)/2}}{D} + \frac{(D-E)y^2}{D} (x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E-2)/2} \end{aligned} \quad (79)$$

Následně všechny parciální derivace sečteme

$$\Delta V = -\frac{eK}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (x^2 + y^2 + z^2 + \dots)^{(D-E)/2} \left[\frac{E}{D} + \frac{D-E}{D} \frac{(x^2 + y^2 + z^2 + \dots)}{(x^2 + y^2 + z^2 + \dots)} \right] \quad (80)$$

Protože člen v hranaté závorce je roven jedné, dostáváme ze vztahu (75) vztah pro hustotu nosičů náboje (4), který jsme chtěli odvodit.

7.1.2 Odvození vztahu mezi hustotou prostorového náboje a napětím

Odvození $\rho = f(V_r)$ se dá provést sloučením vztahů (4) a (11), čímž dostaneme hledaný vztah

$$\rho_c(r) = \varepsilon_0 \varepsilon_r D(D - E + 2) \frac{V(r)}{r^2}, \quad (81)$$

z něhož vyplývá přímá úměra mezi elektrickým potenciálem a hustotou volných nosičů náboje.

Pomocí vztahu (17) lze pomocí vztahu (81) určit závislost prostorového náboje (rozdílu celkového náboje při napětí U n_{sx} a při termodynamické rovnováze n_{s0}) na elektrickém potenciálu V , tedy $n_{sx} - n_{s0} = f(V)$.

$$n_{sr} - n_{s0} = -\varepsilon_0 \varepsilon_r D(D - E + 2) \frac{(V_r - V_0)}{er^2}. \quad (82)$$

Ze vztahu vyplývá, že rozdíl hustoty nosičů náboje po připojení elektrického napětí n_{sr} a při termodynamické rovnováze n_{s0} závisí na rozdílu elektrických potenciálů $V_r - V_0$ přímou úměrou.

7.1.3 Odvození vztahu mezi hustotou energie, proudovou hustotou a napětím

Hustotu elektrické energie (24) lze definovat pomocí elektrického potenciálu tak, že z něj vyjádříme r , které následně pomocí potenciálu substituujeme (11).

$$w = ekV_r \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r V_r}{ek} D(D - E + 2) \right]^{(D-E)/(D-E+2)}. \quad (83)$$

Závislost hustoty energie w na elektrickém potenciálu V závisí na fraktální dimenzi D a rozměru euklidovského prostoru E .

Proudovou hustotu (25) lze definovat pomocí elektrického potenciálu tak, že z něj vyjádříme r , které následně pomocí potenciálu substituujeme (11)

$$j = \mu i = (D - E + 2) \mu (ekV_r) \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r V_r}{ek} D(D - E + 2) \right]^{(D-E-1)/(D-E+2)}. \quad (84)$$

Vztah pro proudové hustoty j a hustoty elektrické energie w a se dá odvodit jako poměr vztahů (84) a (83)

$$\frac{j}{w} = \mu(D - E + 2) \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r V_r}{ek} D(D - E + 2) \right]^{-1/(D-E+2)}, \quad (85)$$

kde člen $(D - E + 2)$ závisí na topologii elektrody.

Poměr logaritmů $d \ln V / d \ln j$ se dá zjistit ze vztahu (84) jako

$$\frac{d \ln j}{d \ln V} = \frac{2D - 2E + 1}{D - E + 2} \quad (86)$$

za předpokladu, že D není funkcí napětí. Poměr derivací logaritmů vyjadřuje mocnitele závislosti j na V .

7.1.4 Odvození vztahu mezi entropií a napětím

Entropii $S = D \ln r$, jako funkci potenciálu lze odvodit ze vztahu definujícího potenciál (11)

$$S = \frac{D}{D-E+2} \ln \left[\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r V_r}{eK} D(D-E+2) \right]. \quad (87)$$

Potenciál lze z této rovnice vyjádřit jako funkce entropie

$$V_r = \frac{eK}{D(D-E+2)\varepsilon_0 \varepsilon_r} e^{S(D-E+2)/D}. \quad (88)$$