

**ESPAÇO DE PARÂMETROS DE ALTA RESOLUÇÃO  
SEGUNDO O MODELO DE DOIS VALES PARA O  
SEMICONDUTOR GaAs SEMI-ISOLANTE**

SAMIR LACERDA DA SILVA

**ESPAÇO DE PARÂMETROS DE ALTA RESOLUÇÃO  
SEGUNDO O MODELO DE DOIS VALES PARA O  
SEMICONDUTOR GaAs SEMI-ISOLANTE**

**SAMIR LACERDA DA SILVA**

**ORIENTADOR: ALFREDO GONTIJO DE OLIVEIRA**

**CO-ORIENTADOR: GERALDO MATHIAS RIBEIRO**

**Tese apresentada à Universidade Federal  
de Minas Gerais como requisito parcial  
para obtenção do grau de DOUTOR EM  
FÍSICA.**

**BELO HORIZONTE  
NOVEMBRO DE 2014**

## Agradecimentos

- Ao professor Alfredo Gontijo de Oliveira, por sua orientação, acompanhamento e atenção permanentes, pelo constante debate e, pelo seu comprometimento no meu processo de formação científica.
- Ao professor Geraldo Mathias Ribeiro, por sua constante colaboração, participação e amizade que tiveram um importante papel no desenvolvimento de meu trabalho.
- Ao Dr. Rodrigo Lacerda da Silva por ter disponibilizado ajudar neste trabalho, também pelas discussões que contribuíram para a minha formação.
- Ao Dr. *Emilson Ribeiro Viana Junior* pelo auxílio, discussões científicas, amizade e companheirismos ao longo deste período de pós-graduação.
- Aos colegas de curso, que contribuíram com a amizade e discussões enriquecedoras.
- Aos funcionários do Departamento de Física da UFMG, pela sua colaboração na disponibilização da infra-estrutura, necessária ao desenvolvimento deste trabalho.
- A minha esposa Tamiris por seu apoio, compreensão, amor e carinho.
- A meu pai e mãe, irmãos por sua solidariedade, compreensão e apoio ao meu desenvolvimento.
- A CAPES e CNPq, que proporcionou apoio financeiro para a implementação deste projeto.
- E agradeço a Deus por oferecer essa oportunidade à minha vida.

# Índice

<b>Lista de figuras</b> .....	I
<b>Lista de tabelas</b> .....	V
<b>Resumo</b> .....	1
<b>Abstract</b> .....	2
<b>Introdução</b> .....	3
<b>Capítulo 1 – Introdução à dinâmica não linear</b> .....	7
Evolução da teoria do caos, série temporal e o atrator .....	8
Seção de Poincaré .....	13
O mapa logístico .....	15
O modelo de Lorenz .....	16
Referências do capítulo 1 .....	18
<b>Capítulo 2 – Dinâmica não linear em semicondutores GaAs</b> .....	19
Oscilações espontâneas e a condutividade diferencial negativa .....	19
Processos de geração e recombinação de cargas.....	25
Defeitos estruturais em amostras de GaAs .....	27
Experimentos em GaAs semi-isolante .....	28
A região NNDC na curva característica $\vec{j}(\vec{E})$ .....	30
LFO, diagrama de bifurcação e a influência do campo magnético $\vec{B}$ .....	33
Referências do capítulo 2 .....	38
<b>Capítulo 3 – Modelos de equações de taxas para os processos de geração-recombinação em Semicondutores.</b> .....	42
Modelos de dois níveis de Schöll .....	43
Um modelo de dois níveis para GaAs semi-isolante .....	49
Referências do capítulo 3 .....	54
<b>Capítulo 4 – Um modelo de equações de taxas para GaAs semi-isolante</b> .....	56
Velocidade de drift em GaAs .....	58

Modelagem da equação para velocidade de drift em GaAs .....	62
Modelo de equações de taxas para GaAs SI – O Modelo de Dois Vales .....	65
Referências do capítulo 4 .....	70
<b>Capítulo 5 – Resultados e discussão .....</b>	<b>71</b>
A curva característica J(E) para GaAs SI .....	72
Espaços de Parâmetros .....	76
Referências do capítulo 5 .....	85
<b>Conclusões .....</b>	<b>86</b>
Referências das conclusões .....	88
<b>Glossário de termos técnicos .....</b>	<b>89</b>

## Lista de Figuras

### Capítulo 1:

**Figura 1.1** – Esquema que representa da taxa média de divergência ( $\lambda > 0$ ) e convergência ( $\lambda < 0$ ) de orbitas determinadas pelo expoente de Lyapunov.  
.....pág. 10

**Figura 1.2** – Atrator de estranho de Lorentz para de  $\sigma = 10$ ,  $\rho = 28$  e  $\beta = 8/3$ .  
.....pág. 11

**Figura 1.3** – Série temporal e atrator do sistema harmônico amortecido.  
.....pág. 11

**Figura 1.4** – Série temporal e atrator do sistema presa-predador.  
.....pág. 12

**Figura 1.5** – Seção de Poincaré de uma órbita contínua tridimensional. As intercepções da órbita com o plano definem o mapa de Poincaré.  
.....pág. 14

**Figura 1.6** – Seção de Poincaré obtida através dos máximos ou mínimos de uma série temporal original contínua e periódica.  
.....pág. 14

**Figura 1.7** – Diagrama de bifurcação do mapa logístico.  
.....pág. 16

**Figura 1.8** – Série temporal e atrator do modelo de Lorentz.  
.....pág. 17

### Capítulo 2:

**Figura 2.1** - Densidade de corrente  $j$  em função do campo elétrico  $E$  para dois tipos de variações de NDC:(a) tipo NNDC e (b) tipo SNDC.  
.....pág. 21

**Figura 2.2** - Oscilação de baixa frequência (LFO) obtida em GaAs semi-isolante.  
.....pág. 21

**Figura 2.3** – (a) Esquema da transferência de elétrons do vale  $\Gamma$  para o vale L. (b) Mudança de mobilidade entre os vales no GaAs.  
.....pág. 23

**Figura 2.4** – Esquema do campo elétrico e da densidade de elétrons em função da posição linear ilustrando o movimento do domínio de campo em direção ao anodo.  
.....pág. 24

**Figura 2.5** – Esquema do circuito utilizado para obtenção das medidas de  $I(V)$  e LFO.  
.....pág. 30

**Figura 2.6** – Curva  $\vec{J}(\vec{E})$  característica para a amostra GaAs-SI crescida por LT-MBE. Medidas realizadas com 175K e 200K com intensidade luminosa do LED de 10mA.  
.....pág. 32

**Figura 2.7** – Curva  $\vec{J}(\vec{E})$  característica para a amostra GaAs-SI crescida por LT-MBE. Medidas realizadas temperatura fixa em 200K e variação da intensidade luminosa do LED de 30mA a 50mA.  
.....pág. 32

**Figura 2.8** – Séries temporais da corrente elétrica para a amostra de GaAs-SI a 200 K e  $I_{LED}=30mA$ . A tensão foi mantida constante em (a) 31 V, (b) 32 V e (c) 34 V.  
.....pág. 34

**Figura 2.9** – Atratores para a amostra de GaAs-SI a 200 K e  $I_{LED}=30mA$ . A tensão foi mantida constante em (a) 31 V, (b) 32 V e (c) 34 V.  
.....pág. 34

**Figura 2.10** – Diagrama de bifurcação (a) original e (b) limpo para a amostra de GaAs-SI a 200 K e  $I_{LED}=10mA$ . Os pontos indicados por (1), (2), (3) e (4) estão associados com as oscilações de período 1-2-4-2 e caos respectivamente.  
.....pág. 35

**Figura 2.11** – Evolução do diagrama de bifurcação em função do campo magnético paralelo aplicado para a amostra de GaAs-SI a 200 K e  $I_{LED}=40mA$ . Os diagramas indicados por (a), (b) e (c) estão associados ao módulo  $B_{||}$  de valores de 0G, 3kG e 7kG respectivamente.  
.....pág. 36

**Figura 2.12** – Evolução dos atratores em função do campo magnético paralelo aplicado para a amostra de GaAs-SI a 200 K,  $I_{LED}=40mA$  e  $V=37,5V$ . Os atratores indicados por (a), (b) e (c) estão associados ao módulo  $B_{||}$  de valores de 0G, 3G e 7G respectivamente.  
.....pág. 37

**Figura 2.13** – Espaço de parâmetro de tensão versus campo magnético B paralelo obtidas em  $T = 186 K$ ,  $I_{LED} = 16 mA$ . Através da curva branca podemos observar uma seqüência de bifurcações de atratores com periodicidade caos-4-3-6-3-5-7-5-caos.  
.....pág. 38

### Capítulo 3:

**Figura 3.1** - Modelo de geração-recombinação envolvendo a banda de condução (CB) e o defeito – estado fundamental (GS) e o primeiro estado excitado (FIS).

.....pág. 43

**Figura 3.2** – Curva da velocidade de drift referente à equação (3.10)

.....pág. 46

**Figura 3.3** – Curva característica SNDC para a densidade corrente em função do campo elétrico estático para as equações de taxas no estado estacionário.

.....pág. 47

**Figura 3.4** – Séries temporais e atratores com rota de duplicação de período e caos.

.....pág. 48

**Figura 3.5** – Diagrama de bifurcação.

.....pág. 48

**Figura 3.6** - Curva característica para a densidade corrente em função do campo elétrico estático.

.....pág. 51

**Figura 3.7** - Diagrama de bifurcação para (a)  $E_1 = 1.70E_t$  e (b)  $E_1 = 1.55E_t$ .

.....pág. 52

**Figura 3.8** - Diagrama de bifurcação para  $E_1 = 1.50E_t$ . Em (b) uma ampliação de (a).

.....pág. 52

**Figura 3.9** - Diagrama de bifurcação para (a)  $E_1 = 1.00E_t$  e para (b)  $E_1 = 0.10E_t$ .

.....pág. 52

**Figura 3.10** - Diagrama de bifurcação para GaAs-Si.

.....pág. 53

### Capítulo 4:

**Figura 4.1** – Velocidade de Drift em função do campo elétrico para elétrons e buracos de GaAs e Si.

.....pág. 59

**Figura 4.2** – Estrutura eletrônica de banda de condução para GaAs.

.....pág. 60

**Figura 4.3** – Tempo de relaxação do elétron de condução no vale  $\Gamma$  do GaAs em função da energia do elétron.

.....pág. 61

**Figura 4.4** – Esquema da dependência da velocidade de drift de elétrons do GaAs com o campo elétrico.

.....pág. 62

**Figura 4.5** – Conjunto de velocidade de drift de elétrons de condução em GaAs à 300K.

.....pág. 63

**Figura 4.6** – A velocidade de drift efetiva  $V(\epsilon)$  de elétrons livres em GaAs-SI, ajuste aos dados de Ruch and Kino através da equação 4.3.

.....pág. 64

**Figura 4.7** - Esquema para a transição entre o modelo de dois níveis e o modelo de dois vales.

.....pág. 65

**Figura 4.8** – Processo de g-r envolvendo os vales  $\Gamma$  e L dentro da banda de condução e o esta fundamental do defeito, que foi considerado no modelo de dois vales para GaAs-SI.

.....pág. 66

## Capítulo 5:

**Figura 5.1** – A densidade de corrente longitudinal  $J(E)$  no vale  $\Gamma$  para o modelo de Dois Vales.

.....pág. 72

**Figura 5.2** – Curva característica experimental  $J(E)$  para GaAs-SI com NNDC.

.....pág. 73

**Figura 5.3** - Diagrama de bifurcação para os máximos da series temporal do campo elétrico  $\epsilon(t)$  para o modelo de dois vales em GaAs-SI.

.....pág. 74

**Figura 5.4** - Atratores periódicos de (período-1) a (período-5) e um atrator caótico para o modelo de dois vales em GaAs-SI.

.....pág. 75

**Figura 5.5** – Espaço de parâmetro de periodicidade para o modelo de Dois Vales para GaAs-SI. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $5,0 \times 10^{-2}$  a  $18,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $5,0 \times 10^{-4}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 46,4 a 50,5 com passo de  $1,0 \times 10^{-3}$ .

.....pág. 77

**Figura 5.6** – Ampliação de (25x) do espaço de parâmetros para GaAs-SI simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $10,8 \times 10^{-2}$  a  $65,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $2,0 \times 10^{-4}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 47,4 a 48,0 com passo de  $1,0 \times 10^{-4}$ .

.....pág. 78

**Figura 5.7** – Ampliação do espaço de parâmetros da figura (5.6) para GaAs-Si simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $12,0 \times 10^{-2}$  a  $13,8 \times 10^{-2}$  com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 47,58 a 47,75 com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$ .

.....pág. 80

**Figura 5.8** – Espaço de parâmetros nas proximidades da concha do caracol para GaAs-Si simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $13,5 \times 10^{-2}$  a  $15,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 48,0 a 48,2 com passo de  $1,0 \times 10^{-5}$ .

.....pág. 81

**Figura 5.9** – Espaço de parâmetros na região central do caracol para GaAs-Si simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $7,5 \times 10^{-2}$  a  $10,5 \times 10^{-2}$  com passo de  $3,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 47,46 a 49,1 com passo de  $2,0 \times 10^{-4}$ .

.....pág. 82

**Figura 5.10** – Espaço de parâmetros na região cabeça do caracol para GaAs-Si simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $7,5 \times 10^{-2}$  a  $10,5 \times 10^{-2}$  com passo de  $3,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 49,10 a 49,65 com passo de  $1,0 \times 10^{-4}$ .

.....pág. 83

**Figura 5.11** – Ampliação do espaço de parâmetros da figura (5.10). Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $8,4 \times 10^{-2}$  a  $8,9 \times 10^{-2}$  com passo de  $5,0 \times 10^{-6}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 49,49 a 49,56 com passo de  $1,0 \times 10^{-5}$ .

.....pág. 84

## Lista de Tabelas

### Capítulo 5:

**Tabela 1:** Coeficientes adimensionais g-r e os parâmetros usados no modelo de dois vales.

.....pág. 72

## Resumo

Amostras de GaAs semi-isolantes (GaAs SI) experimentalmente mostram, sob campos elétricos elevado e à temperatura ambiente, uma condutividade diferencial negativa do tipo N (NNDC). Desde a elaboração do modelo mais consolidado para n-GaAs, ou seja, “o modelo de dois níveis”, proposto por E. Schöll, não contempla a curva NNDC para GaAs SI. Neste trabalho, um modelo alternativo é proposto, o modelo de Dois Vales, baseando-se no conjunto mínimo de equações para a geração-recombinação para dois vales dentro da banda de condução, e uma equação para a velocidade de drift como uma função do campo elétrico aplicado, que abrange as propriedades físicas da condução elétrica não linear do sistema GaAs SI. O modelo de Dois Vales foi capaz de gerar, teoricamente, a região NNDC pela primeira vez, e com isso, nós fomos capazes de construir um espaço de parâmetro de periodicidade de alta resolução usando uma rotina de detecção de periodicidade (PD). No espaço de parâmetros foram observadas estruturas periódicas auto-organizadas imersas em regiões caóticas. As regiões complexas são apresentadas com estruturas na forma “camarão” girando em torno de um ponto focal, que compõe em grande escala uma “concha do caracol”, com complexas ligações entre diferentes “camarões”. O conhecimento de informações detalhadas sobre os espaços de parâmetros é fundamental para localizar amplas regiões de caos suave e contínuo, a fim de cumprir os requisitos para comunicações seguras com o caos.

## Abstract

Semi-insulating GaAs (SI-GaAs) samples experimentally show, under high electric fields and even at room temperature, negative differential conductivity in N-shaped form (NNDC). Since the most consolidated model for n-GaAs, namely, “*the two level model*”, proposed by E.Schöll, was not capable to generate the NNDC curve for SI-GaAs, in this work we proposed an alternative model. The model proposed, “*the two-valley model*”, is based on the minimal set of generation-recombination equations for two valleys inside the conduction band, and an equation for the drift velocity as a function of the applied electric field, that covers the physical properties of the nonlinear electrical conduction of the SI-GaAs system. The “*two-valley model*” was capable to generate theoretically the NNDC region for the first time, and with that, we were able to build a high-resolution parameter-space of the periodicity (PSP) using a Periodicity-Detection (PD) routine. In the parameter space were observed self-organized periodic structures immersed in chaotic regions. The complex regions are presented in a “*shrimp*” shape rotated around a focal point, which forms in large-scale a “*snail shell*” shape, with intricate connections between different “*shrimps*”. The knowledge of detailed information on parameter spaces is crucial to localize wide regions of smooth and continuous chaos, in order to fulfill the requirements for secure communications with chaos.

## Introdução

### Motivação

Nesse trabalho desenvolveremos um estudo através de um modelo físico para descrever a condução elétrica em materiais semicondutores GaAs semi-isolante (GaAs-SI). Essas amostras possuem um nível de defeito profundo e apresentam a temperaturas elevadas (acima de 175K) oscilações espontâneas de baixa frequência, conhecidas com LFO (low frequency oscillation). Tais oscilações ocorrem em uma região de condutividade diferencial negativa do tipo N (NNDC) da curva característica  $J(E)$  e apresentam comportamentos periódicos e caóticos. Esses fenômenos ocorrem em virtude de mecanismos de mobilidade de portadores de cargas conhecidos por processos de geração-recombinação (g-r) entre o nível profundo de defeito e a banda de condução. Em GaAs-SI os processos g-r são descritos pelo fenômeno de geração conhecido como ionização por impacto (*Impact Ionization*) e recombinação por captura assistida por campo elétrico (*field-enhanced trapping*).

O modelo mais consolidado para materiais semicondutores, chamado de modelo de dois níveis proposto por E. Schöll, utilizando equações de taxas não foi capaz de produzir o regime de condutividade diferencial negativo NNDC para GaAs-SI, que é a assinatura experimental das curvas características não lineares para este material.

Para conseguir para obter a região NNDC acrescentamos ao nosso modelo de equações de taxas um mecanismo de transferência de portadores de carga entre os dois vales  $\Gamma$  e L no interior da banda de condução e o estado fundamental do

defeito do nível profundo. Ao conjunto, foi necessário determinar uma expressão analítica para a velocidade de drift para elétrons livres, obtida a partir da curva experimental bem estabelecido de GaAs.

Esse trabalho é o primeiro que propõem um modelo de equações de taxas para produzir o regime de condutividade diferencial negativo NNDC para GaAs-SI levando em conta as principais propriedades físicas do GaAs-SI, como os fenômenos “ionização por impacto” e “captura assistida por campo elétrico”. Além do mais, a proposta de nosso trabalho foi construída como o menor conjunto testado, que produz a região NNDC.

Em nosso trabalho a dinâmica não linear foi investigada na região de condutividade diferencial negativa NNDC. Atratores, diagrama de bifurcação e espaços de parâmetros bidimensionais foram obtidos para observar regimes periódicos e caóticos, rotas de bifurcação, janelas de ordem complexa e estruturas periódicas auto similares conhecidas como camarões.

Essa tese está organizada em 6 capítulos. No primeiro capítulo apresentaremos uma pequena introdução sobre dinâmica não linear e teoria do caos, onde discutiremos a sensibilidade às condições iniciais das séries temporais caóticas, conhecida como efeito borboleta. Exibiremos alguns tipos de atratores dinâmicos, definiremos o processo de aquisição da seção de Poincaré de uma série temporal e ao longo do capítulo apresentaremos alguns modelos não lineares clássicos.

No capítulo 2 revisaremos os resultados experimentais que exibem o fenômeno de oscilações espontâneas de corrente que ocorrem na região de condutividade diferencial negativa NDC da curva característica para amostras de GaAs do tipo N (n-GaAs) e GaAs semi-isolante (GaAs SI) quando submetidas a um

campo elétrico elevado. Durante o capítulo discutiremos os mecanismos geradores desses fenômenos não lineares como os processos de geração-recombinação e o trânsito de portadores de cargas entre os vales  $\Gamma$  e L dentro da banda de condução. Apresentaremos também um foco especial ao material GaAs-SI exibindo seus resultados experimentais como curvas características com NNDC, LFO, atratores e diagramas de bifurcação. A motivação de nosso trabalho está contida nesse conjunto de resultados experimentais.

No capítulo 3 revisaremos as características do modelo de dois níveis proposto por E. Schöll, que descreve as oscilações espontâneas de corrente para semicondutores através de equações de taxas através de processos de geração-recombinação de cargas livres. Apresentaremos também, que o modelo não é capaz de descrever as regiões NNDC observadas em amostras GaAs-SI. Por limitação da estrutura do modelo ele é efetivo apenas para descrever regiões SNDC.

No capítulo 4 propomos um modelo físico, denominado de “modelo de Dois Vales”, para descrever a condução elétrica para GaAs semi-isolantes (GaAs-SI), que é o primeiro que produz o regime de condutividade diferencial negativa NNDC. O modelo utiliza equações de taxa de geração-recombinação (g-r), uma expressão analítica para a velocidade de drift para elétrons livres e um mecanismo de transferência de portadores de carga entre os vales  $\Gamma$  e L no interior da banda de condução e do estado fundamental do defeito do nível profundo.

No capítulo 5 apresentaremos nossos resultados através do cálculo das equações de taxa para o modelo de Dois Vales. Produziremos uma curva característica com região NNDC inédita para GaAs-SI, e através de análises nas séries temporais mostraremos atratores periódicos e caóticos, diagrama de bifurcação com rota de bifurcação com adição de período e janelas de ordem de

período ímpar, muitos espaços de parâmetros de periodicidade e estruturas auto similares presentes nelas.

No capítulo 6 faremos nossas discussões finais, as conclusões e perspectivas para futuros trabalhos utilizando o modelo de Dois Vales.

As referências bibliográficas citadas ao longo da dissertação são apresentadas ao final de cada capítulo. No início da tese são apresentados os agradecimentos, resumo, abstract e as listas de figuras e tabelas do trabalho.

## Capítulo 1 – Introdução à dinâmica não linear

Nas últimas décadas é crescente o interesse pela dinâmica de sistemas complexos, cuja natureza é a presença de não linearidade entre os parâmetros físicos observados no fenômeno. Seu estudo é realizado pela teoria da dinâmica não linear onde os sistemas complexos são analisados através da solução de sistemas de equações diferenciais não lineares de evolução com pelo menos três graus de liberdade. Tais sistemas podem exibir comportamentos caóticos. Sua solução, com condições iniciais particulares, leva a produção de séries temporais, que em muitos casos, apresentam um comportamento irregular, ou aperiódico, e com dependência sensível às condições iniciais, podendo surgir órbitas periódicas e quase periódicas, ciclos limite e caos [1,2].

A dinâmica não linear está presente em um campo muito amplo de aplicações, pois atinge diversos sistemas teóricos e experimentais que podem ser descritos por tais equações. Como exemplos estão os sistemas biológicos, o desempenho de ações e bolsas de valores, a propagação e controle de doenças, dispositivos e circuitos elétricos, fenômenos de transporte em materiais semicondutores, etc.

Apresentaremos nesse capítulo uma introdução à dinâmica não linear e teoria do caos. Exibiremos alguns tipos de atratores dinâmicos, definiremos a seção de Poincaré e ao longo do capítulo apresentaremos alguns modelos não lineares clássicos.

### 1.1 – Evolução da teoria do caos, série temporal e o atrator.

O início dos estudos sobre caos acontece no final do século XIX quando o rei Oscar II da Suécia promove uma competição de matemática na busca sobre a dinâmica de orbitas no problema de três corpos celestes. Naquela época o físico matemático Henri Poincaré saiu ganhador do prêmio. Poincaré demonstrou que o problema apresentava diversas soluções possíveis, ou seja, que a evolução do sistema era sensível a pequenas mudanças em suas condições iniciais de modo que não seria capaz de prever o estado final dos corpos celeste. Matematicamente, as soluções eram limitadas espacialmente, preenchiam todo esse espaço de estados, diferente de um ponto fixo (atrativo ou repulsivo) ou ciclo limites que são estados defendidos pelo colégio de cientistas da época conhecidos como Deterministas. Apesar do problema de três corpos não ter sido resolvido por Poincaré e sim por Karl F. Sundman em 1912, seu trabalho deu início aos estudos que hoje conhecemos como teoria do caos.

Apesar de Poincaré ter conseguido trazer a ideia de comportamentos caóticos, ele não pode avançar devido à limitação tecnológica do seu tempo para resolver as equações do movimento por um tempo suficientemente longo. Assim, para possuir a previsão dos estados futuros da dinâmica do sistema o problema deveria ser posto a análise do Demônio de Laplace. O demônio de Laplace é uma ideia determinista que estabelece que se uma “inteligência superior” conhecesse o estado de todas as variáveis em um determinado instante de tempo seria possível obter todas as soluções futuras.

Naquela época os Demônios de Laplace utilizados para obter as soluções não possuíam uma boa capacidade de processamento (velocidade de cálculo), mas com o advento dos computadores, a solução de sistemas de equações diferenciais não lineares para longos tempos tornou-se possível e trouxe à tona outros aspectos do comportamento caótico.

O primeiro relato foi o trabalho desenvolvido pelo meteorologista e matemático americano Edward Lorenz (1917-2008) [2] que consistia em resolver um sistema de equações diferenciais acopladas que descrevia a dinâmica do ar na atmosfera através de métodos numéricos realizados em um computador. Lorenz observou que pequenas diferenças nas condições iniciais produziam grandes mudanças na solução do sistema de equações. Ele havia descoberto a grande implicação de um sistema caótico: a alta sensibilidade às condições iniciais. Tal característica ficou conhecida como efeito Borboleta. Nas próximas seções entraremos mais em detalhes sobre o modelo de Lorenz.

Para medir a sensibilidade às condições iniciais utilizamos um método chamado de expoente de Lyapunov. O expoente mede a taxa de divergência ou convergência de trajetórias de um sistema com condições iniciais infinitesimalmente próximas que podemos apresentar pelas equações abaixo.

$$\vec{x}_1(t_0) = \vec{x}_0 \quad (1.1)$$

$$\vec{X}_2(t_0) = (\vec{x}_0 + d\vec{x}) = \vec{X}_0 \quad (1.2)$$

O sistema então evolui a partir da posição inicial

$$\vec{D}_0(\vec{x}_1(t_0), \vec{X}_2(t_0)) = (\vec{X}_0 - \vec{x}_0) \quad (1.3)$$

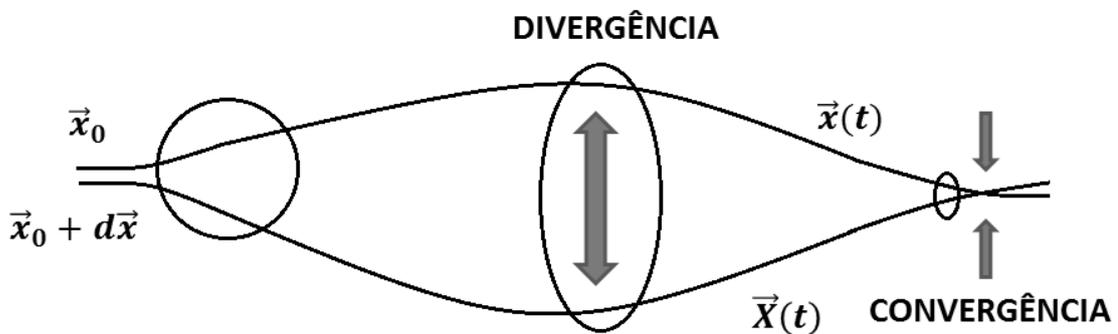
Aqui  $\vec{D}_0$  é a posição entre as equações (1.1) e (1.2). À medida que o tempo evolui as equações não lineares que regem o sistema exibiram uma diferença entre as trajetórias para as duas condições iniciais diferentes, que pode ser dada por:

$$\vec{D}(\vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t)) = (\vec{X}(t) - \vec{x}(t)) \quad (1.4)$$

Essa equação diverge exponencialmente se as trajetórias possuem sensibilidade às condições iniciais e converge caso contrário. Esse comportamento possui uma representação semelhante à equação (1.5) abaixo.

$$\vec{D}(\vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t)) = \vec{D}_0(\vec{x}_1(t_0), \vec{x}_2(t_0)) \cdot e^{\lambda t} \quad (1.5)$$

Onde  $\lambda$  representa o expoente de Lyapunov.



**Figura 1.1** – Esquema que representa da taxa média de divergência ( $\lambda > 0$ ) e convergência ( $\lambda < 0$ ) de orbitas determinadas pelo expoente de Lyapunov.

Um sistema regido por equações diferenciais não lineares determinística, suas trajetórias convergem para um atrator, que é um conjunto compacto no espaço de fase invariante e representa sua dinâmica. Quando esses atratores são formados por trajetórias sensíveis às condições iniciais o atrator é chamado de atrator estranho ou atrator caótico como apresentado na figura 1.2.

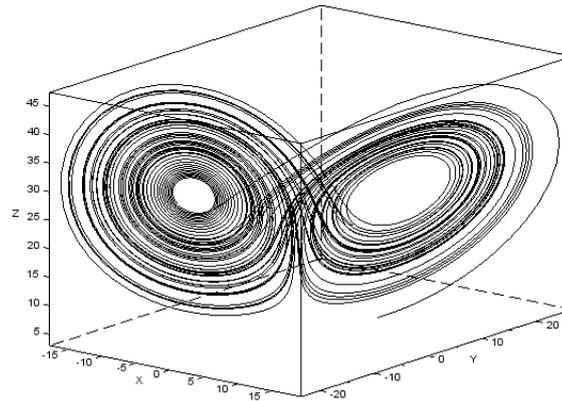


Figura 1.2 – Atrator estranho de Lorenz para de  $\sigma = 10$ ,  $\rho = 28$  e  $\beta = 8/3$ .

Quando a trajetória do atrator no espaço de fase converge para um ponto tornando-se independente no tempo temos um atrator pontual ou ponto fixo. Como um bom exemplo de um ponto fixo é apresentado pelo movimento harmônico amortecido [2]. Sua solução apresenta uma série temporal que diminui sua amplitude de oscilação até torná-la nula para tempos longos. Sua evolução no espaço de fases é um atrator que converge para um ponto fixo. Na figura 1.3 apresentamos sua série temporal e seu atrator.

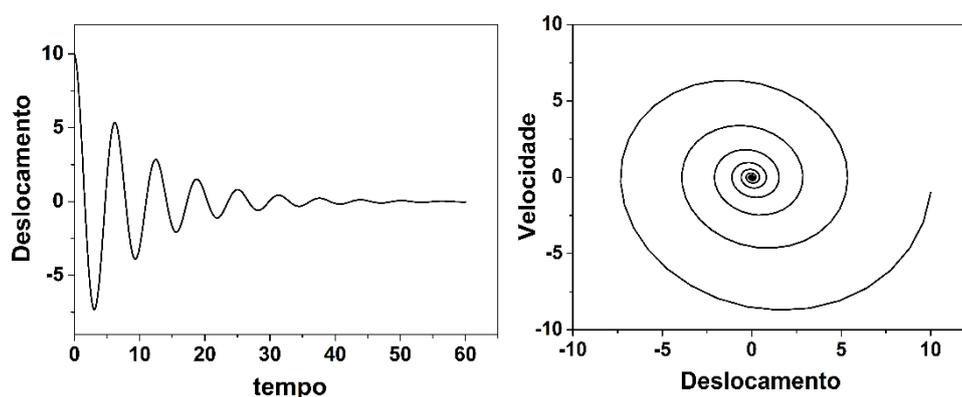


Figura 1.3 – Série temporal e atrator do sistema harmônico amortecido

Já atratores que apresentam uma periodicidade temporal, conhecidos como ciclo limite, são caracterizados por uma amplitude e um período. Seu espectro de Fourier é constituído por uma frequência fundamental e harmônica. Um ciclo limite pode ser

exemplificado pelo movimento harmônico do sistema massa-mola e pelo movimento de um pêndulo simples. Atratores periódicos também podem ser observados no modelo de Lotka-Volterra conhecido como presa-predador [3]. O modelo descreve uma população de presas vivendo em um ambiente sem limitações de recursos e uma população de seus predadores limitada à disponibilidade de presas. Como resultado, as séries temporais das duas populações oscilam periodicamente apresentando uma alternância no número de indivíduos formando um ciclo limite. A equação diferencial que descreve o sistema é apresentada no sistema adimensional de equações 1.6 e 1.7.

$$\frac{dx}{dt} = x(1 - y) \quad (1.6)$$

$$\frac{dy}{dt} = \alpha y(x - 1) \quad (1.7)$$

Na figura 1.4 podemos visualizar seu atrator com diferentes valores de  $\alpha$ .

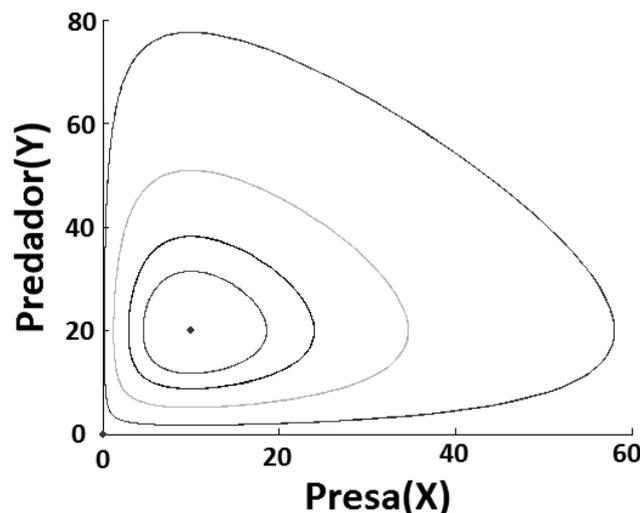


Figura 1.4 – Atrator do sistema presa-predador

Sistemas determinísticos cuja evolução temporal conduz assintoticamente a atratores estranhos apresentam dinâmica caótica. As condições para a ocorrência de comportamento caótico no sistema contínuo residem nos fatos que bastam pelo

menos três graus de liberdade e sensibilidade às condições iniciais para produzir a divergência exponencial de trajetórias. O atrator que apresente esse estado é limitado no espaço de estado sem possuir cruzamentos de trajetórias.

A dependência às condições iniciais, quando existe, resulta das não linearidades presentes no sistema, as quais amplificam exponencialmente quando pequenas diferenças nas condições iniciais são estabelecidas. Assim sendo, leis de evolução determinísticas podem levar a comportamentos caóticos, inclusive na ausência de ruídos ou flutuações externas.

### 1.2 – Seção de Poincaré

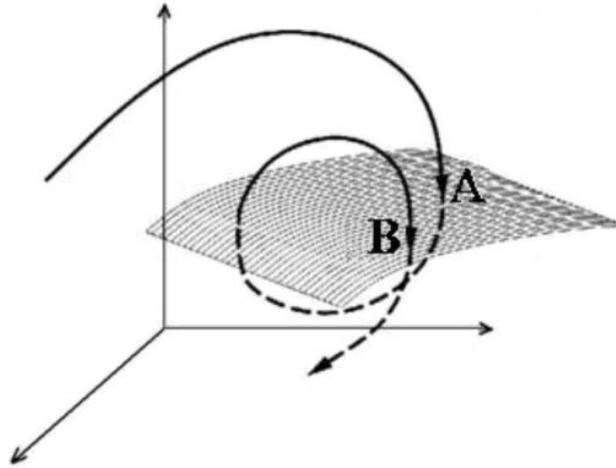
Poincaré idealizou uma importante ferramenta para a teoria do caos, o mapa de Poincaré. O mapa pode ser descrito através de uma função  $f(x_n)$ , onde  $x_n$  é o valor da variável no tempo discreto  $n$ .

$$x_{n+1} = F_{\mu}(x_n) \quad (1.8)$$

Esse procedimento reduz um sistema dinâmico de tempo contínuo de dimensão  $m$  para um mapa de tempo discreto de dimensão  $m-1$ , conhecido como mapa de primeiro retorno ou seção de Poincaré.

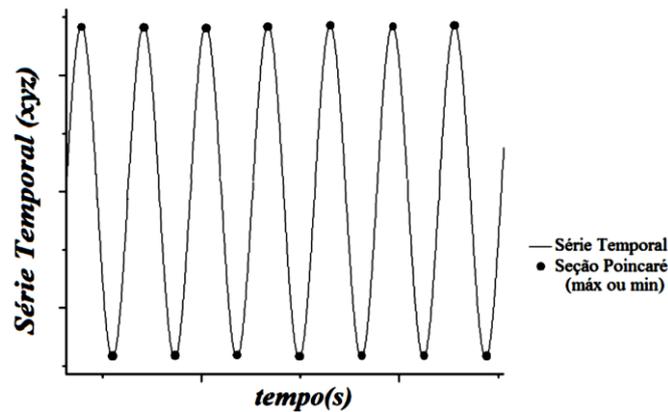
A seção de Poincaré utiliza um hiperplano de dimensão  $m-1$  para seccionar um atrator do sistema dinâmico. Quando as trajetórias do atrator atravessam o hiperplano criam pontos sobre ele como apresentado na figura 1.5. Tal procedimento registra esses pontos em uma nova série temporal que depende da orientação escolhida do hiperplano. Para obter a melhor informação da nova série temporal orientamos o hiperplano para alcançar o máximo de pontos produzidos pelo

cruzamento entre as orbitas do atrator e o hiperplano e minimizamos o intervalo de tempo entre dois pontos sucessivos no mapa [1,2].



**Figura 1.5** – Seção de Poincaré de uma órbita contínua tridimensional. As interseções da órbita com o plano definem o mapa de Poincaré [1].

Em resumo, para obter o máximo de informação através da seção de Poincaré selecionamos os máximos ou mínimos da série temporal original do atrator para formar a nova série temporal da seção de Poincaré. A ilustração desse procedimento pode ser acompanhada na figura 1.6.



**Figura 1.6** – Seção de Poincaré obtida através dos máximos ou mínimos de uma série temporal original contínua e periódica [4].

### 1.3 – O mapa logístico

O mapa logístico é um modelo matemático de crescimento populacional descrito por Robert May regido por uma equação discreta não linear. Esse mapa apresenta uma riqueza de comportamentos presente em sistemas caóticos. A equação de segundo grau discreta para o mapa é apresentada abaixo. O valor  $x_n$  representa a densidade da população no instante de tempo  $n$  e  $x_0$  é o valor da população inicial. O parâmetro positivo  $r$  está relacionado com a taxa combinada de natalidade e mortalidade da população [1-3].

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n) \quad (1.9)$$

Para determinados valores de  $r$  a competição entre natalidade e mortalidade pode gerar um comportamento caótico. O resumo dos estados possíveis para cada valor de  $r$  pode ser apresentado em um diagrama chamado de diagrama de bifurcação. Nesse diagrama podemos acompanhar a evolução das séries temporais. Variando os valores de  $r$  crescentemente o sistema apresenta uma evolução em seus períodos através de uma sequência de duplicações até atingir o regime caótico. A mudança de periodicidade através de uma duplicação de período é chamada de bifurcação. Para valores de  $r > 3,57$  o mapa apresenta caos. Entre duas regiões caóticas é possível observar séries periódicas, que geralmente são de periodicidade ímpar. Para confeccionar o diagrama separamos para cada valor de  $r$  os valores máximos ou mínimos da série temporal, ou em um segundo formato separamos uma pequena porção dos pontos finais da série temporal. Abaixo apresentamos o diagrama de bifurcação para o mapa logístico na figura 1.7.

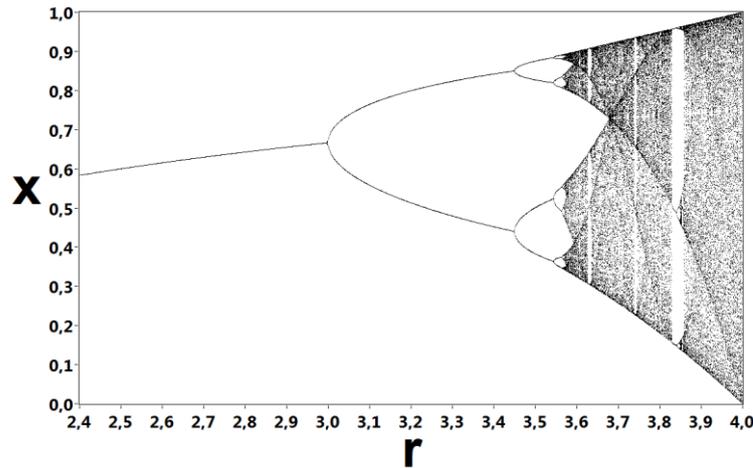


Figura 1.7 – Diagrama de bifurcação do mapa logístico.

#### 1.4 – O modelo de Lorenz

Dando continuidade ao estudo desse intrigante fenômeno, Lorenz obteve através de seu sistema de equações um sistema mais simples de equações diferenciais não lineares que apresentavam sensibilidade às condições iniciais. Apresentamos abaixo o conjunto de equações [1,2].

$$\frac{dx}{dt} = \dot{x} = \sigma(y - x) \quad (1.10)$$

$$\frac{dy}{dt} = \dot{y} = -xz + \rho z - y \quad (1.11)$$

$$\frac{dz}{dt} = \dot{z} = xy - \beta z \quad (1.12)$$

onde  $x = x(t)$ ,  $y = y(t)$  e  $z = z(t)$  são as séries temporais das variáveis do sistema e  $\sigma, \rho$  e  $\beta$  são os parâmetros de controle do sistema.

Em 1963 Lorenz apresentou seus resultados através da descrição geométrica do sistema por meio de atratores. Como o espaço de fases de um sistema é constituído pelas variáveis independentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  que descrevem o sistema, o atrator é a representação da dinâmica de um sistema no espaço de fases.

Portanto, o atrator é formado por um espaço no qual os eixos são formados pelos valores de  $x(t)$ ,  $y(t)$  e  $z(t)$  para cada instante de tempo. O conjunto de seus pontos forma uma curva que nunca se cruza. Para os parâmetros de controle com valores de  $\sigma = 10$ ,  $\rho = 28$  e  $\beta = 8/3$  encontramos o atrator estranho de Lorenz. Na figura 1.2 foi apresentado o atrator estranho tridimensional gerado através da integração das equações 1.10-12 pelo método de Runge Kutta de quarta ordem.

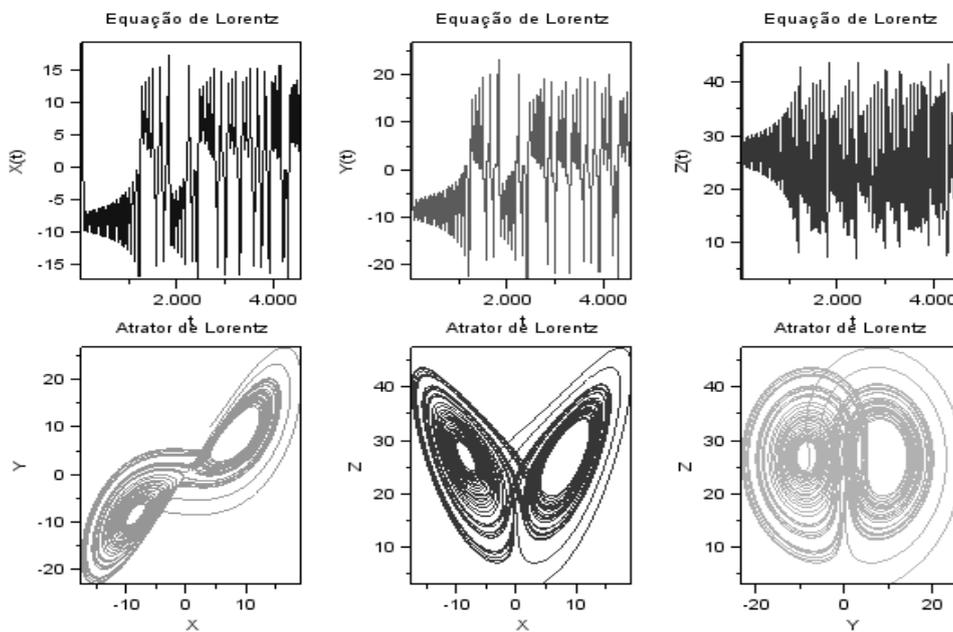


Figura 1.8 – Série temporal e atrator do modelo de Lorenz

Na figura 1.8 apresentamos as séries temporais de  $x(t)$ ,  $y(t)$  e  $z(t)$  e atratores bidimensionais envolvendo pares de variáveis independentes.

## Referências

- [1] Hilborn, Robert C. Chaos and Nonlinear Dynamics: An Introduction for Scientists and Engineers. s.l. : Oxford University, 1994.
- [2] Lorenz, Edward N. Journal of the Atmospheric Sciences. Deterministic Nonperiodic Flow. 1963, Vol. 20, pp. 130-141.

[3] Murray, J. D. *Mathematical Biology – An introduction*. Springer, 2002 [3] H. J. Poincaré, “Sur le problème des trois corps et les équations de la dynamique”, *Acta Mathematica* 13 (1890).

[4] Dissertação de mestrado de EMILSON RIBEIRO VIANA JUNIOR, Espaços de parâmetros para um circuito caótico experimental, 2010, DPF Física – UFMG.

## Capítulo 2 – Dinâmica não linear em semicondutores GaAs

Semicondutores são sistemas dinâmicos dissipativos, quando colocado em condições controladas, produzem estados não lineares no transporte elétrico do material. Esses materiais apresentam curvas características  $\vec{J}(\vec{E})$  com regiões de condutividade diferencial negativa (NDC) na presença de campo elétrico elevado. Dentro dessa região ocorrem oscilações de baixa frequência (LFO) na corrente elétrica, que podem apresentar um comportamento oscilatório periódico ou caótico [1-4]. A descrição desses fenômenos é dada em parte pelos processos de geração e recombinação que envolve o nível de energia fundamental do defeito e a banda de condução [3,4]. Por outro lado, o trânsito de portadores de cargas entre os vales  $\Gamma$  e L dentro da banda de condução influenciam fortemente na forma da região NDC [5] e conseqüentemente na dinâmica das LFO.

Todas as ocorrências experimentais desse capítulo terão como base o estudo do composto arseneto de gálio (GaAs), em especial os materiais n-GaAs e GaAs semi-insulante. O entendimento dos fenômenos envolvendo esses materiais é extremamente importante para a elaboração da base motivacional de nosso trabalho.

### 1.1 – Oscilações espontâneas e a condutividade diferencial negativa

Semicondutores são sistemas dinâmicos dissipativos não lineares. Esse tipo de comportamento é devido às não linearidades inerentes aos processos de transporte de carga em altos campos elétricos. O transporte elétrico em semicondutores no estado estacionário pode ser descrito pela Lei de Ohm

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (2.1)$$

Onde a condutividade elétrica  $\sigma$  é dada por

$$\sigma = \begin{cases} en\mu_e & \text{para semicondutores do tipo } n \\ en\mu_p & \text{para semicondutores do tipo } p \end{cases} \quad (2.2)$$

Onde  $n$  e  $p$  são, respectivamente, a densidade de elétrons e de buracos livres,  $\mu_e$  e  $\mu_p$  são, respectivamente, a mobilidade dos elétrons e dos buracos, e finalmente,  $e$  é o módulo da carga elementar.

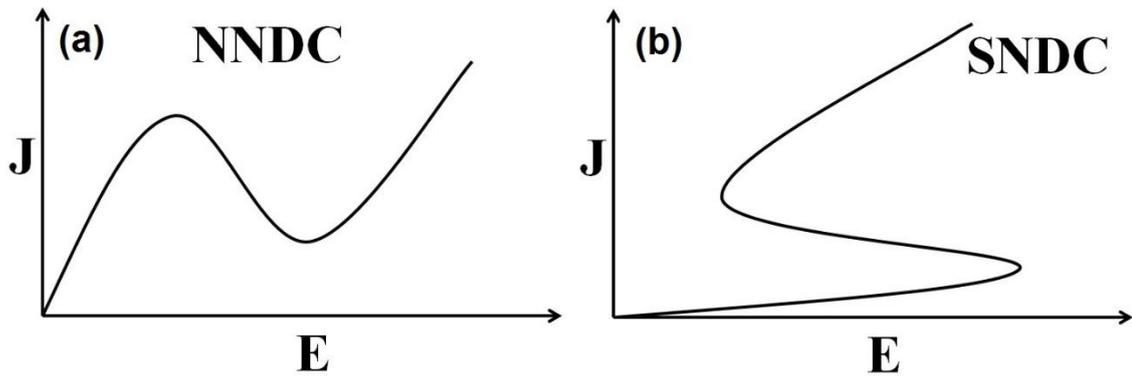
Perto do equilíbrio termodinâmico, ou seja, para campos elétricos aplicados suficientemente baixos, a relação  $\vec{J}(\vec{E})$  é linear descrevendo a Lei de Ohm. Entretanto, sob condições operacionais práticas, ou seja, para campos elétricos aplicados elevados, a relação geralmente torna-se não linear e pode até mesmo exibir um regime de condutividade diferencial negativa. Assim, a densidade de corrente diminui com o aumento de campo, e vice-versa, que em geral corresponde a uma situação instável [3,4].

Nestas curvas características existem regiões de instabilidades onde a diferencial de  $\vec{J}$  em relação à  $\vec{E}$  é negativa. Essa região é chamada de condutividade diferencial negativa (*negative differential conductivity*) e abreviada pela sigla NDC.

A condutividade diferencial é definida por:

$$\sigma_{diff} = \frac{d\vec{J}}{d\vec{E}} \quad (2.3)$$

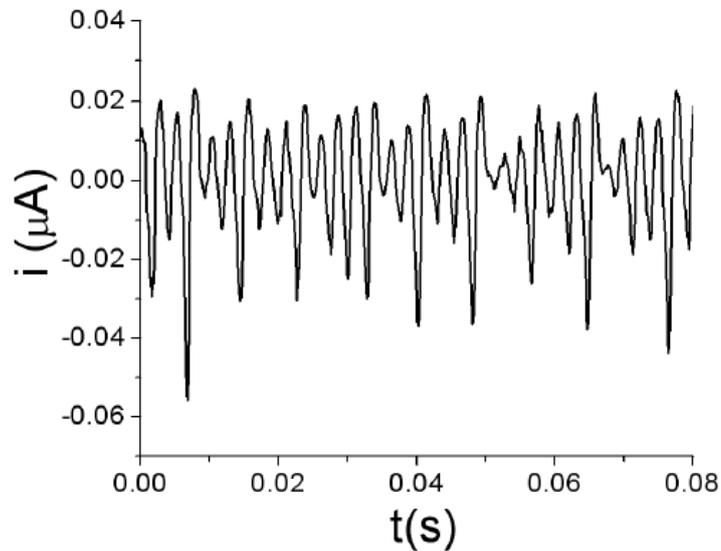
Em semicondutores existem dois tipos de curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$ , que são apresentados na figura 2.1. Dependendo da forma da curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$  o fenômeno NDC pode ser classificado como **SNDC** e **NNDC**, notação que é decorrente da semelhança das curvas com as letras S e N [3,4].



**Figura 2.1** - Densidade de corrente  $j$  em função do campo elétrico  $E$  para dois tipos de variações de NDC: (a) tipo NNDC e (b) tipo SNDC.

Os fenômenos de NNDC e SNDC estão associados com instabilidades de tensão ou corrente. Em sistemas que apresentam NNDC é comum observar a formação de domínios de alto campo que propagam pelo material [6-10]. Já em sistemas que apresentam SNDC, o comum é a formação de filamentos de corrente produzidas, por exemplo, por ionização por impacto (*Impact Ionization*) [3,4]. Entre os materiais/dispositivos que apresentam NNDC estão, por exemplo, o diodo *Gunn* e *GaAs semi-isolante* e, entre os que apresentam SNDC estão o diodo IMPATT (*Impact Ionization avalanche transit time*) e *n-GaAs*.

Em amostras de *GaAs* semi-isolantes, as oscilações espontâneas de corrente medidas são observadas na região NDC e são chamadas de Oscilações de Baixa Frequência (LFO – do inglês *low frequency oscillations*), onde as LFO são consideradas as oscilações na faixa de sub-Hz à  $10^5$  Hz (figura 2.2). Estas oscilações são frequentemente observadas em circuitos compostos por resistor, uma fonte de tensão DC e a amostra semicondutora. Sob certas condições, esta amostra é apresenta uma região de condutividade diferencial negativa (NDC) numa curva  $\vec{J}(\vec{E})$ , quando aplicamos ao circuito uma tensão DC crescente (ou, em outro caso, decrescente).

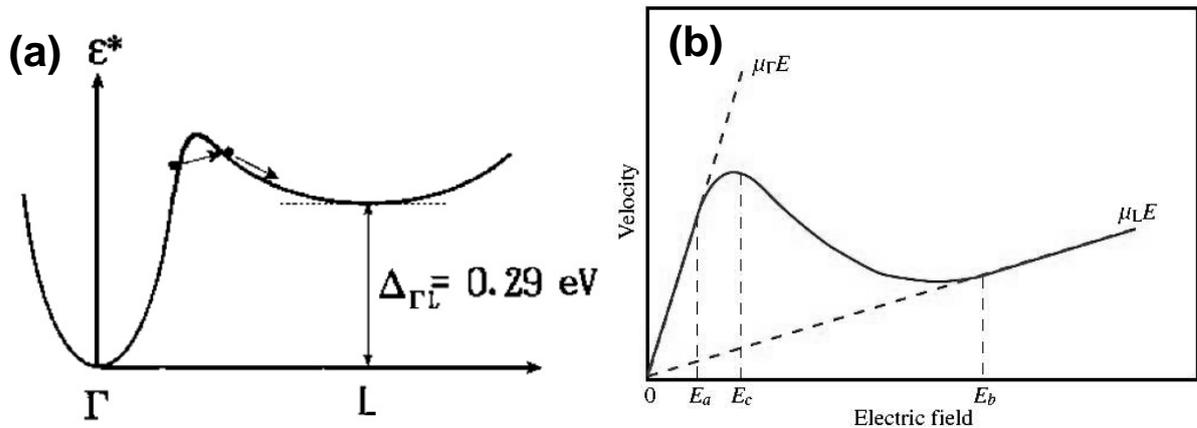


**Figura 2.2** - Oscilação de baixa frequência (LFO) obtida em GaAs semi-isolante [11].

Os mecanismos de controle que irão caracterizar a LFO provêm de um processo de ativação (fornecida pela fonte de tensão) e um processo de inibição (provisto pelo amortecimento da tensão no circuito).

Diversos trabalhos realizados indicam, de forma já consistente, que as oscilações ocorrem pela formação de domínios de campo elétrico que propagam através da amostra, sendo gerados no catodo e aniquilados no anodo, sempre presente em uma região com NDC da curva característica da amostra [6-10,12].

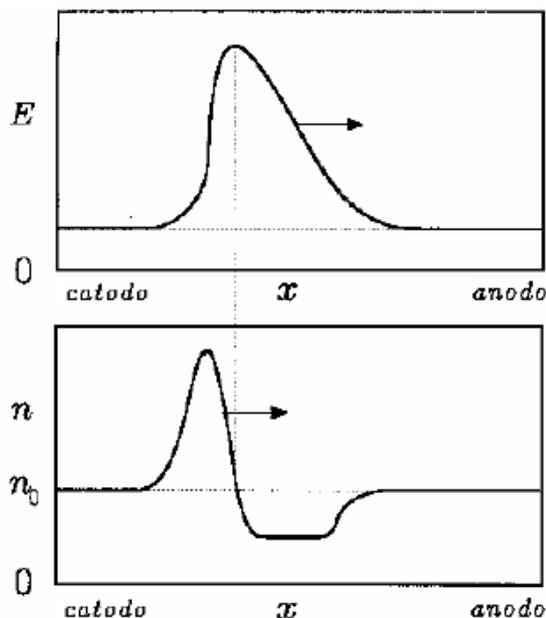
O efeito Gunn, também conhecido com efeito de transferência de elétrons presente em amostras de n-GaAs altamente dopadas, é um bom exemplo desse comportamento [13]. Esse efeito propõe que a transferência de elétrons entre um vale  $\Gamma$  na banda de condução com baixa energia e alta mobilidade para outro vale L com alta energia e baixa mobilidade, veja figura 2.3. Esse mecanismo é responsável pelo aparecimento da região NDC na curva característica da amostra e conseqüentemente à formação de domínios de campo elétrico.



**Figura 2.3** – (a) Esquema da transferência de elétrons do vale  $\Gamma$  para o vale L. (b) Mudança de mobilidade entre os vales no GaAs.

Para valores de campo elétrico aplicado próximo do  $E_c$ , ou seja, no limiar que a transferência efetiva de elétrons ocorre entre os vales, um domínio de campo elétrico é formado no interior da amostra em uma região próxima do catodo. Pelo fato da mobilidade dos elétrons no vale L ser pequena eles acumulam atrás do domínio, enquanto os portadores localizados logo a frente são empurrados, gerando o perfil de densidade de portadores e consequentemente o perfil do campo elétrico da figura 2.4. Quando o domínio atinge o anodo ele desaparece e um novo é formado no catodo reiniciando o processo.

O diodo Gunn é um dispositivo elétrico que apresenta esse tipo de comportamento que gera e amplifica frequências além de 1GHz. A região NDC surge para campos elétricos elevados de  $E_c > 3 \text{ kV/cm}$  e a velocidade de propagação dos domínios é próximo de  $3 \times 10^7 \text{ cm/s}$  [14].



**Figura 2.4** – Esquema do campo elétrico e da densidade de elétrons em função da posição linear ilustrando o movimento do domínio de campo em direção ao anodo.

Para amostra de GaAs SI observamos valores muito diferentes na frequência de oscilação, na velocidade de propagação dos domínios de campo e na região NDC. Para uma amostra de GaAs SI crescida por LEC (*Liquid Encapsulated Czochralski*) [12] o valor de  $E_c$  é da ordem de 1,0 kV/cm, valor três vezes menor ao encontrado para o efeito Gunn [14]. A frequência de oscilação da amostra é de 56 Hz e a velocidade de propagação do domínio é de 39 cm/s.

Para amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE (*low-temperature molecular-beam epitaxy*) apresentam o valor de  $E_c$  com 0,62 kV/cm [1] e 1,0 kV/cm [2] e velocidade de propagação do domínio de campo de 35 cm/s [1] e 63 cm/s [2].

Os valores apresentados acima são características comuns de GaAs SI [1,2,15-17] e são incompatíveis com os resultados do efeito Gunn [14], o que sugere que outros mecanismos estão envolvidos no fenômeno de formação de domínios de campo. Complementando, alguns trabalhos afirmam que as regiões NDC e os domínios de campos em GaAs SI são formados pelo fenômeno de captura assistida

por campo elétrico (*field-enhanced trapping*) em defeitos [8-10]. Tais defeitos responsáveis pela captura de elétrons são conhecidos como defeitos EL2 [6,7,18].

Portanto, além da transferência de elétrons entre os vales da banda de condução os processos de geração e recombinação de cargas exercem um papel importante na produção da região NDC e todos os efeitos a ela relacionados.

## 2.2 - Processos de geração e recombinação de cargas

Em semicondutores, podemos controlar a densidade de portadores de carga livres através de impurezas e defeitos intrínsecos. Estes podem funcionar como doadores ou centros de recombinação de cargas. Estímulos externos tais como a temperatura, a intensidade da iluminação, o campo elétrico e o campo magnético podem interagir com as impurezas e defeitos do material semicondutor de forma a aumentar (geração) ou diminuir (recombinação) a densidade de portadores de carga livres. Tais processos de geração e recombinação (g-r) podem levar o semicondutor a apresentar NDC em suas curvas características  $\vec{J}(\vec{E})$ .

A região NDC ocorre devido a uma redistribuição de elétrons entre a banda de condução e os defeitos em função da variação do campo elétrico. As probabilidades de transições microscópicas dos portadores entre estados diferentes, descritas pelos coeficientes de g-r, geralmente dependem do campo elétrico. Os principais processos de g-r que dependem fortemente do campo elétrico são: captura assistida por campo (*field-enhanced trapping*), que geralmente leva a formação de regiões do tipo NNDC; e a ionização por impacto (*Impact Ionization*), que é o principal processo para a formação de regiões do tipo SNDC [3,4,19-22].

A captura assistida por campo elétrico ocorre geralmente em semicondutores com presença de níveis profundos de impureza, ou seja, é um processo de recombinação de portadores de carga. A captura de elétrons nestes níveis requer uma penetração da barreira de potencial Coulombiano. Portanto, o coeficiente de captura aumenta com o campo  $\vec{E}$  enquanto a emissão (térmica e ótica) de elétrons é praticamente independente do campo, para valores abaixo do campo limiar para a ocorrência de ionização. Assim, a densidade de portadores livres decai com o aumento do campo, e a condutividade diferencial torna-se negativa. Para campos muito elevados, o coeficiente de ionização aumenta e a densidade de portadores passa a aumentar com o campo, levando a uma condutividade diferencial positiva. Assim uma curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$  do tipo N é formada [3,4,19-22].

Os domínios de campo elétrico induzidos pelo fenômeno de captura assistida por campo elétrico que atravessam a amostra GaAs semi-isolante geralmente são responsáveis pelo surgimento das oscilações de baixa frequência.

A ionização por impacto de portadores de impurezas, como doadores rasos, aceitadores ou defeitos profundos ou ainda através de transições interbandas também pode levar à formação de regiões de NDC. Quando o portador livre ganha energia cinética suficiente do campo elétrico, ele pode transferir esta energia em uma colisão para um portador ligado, que passa para a banda de condução. Portanto um portador livre é gerado e este pode ionizar outros portadores quando for acelerado e colidir com um portador ligado, gerando um processo de avalanche. Assim, o processo produz um rápido aumento da densidade de portadores livres, ou seja, a ionização por impacto é um processo de geração de portadores de carga induzidos por alto campo elétrico [3,4,19,20].

A presença simultânea desses dois processos, um de geração e outro de recombinação pode resultar também na forma não linear da curva  $\vec{J}(\vec{E})$ . Portanto, esse processo g-r será um dos pontos de partida para produzir as instabilidades vistas em dispositivos semicondutores.

### 2.3 – Defeitos estruturais em amostras de GaAs

A característica não linear das amostras em geral é produzida no momento de sua confecção e na criação de seus níveis de defeitos. Os defeitos em semicondutores são classificados como defeitos rasos e profundos. Essa rotulação está relacionada com a magnitude do nível de energia do defeito medido com relação à banda de condução ou a banda de valência. Os defeitos rasos são aqueles que apresentam o nível de energia dos defeitos próximos à banda de condução ou a banda de valência. Os doadores rasos do material n-GaAs, por exemplo, apresentam facilidade de interação com a banda de condução pela sua proximidade, cerca de 6 meV [5].

A diferença de energia entre a banda de valência e a banda de condução de um material é conhecida como gap de energia. Essa energia pode ser representada por  $E_g$ . Nos materiais semicondutores que apresentam defeitos profundos geralmente a energia de ionização é próxima ao meio do gap com  $E_g/2$ , ou seja, valores de energia bem afastados da banda de valência ou da banda de condução [19].

As amostras de GaAs SI possuem defeitos profundos quando são crescidas pela técnica de LT-MBE (*low-temperature molecular-beam epitaxy*) isto é, a baixa temperatura. O crescimento dessas amostras a baixa temperatura proporciona uma

grande concentração de defeitos estruturais, conhecidos como defeitos de anti-sítios  $As_{Ga}$ , devido à baixa mobilidade dos átomos na sua superfície durante o processo. No caso do GaAs, a formação de anti-sítios ocorre quando átomos de As ocupam os sítios cristalográficos dos átomos de Ga. A concentração desses defeitos depende da temperatura de crescimento e são, dentro do fenômeno de transporte elétrico, eficientes centros de recombinação. Da mesma forma, os mesmos anti-sítios podem ser produzidos em GaAs pela técnica de crescimento *Liquid-Encapsulated Czochralski* (LEC) [12,18,23].

Com a presença de defeitos profundos, os portadores de cargas são capturados promovendo um esvaziamento. Na banda de condução esse esvaziamento aumenta a resistividade elétrica criando um comportamento isolante no material.

### 2.4 – Experimentos em GaAs semi-isolante

A ocorrência e análise das oscilações de baixa frequência em amostras GaAs semi-isolante será o ponto de discussão dessa seção. Tal material, para que exiba esses comportamentos sob a ação de parâmetros de controle, deve apresentar em sua estrutura os defeitos profundos, que foram expostos na seção anterior. Como já foi informado anteriormente, esses defeitos funcionam como centros de recombinação de portadores e são responsáveis pela produção de uma região de condutividade diferencial negativa da forma NNDC em sua curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$ . Dentro dessa região NNDC, são observados as oscilações espontâneas de corrente periódicas e caóticas, que sob condições controladas exibem uma dinâmica de bifurcação de período, rotas para o caos e janelas de ordem dentro de regiões

caóticas. A dependência das LFO dentro da região de NDC foi estudada em diversos trabalhos de nosso grupo [1,2,11,19,20,24-26] e seus resultados são a motivação para a elaboração deste trabalho.

As amostras de GaAs estudadas foram crescidas pela técnica de LT-MBE (*low-temperature molecular-beam epitaxy*) para produzir defeitos profundos e conseqüentemente caracterizar o GaAs como um material semi-isolante. Não concentraremos nossa atenção na descrição do processo de crescimento e nem na clivagem e preparação da amostra, pois julgamos não ser o foco de nosso trabalho.

A amostra devidamente preparada é anexada a um sistema automatizado de medidas, onde os parâmetros de controles são variados conforme a necessidade da realização da medida. Nesse sistema a amostra é posta dentro de um criostato onde ficará sujeita a uma variação controlada de temperatura e uma variação de intensidade luminosa promovida por um LED de GaAs que emite no infravermelho próximo da amostra. A intensidade do LED é alimentada por uma fonte de corrente.

A amostra é ligada em série a um resistor e a uma fonte variável de tensão DC (corrente contínua). Assim, as oscilações espontâneas são medidas na queda de tensão do resistor. O criostato é colocado entre as bobinas de um eletroímã, de forma que a amostra possa ser orientada de forma paralela ou perpendicular a um campo magnético  $\vec{B}$  externo.

Todo o sistema é automatizado através de softwares elaborados na plataforma LabVIEW® desenvolvidos pelo próprio grupo. As medidas são coletadas através de uma placa de aquisição de dados DAQ-MX de 16 bits de elevada capacidade de obtenção de dados, fabricada pela *National Instruments*. O esquema do sistema de medida é apresentado na figura 2.5 abaixo.

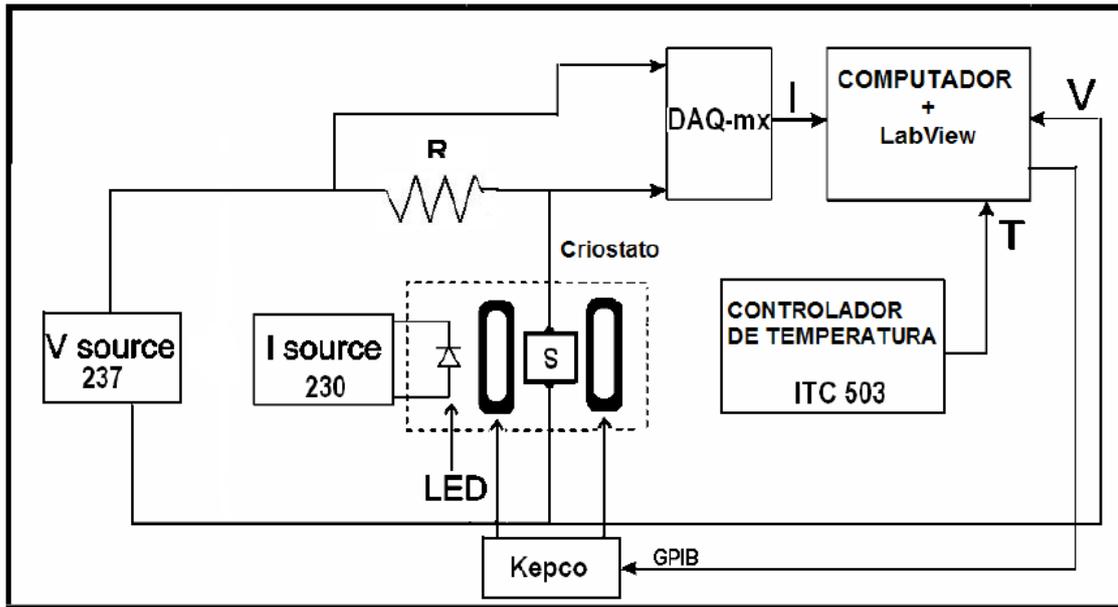


Figura 2.5 – Esquema do circuito utilizado para obtenção das medidas de I(V) e LFO.

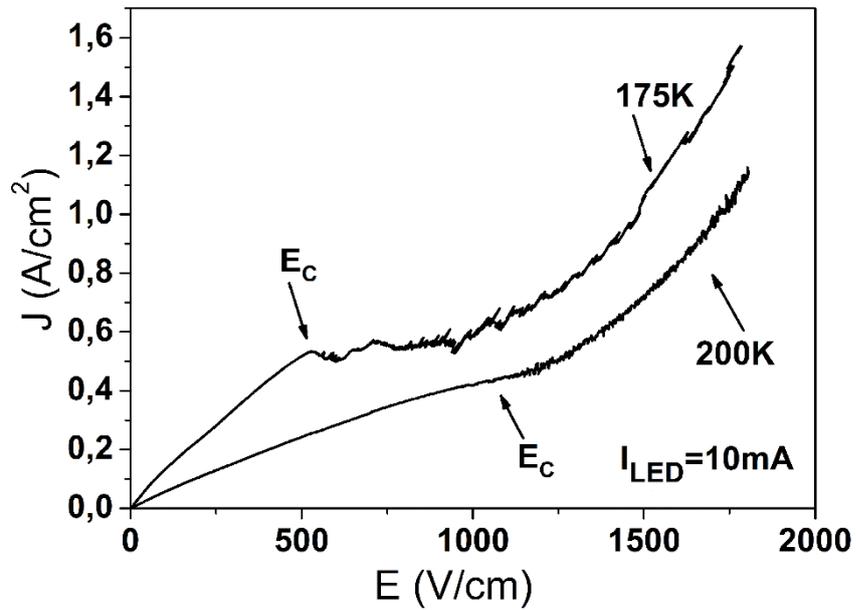
Na realização de medida os resultados são apresentados na forma de parâmetros extensivos como tensão elétrica  $V$  e corrente elétrica  $I$ . Para obter o campo elétrico aplicado  $E$  dividimos  $V$  pela distância  $d$  entre os contatos. Da mesma forma a densidade de corrente  $J$  pode ser obtida dividindo a corrente elétrica  $I$  pela área  $A$  da seção transversal da amostra.

#### 2.4.1 – A região NNDC na curva característica $\vec{J}(\vec{E})$

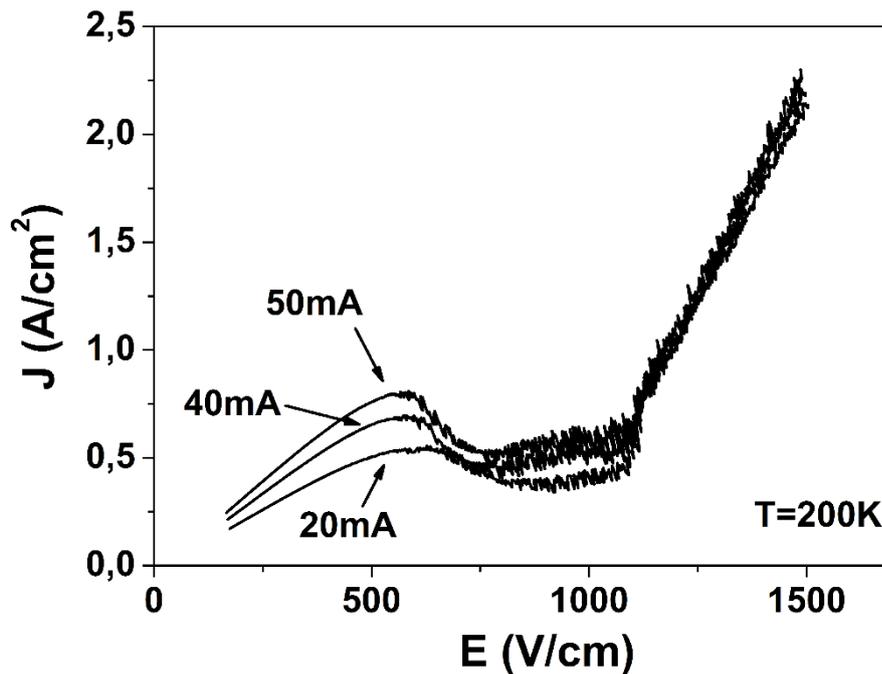
Nesses trabalhos verificou-se que as LFO na região NNDC em amostras GaAs semi-isolante estão relacionados com alguns parâmetros utilizados nas medidas, como o campo elétrico e magnético aplicado, a intensidade da iluminação do LED e a temperatura da amostra. Assim, esses quatro parâmetros exercem uma grande influência sobre as oscilações da corrente na amostra.

A temperatura tem um papel fundamental na dinâmica das oscilações espontâneas presente na região de NDC. Para valores pequenos do campo elétrico aplicado  $\vec{E}$  a densidade de corrente  $\vec{J}$  apresenta um comportamento ôhmico até atingir um campo elétrico crítico  $E_c$ . Com a mudança de temperatura a curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$  exibe uma nova posição para o campo elétrico crítico  $E_c$ . À medida que a temperatura é aumentada a curva  $\vec{J}(\vec{E})$  apresenta uma região maior onde o comportamento ôhmico domina. A influência da temperatura modifica a resistividade elétrica do material no sentido que quanto menor a temperatura maior a resistividade. Esse comportamento pode ser observados na curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$  para o GaAs semi-isolante apresentada com dois valores distintos de temperatura na figura 2.6.

A exposição à intensidade da luz do LED produz uma alteração na densidade de elétrons livres que, via o processo de foto-excitação, altera as condições de condução da amostra e conseqüentemente, altera a curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$ . Para temperatura e tensão elétrica constante, observa-se que quanto maior a intensidade luminosa, maior é a densidade de elétrons fotogerados. Na figura 2.7 observamos esse comportamento com o deslocamento vertical da curva característica. Note que o campo elétrico crítico  $E_c$  não sofre influência da intensidade luminosa aplicada sobre a amostra.



**Figura 2.6** – Curva  $\vec{J}(\vec{E})$  característica para a amostra GaAs-Si crescida por LT-MBE. Medidas realizadas com 175K e 200K com intensidade luminosa do LED de 10mA.



**Figura 2.7** – Curva  $\vec{J}(\vec{E})$  característica para a amostra GaAs-Si crescida por LT-MBE. Medidas realizadas temperatura fixa em 200K e variação da intensidade luminosa do LED de 30mA a 50mA.

Na figura 2.7 ainda podemos notar que ocorre uma ampliação acentuada na região NNDC à medida que a intensidade da iluminação aplicada aumenta. Neste caso, uma densidade maior de portadores de cargas livres é capturado pelo

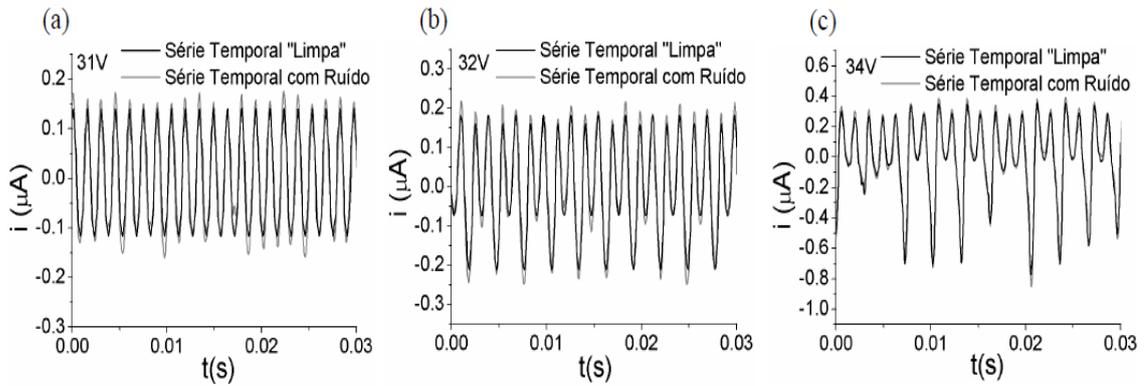
processo de recombinação por captura assistida por campo elétrico (*field-enhanced trapping*) [19,20,27]. Porém, na figura 2.6 a curva característica com temperatura de 200K e intensidade de iluminação de 10 mA não é bem manifestado. Uma característica presente em todas as curvas características dessa amostra de GaAs-SI é a ocorrência de um aumento acentuado na densidade de corrente em sua parte final, caracterizando que os portadores de cargas livres estão sofrendo o processo de geração conhecido como ionização por impacto (*Impact Ionization*) até a banda de condução [3,28,29].

Na realidade, a mudança nos valores de temperatura e intensidade luminosa em que a amostra está submetida não são os fatores exclusivos para exibir a forma marcante da região NNDC. A competição entre o processo de geração (ionização por impacto) e o processo de recombinação (captura assistida por campo elétrico) entre a banda de condução e o nível do defeito contribui para o fenômeno. Outros mecanismos dependentes do campo elétrico envolvendo os processos de g-r entre os vales  $\Gamma$  e L também podem ser determinantes para a formação da região de NNDC. Como essas informações se organizam para explicar a região de NNDC é a motivação de nosso trabalho.

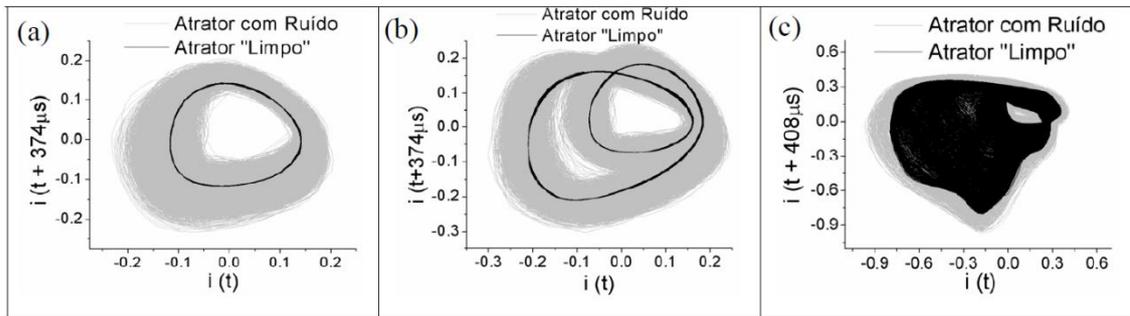
### 2.4.2 – LFO, diagrama de bifurcação e a influência do campo magnético $\vec{B}$

Abaixo apresentamos algumas LFO presentes na região NNDC da curva característica da amostra de GaAs-SI com temperatura de 200K e intensidade de iluminação do LED de 30mA. A figura 2.8 apresenta as séries temporais para as tensões aplicadas de 31 V, 32 V e 34 V. Para visualizar as LFO em uma forma mais pura foi utilizado um algoritmo de redução de ruído, cujo objetivo é limpar as séries

temporais o máximo possível sem prejudicar a dinâmica do sistema. A discussão da técnica não é o objetivo de nosso trabalho, mas para maiores informações as referências [30] podem ser consultadas.



**Figura 2.8** – Séries temporais da corrente elétrica para a amostra de GaAs SI a 200 K e  $I_{LED}=30\text{mA}$ . A tensão foi mantida constante em (a) 31 V, (b) 32 V e (c) 34 V.

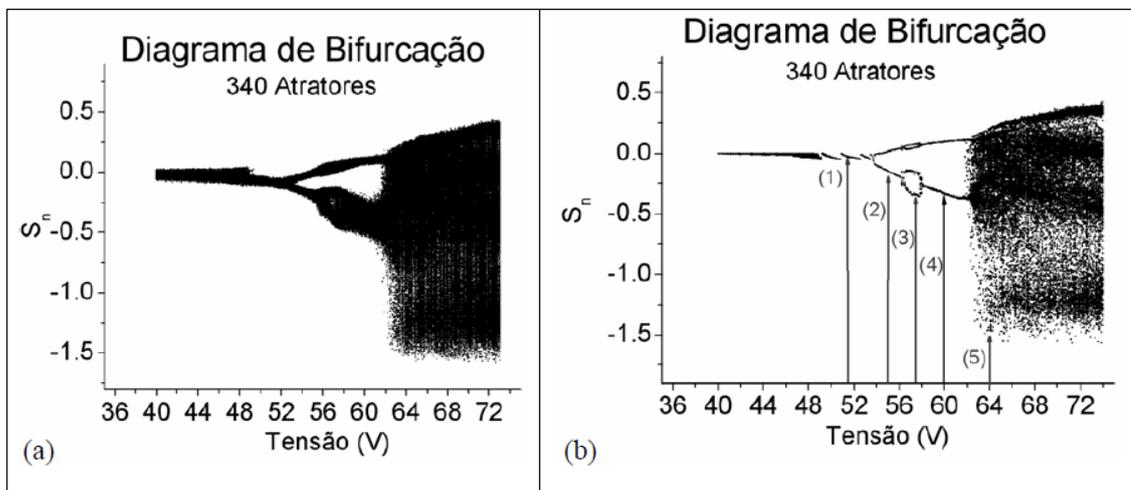


**Figura 2.9** – Atratores para a amostra de GaAs SI a 200 K e  $I_{LED}=30\text{mA}$ . A tensão foi mantida constante em (a) 31 V, (b) 32 V e (c) 34 V.

A figura 2.9 apresenta os atratores reconstruídos a partir das séries temporais da figura 2.8 para os mesmos valores de tensão. Em cinza é representado o atrator original e em preto o atrator após sofrer o processo de redução de ruído. Os atratores são reconstruídos no espaço de estados utilizando a técnica de atraso temporal (*time delay*) que não será discutida nesse trabalho, porém, seu procedimento pode ser encontrado nas referências [30,31]. Os atratores apresentam periodicidade 1, 2 e caos respectivamente. Os expoentes de Lyapunov referentes

aos atratores da figura 2.9 (a), (b) e (c) possuem valores respectivamente de  $EL_{(a)}=0$ ,  $EL_{(b)}=0$  e  $EL_{(c)}=0,57$  [30].

A seguir na figura 2.10 apresentamos um diagrama de bifurcação original e limpo com a técnica de redução de ruído. O diagrama é construído utilizando o mapa de Poincaré, onde  $S_n$  representa os mínimos da série temporal [2,30]. Outros diagramas de bifurcação para GaAs SI podem ser encontrados na literatura [30,11].



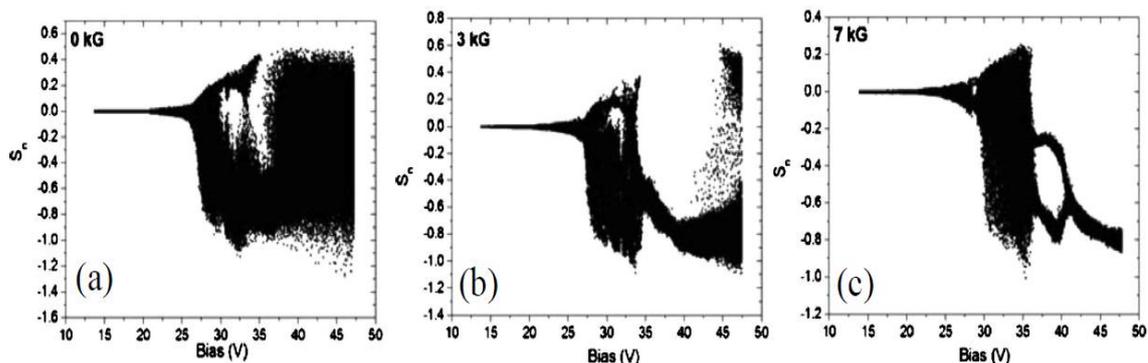
**Figura 2.10** – Diagrama de bifurcação (a) original e (b) limpo para a amostra de GaAs SI a 200 K e  $I_{LED}=10\text{mA}$ . Os pontos indicados por (1), (2), (3) e (4) estão associados com as oscilações de períodos 1-2-4-2 e (5) caos respectivamente.

Alguns poucos trabalhos têm abordado a questão de medidas em presença de campo magnético  $\vec{B}$  em amostras semi-isolantes de GaAs e sua correlação com as medidas de LFO realizadas no escuro, para temperatura ambiente. Podemos citar o trabalho de Vaitkus et al. [32] e Neumann et al. [12]. Suas principais conclusões os levaram a propor que o campo magnético induz oscilações e que ele pode causar ou destruir tais oscilações, dependendo do acoplamento dos campos elétrico e magnético oscilantes. O efeito do campo magnético sobre as LFO é

significativo quando  $\vec{B}$  é aplicado perpendicularmente a corrente da amostra ou sobre sua superfície. Mas se  $\vec{B}$  for aplicado paralelo à corrente ou a superfície da amostra nenhum efeito significativo sobre o transporte elétrico foi observado [12].

Em outro trabalho de nosso grupo [24], utilizando uma amostra semi-isolante de GaAs crescida por LT-MBE (*molecular beam epitaxy* de baixas temperaturas), as LFO foram estudadas. Observamos uma forte influência sobre os diagramas de bifurcações e atratores na presença de campo magnético paralelo à corrente e a superfície da amostra.

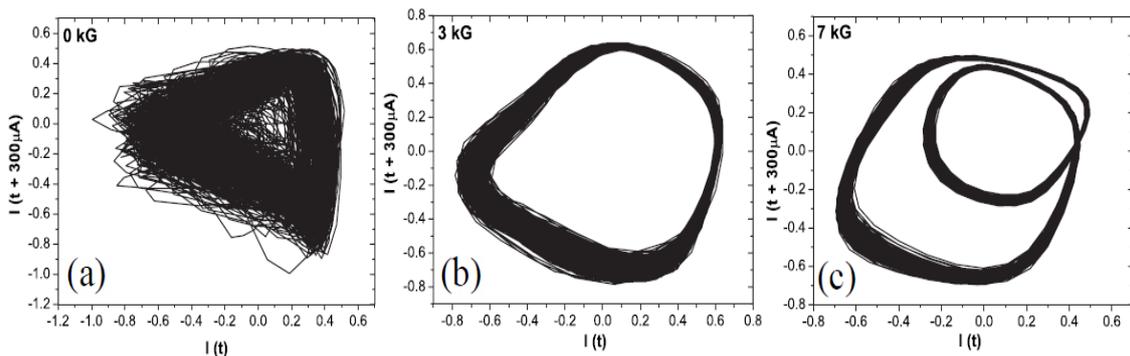
Na figura 2.11 são apresentados diagramas de bifurcação construídos para valores distintos de campo magnético  $B_{||}$  paralelo aplicado para temperatura de 200K e intensidade de iluminação do LED de 40 mA. A mudança no módulo de  $B_{||}$  modifica diretamente as regiões do diagrama, como por exemplo, para o valor do potencial elétrico aplicado de 37,5 V essa região que possuíam inicialmente caos muda para períodos 1 e 2.



**Figura 2.11** – Evolução do diagrama de bifurcação em função do campo magnético paralelo aplicado para a amostra de GaAs SI a 200 K e  $I_{LED}=40mA$ . Os diagramas indicados por (a), (b) e (c) estão associados ao módulo  $B_{||}$  de valores de 0G, 3kG e 7kG respectivamente [24].

Podemos observar na figura 2.12 que o estado de um atrator pode ser modificado com a aplicação de um campo magnético paralelo. Um atrator caótico

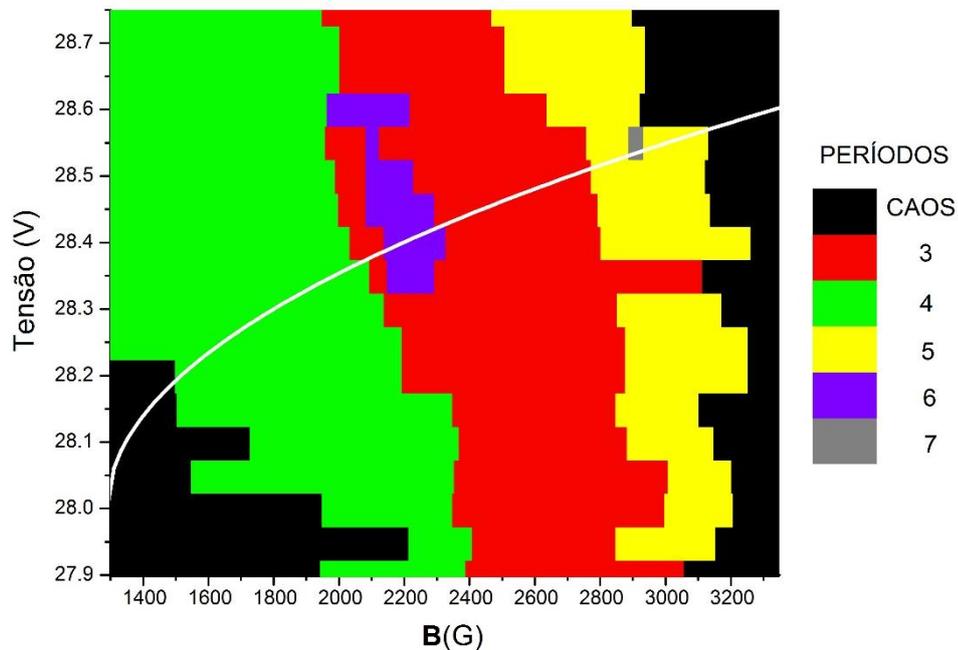
com valor fixo de potencial elétrico aplicado de 37,5 V quando  $B=0G$  evolui para um atrator de período 1 quando  $B=3kG$  e para um atrator de período 2 quando  $B=7kG$ . Esses resultados demonstram que as oscilações espontâneas presente na região NNDC dependem do valor do campo magnético paralelo aplicado.



**Figura 2.12** – Evolução dos atratores em função do campo magnético paralelo aplicado para a amostra de GaAs SI a 200 K,  $I_{LED}=40mA$  e  $V=37,5V$ . Os atratores indicados por (a), (b) e (c) estão associados ao módulo  $B_{||}$  de valores de 0G, 3G e 7G respectivamente [24].

Em um recente trabalho de nosso grupo [25] realizadas por mim no período de mestrado [33], observamos o controle das oscilações de forma bem mais detalhada, com o campo magnético  $B_{||}$  aplicado paralelamente associado às LFO. Através da combinação adequada de quatro parâmetros majoritários, sendo eles: o campo elétrico, o campo magnético, a intensidade de iluminação do LED e a temperatura da amostra foi possível observar órbitas de períodos ímpares 3, 5 e 7 e os pares intermediários, 4, 6 e 8. Os períodos ímpares são de difícil observação experimental, pois, normalmente aparecem como janelas de ordem dentro do regime caótico e são difíceis de estabilizar. Esses resultados foram apresentados na forma de mapas bidimensionais de tensão versus campo magnético e intensidade de iluminação por campo magnético, conhecido como espaço de parâmetros. As regiões periódicas são representadas nesses mapas por cores.

Abaixo apresentamos um deles no figura 2.13. Nessa figura temos um o espaço de parâmetros de tensão versus campo magnético obtido obtidas em  $T = 187 \text{ K}$  e  $I_{LED} = 16 \text{ mA}$ . O gráfico mostra uma região de período-6 imersa em uma região de período-3. De forma semelhante, uma pequena região de período-7 encontra-se dentro da região de período-5. Para uma tensão constante existem bifurcações diretas de período-4 para o período-6. Através de uma curva, representada na cor branca, podemos observar uma sequência de bifurcações de atratores com periodicidade caos-4-3-6-3-5-7-5-caos [25,33].



**Figura 2.13** – Espaço de parâmetro de tensão versus campo magnético  $B$  paralelo obtidas em  $T = 186 \text{ K}$ ,  $I_{LED} = 16 \text{ mA}$ . Através da curva branca podemos observar uma sequência de bifurcações de atratores com periodicidade caos-4-3-6-3-5-7-5-caos [25,33].

Mais resultados podem ser acompanhados no artigo publicado em 2009 pelo grupo [25]. A introdução do campo magnético foi relevante, pois ele age como um parâmetro fino.

Em resumo, esse capítulo apresentou uma revisão dos fenômenos envolvidos na geração de oscilações espontâneas de corrente elétrica em n-GaAs e GaAs SI presentes em uma região NDC. O processo geração por ionização por impacto, o processo recombinação por captura assistida por campo elétrico e mecanismos de transferência de portadores de carga entre os vales  $\Gamma$  e L são determinantes na elaboração da forma da curva característica, e conseqüentemente no processo dinâmico do sistema. Esses fenômenos foram apresentado em amostra GaAs-SI através das curvas características com região NNDC, dos atratores e das rotas de bifurcação e caos em diagramas de bifurcação. Observamos também, o comportamento das curvas  $\vec{J}(\vec{E})$  e dos períodos das LFO quando os quatro parâmetros de controle são submetidos a variações.

Compreender como os processos de g-r e os mecanismos de transporte entre vales na banda de condução estão relacionados com a região NNDC da amostra GaAs-SI e toda a dinâmica não linear presente nela é o objetivo de nosso trabalho de doutorado. No próximo capítulo apresentaremos alguns modelos que descrevem processo g-r através de equações de taxas para regiões SNDC. No capítulo 4 apresentaremos a contribuição de nosso trabalho, que é descrever as LFO e toda sua dinâmica para curvas característica NNDC, através de equações de taxa envolvendo os processos de g-r, um mecanismo de competição entre os vales  $\Gamma$  e L da banda de condução e uma inédita curva de velocidade de drift.

### Referências

- [1] R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and H. A. Albuquerque, *Chaos* **13**, 457 (2003).
- [2] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, and G. M. Ribeiro, *Physica D* **194**, 166 (2004).

- [3] E. Schöll, *Nonlinear Spatio-Temporal Dynamics and Chaos in Semiconductors*, Cambridge, (2001)
- [4] K. Aoki - *Nonlinear Dynamics and Chaos in Semiconductors* - IOP Publishing Ltda - Bristol and Philadelphia 2001
- [5] Yu, P. Y. and Cardona, M. – *Physics and Materials Properties* – Spring (2010).
- [6] M. Kiyama, M. Tatsumi and M. Yamada, *Appl. Phys. Lett.* 86, 012102 (2005).
- [7] M. Kiyama, M. Yamada and M. Tatsumi, *Eur. Phys. J.: Appl. Phys.* 27, 185 (2004).
- [8] F. Piazza, P. C. M. Christianen and J. C. Maan, *Phys. Rev. B* 55, 15591 (1997).
- [9] F. Piazza, P. C. M. Christianen and J. C. Maan, *Appl. Phys. Lett.* 69, 1909 (1996).
- [10] M. Kaminska, J. M. Parsey, J. Lagowski and H. C. Gatos, *Appl. Phys. Lett.* 41, 989 (1982).
- [11] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and W. N. Rodrigues, *Brazilian Journal of Physics*, **36** 2A (2006).
- [12] A. Neumann, *J. Appl. Phys.* **90**, 1 (2001).
- [13] J. B. Gunn, *Solid State Commun.* 1, 88 (1963).
- [14] K. Seeger, *Semiconductor Physics – An Introduction*, 4th ed, Springer, Berlin, 1989.
- [15] A. Barraud, *C. R. Acad. Sci.* 256, 3632 (1963).
- [16] G. N. Maracas, D. A. Johnson and H. Goronkin, *Appl. Phys. Lett.* 46, 305 (1985).
- [17] H. Rajbenbach, J. M. Verdiell and J. P. Huignard, *Appl. Phys. Lett.* 53, 541 (1988).
- [18] K. Krambrock, M. Linde, J. M. Spaeth, D. C. Look, D. Bliss and W. Walukiewics, *Semicond. Sci. Technol.* 7, 1037 (1992).
- [19] R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, J. C. Bezerra, M. V. B. Moreira, and H. Chacham, *J. Appl. Phys.* **88**, 6541 (2000).
- [20] H. A. Albuquerque, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, R. L. da Silva, W. N. Rodrigues, M. V. B. Moreira and R. M. Rubinger, *Journal of Applied Physics* **93**, 3 (2003).
- [21] H.A. Albuquerque, R.L. da Silva, R.M. Rubinger, A.G. de Oliveira, G.M. Ribeiro, W.N. Rodrigues - *Physica D* **208**, 123 (2005).
- [22] Albuquerque, H. A., da Silva, R. L., Rubinger, R. M., de Oliveira, A. G., Ribeiro, G. M., and Rodrigues, W. N. - *Brazilian Journal of Physics*, **36**, 2A (2006)

- [23] D.C. Look, in Semiconductors and Semimetals vol.19, edited by R.K. Willardson e A.C.Beer, Academic Press, N.Y, (1983).
- [24] A.G. de Oliveira, R. L. da Silva, G. M. Ribeiro, M. V. B. Moreira, J. C. González and R. M. Rubinger, Physical Review B **76**, 155206 (2007).
- [25] S.L. da Silva, R.M. Rubinger, A.G. de Oliveira, G.M. Ribeiro, E.R. Viana - Physica D **238**, 1951 (2009).
- [26] R. L. da Silva, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira and G. M. Ribeiro, Brazilian Journal of Physics, **32** 2A (2002).
- [27] R. G. Praat and B. K. Ridley, J. Phys. Chem. Solids 26, 11 (1965).
- [28] C. Paracchini and V. Dallacasa, Solid State Commun. 69
- [29] E. Schöll, Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors, Springer, Berlin (1987).
- [30] Tese de doutorado de Rodrigo Lacerda da Silva, Oscilações Espontâneas de Corrente Elétrica e Rotas para o Caos em GaAs, Abril de 2006, DP Física – UFMG
- [31] Tese de doutorado de Holokx Abreu Albuquerque, Fenômenos Não Lineares de Transporte Elétrico Induzidos por Geração-Recombinação em Semicondutores, Dezembro de 2005, DP Física - UFMG
- [32] J. Vaitkus, R.-P. Kiliulis, and J. Storasta, Lith Phys. J. **29**, 97 (1989)
- [33] Dissertação de mestrado de Samir Lacerda da Silva, Controle de Caos em Amostras Semi-isolantes de Arseneto de Gálio, Agosto de 2008, DP Física – UFMG

## Capítulo 3 - Modelos de Equações de Taxas para os Processos de geração-recombinação em Semicondutores

Materiais semicondutores são sistemas dinâmicos dissipativos, quando colocados em condições controladas, apresentam estados não lineares no transporte elétrico. Efeitos como oscilações espontâneas de baixa frequência (LFO), duplicação de período e rota para o caos acontecem em regiões com condutividade diferencial negativa NDC em suas curvas características  $J(E)$ . O elemento físico responsável por tais fenômenos é a competição entre os processos de geração e recombinação de cargas ocorrendo entre os níveis de defeito e a banda de condução quando um campo elétrico externo é aplicado sobre o material.

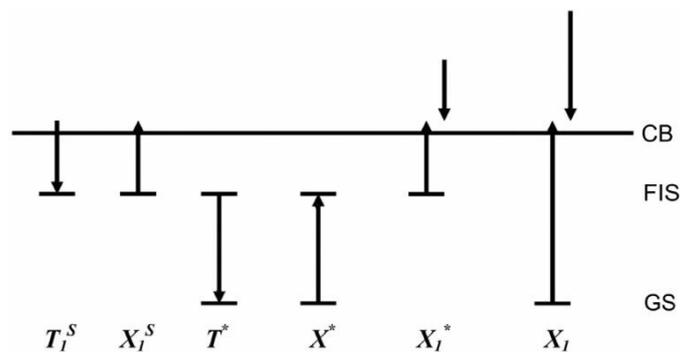
Neste capítulo, apresentaremos alguns modelos de equações de taxas para os processos de geração e recombinação em semicondutores. A base fundamental desses modelos é conhecida como modelo de dois níveis (*two-level model*), criado por E. Schöll, e que consiste em um nível de defeito, o seu primeiro estado excitado e a banda de condução. Tal modelo é aplicado em semicondutores do tipo N ou P que apresentam nível de defeito do tipo raso, baixas temperaturas ( $\sim 4\text{K}$ ) e regiões NDC do tipo S, já ilustrada no capítulo anterior por SNDC.

Durante esse capítulo abordaremos dois tipos de materiais semicondutores o arseneto de gálio do tipo N (n-GaAs) e GaAs semi-isolante (GaAs SI). O primeiro material apresenta todas as características citadas acima, porém, GaAs SI possui diferenças consideráveis como a presença de um nível de defeito profundo, temperatura de operação próxima a temperatura ambiente ( $\sim 300\text{K}$ ) e região com condutividade negativa do tipo N (NNDC). Observaremos adiante como o modelo de dois níveis trata esses dois sistemas físicos diferentes.

### 3.1 – O Modelo de dois níveis de Schöll

O modelo de dois níveis, já solidamente consolidado na literatura, descreve muitas propriedades de transporte não linear em semicondutores do tipo n-GaAs para temperaturas de Hélio líquido (~4K). O modelo é baseado em equações de taxa de geração e recombinação de cargas. No caso do n-GaAs, as cargas são elétrons. O modelo é composto de um nível de defeito, um nível excitado desse defeito e a banda de condução. Nesse caso, o nível de defeito é raso, ou seja, de uns poucos meV para um *gap* de cerca de 1,5 eV.

Os processos de geração e recombinação envolvendo a banda de condução, o nível de defeito e seu nível excitado, estão representados esquematicamente na figura 3.1.



**Figura 3.1** - Modelo de geração-recombinação envolvendo a banda de condução (CB) e o defeito – estado fundamental (GS) e o primeiro estado excitado (FIS). [1,2]

Assume-se como ponto de partida que o semiconductor do tipo-n tenha uma densidade  $N_D$  de doadores e  $N_A$  de aceitadores, com  $N_A < N_D$ . Para baixas temperaturas podem-se desprezar os processos de g-r envolvendo a banda de

valência e supor que os aceitadores estão todos ocupados e, assim, não entram explicitamente nos processos de g-r.

Na figura 2.1, a linha mais elevada representa o nível de energia da banda de condução, a linha intermediária representa o nível de energia excitado do defeito e a linha mais baixa representa o nível de energia fundamental do defeito. A banda de valência é omitida no esquema porque o valor dos processos de geração envolvidos são desprezíveis comparados com os processos de geração dos níveis de impureza e a banda de condução.

O conjunto de equações de taxas para o modelo de dois níveis sugerido por Schöll [3-4] com variáveis normalizadas ( $n$ ,  $n_1$ ,  $n_2$  e  $\varepsilon$ ) é:

$$\dot{n} = X_1^S n_2 - T_1^S n p_t + X_1 n n_1 + X_1^* n n_2 \quad (3.1)$$

$$\dot{n}_1 = T^* n_2 - X^* n_1 + X_1 n n_1 \quad (3.2)$$

$$\dot{\varepsilon} = J - nV(\varepsilon_0) \quad (3.3)$$

Onde  $n$  é a densidade de cargas na banda de condução,  $n_1$  é a densidade de cargas no nível fundamental de defeito e  $\varepsilon$  é o campo elétrico. A densidade de elétrons no nível excitado  $n_2$  é eliminada devido à condição de neutralidade das cargas  $n_2 = N_D^* - n_1 - n$ . A densidade de defeitos não ocupados,  $p_t$ , é dado por  $p_t = N_A + n$ . A densidade efetiva de doadores e a densidade aceitadores são representados por  $N_D^*$  e  $N_A$  respectivamente. O campo elétrico aplicado é  $\varepsilon_0$ .

Normalizamos todas as densidades de cargas  $v_i$  pela densidade efetiva de doadores  $N_D^*$ . As demais variáveis como o tempo  $\tau$ , o espaço  $\xi$  e campo elétrico  $\varepsilon$  obedecem às definições abaixo:

$$n_i = (v_i / N_D^*) \quad (3.4)$$

$$\tau \equiv (t / \tau_M), \quad \tau_M \equiv (\varepsilon_S / 4\pi e \mu_o N_D^*) \quad (3.5)$$

$$\xi \equiv (\vec{x} / L_D), \quad L_D \equiv (D_0 \tau_M)^{1/2} \quad (3.6)$$

$$\vec{\varepsilon} \equiv (eL_D / k_B T) \vec{E} \quad (3.7)$$

Onde  $\tau_M$  é o tempo efetivo de relaxação dielétrica,  $\varepsilon_S$  é a constante dielétrica,  $L_D$  o caminho efetivo de Debye,  $D_0$  e  $\mu_0$  são a constante de difusão e mobilidade para campos baixos e  $k_B$  a constante de Boltzmann.

O coeficiente  $X_1^S$  é o coeficiente de ionização térmica  $X^*$  e  $T^*$  são coeficientes de transição do estado fundamental ao estado excitado e vice-versa, e  $T_1^S$  é o coeficiente de transição da banda de condução ao estado excitado. Todos esses coeficientes são independentes do campo elétrico.

Os processos de ionização por impacto estão representados pelos coeficientes de geração  $X_1$  e  $X_1^*$  do nível fundamental e do nível excitado respectivamente. A dependência com o campo elétrico desses coeficientes é proposto pelo modelo de Schockley [6] e são proporcionais a  $\exp[-E_0/(e\lambda\varepsilon)]$ , onde  $E_0$  é o limiar da energia de ionização,  $e$  a carga do elétron,  $\lambda$  o livre caminho médio e  $\varepsilon$  o campo elétrico.

As equações normalizadas são da seguinte forma:

$$X_1 = X_1^0 \exp[-6.0E_t/\varepsilon] \quad (3.8)$$

$$X_1^* = X_1^{*0} \exp[-1.5E_t/\varepsilon] \quad (3.9)$$

Onde  $E_t$  é o valor normalizado da energia da impureza no estado fundamental e  $\varepsilon$  o campo elétrico.

A velocidade de *drift*  $V(\varepsilon)$ , apresentada na figura 3.2, é dada pela equação empírica [1-4]:

$$V(\varepsilon) = \frac{\arctan(r_2\varepsilon)}{r_2} \quad (3.10)$$

A velocidade, dada por essa equação, cresce linearmente para campos  $\varepsilon$  pequenos e satura para campos  $\varepsilon$  grandes. O termo  $r_2$  é um parâmetro de saturação adimensional dado por:

$$r_2 = \frac{\pi\mu_0 k_B T}{2v_S e L_D} \quad (3.11)$$

onde  $\mu_0$  é a mobilidade para campos baixos,  $v_S$  a velocidade de saturação,  $L_D$  o comprimento efetivo de Debye,  $k_B$  a constante de Boltzmann e T a temperatura.

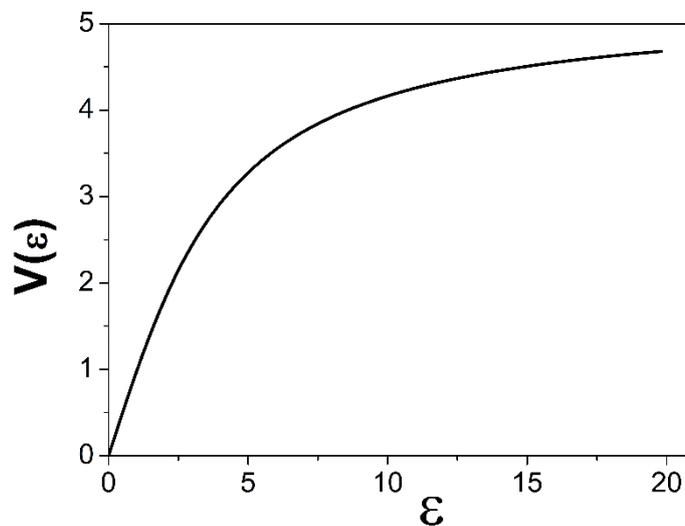


Figura 3.2 – Curva da velocidade de drift referente à equação (3.10)

Para obter a curva característica  $J(\varepsilon)$  às equações de taxa são levadas à condição de regime estacionário, ou seja, as derivadas temporais das densidades de elétrons na banda de condução e nos níveis de defeito fundamental e excitado são nulos, produzindo um polinômio de grau 3,  $P_3(n) = 0$ .

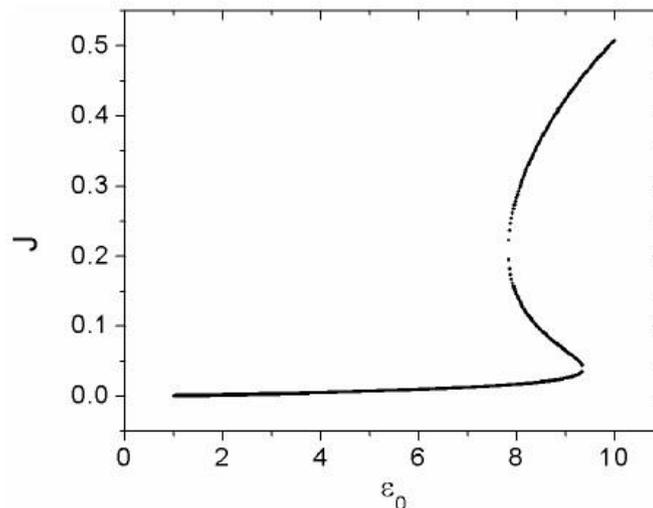
$$\dot{n} = 0; \quad \dot{n}_1 = 0; \quad \dot{\varepsilon} = 0 \quad (3.12)$$

Então, a curva característica é determinada pela equação abaixo.

$$J = nV(\varepsilon) \quad (3.13)$$

Utilizando métodos numéricos de integração com esse conjunto de parâmetros, o trabalho de Schöll [3-5] foi capaz de reproduzir uma curva característica do tipo S como mostrado abaixo na figura 3.3, duplicação de período e rota para o caos na figura 3.4. Em seguida apresentamos um diagrama de bifurcação na figura 3.5.

E. Schöll apresentou em seus trabalhos [7,8], utilizando o modelo de dois níveis, um modelo de formação da dinâmica espaço-temporal de filamentos de corrente na presença de campo elétrico e campo magnético transversal para materiais semicondutores que apresentam regiões de SNDC a baixas temperaturas. Em outros trabalhos [9,10] o modelo de dois níveis foi modificado para as oscilações de corrente induzida por um campo magnético transversal e perpendicular em função de um efeito de Hall dinâmico acoplado à ionização por impacto em filmes n-GaAs [11,12].



**Figura 3.3** – Curva característica SNDC para a densidade corrente em função do campo elétrico para as equações de taxas no estado estacionário.

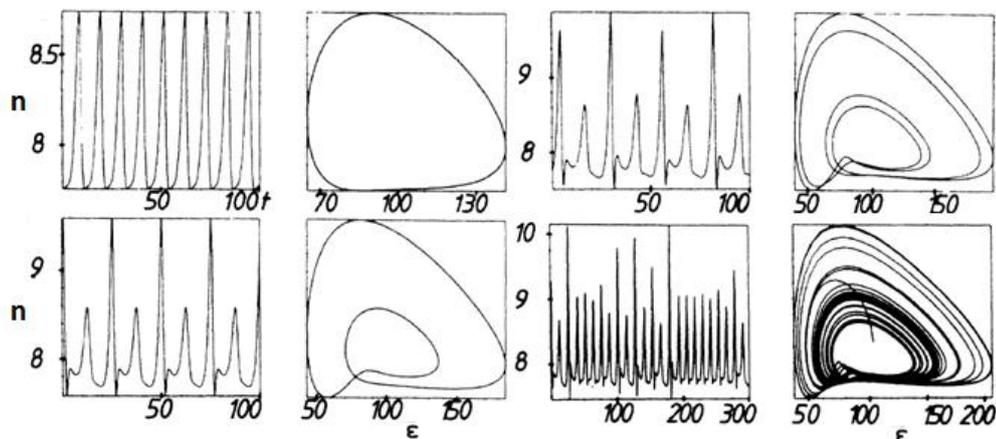


Figura 3.4 – Séries temporais e atratores com rota de duplicação de período e caos [5].

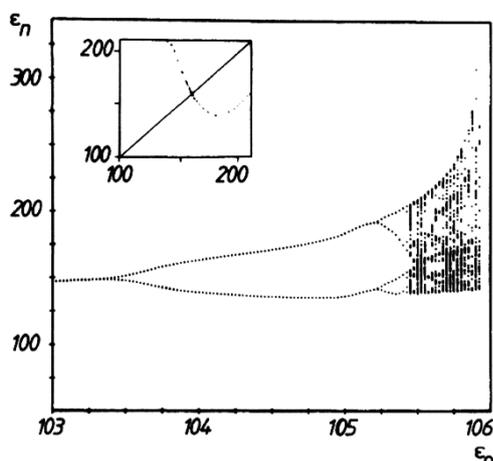


Figura 3.5 – Diagrama de bifurcação [5]

Outros pesquisadores utilizaram o modelo dois níveis como base para o desenvolvimento de novos modelos para o transporte elétrico não linear em semicondutores, como é o caso de Shwu-Yun Tsay Tzeng et al.. Em seus trabalhos utilizou o material n-GaAs a baixas temperaturas e condutividade diferencial negativa SNDC para elaborar seus modelos. Entre suas aplicações apresentou a explicação do efeito Hall dinâmico levando em conta os efeitos do campo magnético nos parâmetros de ionização de impacto. Como resultado o sistema apresenta oscilações espontâneas com rota de bifurcação e caos quando um campo B transversal é aplicado [13]. No trabalho seguinte [14], são apresentados resultados

do efeito do campo magnético para explicar a histerese na curva I-V. Utilizando como base os seus dois trabalhos anteriores, apresenta em [15] um modelo de dois níveis para explicar as instabilidades de corrente induzidas quando um campo magnético  $B$  é aplicado transversalmente na amostra. No trabalho da referência [16] apresenta os efeitos de um campo elétrico oscilatório aplicado na formação das oscilações induzidas de corrente. No trabalho de 2009 [17] apresentamos a formação de oscilações espontâneas de corrente com período 3 quando inclui uma corrente de difusão formada por cargas locais no contato da amostra.

### 3.2 – Um modelo de dois níveis para GaAs semi-isolante

Na seção anterior apresentamos um conjunto de aplicações para o modelo de dois níveis em n-GaAs à baixa temperatura, possuidor de nível de defeito raso, curva característica com condutividade diferencial negativa (SNDC) e processo de geração dependente do campo elétrico como a ionização por impacto. Nessa seção estudaremos, através do modelo de dois níveis, um novo material, o GaAs semi-isolante. Este material semiconductor apresenta temperatura de operação próxima à temperatura ambiente (300K), nível de defeito profundo, curva característica com condutividade diferencial negativa NNDC e processos de geração e recombinação de portadores dependentes do campo elétrico [18-21].

Nesta seção, apresentaremos o trabalho realizado por H. A. de Albuquerque et al [2], onde oscilações espontâneas em GaAs SI são tratadas em um modelo de dois níveis. O estudo foi realizado com o modelo de equações de taxas descrita na seção anterior. O coeficiente de recombinação  $T_1^S$ , que no modelo de Schöll é constante para a região de campo elétrico utilizado, foi modificado. A modificação

consiste em fazer com que este coeficiente seja dependente do campo elétrico. A dependência segue o fenômeno de captura assistida por campo elétrico (*field-enhanced trapping*). O objetivo é incorporar, no modelo de equações de taxas para os processos de g-r descrito na seção anterior, os principais fenômenos de g-r do portador de carga do sistema GaAs semi-isolante crescido por LT-MBE. Na realidade, estava-se introduzindo elementos que eram considerados essenciais para a ocorrência de oscilações espontâneas de baixa frequência.

O fenômeno de captura assistida por campo elétrico [1,2,22] é proporcional a  $\exp[-E_0/(e\lambda\varepsilon)]$ , onde  $E_0$  é o limiar da energia de ionização,  $e$  a carga do elétron,  $\lambda$  o livre caminho médio e  $\varepsilon$  o campo elétrico. A equação normalizada é descrita por:

$$T_1 = T_1^0 \exp[-E_1/\varepsilon] \quad (3.14)$$

Onde  $E_1$  é o limiar da energia de ionização normalizado e  $\varepsilon$  o campo elétrico. O valor assumido por  $T_1^S$  é estabelecido para  $T_1^0$ .

Embora o material GaAs SI apresente uma região de condutividade diferencial negativa NNDC em sua curva característica  $J(\varepsilon)$ , foi assumido nesse modelo que o semiconductor possuía SNDC, como pode ser visto na figura 3.6. Efetivamente, o trabalho produziu uma curva do tipo SNDC.

Os resultados do trabalho [2] são apresentados através de oscilações de campo elétrico  $\varepsilon(t)$ . Porém, utilizando a equação (3.13), as oscilações podem ser representadas pela densidade de corrente elétrica  $J(t)$  servindo como uma comparação mais próxima aos resultados experimentais. Com essa modificação no modelo de equações de taxas, os diagramas de bifurcação tornam-se dependentes da energia do defeito  $E_t$  conseqüentemente as oscilações induzidas também. Os valores dos coeficientes e parâmetros para o modelo podem ser encontrados na

referência [2]. Abaixo, apresentamos um conjunto de diagramas de bifurcação para um intervalo de energia onde o eixo horizontal é o parâmetro de controle  $\varepsilon_0$  e o eixo vertical corresponde aos máximos da série temporal do campo elétrico.

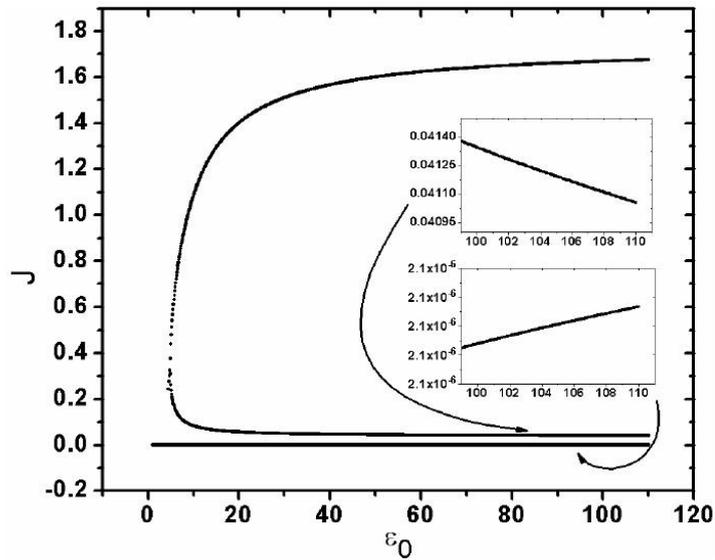


Figura 3.6 - Curva característica para a densidade corrente em função do campo elétrico estático [23]

No intervalo do parâmetro de controle  $\varepsilon_0$  mostrado nas figuras (3.7-3.9), observamos que a coleção de oscilações de campo elétrico em cada diagrama torna-se mais rica, em variedade de período de oscilação, a medida que o parâmetro  $E_1$  torna-se pequeno comparado com  $E_t$ .

Para  $E_1$  entre  $1.70E_t$  e  $1.55E_t$  os diagramas mostram apenas oscilações periódicas. Enquanto que, para  $E_1$  entre  $1.50E_t$  e  $0.10E_t$  os diagramas apresentam, além das oscilações periódicas, rota de bifurcações e caos.

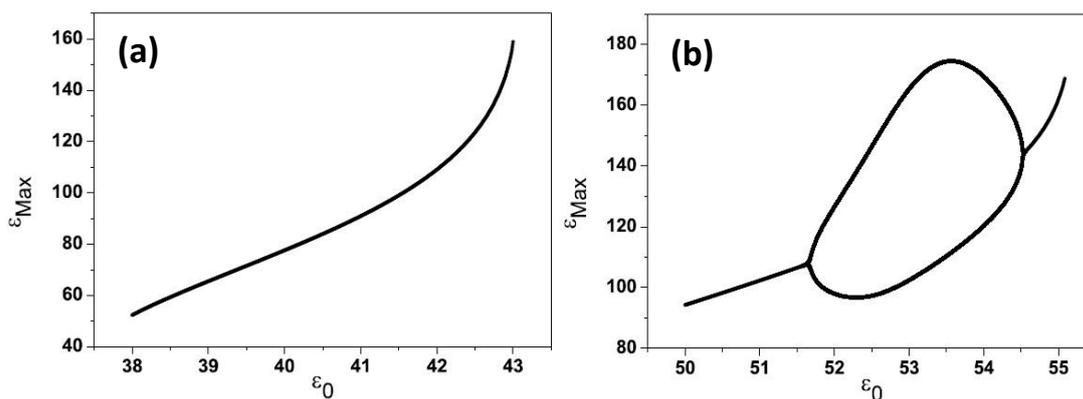


Figura 3.7 - Diagrama de bifurcação para (a)  $E_1 = 1.70E_t$  e (b)  $E_1 = 1.55E_t$  [2]

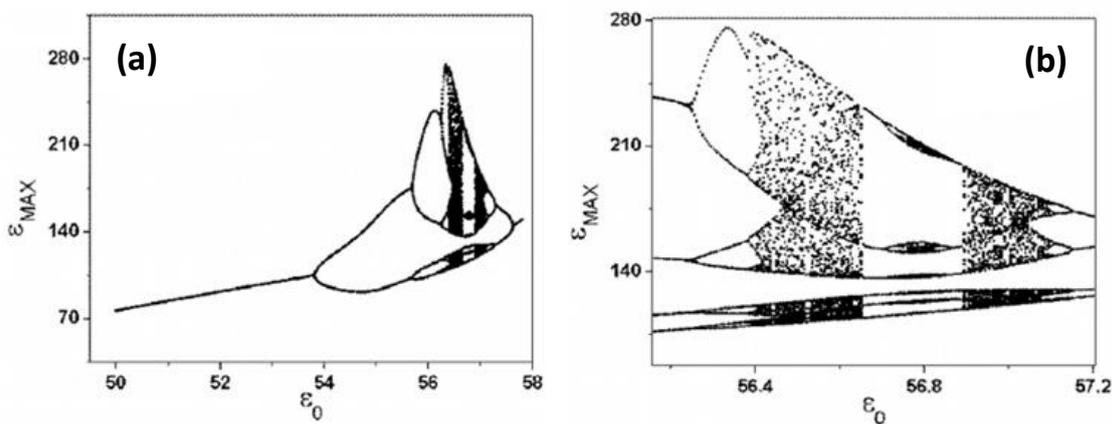


Figura 3.8 - Diagrama de bifurcação para  $E_1 = 1.50E_t$ . Em (b) uma ampliação de (a). [2]

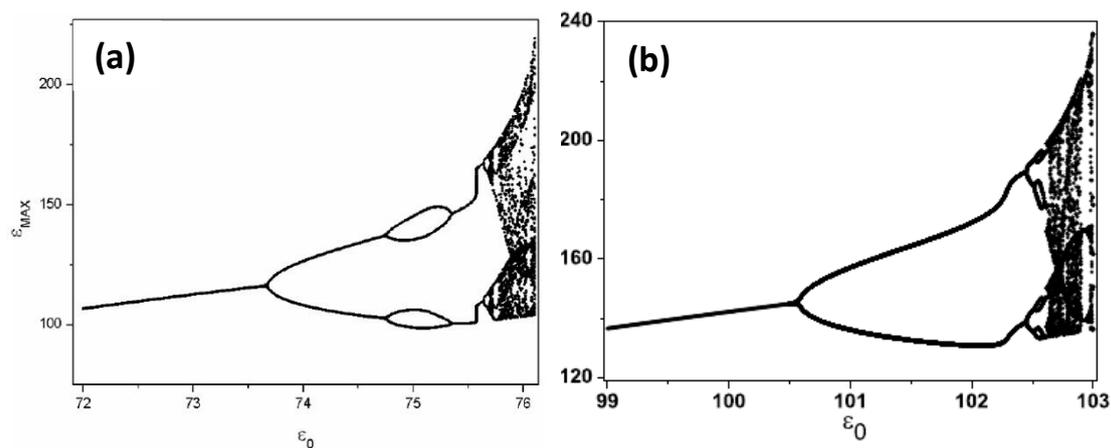


Figura 3.9 - Diagrama de bifurcação para (a)  $E_1 = 1.00E_t$  e para (b)  $E_1 = 0.10E_t$  [2]

Na figura 3.9 (a), neste caso o sistema bifurca de um ciclo de período-1 para período-2 seguido de um ciclo de período-4 e retorna para um ciclo de período-2

seguindo uma rota de bifurcação por duplicação de período. Essa sequência de bifurcação é semelhante às oscilações observadas nas medidas experimentais de GaAs SI [20], como apresentado na figura 3.10.

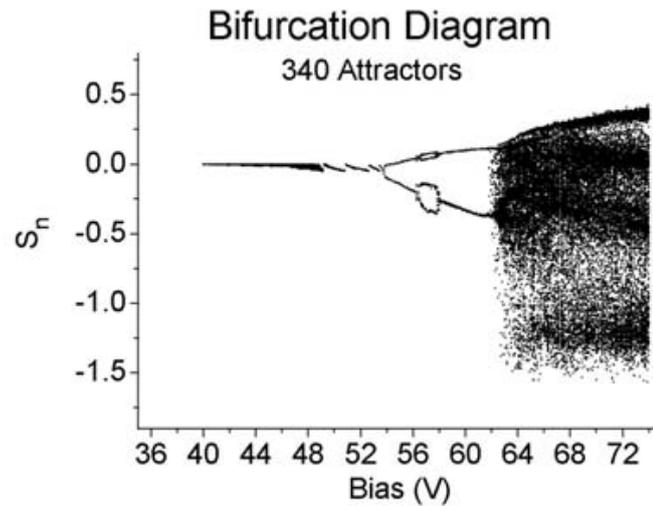


Figura 3.10 - Diagrama de bifurcação para GaAs SI [20]

O processo de captura assistida por campo elétrico, inserida como o parâmetro  $T_1$  trouxe ao modelo uma estruturação interessante de oscilações periódicas e caóticas presente nos diagramas de bifurcação. Outro fato atraente é a dependência da complexidade dos diagramas de bifurcação com o nível de energia do defeito presente na equação 3.12. Para determinados valores de  $E_1$ , a competição entre os processos de ionização por impacto e a captura assistida por campos elétricos exerce um papel importante na dinâmica dos portadores de carga no semicondutor.

## Referências

- [1] H.A. Albuquerque, R.L. da Silva, R.M. Rubinger, A.G. de Oliveira, G.M. Ribeiro, W.N. Rodrigues - *Physica D* 208 123–130 (2005)
- [2] Albuquerque, H. A., da Silva, R. L., Rubinger, R. M., de Oliveira, A. G., Ribeiro, G. M., and Rodrigues, W. N. - *Brazilian Journal of Physics*, 36, 2A (2006)
- [3] E. Schöll, *Nonlinear Spatio-Temporal Dynamics and Chaos in Semiconductors*, Cambridge Nonlinear Science Series 10, Cambridge University Press, Cambridge, (2001)
- [4] E. Schöll, *Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, 1987
- [5] E. Schöll, *Phys. Rev. B* **34**, 1395 (1986)
- [6] W. Schockley, *Solid-State Electron.* **2**, 35 (1961).
- [7] G. Hüpper, K. Pyragas, and E. Schöll, *Phys. Rev. B* 47, 15515 (1993)
- [8] G. Hüpper, K. Pyragas, and E. Schöll, *Phys. Rev. B* 48, 17633 (1993)
- [9] G. Hüpper and E. Schöll, *Phys. Rev. Lett.* 66, 2372 (1991)
- [10] E. Scholl, G. Hupper and A. Rein, *Semicond. Sci. Technol.* 7, B480 (1992)
- [11] M. Gaa, R. E. Kunz, and E. Schöll, *Phys. Rev. B* 53, 15971 (1996)
- [12] Kazuaki Kunihiro, Michael Gaa, and Eckehard Schöll, *Phys. Rev. B* 55, 2207 (1997)
- [13] S.-Y. T. Tzeng, and Y.-C. Cheng - *Phys. Rev. B* 68, 035211 (2003)
- [14] S.-Y. T. Tzeng, and Y. Tzeng - *Phys. Rev. B* 70, 085208 (2004)
- [15] S.-Y. T. Tzeng, and Y. Tzeng - *Phys. Rev. B* 72, 205201 (2005)
- [16] K. Liu, S.-Y. T. Tzeng and Y. Tzeng, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 116208 (2007)
- [17] S.-Y. T. Tzeng, K. LIU, and Y. Tzeng, *J. Phys. Soc. Jpn.* 78, 094702 (2009)
- [18] R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and H. A. Albuquerque, *Chaos* **13**, 457 (2003).

- [19] H. A. Albuquerque, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, R. L. da Silva, W. N. Rodrigues, M. V. B. Moreira and R. M. Rubinger, J. Appl. Phys. **93**, 3 (2003).
- [20] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, and G. M. Ribeiro, Physica D **194**, 166 (2004).
- [21] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and W. N. Rodrigues Brazilian J. Phys. **36**(2A), (2006).
- [22] R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, J. C. Bezerra, M. V. B. Moreira, and H. Chacham, J. Appl. Phys. **88**, 6541 (2000).
- [23] Tese de doutorado de HOLOKX ABREU ALBUQUERQUE, fenômenos não lineares de transporte elétrico induzidos por geração-recombinação em semicondutores, 2005, DPF Física – UFMG

## Capítulo 4 – Um modelo de equações de taxas para GaAs semi-isolante.

No presente capítulo, vamos apresentar um modelo de equações de taxas aplicado a nossas amostras de GaAs semi-isolante crescidas por LT-MBE. Nesse modelo descreveremos os processos de g-r ionização por impacto e a captura assistida por campo elétrico, além de um mecanismo de competição entre portadores de cargas presentes nos vales  $\Gamma$  e L da banda de condução. Esse mecanismo inter-vales também é responsável pela região de NDC.

Revisamos no capítulo anterior que o modelo de dois níveis de Schöll é funcional para um semicondutor n-GaAs a temperaturas de Hélio líquido ( $\sim 4$  K). O n-GaAs apresenta níveis de energia de defeitos rasos, ou seja, bem próximo do nível de energia da banda de condução. A curva característica  $J(\varepsilon)$ , obtida no estado estacionário pela função da velocidade de drift que possui a arco tangente [1], apresenta região de condutividade diferencial negativa do tipo S (SNDC), local exclusivo da ocorrência de dinâmica não linear no transporte elétrico desses materiais. Os componentes responsáveis pela dinâmica não linear no modelo de Schöll é a presença de dois níveis de energia, o nível fundamental do defeito e o seu primeiro nível excitado, e a dependência de algumas taxas de geração com o campo elétrico, papel realizado pelo processo de geração por ionização por impacto [2,3].

Em outro trabalho [4], é imposta uma modificação na taxa de combinação para o modelo de dois níveis de Schöll. Essa taxa, que no modelo de Schöll é constante, tornou-se dependente do campo elétrico para descrever o processo de recombinação por captura assistida por campo elétrico, que é observada em nossas amostras de GaAs semi-isolantes [5]. O resultado é que as oscilações espontâneas

e a dinâmica não linear no transporte elétrico presentes na amostra são reproduzidos pelo modelo. As modificações no modelo de equações de taxas mostrou que os diagramas de bifurcação são dependentes da energia do defeito [4]. O modelo apresenta um grande avanço na descrição das propriedades elétricas do GaAs semi-isolante, mas não conseguiu reproduzir uma curva característica com condutividade diferencial negativa do tipo N (NNDC), presente nas medidas de transporte elétrico em nossa amostra de GaAs semi-isolante.

Nossas considerações foram que o modelo de dois níveis deveria sofrer algumas mudanças estruturais para descrever uma amostra semicondutora de GaAs semi-isolante que apresenta nível de energia de defeitos chamados profundos (no meio do gap). Essas amostras apresentam uma dinâmica não linear no transporte elétrico a altas temperaturas (acima de 170 K) provocadas pelos processos de geração via ionização por impacto e recombinação via captura assistida por campo elétrico [4,6].

A primeira mudança que consideramos seria de como, a partir do modelo de Schöll, poderíamos gerar curvas características  $J(\epsilon)$  com condutividade diferencial negativa do tipo NNDC. Para obter isso, podemos modificar as equações de taxas e a equação que descreve a velocidade de *drift* em função do campo elétrico para uma amostra semicondutora de GaAs. Acreditamos que mecanismo que promove a mudança de mobilidade dos portadores de cargas entre os vales  $\Gamma$  e L da banda de condução, responsável pela promoção de uma região de resistividade diferencial negativa NDR, é o processo responsável pelo surgimento da região de NNDC na curva característica  $J(\epsilon)$  em GaAs SI. A competição inter-vales é um modelo consolidado na literatura [7], porém, nenhum trabalho anterior ao nosso incorporou

em suas equações de taxa esse fenômeno para descrever as regiões NNDC e toda a dinâmica não linear no transporte elétrico presente nela.

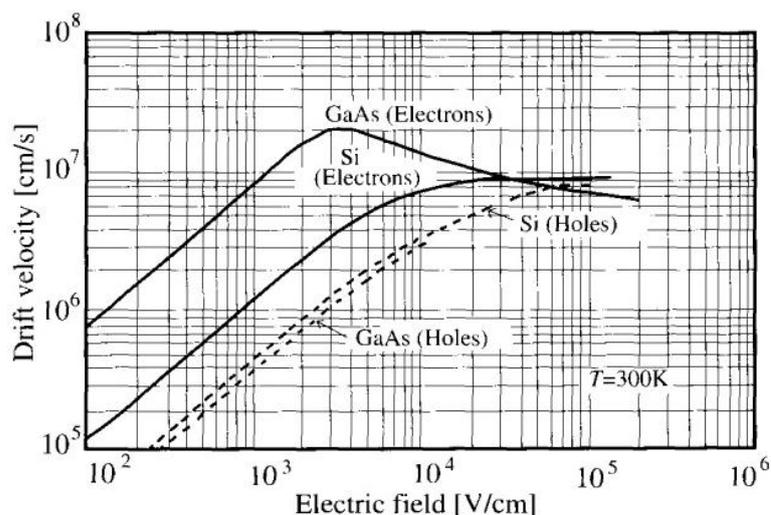
Para a amostra de GaAs SI sabemos que o processo de geração e recombinação, ionização por impacto e captura assistida por campo elétrico, respectivamente, estão presentes nos fenômenos não lineares de transporte, porém, não são os únicos responsáveis. Cremos que os mecanismos de transporte inter-vales também exercem um fração de igual importância no fenômeno. Desta forma, as equações de taxas e a equação da velocidade de drift do material devem ser modificadas para contemplar esse comportamento.

Ao longo do capítulo apresentaremos uma breve revisão do comportamento da velocidade de drift em função do campo elétrico aplicado em GaAs. Em seguida, com base nesses conceitos, apresentaremos uma proposta de uma velocidade de drift para GaAs SI com os mecanismos de competição entre vales da banda de condução. Finalizando o modelo, adicionaremos às equações de taxas novos processos g-r envolvendo os vales  $\Gamma$  e L da banda de condução aos já estabelecidos processos de ionização por impacto e captura assistida por campo elétrico.

### 4.1 - Velocidade de drift em GaAs

Apresentaremos a dependência da velocidade de drift na presença de um campo elétrico. A palavra inglesa *drift* tem sido traduzida para o português para “deriva”. Por comodidade, nesse trabalho iremos manter a expressão inglesa. A figura (4.1) mostra o comportamento da velocidade de *drift* em Si e GaAs em função do campo elétrico. Para campos abaixo de  $10^3$  V/cm os portadores obedecem à lei de Ohm, ou seja, a velocidade de drift cresce linearmente com o campo. A partir de

um determinado valor do campo, surge um comportamento sublinear e, finalmente, satura a uma velocidade de  $10^7$  cm/s. Semicondutores GaAs do tipo N apresentam um comportamento um pouco mais complicado. A curva experimental apresenta um máximo, com valores da velocidade maiores que a de saturação. Esse fenômeno é conhecido como *overshoot* da velocidade e é encontrada em poucos semicondutores do tipo N como GaAs, InP e InGaAs. Na figura (4.1), observamos que para o caso de GaAs com condução por elétrons, para campos elétricos maiores que  $3 \times 10^3$  V/cm, a velocidade dos elétrons diminui com o aumento do campo. Esse fenômeno tem, exatamente, as características de resistividade diferencial negativa (*negative differential resistivity* - NDR) [7,8].



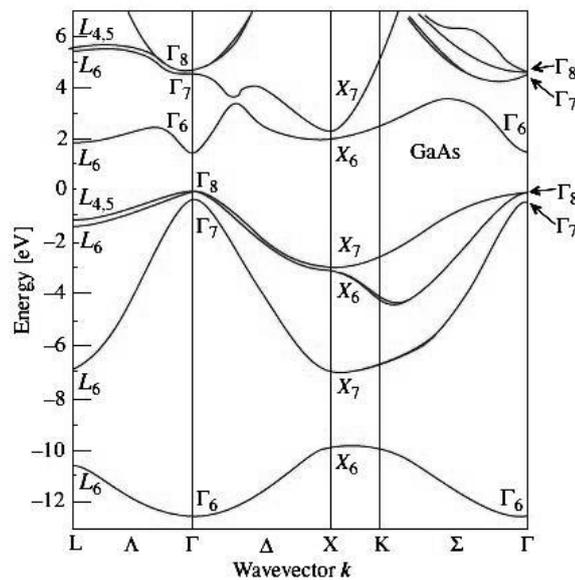
**Figura 4.1** – Velocidade de Drift em função do campo elétrico para elétrons e buracos de GaAs e Si [7].

Para entender esse comportamento de NDR em GaAs, vamos recorrer à estrutura de bandas mostrada na figura (4.2). O mínimo mais baixo da banda de condução ocorre no centro da zona de *Brillouin*  $\Gamma$ . Um outro mínimo na banda de condução aparece no ponto L. Ele se encontra a cerca de 0,3 eV acima do mínimo do ponto  $\Gamma$ . A massa efetiva dos elétrons nesse vale L não é isotrópica. Para movimentos ao longo do eixo dos vales, a massa longitudinal é  $1,9 m_0$  enquanto a

massa transversal é 0,075  $m_0$ . Esses valores de massas são maiores que a massa efetiva (denotado por  $m_{\Gamma}^*$ ) de valor 0,067  $m_0$  do elétron no vale  $\Gamma$  [7,8]. A equação de mobilidade elétrica é definida por:

$$\mu = \frac{q\tau}{m^*} \quad (4.1)$$

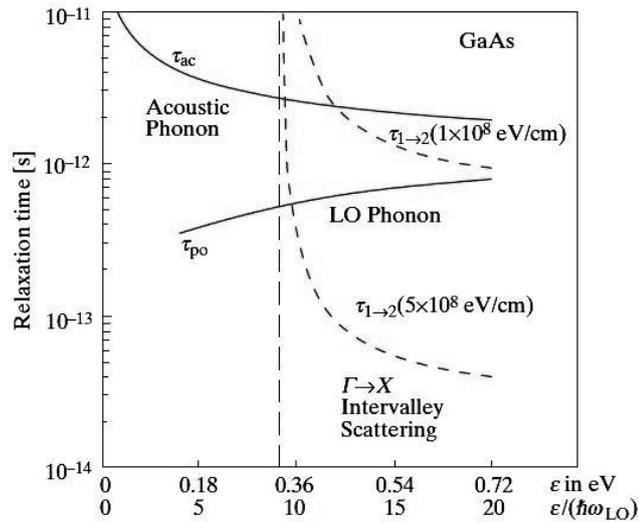
onde  $q$  é a carga do elétron,  $\tau$  o tempo de espalhamento e  $m^*$  a massa efetiva do elétron.



**Figura 4.2** – Estrutura eletrônica de banda de condução para GaAs [7].

Analisando essa equação observamos que a mobilidade dos elétrons no vale  $\Gamma$  (denotado por  $\mu_{\Gamma}$ ) deve ser maior que a mobilidade dos elétrons no vale L (denotado por  $\mu_L$ ). Para valores pequenos de campo elétrico todos os elétrons estão no vale  $\Gamma$  e a mobilidade dos elétrons é alta por causa do pequeno valor de  $m_{\Gamma}^*$ . À medida que o campo elétrico vai aumentando, os elétrons ganham energia até que alguns deles tenham energia suficiente para se transferirem para o vale L via espalhamento entre vales. O espalhamento entre vales irá competir com relaxação entre vales por espalhamento de fônons óticos. Em GaAs, o tempo que o elétron

leva para emitir um LO fônon via interação de Fröhlich é cerca de 200 fs, veja a figura (4.3). O tempo de espalhamento do vale  $\Gamma$  para o vale L, à temperatura ambiente, é menor que 100 fs. Porém, o tempo que o elétron leva para retornar ao vale é da ordem de picosegundo, porque a densidade de estados do vale  $\Gamma$  é muito menor do que a densidade de estados do vale L [7].



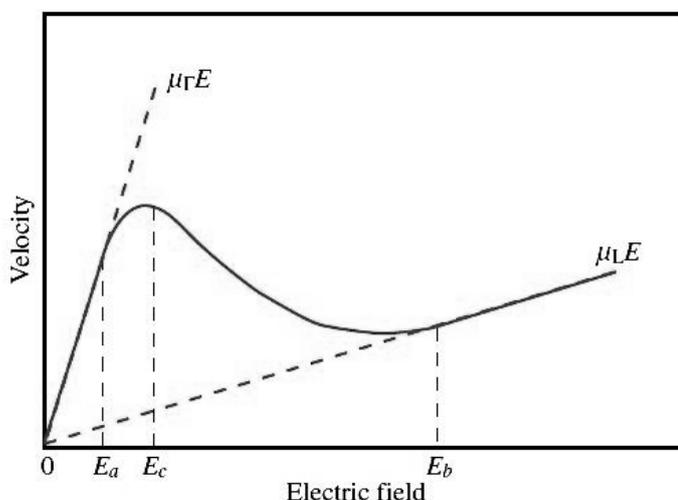
**Figura 4.3** – Tempo de relaxação do elétron de condução no vale  $\Gamma$  do GaAs em função da energia do elétron [7].

Como resultado, para campos elétricos suficientemente altos, esperamos que uma fração significativa dos elétrons seja excitada para o vale L e a condutividade eletrônica se tornará:

$$\sigma = e(N_{\Gamma}\mu_{\Gamma} + N_L\mu_L) \quad (4.2)$$

onde  $N_{\Gamma}$  e  $N_L$  representam a densidade de elétrons no vale  $\Gamma$  e no vale L, respectivamente. Como  $\mu_L$  é menor que  $\mu_{\Gamma}$ , a condutividade diminui com o aumento do campo, produzindo a resistência diferencial negativa. A dependência da velocidade de drift dos elétrons em GaAs pode ser ilustrada na figura (4.4) [7].

Para campos grandes ( $E > E_b$ ) haverá mais elétrons no vale L do que no vale  $\Gamma$  porque o vale L tem maior densidade de estados e a transferência de elétrons entre vales é cessada. A partir dessa condição, os elétrons no vale L são acelerados pelo campo externo e suas velocidades aumentam linearmente. O material volta a apresentar um comportamento ôhmico. O campo limiar  $E_c$  em que a velocidade de drift começa a diminuir é chamado de campo crítico [7].



**Figura 4.4** – Esquema da dependência da velocidade de drift de elétrons do GaAs com o campo elétrico [7].

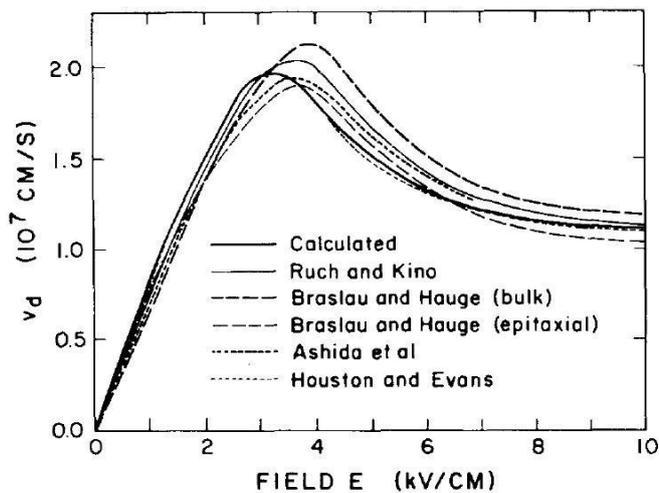
## 4.2 – Modelagem da equação para velocidade de drift em GaAs

O modelo descrito na seção (4.1) é o mais aceito para explicar o comportamento da velocidade de drift em função do campo elétrico para GaAs. Em nosso trabalho utilizamos dados experimentais para GaAs [8] e modelamos uma equação para a velocidade de drift que apresenta o mesmo comportamento com o campo elétrico descrito no modelo anterior. As curvas experimentais da velocidade de drift dependente do campo elétrico são apresentadas na figura (4.5). Escolhemos

a curva de Ruch and Kino para fazer o ajuste. Dessa forma, propomos a equação (4.3) abaixo.

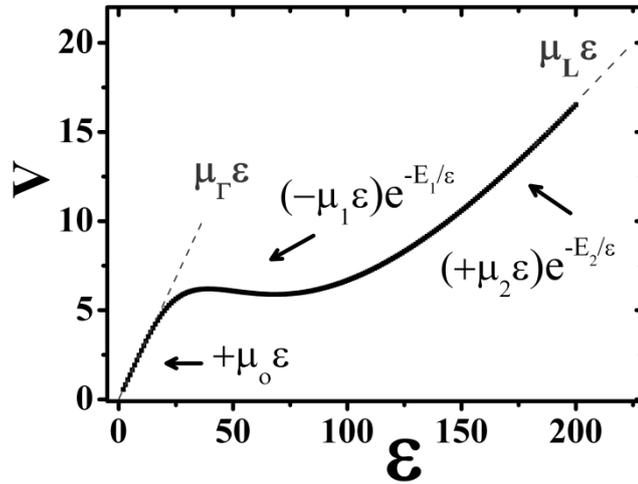
$$V(\varepsilon) = [\mu_0 - \mu_1 e^{-E_1/\varepsilon} + \mu_2 e^{-E_2/\varepsilon}] \varepsilon \quad (4.3)$$

As constantes  $\mu_0$ ,  $\mu_1$  e  $\mu_2$  apresentam dimensão de mobilidade elétrica  $\mu$ . As constantes  $E_1$  e  $E_2$  têm dimensão de campo elétrico, e  $\varepsilon$  é o campo elétrico.



**Figura 4.5** – Conjunto de velocidade de drift de elétrons de condução em GaAs à 300K [8]

Para valores baixos de campo elétrico  $\varepsilon$  a Lei de Ohm é descrita pelo termo linear  $(+\mu_0\varepsilon)$  dominante com  $\mu_0 \rightarrow \mu_\Gamma$ . Para valores intermediários de  $\varepsilon$ , o termo negativo  $(-\mu_1 e^{-E_1/\varepsilon})$  torna-se efetivo e produz uma queda em  $V(\varepsilon)$  que implica em uma inclinação negativa, iniciado o regime de resistividade diferencial negativa observada na figura (4.6). Finalmente, para valores elevados de  $\varepsilon$ , o termo positivo  $(+\mu_2 e^{-E_2/\varepsilon})$  torna-se dominante com uma inclinação linear positiva e com  $\mu_1 \rightarrow \mu_L$  como é mostrado na figura (4.6). O segundo e o terceiro termo da equação para velocidade de drift reproduzem esses fenômenos graças à concorrência natural que eles produzem na equação (4.3).

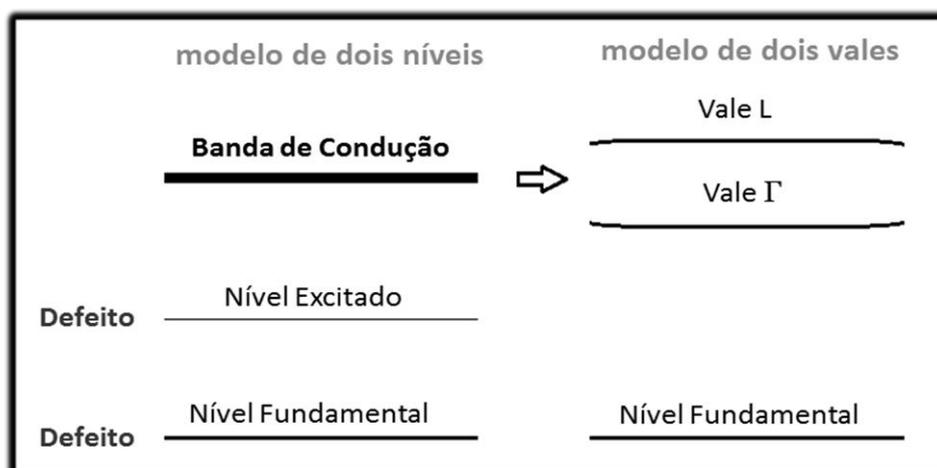


**Figura 4.6** – A velocidade de drift efetiva  $V(\epsilon)$  de elétrons livres em GaAs SI, ajuste aos dados de Ruch and Kino [8] através da equação 4.3.

O mecanismo estabelecido na equação (4.3) foi capaz de reproduzir para o GaAs toda a fenomenologia apresentada na seção (3.1) entre os vales  $\Gamma$  e L da banda de condução é uma parte importante para a descrição da região de NNDC em GaAs SI. Nesse momento ressaltamos que essa equação (4.3) é uma contribuição inédita de nosso trabalho. Todos os trabalhos que descrever as oscilações espontâneas em semicondutores em regiões SNDC utilizam um modelo para velocidades de drift de elétrons livres que depende do campo elétrico usando uma função arco tangente, apresentada no capítulo 3 pela equação (3.10) e representada na figura (3.2). Note que a figura (3.2) possui a forma semelhante à curva da velocidade e drift de elétrons do Silício da figura (4.1). Portanto, a equação (4.3) apresenta uma afinidade maior com o GaAs SI do que a equação (3.10).

### 4.3 – Modelo de equações de taxas para GaAs SI – O Modelo de Dois Vales

Observamos o papel fundamental dos vales  $\Gamma$  e L da banda de condução na produção da resistividade diferencial negativa NDR da curva da velocidade de drift em função do campo elétrico. Dessa forma, propomos modificar a estrutura do modelo de dois níveis para criar um modelo mais simples para descrever a dinâmica não linear do transporte elétrico em semicondutores GaAs SI. Nossa proposta é manter no modelo o nível fundamental de energia do defeito do modelo de dois níveis. Porém, o nível de energia excitado do defeito será retirado. Dentro do nível de energia da banda de condução introduziremos dois níveis de energia, um nível de energia para a o vale  $\Gamma$  e outro para a o vale L. O modelo será chamado de modelo de dois vales (*two-valley model*). Abaixo apresentamos na figura (4.7) um esquema da transição entre o modelo de dois níveis e o modelo de dois vales.

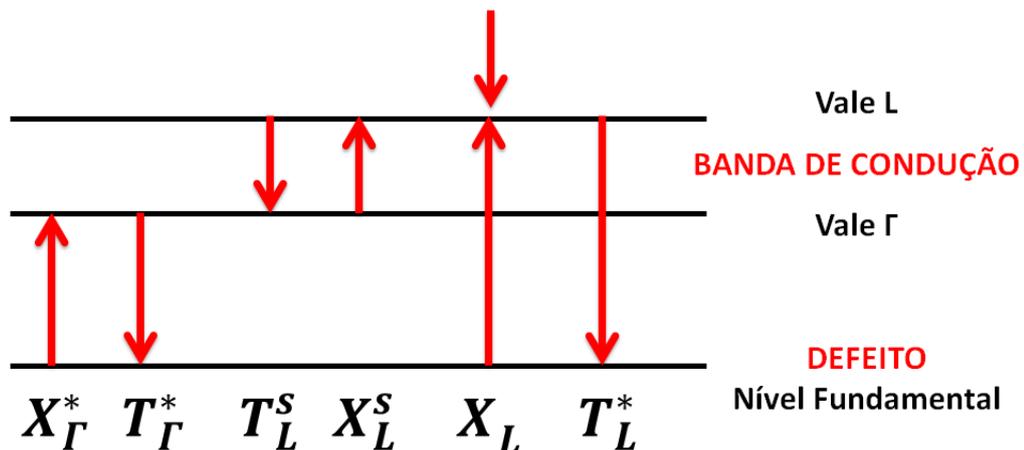


**Figura 4.7** - Esquema para a transição entre o modelo de dois níveis e o modelo de dois vales.

O modelo de dois vales é uma proposta inédita do nosso trabalho e vem para fundamentar a teoria da dinâmica não linear, observada experimentalmente em nossas amostras. Resta-nos agora escolher as taxas de geração e recombinação

para a elaboração das equações de taxas. Obviamente essa escolha deve ser feita observando as características físicas dos fenômenos de transporte elétrico de nossas amostras semi-isolantes de GaAs e a física dos vales  $\Gamma$  e L da banda de condução presentes na curva da velocidade de drift em função do campo elétrico.

Nossas medidas experimentais acusam a presença do processo de ionização por impacto (geração) e do processo de captura assistida por campo (recombinação). De acordo com a teoria dos vales  $\Gamma$  e L da banda de condução, a produção da resistividade diferencial negativa NDR na curva da velocidade de drift é proveniente da dependência, dos processos de geração e recombinação entre os vales, com o campo elétrico. Outros processos de g-r presentes no modelo não dependem do campo elétrico e podem estar associados à intensidade luminosa e a temperatura da amostra. A presença dessas taxas no modelo de dois vales e a localização delas de forma a produzir o modelo mais simplificado é fundamental.



**Figura 4.8** – Processo de g-r envolvendo os vales  $\Gamma$  e L dentro da banda de condução e o nível fundamental do defeito, que foi considerado no modelo de dois vales para GaAs-SI.

O modelo de dois vales, proposto por nós, inclui o nível fundamental do defeito profundo (com nível de energia no meio do gap com valor de  $\Delta E_{\text{band}}$

$g_{\text{gap}}=1.42\text{eV}$  à temperatura ambiente), e a  $\Gamma$  e os vales de L no interior da banda de condução, com  $\Delta E_{\Gamma-L} = 290 \text{ meV}$  [8]. Na figura (4.8), é apresentado o diagrama esquemático das equações de taxa g-r que temos utilizado para gerar a curva em forma de N a partir do modelo de dois vales.

O conjunto de equações de taxas para o modelo de dois vales com variáveis normalizadas  $n_D$ ,  $n_\Gamma$  e  $\varepsilon$  é:

$$\dot{n}_\Gamma = X_\Gamma^* n_D - T_\Gamma^* n_\Gamma p + T_L^s n_L - X_L^s n_\Gamma \quad (4.4)$$

$$\dot{n}_D = -X_\Gamma^* n_D + T_\Gamma^* n_\Gamma p - X_L n_D n_L + T_L^* n_L p \quad (4.5)$$

$$\dot{\varepsilon} = J(\varepsilon_0) - n_\Gamma V(\varepsilon_0) \quad (4.6)$$

Onde  $n_\Gamma$  é a densidade de cargas na banda de condução no vale  $\Gamma$ ,  $n_D$  é a densidade de cargas no nível fundamental de defeito e  $\varepsilon$  é o campo elétrico. A densidade de elétrons na banda de condução no vale L  $n_L$  é eliminada devido à condição de neutralidade das cargas  $n_L = N_D^* - n_D - n_\Gamma$ . A densidade de defeitos não ocupados,  $p$ , é dado por  $p = N_A + n_\Gamma + n_L$ . A densidade efetiva de doadores e aceitadores são representados por  $N_D^*$  e  $N_A$  respectivamente. O valor  $\varepsilon_0$  é o campo elétrico aplicado.

Os coeficientes  $X_\Gamma^*$  e  $T_\Gamma^*$  são coeficientes de transição do estado fundamental ao nível de energia do vale  $\Gamma$  e vice-versa, elas representam as transições dependentes à intensidade luminosa e da temperatura da amostra. Eles controlam as densidades de cargas relativas nos canais de condução, e eles são considerados independentes do campo elétrico.

O coeficiente de geração  $X_L$  representa o processo de ionização por impacto envolvendo o estado fundamental e vale L, e  $T_L^*$  representa o fenômeno de captura

assistida por campo elétrico [5]. Sua dependência funcional com o campo elétrico aplicado  $\varepsilon$  está dando por:

$$X_L = X_L^0 \exp(-E_{XL} / \varepsilon) \quad (4.7)$$

$$T_L^* = T_L^{*0} \exp(-E_{TL^*} / \varepsilon) \quad (4.8)$$

Os coeficientes g-r  $X_L^s$  e  $T_L^s$  envolvendo os vales  $\Gamma$  e L da banda de condução, respectivamente, e são dependentes do campo elétrico aplicado  $\varepsilon$  dado por:

$$X_L^s = X_L^{s0} \exp(-E_{sL} / \varepsilon) \quad (4.9)$$

$$T_L^s = T_L^{s0} \exp(-E_{s\Gamma} / \varepsilon) \quad (4.10)$$

As equações (4.7 – 4.10) obedecem ao modelo de Shockley [1], onde  $E_i$  são os campos elétricos crítico.

É possível incorporar muitos outros mecanismos, como se desejar, ao presente modelo, mas esse ato pode tornar-se supérfluo e, portanto, têm muito pouco efeito sobre o resultado final. A causa é que a equação de taxas g-r escolhida, equações (4.7 – 4.10) são o menor conjunto testados que ainda produz a região NNDC, e levam em consideração as principais propriedades físicas SI-GaAs [9-12]. Além disso, para as simulações o menor conjunto de equações que ainda reproduz todos os fenômenos físicos é importante, a fim de reduzir o custo computacional, abrindo possibilidades para solucionar o problema experimental desejado.

Outro ponto importante do nosso modelo diz respeito ao comportamento da velocidade drift  $V(\varepsilon)$ . Ela implica uma mudança sofrida na forma empírica saturada da função arco tangente, como função do campo elétrico aplicado  $\varepsilon$ , proposto por Schöll no modelo de dois níveis. Essa mudança tem a sua origem física na condução mista dos elétrons livres nos vales  $\Gamma$  e L, em função do  $\varepsilon$ . Na verdade, a

fim de obter a nova velocidade de deriva e eficaz para testar o nosso modelo, utilizamos os dados experimentais para GaAs [1], e nós modelamos através da equação (4.3).

Para obter a curva característica  $J(\varepsilon)$  aplicamos às equações de taxa a condição de regime estacionário, ou seja, as derivadas temporais das densidades de elétrons na banda de condução do vale  $\Gamma$  e L, do nível de defeito fundamental e a taxa de variação temporal do campo elétrico são nulos ( $\dot{n}_\Gamma = \dot{n}_D = \dot{\varepsilon} = 0$ ), produzindo um polinômio de grau 3,  $P_3(n_\Gamma) = 0$ . Equações similares podem ser obtidas para  $n_L$ . Cada uma dos três zeros para  $n_\Gamma(\varepsilon)$ , isto é  $n_{\Gamma 1}$ ,  $n_{\Gamma 2}$  e  $n_{\Gamma 3}$ , produzem uma curva independente  $J_i(\varepsilon)$ , usando a seguinte equação:

$$J_i(\varepsilon) = n_{\Gamma i}(\varepsilon) \cdot V(\varepsilon) \quad (4.11)$$

Por razões físicas apenas uma das três curvas independentes  $J_i(\varepsilon)$  é solução, porque quando uma curva é estável as outras duas tornam-se instáveis.

Apresentaremos no próximo capítulo que o modelo de dois vales é eficiente para gerar a inédita curva característica  $J(\varepsilon)$  com uma região NNDC para GaAs SI. Dentro dessa região observaremos que o modelo exibe uma coleção rica de oscilações periódicas e caóticas. Controlando seus parâmetros de controle em um mapa de parâmetros, as oscilações espontâneas se organizam em uma estrutura interessante, onde é possível observar padrões não lineares conhecidos como camarões periódicos. Todo o domínio dessa estrutura será apresentado na forma de espaço de parâmetros.

Vale ressaltar que todo nosso desenvolvimento se deve ao grande avanço do processamento computacional dos últimos anos e a evolução de ferramenta de análise e simulação como o Matlab, Scilab e LabView.

## Referências

- [1] W. Shockley, *Solid-State Electron.* **2**, 35 (1961).
- [2] E. Schöll, *Nonlinear Spatio-Temporal Dynamics and Chaos in Semiconductors*, Cambridge Nonlinear Science Series 10, Cambridge University Press, Cambridge, (2001)
- [3] E. Schöll, *Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin (1987)
- [4] H. A. Albuquerque, R. L. da Silva, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro and W. N. Rodrigues - *Brazilian Journal of Physics*, **36**, 2A (2006)
- [5] R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, J. C. Bezerra, M. V. B. Moreira, and H. Chacham - *J. Appl. Phys.*, **88**, 11 (2000)
- [6] H.A. Albuquerque, R.L. da Silva, R.M. Rubinger, A.G. de Oliveira, G.M. Ribeiro, W.N. Rodrigues - *Physica D* **208** 123–130 (2005)
- [7] Yu, P. Y. and Cardona, M. – *Physics and Materials Properties* – Springer (2010)
- [8] Blakemore, J. S. - *J. Appl. Phys.* **53**,10 (1982)
- [9] R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and H. A. Albuquerque, *Chaos* **13**, 457 (2003).
- [10] H. A. Albuquerque, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, R. L. da Silva, W. N. Rodrigues, M. V. B. Moreira and R. M. Rubinger, *J. Appl. Phys.* **93**, 3 (2003).
- [11] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, and G. M. Ribeiro, *Physica D* **194**, 166 (2004).
- [12] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and W. N. Rodrigues *Brazilian J. Phys.* **36**(2A), (2006).

## Capítulo 5 – Resultados e discussão

Nesse capítulo apresentaremos os resultados numéricos para o modelo de dois vales aplicado em nossas amostras de GaAs semi-isolante crescidas por LT-MBE. O modelo é formado por um nível fundamental de defeito e dois níveis de energia na banda de condução, uma para o vale  $\Gamma$  e outro para o vale L. As equações de taxas, apresentadas no capítulo 4, contemplam os fenômenos de geração e recombinação, presentes em amostras GaAs SI, respectivamente conhecidas por: ionização por impacto e captura assistida por campo elétrico. O modelo ainda aprecia em suas taxas g-r um mecanismo de competição entre portadores de cargas presentes nos vales  $\Gamma$  e L da banda de condução. Um modelo baseado em GaAs para sua curva da velocidade de drift para elétrons livres completa o modelo.

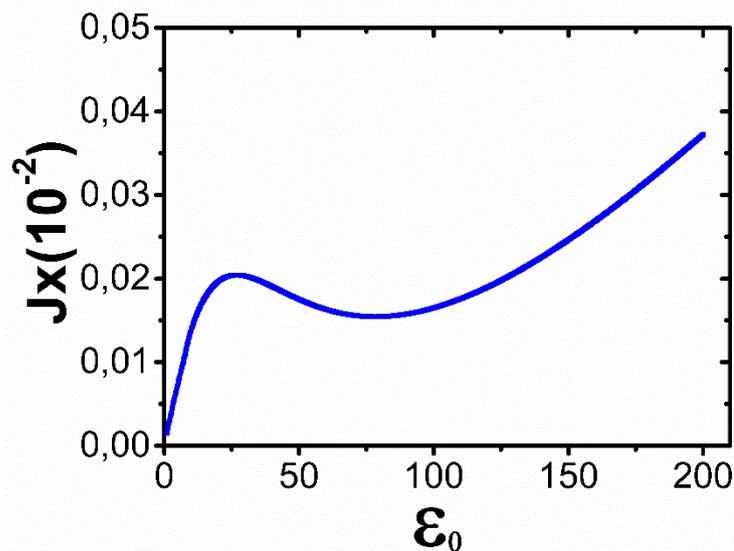
Os resultados estão organizados no capítulo em uma sequência apresentando inicialmente a curva característica  $J(\varepsilon_0)$  com uma região com condutividade diferencial negativa do tipo N (NNDC) inédita na literatura para descrever um material semiconductor GaAs-SI. Em seguida, exibiremos atratores periódicos, atratores caóticos e um diagrama de bifurcação confirmam a existência das oscilações espontâneas presentes na região NNDC. Para finalizar, diversas estruturas e padrões organizados que estão presentes em comportamentos não lineares são apresentados na forma de espaço de parâmetros.

### 5.1 – A curva característica J(E) para GaAs SI

Nessa seção, apresentamos a integração numérica das equações (4.4 – 4.6) no estado estacionário para o modelo de dois vales para GaAs SI, onde o campo elétrico  $\varepsilon_0$  foi usado como parâmetro de controle. Os coeficientes de g-r são dados pelas equações (4.7 – 4.10) e a velocidade de drift é dada pela equação (4.3). A curva característica  $J(\varepsilon_0)$  foi calculada usando a equação (4.11) e dos dados da tabela 1.

$X_{\Gamma}^*$	$1 \times 10^{-5}$	$X_L^{s0}$	$1.5 \times 10^{-3}$	$\mu_0$	0.275
$T_{\Gamma}^*$	$2 \times 10^{-5}$	$E_{sL}$	2.5	$\mu_1$	0.935
$X_L^0$	$1 \times 10^{-2}$	$T_L^{s0}$	$5.25 \times 10^{-3}$	$\mu_2$	0.850
$E_{XL}$	10.5	$E_{s\Gamma}$	22.5	$E_1$	70
$T_L^{*0}$	$1 \times 10^{-2}$	$N_a / N_D^*$	0.135	$E_2$	120
$E_{TL}^*$	1.0	-	-	-	-

**Tabela 1:** Coeficientes adimensionais g-r e os parâmetros usados no modelo de dois vales.



**Figura 5.1** – A densidade de corrente longitudinal  $J(\varepsilon_0)$  no vale  $\Gamma$  para o modelo de Dois Vales.

A curva estável  $J(\varepsilon_0)$ , apresentada na figura 5.1, mostra claramente a região NNDC, que foi um dos objetivos a serem abordados nesse trabalho. Na figura 5.2 apresentamos uma curva característica  $J(\varepsilon_0)$  experimental para GaAs-SI com região NNDC à 200K, sob iluminação com uma corrente de 30 mA através de um LED, e para mais detalhes veja a ref. [1]. Mesmo para curvas estáveis da forma N a dinâmica não linear pode também ser alcançado, na parte de inclinação negativa (NNDC), como apresentado experimentalmente para GaAs-SI [2].

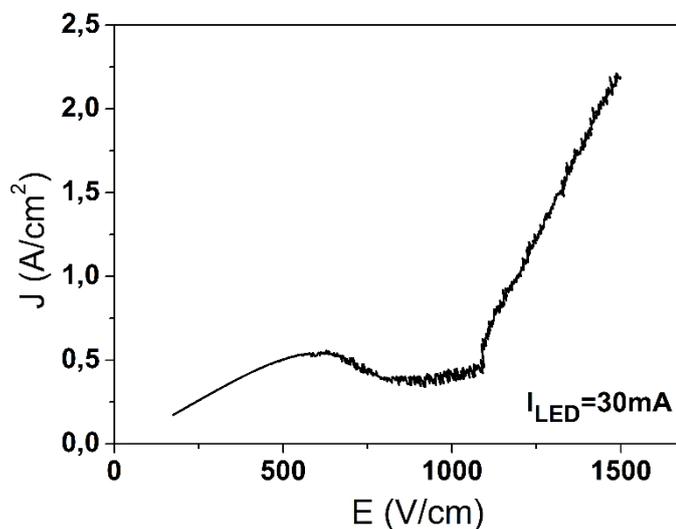
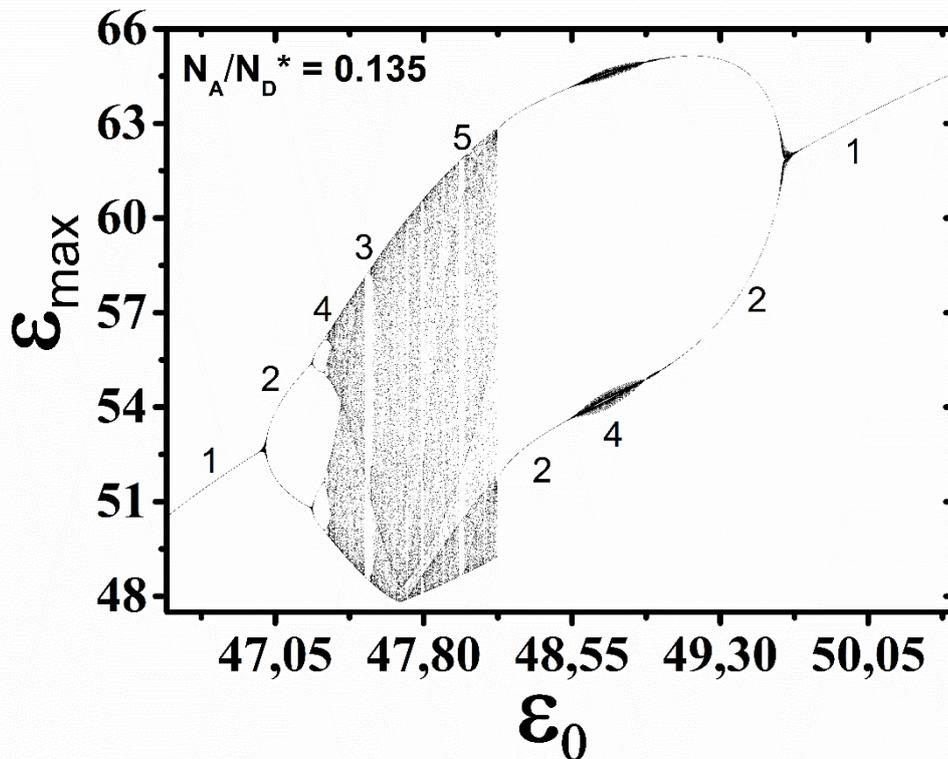


Figura 5.2 – Curva característica experimental  $J(E)$  para GaAs-SI com NNDC [1].

## 5.2 – Análises de séries não lineares

Usando o Runge-Kutta de 4ª ordem como método de integração para as equações de taxas (4.4 – 4.6) e usando os coeficientes apresentados na Tabela 1, geramos séries temporais para  $\varepsilon(t)$ ,  $n_{\Gamma}(t)$  e  $n_{D}(t)$  para o sistema GaAs SI. Cada série temporal obtida contém todas as informações não lineares do sistema GaAs SI. Por conveniência, as análises das séries temporais foram realizadas para  $\varepsilon(t)$

para extrair o comportamento não linear do nosso modelo proposto e corroboram com os resultados experimentais anteriores [1-3].

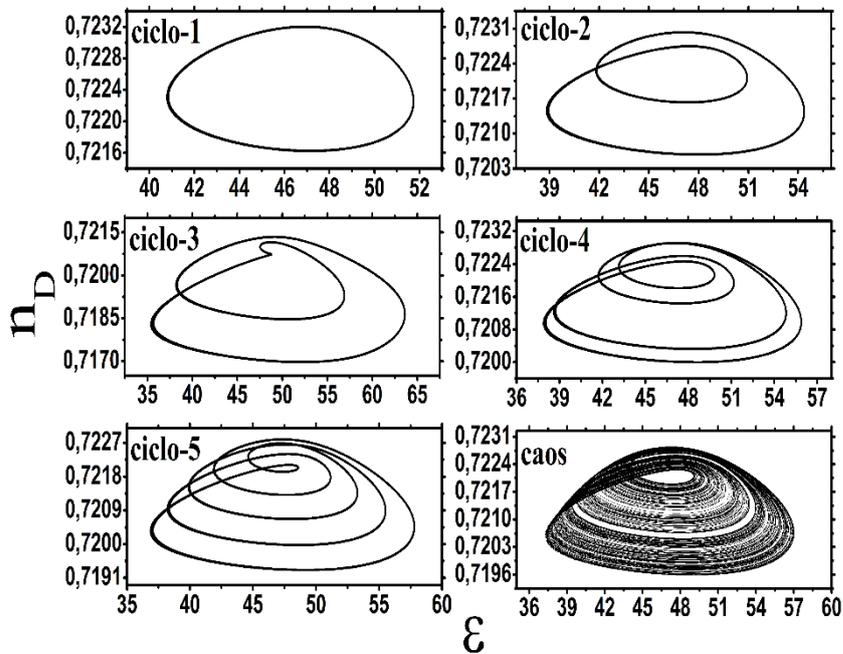


**Figura 5.3** - Diagrama de bifurcação para os máximos da series temporal do campo elétrico  $\epsilon(t)$  para o modelo de dois vales em GaAs SI.

Usando o mapa de Poincaré, o diagrama de bifurcação do valor máximo do campo elétrico  $\epsilon_{max}(t)$  versus  $\epsilon_0$  foi construído e apresentado na figura 5.3. O diagrama de bifurcação apresenta uma rota de bifurcação com duplicação de períodos até atingir caos: (período-1) - (período-2) - (período-4) - ... - (caos). Além disso, também é possível observar janelas estáveis com períodos ímpares, como (período-3) e (período-5), incorporado na região caótica, que é semelhante ao observado experimentalmente para o sistema GaAs-SI [3,4].

Atratores periódicos de (período-1) a (período-5) e um atrator caótico foram obtidos usando a série temporal da densidade de defeitos  $n_D(t)$  e o campo elétrico

$\varepsilon(t)$  e os mesmos parâmetros do diagrama de bifurcação da figura 5.3, e todos são apresentados na figura 5.4.



**Figura 5.4** - Atratores periódicos de (período-1) a (período-5) e um atrator caótico para o modelo de dois vales em GaAs Si.

Diversos outros diagramas de bifurcação podem ser obtido para esse modelo caso outro valor do fator de compensação ( $N_A / N_D^*$ ) seja estabelecido na tabela 1. Porém, nesse caso é mais proveitoso estudar a mudança da forma do diagrama de bifurcação através de um mapa de parâmetros de controle. Desta forma podemos observar estruturas periódicas imersas em regiões caóticas. Esse estudo será dado em detalhes na próxima seção.

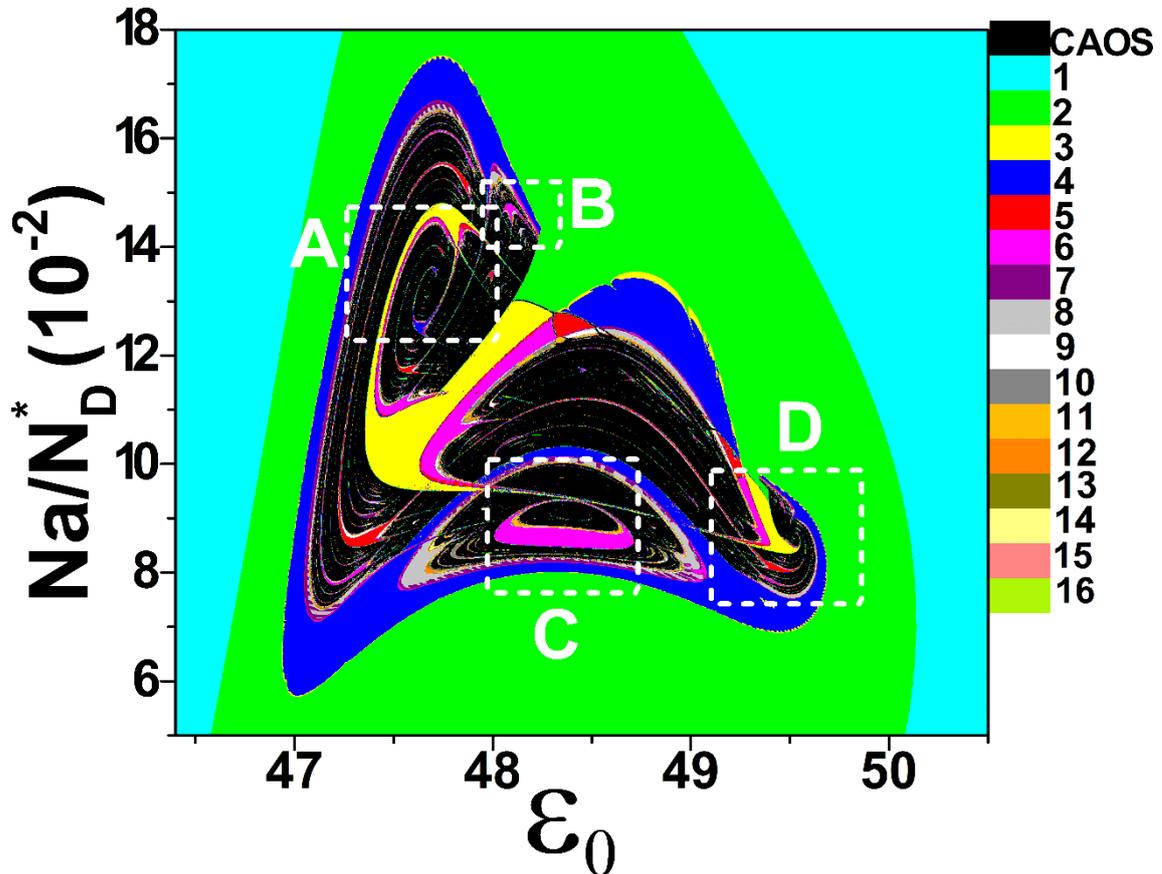
### 5.3 – Espaços de Parâmetros

Na ordem de explorar as periódicas estruturas que aparecem imersas no regime caótico, como aqueles do diagrama de bifurcação para o GaAs-SI mostrado na figura (5.3), uma forma bidimensional do diagrama de bifurcação chamado espaço de parâmetros (*Parameter-Space*) será construído para determinar como essas periódicas estruturas estão organizadas quando mudamos dois parâmetros de controle.

O espaço de parâmetros de periodicidade (*P-parameter-space*) é um mapa bidimensional  $((\epsilon_0), (N_A / N_D^*))$  onde os valores da periodicidade P da série temporal S(t) foi codificada em uma escala de cores de 16 valores. Embora na literatura sejam encontrados alguns métodos para determinar a periodicidade de séries temporais [5,6], nós usamos uma rápida e confiável rotina de detecção de periodicidade feita na plataforma LabVIEW, desenvolvida por Viana et. Al. [7]. O método consiste em transformar uma série temporal S(t) (fluxo) em uma série temporal discreta U(n) (unitário) selecionando os valores máximos e mínimos de S(t). Desta forma, o número de picos na transformada rápida de Fourier (FFT) de U(n) é contado, e esse número define a periodicidade da série S(t). Em nosso trabalho, os períodos foram contados até (período-16), assim qualquer série com período  $P > 16$  foi considerado caótico.

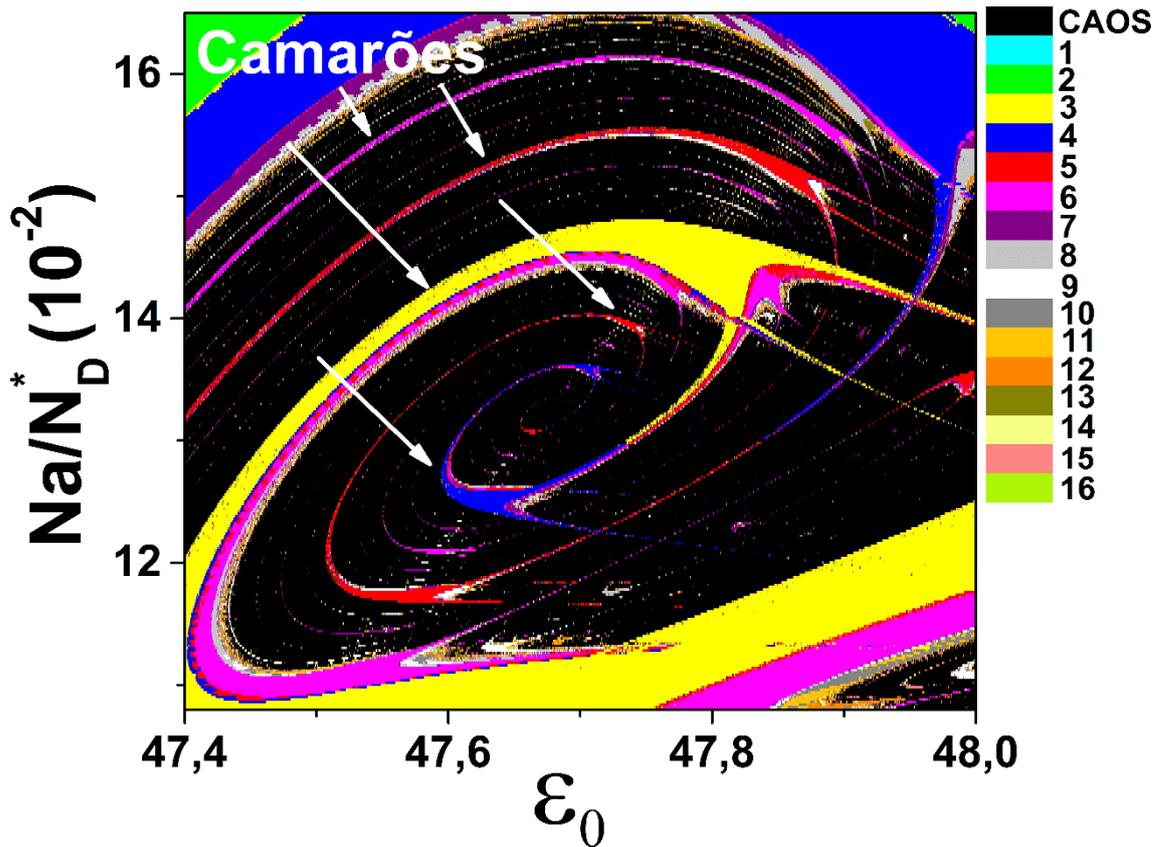
Na figura 5.5 apresentamos nosso espaço parâmetros de periodicidade para o GaAs-SI usando o modelo de Dois Vales. O eixo vertical representa o fator de compensação  $(N_A / N_D^*)$ , variando de  $5,0 \times 10^{-2}$  a  $18,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $5,0 \times 10^{-4}$ , e a abscissa representa o campo elétrico  $\epsilon_0$  variando de 46,4 a 50,5 com passo de

$1,0 \times 10^{-3}$ . O espaço de parâmetro com resolução  $(x,y)=(4100 \times 260)$  pontos, apresentada na figura 5.5, mostra um estrutura interessante semelhante a um “caracol”, e dentro da "concha do caracol" (região A) é possível visualizar um grande “camarão” com periodicidade-3, embutidos dentro da "concha do caracol”.



**Figura 5.5** – Espaço de parâmetro de periodicidade para o modelo de Dois Vales para GaAs-Si. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $5,0 \times 10^{-2}$  a  $18,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $5,0 \times 10^{-4}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 46,4 a 50,5 com passo de  $1,0 \times 10^{-3}$ .

As informações de muitas estruturas periódicas podem ser acessadas através do espaço de parâmetros. Essas estruturas estão presentes em janelas periódicas complexas. Em algumas direções as estruturas periódicas organizam-se com adição de período formando cascatas de bifurcação e as regiões periódicas são alternadas por regiões caóticas.



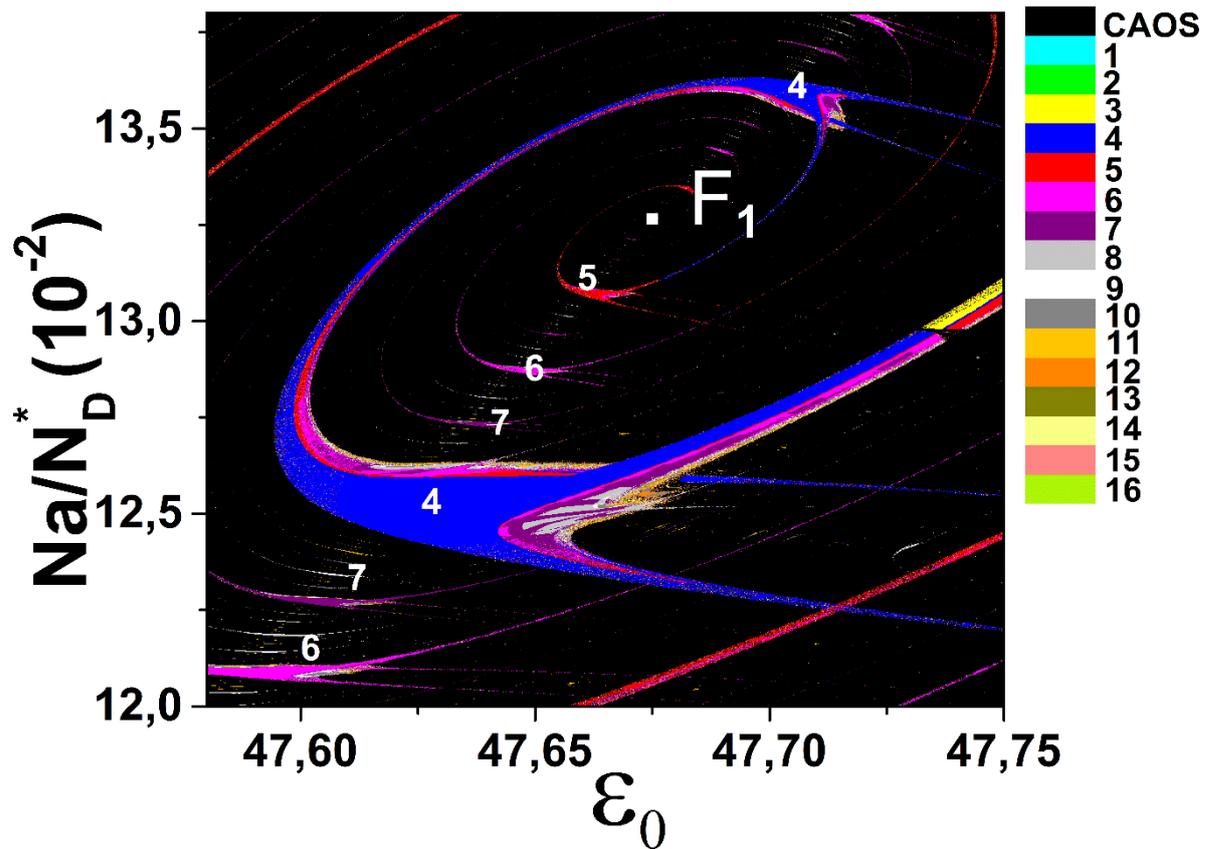
**Figura 5.6** – Ampliação de (25x) do espaço de parâmetros para GaAs-SI simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $10,8 \times 10^{-2}$  a  $65,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $2,0 \times 10^{-4}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 47,4 a 48,0 com passo de  $1,0 \times 10^{-4}$ .

A fim de obter acompanhar as estruturas dos camarões na figura 5.5, fizemos um aumento de 25 vezes na região A, e produzimos um espaço de parâmetros apresentado na figura 5.6, com ( $N_a/N_D^*$ ) variado de  $10,8 \times 10^{-2}$  a  $16,5 \times 10^{-2}$ , com passo de  $2,0 \times 10^{-4}$  e ( $\epsilon_0$ ) variando de 47,4 a 48,0 com passo de  $1,0 \times 10^{-4}$ , o que implica em uma resolução de 6000x280 pontos. Agora, pode-se identificar que o espaço de parâmetros expandido mostra estruturas periódicas organizadas conhecidas como camarões, e eles são orientados de uma forma rotativa, em torno de um ponto focal estimado em  $F_1 = (\epsilon_0=47,67; (N_a/N_D^*)=13,23 \times 10^{-2})$ . Desta forma, os camarões organizam-se em forma de espiral, e em larga escala como uma "concha de

caracol", na figura 5.5. Estruturas semelhantes são já apresentadas na literatura para outros sistemas [8-11].

Para uma melhor orientação, descrevemos a estrutura auto organizada do espaço de parâmetros como a estrutura física de um camarão, onde o corpo é composto por uma grande região periódica tendo à direita ramificações, que definimos como "antenas" e, pela esquerda, a "cauda". Foram observados no espaço de parâmetros da figura 5.6, que um camarão pode se conectar com outros camarões de três maneiras simultâneas: A primeira ocorre na interseção entre as antenas dos camarões com diferentes periodicidades, a segunda forma por camarões com periodicidade em sequência (P-3 para P-4, P-4 para P-5, e assim por diante) continuamente ligados pelas suas antenas, e finalmente, a terceira ligação está na continuidade entre as "caudas" de camarões, com a mesma periodicidade. O acesso fácil entre as estruturas auto organizadas constitui uma comunicação direta entre as janelas de ordem nas regiões caóticas, produzindo novas rotas, estabelecendo assim um controle de caos. Na figura 5.7 apresentamos uma ampliação da região dentro da figura 5.6 com resolução 8500x900 pontos. O espaço de parâmetros destaca um camarão de período-4, com  $(N_a/N_D^*)$  variado de  $12,0 \times 10^{-2}$  a  $13,8 \times 10^{-2}$ , com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$  e  $(\varepsilon_0)$  variando de 47,58 a 47,75 com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$ .

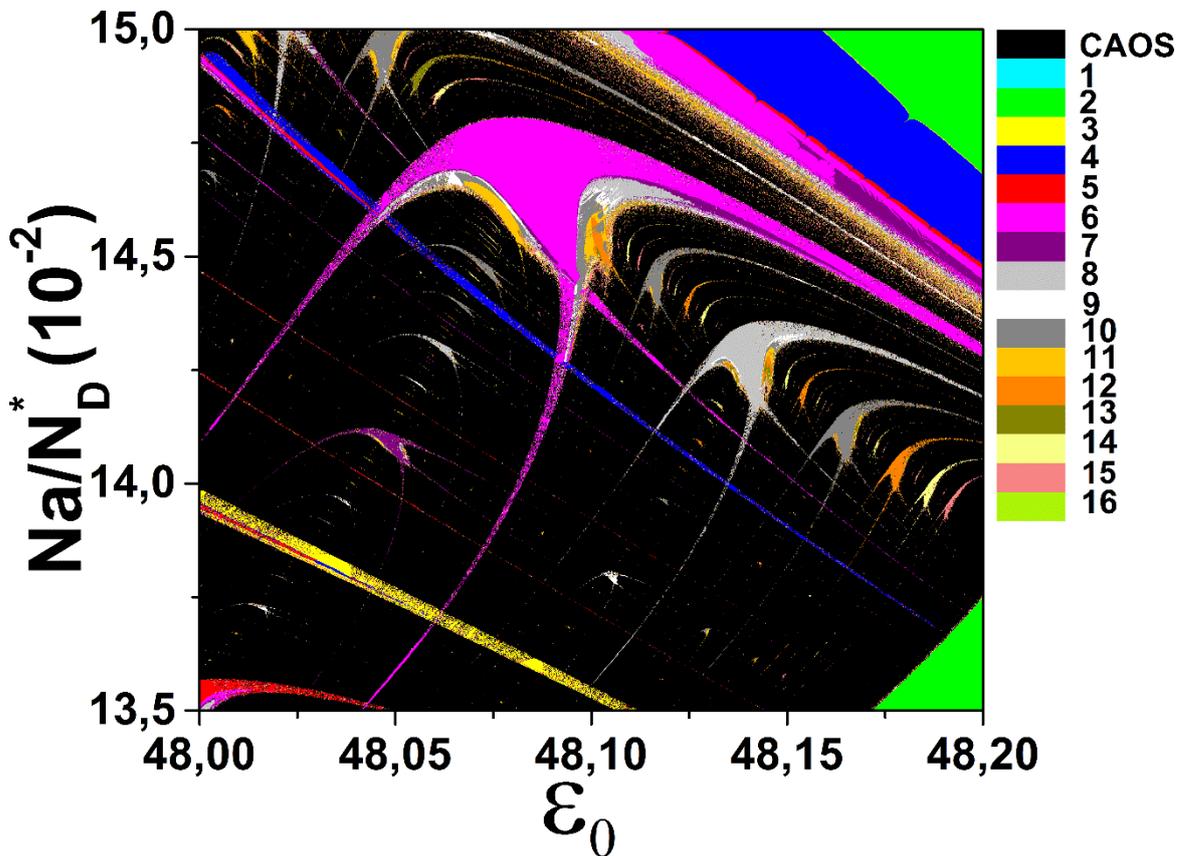
À medida que se afasta do ponto focal  $F_1$ , a estrutura dos camarões sofrem deformações. Os camarões que possuem comunicação entre suas caudas apresentam alongamento no espaço  $(\varepsilon_0; N_a/N_D^*)$  e tornam-se mais "esticados" à medida que eles afastam do ponto focal como pode ser visto na concha do caracol da figura 5.5.



**Figura 5.7** – Ampliação do espaço de parâmetros da figura (5.6) para GaAs-SI simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $12,0 \times 10^{-2}$  a  $13,8 \times 10^{-2}$  com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 47,58 a 47,75 com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$ .

Ainda dentro da concha do caracol na região B, conseguimos observar na figura 5.8 uma coleção de camarões de diversos períodos que apresentam uma estrutura regular e comunicam-se com outros camarões apenas por intersecção entre suas antenas, diferente dos camarões apresentados nas figuras 5.6-7. Podemos observar também que existem diversos camarões preenchendo as vizinhanças do camarão de período-6 formando uma estrutura auto similar. À medida que observamos camarões mais afastados do camarão de período-6 suas estruturas tornam-se mais alongadas no espaço ( $\epsilon_0; N_a/N_D^*$ ) e induz que suas estruturas estão sofrendo uma leve rotação para dentro do plano. Este fato é um indicativo que os camarões podem ocupar um volume em um espaço de parâmetros

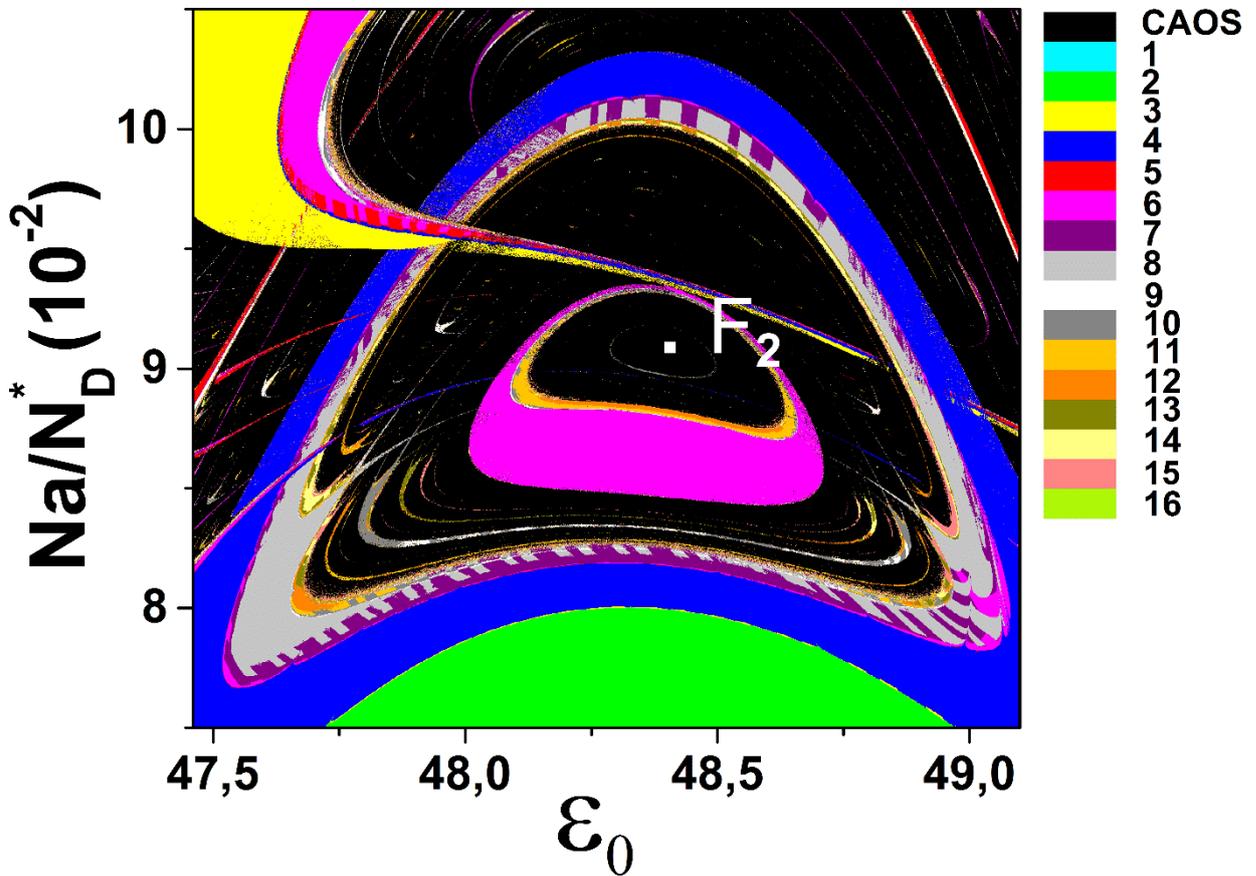
tridimensional, e como consequência algumas intersecções entre suas partes podem não acontecer. Na figura 5.8 o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $13,5 \times 10^{-2}$  a  $15,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 48,0 a 48,2 com passo de  $1,0 \times 10^{-5}$ .



**Figura 5.8** – Espaço de parâmetros nas proximidades da concha do caracol para GaAs-Si simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $13,5 \times 10^{-2}$  a  $15,0 \times 10^{-2}$  com passo de  $2,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 48,0 a 48,2 com passo de  $1,0 \times 10^{-5}$ .

A riqueza de estruturas presente no espaço de parâmetros da figura 5.5 é grande e a caracol exibe mais duas novas regiões que existem pontos focais F com características estruturais diferentes da analisada na região do  $F_1$  apresentado na figura 5.6. Na parte central do caracol, na região C, observamos uma ilha imersa em uma região de período-4, onde estruturas cíclicas de camarões estão presas ao ponto focal  $F_2 = (48,39; 90,7 \times 10^{-3})$  apresentado no espaço de parâmetros de

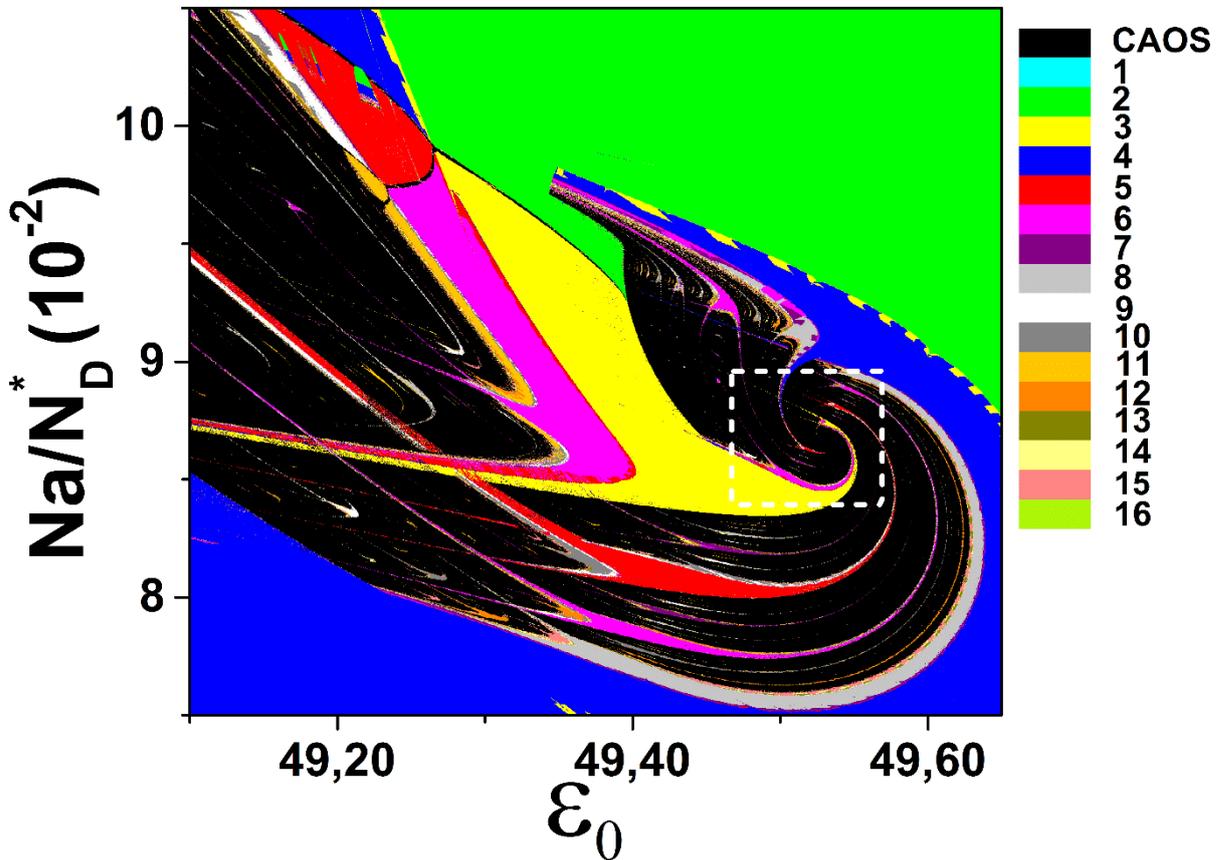
periodicidade da figura (5.9), com  $(N_a/N_D^*)$  variado de  $7,5 \times 10^{-2}$  a  $10,5 \times 10^{-2}$ , com passo de  $3,0 \times 10^{-5}$  e  $(\epsilon)$  variando de 47,46 a 49,10 com passo de  $2,0 \times 10^{-4}$ .



**Figura 5.9** – Espaço de parâmetros na região central do caracol para GaAs-Si simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação  $(N_a/N_D^*)$  foi variado de  $7,5 \times 10^{-2}$  a  $10,5 \times 10^{-2}$  com passo de  $3,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico  $(\epsilon_0)$  de 47,46 a 49,1 com passo de  $2,0 \times 10^{-4}$ .

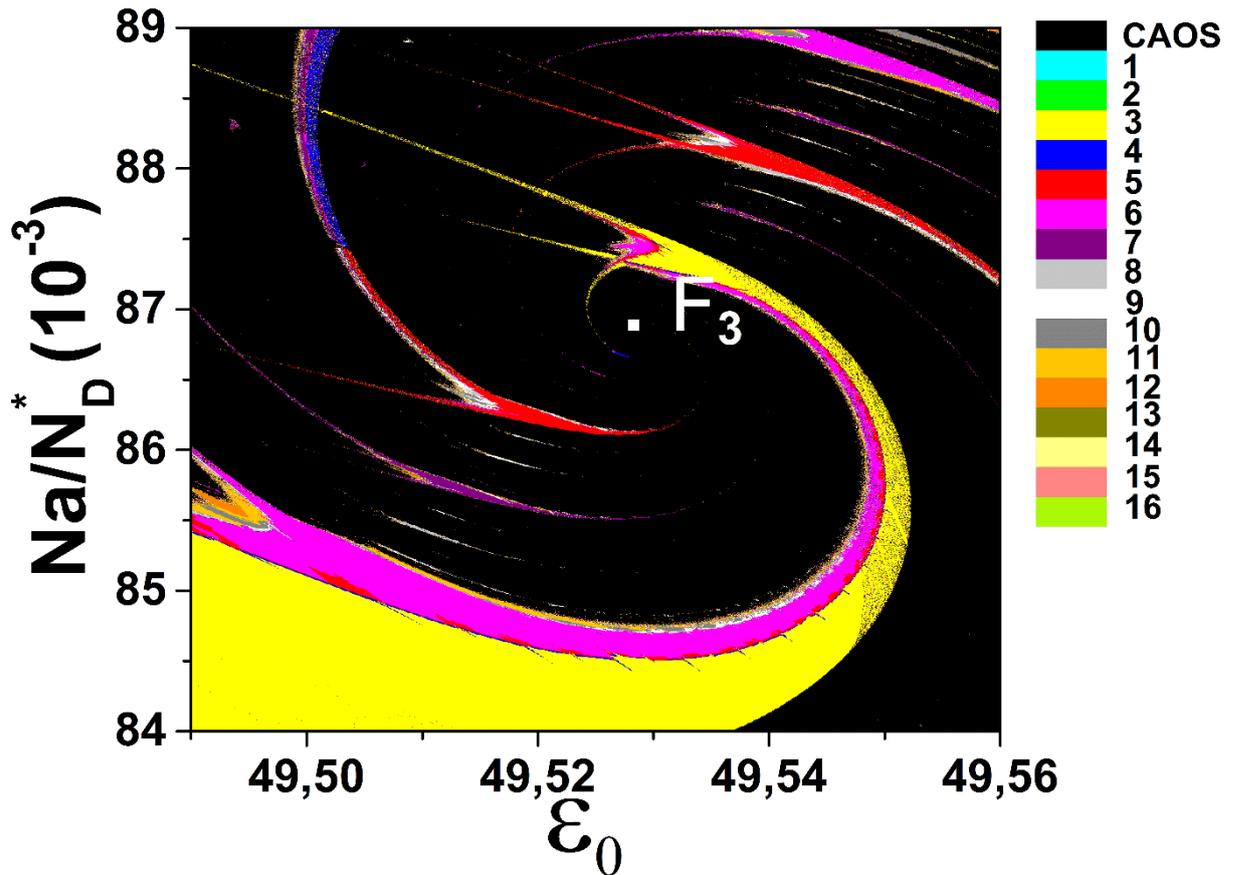
Na extremidade inferior direita da figura 5.5, na região D, observamos que a cabeça do caracol possui também um ponto focal  $F_3 = (49,53; 86,76 \times 10^{-3})$ . Nesse caso as estruturas dos camarões não orbitam o ponto focal, mas são atraídos para ele. Na figura 5.10 apresentamos essa organização, onde  $(N_a/N_D^*)$  foi variado de  $7,5 \times 10^{-2}$  a  $10,5 \times 10^{-2}$ , com passo de  $3,0 \times 10^{-5}$  e  $(\epsilon_0)$  variando de 49,10 a 49,65 com

passo de  $1,0 \times 10^{-4}$ . Na figura 5.11 apresentamos uma ampliação próxima do ponto focal  $F_3$ .



**Figura 5.10** – Espaço de parâmetros na região cabeça do caracol para GaAs-SI simulado pelo modelo de Dois Vales. Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $7,5 \times 10^{-2}$  a  $10,5 \times 10^{-2}$  com passo de  $3,0 \times 10^{-5}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 49,10 a 49,65 com passo de  $1,0 \times 10^{-4}$ .

Comparando os três pontos focais  $F_1$ ,  $F_2$  e  $F_3$ , podemos afirmar que cada um possui uma característica particular para organizar as estruturas de camarões ao redor delas. Compreender quais parâmetros físicos presentes nas equações de taxas do modelo de Dois Vales são responsáveis por cada tipo de comportamento é uma nova questão que ainda está em aberto para estudo em nosso modelo.



**Figura 5.11** – Ampliação do espaço de parâmetros da figura (5.10). Aqui o fator de compensação ( $N_a/N_D^*$ ) foi variado de  $8,4 \times 10^{-2}$  a  $8,9 \times 10^{-2}$  com passo de  $5,0 \times 10^{-6}$  e o campo elétrico ( $\epsilon_0$ ) de 49,49 a 49,56 com passo de  $1,0 \times 10^{-5}$ .

Comparando os resultados experimentais [1-3] com resultados numéricos obtidos a partir de nosso modelo, podemos concluir que o modelo de Dois Vales produz com sucesso regiões NNDC e o comportamento caótico do transporte em GaAs-SI, que são características dos fenômenos não-lineares captura assistida por campo elétrico e a ionização por impacto. A introdução dos vales  $\Gamma$  e L como dois canais de transferência de elétrons e sua característica velocidade drift de elétrons livres foram os responsáveis pelo sucesso do nosso modelo.

Os principais resultados e discussões relacionadas a esta tese foram aceitos para publicação em 03 de setembro de 2014 no periódico *International Journal of Bifurcation and Chaos*, com previsão de publicação em fevereiro de 2015 [12].

## Referências

- [1] R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and H. A. Albuquerque, *Chaos* **13**, 457 (2003).
- [2] H. A. Albuquerque, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, R. L. da Silva, W. N. Rodrigues, M. V. B. Moreira and R. M. Rubinger, *J. Appl. Phys.* **93**, 3 (2003).
- [3] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, and G. M. Ribeiro, *Physica D* **194**, 166 (2004).
- [4] Tese de doutorado de Rodrigo Lacerda da Silva, *Oscilações Espontâneas de Corrente Elétrica e Rotas para o Caos em GaAs*, Abril de 2006, DP Física – UFMG
- [5] H. Hegger, H. Kantz, T. Schreiber: Practical implementation of nonlinear time series methods: The TISEAN package. *Chaos* **9**, 413–435 (1999)
- [6] H. Hegger, H. Kantz, T. Schreiber: TISEAN 3.0.1, [http://www.mpi-pks-dresden.mpg.de/~tisean/Tisean\\_3.0.1/index.html](http://www.mpi-pks-dresden.mpg.de/~tisean/Tisean_3.0.1/index.html) (2007).
- [7] E. R. Viana, R. M. Rubinger, H. A. de Albuquerque, F. O. Dias, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro. *Nonlinear Dyn.* **67**, 385 (2012).
- [8] C. Stegemann, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, P. C. Rech. *Chaos* **21**, 033105 (2011)
- [9] C. Bonatto and J. C. Gallas. *Physical Rev. Lett.* **101**, 054101 (2008).
- [10] H. A. Albuquerque, P. C. Rech. *Int. J. Circ. Theor. Appl.* **40**, 189–194 (2010).
- [11] R. Stoop, P. Benner, and Y. Uwate, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 074102 (2010)
- [12] S. L. da Silva, E. R. Viana, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro and R. L. da Silva - High Resolution Parameter Space from a Two Level Model on Semi-Insulating GaAs - *Int. J. Bifurcat. Chaos* (in press) - **25**, 1530004 (2015)

### Capítulo 5 – Conclusões

No presente trabalho, propomos um modelo físico, chamado de "modelo de "Dois Vales", para a condução elétrica em amostras GaAs semi-isolantes (GaAs-SI). Tanto quanto sabemos, o modelo proposto é o primeiro que, utilizando equações de taxa de geração-recombinação (g-r) produz o regime condutividade diferencial negativo do tipo N (NNDC), que é a assinatura experimental das curvas características não lineares para deste material [1-3].

A fim de conseguir este resultado, foram considerados um mecanismo de transferência de elétrons em dois vales, isto é, os vales  $\Gamma$  e L no interior da banda de condução e do estado fundamental do defeito do nível profundo. Além disso, foi necessário determinar uma expressão analítica para a velocidade de drift para elétrons livres, simulando a curva experimental bem estabelecido, disponíveis na literatura [4].

Entre as múltiplas alternativas de selecionar os processos g-r envolvendo um defeito de nível profundo e os dois vales, a proposta do modelo de Dois Vales foi construída como o menor conjunto testado, que produz a região NNDC, e levar em conta as principais propriedades física do GaAs-SI, como os fenômenos ionização por impacto e captura assistida por campo elétrico. Com um pequeno conjunto de equações diferenciais o custo computacional é significativamente reduzido no cálculo da dinâmica não linear e na análise das séries temporais, aumentando a eficiência do modelo.

A dinâmica não linear foi investigada na região de condutividade diferencial negativo do tipo N (NNDC). Atratores periódicos e caóticos foram construídos pela combinação da série temporal da densidade de defeitos e do campo elétrico. Uma

rota de bifurcação com adição de período e janelas com periodicidade ímpar também foi observado no diagrama de bifurcação construído pelo valor máximo do campo eléctrico  $\varepsilon_{\max}(t)$ .

Uma grande quantidade de séries temporais foi calculada para o sistema apresentado, e usando uma rotina de detecção de periodicidade, fomos capazes de construir muitos espaços parâmetros de periodicidade para GaAs-SI, o que permitiu a observação de estruturas periódicas auto-organizadas imersas nas regiões caóticas, como um “camarão” organizado em espiral, formando a “concha do caracol”. Esta estrutura estabeleceu uma comunicação direta entre as janelas de ordem dentro das regiões caóticas, produzindo novas rotas de bifurcação. Esses padrões auto organizados complexos foram observados experimentalmente na literatura [1-3,4,5].

Observamos também que o espaço de parâmetro global apresenta três regiões com pontos focais que produzem organizações estruturais diferentes para as estruturas dos camarões. Através de regiões ampliadas do espaço de parâmetro global algumas estruturas auto organizadas sugerem que algumas interseções entre os camarões podem não acontecer por eles ocupar planos diferentes. A organização dessas estruturas no espaço de parâmetro e como as taxas de g-r no modelo de Dois Vales as influenciam ainda são questões em aberto. O modelo além de apresentar uma riqueza em estruturas auto similares ele proporciona interessantes expectativas para futuros trabalhos.

### Referências

- [1] R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and H. A. Albuquerque, *Chaos* **13**, 457 (2003).
- [2] H. A. Albuquerque, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, R. L. da Silva, W. N. Rodrigues, M. V. B. Moreira and R. M. Rubinger, *J. Appl. Phys.* 93, 3 (2003).
- [3] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, and G. M. Ribeiro, *Physica D* 194, 166 (2004).
- [4] J. G. Ruch, G. S. Kino, *Phys. Rev.* 174, 921 (1968).
- [5] R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and W. N. Rodrigues *Brazilian J. Phys.* 36(2A), (2006).
- [6] S. L. da Silva, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, E. R. Viana. *Physica D* 238, 1951-1956 (2009).

## Glossário de termos técnicos

**As<sub>Ga</sub>** - Um defeito de anti-sítio de arsênio e corresponde a um átomo de As na posição cristalográfica do átomo de Ga.

**Atrator** – Um conjunto de pontos no espaço de estados obtido pela solução do conjunto de equações diferenciais do sistema ou pelas séries temporais experimentais. Um atrator é um objeto no espaço de estados para o qual as trajetórias convergem no tempo. Um atrator pode ter uma dimensão inteira ou fracionária. Atratores com dimensão racionária é dito atrator estranho ou caótico. Simplificadamente podemos dividir os atratores em três tipos: periódicos, quase periódicos e caóticos, onde os periódicos apresentam-se como ciclos limite no espaço de fase, os quase-periódicos como superfícies toroidais de N dimensões e os caóticos como regiões preenchidas no espaço de fase.

**Bifurcação** – É uma mudança no estado ou na topologia do atrator quando um parâmetro de controle é variado no sistema. A bifurcação é associada a mudanças na estabilidade da solução da equação da dinâmica não linear.

**Caos** – É uma evolução determinística de um sistema não linear. A evolução é imprevisível, não periódica, e as órbitas do atrator correspondente se afastam exponencialmente. O sistema apresenta sensibilidade às condições de iniciais ou a perturbações.

**Curva I(V)** – Medida que se faz da corrente I que passa por um dispositivo quando aplicamos uma tensão V no mesmo.

**DAQmx** – Placa de aquisição de dados de 1.2 MS/s (medidas/s) em um sistema de multiplexo de 8 canais diferenciais com 16 bits de resolução cada.

**Diagramas de Bifurcação** – É uma representação gráfica do comportamento das órbitas quando um dos parâmetros de controle do sistema é variado. Os diagramas são construídos ao traçarmos a seção de Poincaré de uma das variáveis do sistema contra o parâmetro de controle.

**Dimensão de Imersão** – É a menor dimensão do espaço de fase necessária para representar um atrator de um sistema sem que ocorram cruzamentos de trajetórias. Esta dimensão é sempre definida por números inteiros positivos.

**Efeito Borboleta** – O efeito borboleta refere-se à idéia de que o bater das asas da borboleta poderia criar pequenas modificações na atmosfera local, que no futuro poderiam alterar o caminho de um tornado, ou acelerando-o, ou freando-o ou até mesmo desviando-o de seu curso original. Reflete a idéia de hipersensibilidade às condições iniciais.

**Espaço de Estados** – Um sistema descrito por uma equação diferencial de ordem  $n$  pode também ser descrito por um conjunto de  $n$  equações todas de primeira ordem nas derivadas temporais das variáveis de estado. O espaço de estados é então definido pelos  $n$  valores das variáveis de estados desse sistema. Por exemplo, o modelo de Lorenz é descrito por três equações de primeira ordem com:  $\dot{x} = \dot{x}(x, y, z)$ ,  $\dot{y} = \dot{y}(x, y, z)$  e  $\dot{z} = \dot{z}(x, y, z)$ . Sendo assim o espaço de estados é definido pelos valores  $(x, y, z)$ .

**Espaço de Fase** – Sistemas podem ser descritos por vetores multidimensionais que evoluem em tempo contínuo ou discreto. O espaço no qual estes vetores são imersos é chamado espaço de fase. A dimensão deste espaço é inteira. Por exemplo: Espaço de fase  $x(t)$  por  $\dot{x}(t)$  de um oscilador harmônico unidimensional onde dado um ponto nesse espaço é possível definirmos toda a sua dinâmica.

**Espaço de Parâmetros** – São mapas bidimensionais descrito por dois parâmetros de controle do sistema  $a$  e  $b$ , tal que a resposta do sistema para essa condição inicial  $(a,b)$  será codificada numa escala de cores.

**Expoentes de Lyapunov** – São expoentes que descrevem a taxa de afastamento (no caso de serem positivos) ou de aproximação (no caso de negativos) de trajetórias regidas pela evolução temporal de um dado sistema dinâmico que tem condições iniciais próximas. Este expoente é uma medida da sensibilidade às condições iniciais e pode ser utilizado para definirmos se um sistema apresenta-se em comportamento caótico.

**Field enhanced trapping** – Trata-se do fenômeno em que portadores de cargas nas bandas do semicondutor têm sua probabilidade de captura aumenta pela presença de um campo elétrico externo. Numa tradução livre tem-se: captura assistida por campo.

**g-r** – Trata-se de processos de geração e recombinação de portadores de cargas, envolvendo bandas e centros de captura de cargas.

**Gap** - Faixa de energia “proibida” pela solução da Equação de Schroedinger e localizada entre duas faixas de energia permitidas.

**Labview** – Linguagem de programação visual do tipo G, desenvolvida pela National Instruments onde a programação é feita de acordo com o modelo de fluxo de dados. Desenvolvida principalmente para automatização de experimentos científicos controlados por computador, porém apresenta todas as ferramentas operacionais necessárias para uma programação eficiente, bem como a possibilidade de programação paralela com outras linguagens de programação, tais como Fortran, C++, Matlab e Scilab.

**LEC** - Liquid encapsulated Czochralski é uma técnica de crescimento de cristais que utiliza um material de baixa pressão de vapor para encapsular um líquido de alta pressão de vapor.

**LED** - Diodo emissor de luz.

**LFO** – É a abreviatura para low frequency oscillations e traduzido por oscilações de baixa frequência.

**LT** – É a abreviatura para low temperature que associado com MBE se presta a designar os crescimento de GaAs em temperatura entre 200°C e 500°C, sabendo-se que a temperatura para se obter GaAs de boa cristalinidade é de cerca de 580°C.

**MBE** – É a abreviatura de Molecular Beam Epitaxy, traduzido por epitaxia por feixe molecular, e consiste de uma técnica de crescimento de semicondutores em condições fora do equilíbrio termodinâmica e que utilizar fontes gasosas como fontes.

**NDC** – É a abreviação de *negative differential conductivity* e traduzido por condutividade diferencial negativa. Região em uma curva característica  $\vec{J}(\vec{E})$  a densidade de corrente diminui com o aumento de campo.

**NNDC** – Trata-se de uma região da curva característica com NDC na forma estilizada da letra N.

**Seção de Poincaré (mapa de Poincaré)** – Na seção de Poincaré utilizaremos um hiperplano de dimensão (m-1) para seccionar o atrator no espaço de estados, gerado a partir da série temporal do sistema. A órbita do atrator cruza o hiperplano orientado numa certa direção, marcando pontos sobre esse plano. Esses pontos

serão salvos em uma nova série temporal que depende da orientação do hiperplano. A série temporal representará o sistema.

**SI** – É abreviatura de *semi-insulating* e especifica o caráter semi-isolante de GaAs e é tipicamente  $>10^7\Omega\text{cm}$ . Nesse caso, a resistividade do material aumenta devido a captura dos portadores por defeitos, porém, sem produzir alterações nas bandas do semicondutor.

**SNDC** – Trata-se de uma região da curva característica com NDC na forma estilizada da letra S.

**Série Temporal** – É uma sequência de medidas realizadas em função do tempo que contém informações sobre a dinâmica do sistema. As séries temporais podem ser obtidas através de medidas experimentais das variáveis ou através da solução das equações diferenciais do sistema.