

**FENÔMENOS NÃO-LINEARES DE
TRANSPORTE ELÉTRICO INDUZIDOS POR
GERAÇÃO-RECOMBINAÇÃO EM
SEMICONDUCTORES**

HOLOKX ABREU ALBUQUERQUE

**FENÔMENOS NÃO-LINEARES DE TRANSPORTE ELÉTRICO INDUZIDOS POR
GERAÇÃO-RECOMBINAÇÃO EM SEMICONDUTORES**

HOLOKX ABREU ALBUQUERQUE

ORIENTADOR: ALFREDO GONTIJO DE OLIVEIRA

CO-ORIENTADORES: RERO MARQUES RUBINGER
GERALDO MATHIAS RIBEIRO

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

BELO HORIZONTE
DEZEMBRO DE 2005

AGRADECIMENTOS

- Ao professor Alfredo Gontijo de Oliveira, por sua orientação, acompanhamento e atenção permanentes, pelo constante debate e pelo seu compromisso no meu processo de formação científica.
- Um especial agradecimento ao professor Rero Marques Rubinger por ter se disponibilizado na co-orientação desse trabalho e pelas enriquecedoras discussões que foram fundamentais na elaboração deste.
- Ao professor Geraldo Mathias Ribeiro, por sua constante colaboração, participação e amizade.
- Ao amigo Rodrigo Lacerda da Silva pelas discussões científicas, amizade e companheirismo ao longo desse período.
- Aos colegas de curso, que contribuíram com a amizade e discussões enriquecedoras.
- Aos funcionários do Departamento de Física da UFMG, pela sua colaboração na disponibilidade da infra-estrutura, necessária ao desenvolvimento desse trabalho.
- À Karine, por seu Amor, apoio e compreensão incondicional que tem me estimulado nos momentos mais difíceis.
- Um especial agradecimento ao meu pai e minha mãe por tudo que fizeram por mim.
- Aos meus irmãos pela solidariedade e apoio ao meu desenvolvimento.
- Ao Seu Luiz, D. Conceição, Cássia e Camila pelo companheirismo e incentivo.
- Aos amigos Antônio de Pádua Magalhães e Kilder Leite Ribeiro pela amizade e companheirismo ao longo desse período.
- Ao CNPq, que proporcionou minha disponibilidade integral à implementação desse projeto.
- E a Deus ...

ÍNDICE

Resumo	vi
Abstract	vii
Introdução	1
Capítulo 1 – Oscilações de Baixa Frequência em GaAs Semi-Isolante	4
1.1 – Domínios de Campo Elétrico em GaAs SI	4
1.2 – Oscilações de Baixa Frequência e Caos em GaAs SI	9
1.3 – LFO e Caos em Amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE	11
Referências	21
Capítulo 2 – Um Modelo de Equações de Taxas para os Processos de Geração e Recombinação em Semicondutores	23
2.1 – Transporte Elétrico em Semicondutores	23
2.1.1 – Equações Clássicas para Semicondutores	24
2.1.2 – Semicondutores como Sistemas Fora do Equilíbrio Termodinâmico	25
2.2 – Processos de Geração e Recombinação em Semicondutores.....	26
2.3 – Equações de Taxas para os Processos de Geração e Recombinação	29
2.3.1 – Modelo para um Único Portador	29
2.4 – Oscilações Induzidas por Ionização por Impacto	32
2.5 – Análise das Séries Temporais	38
2.6 – O Modelo de Ionização por Impacto com a Captura Assistida por Campo	49
Referências	54
Capítulo 3 – Condutividade Diferencial Negativa em GaAs Semi-Isolante	56
3.1 – Condutividade Diferencial Negativa	56
3.2 – Mecanismos para NDC em GaAS do tipo SI e do tipo- <i>n</i>	60
3.2.1 – Instabilidade de <i>Drift</i>	61
3.2.2 – Instabilidades de Geração-Recombinação	63
3.3 – Condutividade Diferencial Negativa do tipo-N em Amostras de GaAs Crecidas a Baixas Temperaturas por MBE	65
3.3.1 – Captura Assistida por Campo Elétrico	69
3.3.2 – Um Modelo para as Curvas Características $I(V)$ em GaAs SI	72

Referências	79
Conclusões	81
Apêndice I – Caos e Análise de Séries Temporais	84
I.1 – Dinâmica Não-Linear e Caos	84
I.2 – Caracterização da Dinâmica Caótica	85
I.2.1 – Definição de Atrator	86
I.2.2 – Expoentes de Lyapunov	87
I.2.3 – Dimensões de um Atrator	89
I.2.4 – Teorema de Reconstrução de Takens	94
I.3 – Considerações Finais	98
Referências	99

RESUMO

Neste trabalho, estudamos modelos teóricos com vistas a explicar o comportamento não-linear do transporte de carga em semicondutores. Nossa abordagem consistiu em realizar integrações numéricas das equações diferenciais para estudarmos a dinâmica do transporte. Para tanto, consideramos os mais importantes processos de geração e recombinação (g-r) dos portadores de carga presentes em amostras de GaAs semi-isolantes (SI) crescidas por epitaxia por feixe molecular a baixa temperatura (LTMBE): ionização por impacto (a geração) e captura assistida por campo elétrico (a recombinação). Esses dois processos foram incluídos em um modelo de equações de taxas para os processos de g-r para simular as oscilações espontâneas de corrente elétrica de baixa frequência presentes em amostras de GaAs SI. Os resultados das simulações produziram as características específicas dos dados experimentais, sugerindo que o modelo microscópico das equações de taxas para esses processos de g-r é adequado para explicar o comportamento não-linear da corrente elétrica no circuito contendo amostras de GaAs SI. Além disso, propomos uma equação para a característica $j(E)$ das amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE. Esta equação incorpora os dois processos de g-r mencionados acima. Merece registro o fato de que a interpretação e a descrição do processo de recombinação, via captura assistida por campo elétrico, realizada por nosso grupo de pesquisa são contribuições para o tema aqui delineado, evidenciada através de publicações com resultados inéditos.

ABSTRACT

In this work, we studied theoretical models to explain the non-linear behavior of the electric transport of charge carriers in semiconductors. We focused the studies in the numerical integrations of differential equations to obtain the dynamics of the electric transport. In the models, we considered the most important processes of generation and recombination (g-r) of the charge carriers in semi-insulating (SI) GaAs samples grown by low-temperature molecular-beam epitaxy (LTMBE): impact ionization (generation) and field enhanced trapping (recombination). These two processes were included in a model of rate equations for the g-r processes to simulate the spontaneous low frequency electric current oscillations presented in GaAs SI samples grown by LTMBE. The simulation results showed the specific features of the experimental data, suggesting the microscopic model of the rate equations for the g-r processes is adequate to explain the non-linear behavior of the electric current in a circuit with GaAs SI samples. In addition, we proposed an equation for the $j(E)$ characteristics of GaAs SI samples. This equation incorporates the two g-r processes mentioned above.

INTRODUÇÃO

Sob efeito de um alto campo elétrico externo, irradiação ou injeção de corrente em regime fora do equilíbrio termodinâmico, os materiais semicondutores comportam-se como sistemas dinâmicos complexos que, em muitos casos, apresentam instabilidades elétricas tais como quedas bruscas de corrente, chaveamento entre estados não condutores e condutores, oscilações espontâneas de corrente ou de tensão. Há uma grande variedade de mecanismos físicos que levam a essas instabilidades, mas o fenômeno observado com mais frequência envolve a formação espontânea de padrões espaço-temporais tais como distribuições não-homogêneas de corrente e domínios de campo elétrico. Estes últimos têm a propriedade de se propagarem entre os contatos da amostra, produzindo oscilações espontâneas de corrente detectáveis em um circuito externo. Essas oscilações espontâneas apresentam, em função de um *bias* externo, rota de bifurcação para o caos, ou seja, elas podem ser temporalmente organizadas na forma de ciclos periódicos ou regime caótico. A maneira usual de estudar e caracterizar os fenômenos de bifurcação em materiais semicondutores é através da aplicação do formalismo da dinâmica não-linear aos processos de condução elétrica, advindos da geração e da recombinação de portadores de carga livres.

Uma linha de estudos que tem se mostrado bastante produtiva consiste na análise de fenômenos não-lineares de transporte elétrico em semicondutores devido aos processos de geração-recombinação (g-r) dos portadores de carga do material. Um processo de geração bastante conhecido e estudado é o de *ionização por impacto*. Neste caso, o mecanismo de geração de cargas livres ocorre quando portadores quentes (elétrons livres de alta energia) colidem com as impurezas do material resultando em um processo de avalanche (retroalimentação) que se manifesta como um aumento acentuado na densidade dos portadores livres. No caso de recombinação, a *captura assistida por campo elétrico*, os portadores quentes estimulam a captura dos portadores de carga por um processo não radiativo, envolvendo a emissão de múltiplos fônons. Esse cenário é interessante para os nossos estudos pois os elétrons quentes, que dependem de um único parâmetro externo que é o campo elétrico externo aplicado, nos permitem trabalhar em situações limítrofes em que os dois fenômenos estarão competindo em pés de igualdade para gerar uma dinâmica dependendo dos dois fenômenos simultaneamente. Embora não iremos considerar em nossas simulações teóricas, esse sistema é ainda mais versátil

se considerarmos que se pode também interferir na dinâmica por outros parâmetros de sintonia fina como temperatura, iluminação, campo magnético, etc.

Vindo de altos para baixos valores do campo elétrico aplicado, o primeiro efeito dominante é o de ionização por impacto. Reduzindo o valor do campo, tem-se uma redução na relevância da ionização por impacto e começa a aparecer o fenômeno de captura assistida por campo e, nessa situação temos uma efetiva competição entre os dois fenômenos. Continuando a reduzir o campo externo, chegamos até o regime linear, que não é interessante para os nossos estudos. Como mencionado, parâmetros físicos, como a temperatura da medida e iluminação, são também importantes para sintonizar a competição entre os dois fenômenos. A dependência com a temperatura é mais relevante na captura assistida por campo. Por outro lado, a iluminação tende a influenciar mais fortemente a ionização por impacto.

A presença de regiões de condutividade diferencial negativa (NDC) é vista como um indicador importante no estudo das instabilidades presentes nas curvas $j(E)$ características das amostras semicondutoras. Os estados independentes do tempo são geralmente instáveis nas regiões de NDC e a resposta elétrica real depende do circuito elétrico ligado ao dispositivo. NDC permite uma diferenciação quanto à forma da curva característica $j(E)$, usualmente denominada SNDC e NNDC, em função da semelhança da curva característica com as letras S e N. Esses dois casos estão associados, respectivamente, com instabilidades na tensão e na corrente, quando cada um desses parâmetros é controlado. No caso de NNDC puro, a densidade de corrente é uma função unívoca do campo, mas o campo apresenta três valores distintos para alguns valores da densidade de corrente. O caso SNDC puro é o inverso, no sentido de que E e j trocam de papel. A ocorrência simultânea dos dois fenômenos também é possível. Em sistemas que apresentam NNDC é comum observar a formação de domínios de campo elétrico estacionários e de domínios que se movem através do material. Em sistemas que apresentam SNDC, o comum é a formação de filamentos de corrente.

As amostras semi-isolantes (SI) de GaAs crescidas por epitaxia por feixe molecular a baixa temperatura (LTMBE) apresentam regiões de condutividade diferencial negativa (NDC), devido aos processos de g-r mencionados acima. Essas características foram associadas a defeitos que geram níveis profundos tornando possível a observação dos fenômenos mesmo a altas temperaturas. Quando as amostras são perturbadas próximo à região de NDC, por exemplo com a temperatura, iluminação ou um campo magnético, o sistema está sujeito a fazer transições

de fase, bem como apresentar efeitos não-lineares de transporte e, inclusive, chegar até o regime de condução caótica, gerado por duplicação de períodos sucessivas no espaço de estados.

A essência do presente trabalho, de fundamentação teórica, consiste em estudar o comportamento desses sistemas a partir de equações dinâmicas para os processos de g-r e utilizar técnicas da dinâmica não-linear envolvendo, normalmente, cálculos computacionais em virtude da dificuldade (impossibilidade prática) de resolvê-las analiticamente. Assim, a realização de modelagem teórica para esses sistemas é uma boa opção de estudos, tendo como objetivo a previsão de pontos de operação do sistema, ciclos e estabilidade. É também objetivo, estudar as possíveis rotas para o caos contidas nas equações.

A motivação para realizar este trabalho teórico surgiu quando foram observadas experimentalmente as oscilações de corrente elétrica de baixa frequência (LFO – *low frequency oscillations*) nas amostras de GaAs semi-isolantes crescidas por LTMBE. Através de um modelo simplificado de equações de taxas para os processos de g-r procuramos apresentar um modelo para interpretar as LFO observadas.

Esta tese está dividida em três capítulos, conclusões e um apêndice. Para fundamentar a motivação para os nossos trabalhos teóricos, apresentamos, no capítulo 1, alguns resultados da literatura e provenientes do nosso grupo de trabalho com relação ao fenômeno de oscilações de baixa frequência (LFO) em medidas experimentais de corrente elétrica. No capítulo 2, apresentamos os resultados das análises no contexto da teoria do caos no modelo de equações de taxas para os processos de g-r. Este modelo visa explicar as oscilações de corrente elétrica presentes nas amostras de GaAs SI. Os resultados do modelo, que inclui a dependência do processo de captura com o campo elétrico, são apresentados na forma de diagramas de bifurcação similares aos obtidos experimentalmente. No capítulo 3, apresentamos os resultados dos ajustes de curvas $I(V)$ para amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE. Neste caso, a equação utilizada contempla os dois principais processos de g-r mencionados. A identificação desses processos de g-r na curva característica $I(V)$ é importante para formular um modelo para as oscilações de corrente elétrica que possam reproduzir os dados experimentais. Nas conclusões, sintetizamos os principais resultados inéditos obtidos e, no Apêndice I, apresentamos alguns conceitos relativos à teoria do caos e análises de séries temporais não-lineares com vistas a disponibilizar para o leitor os ingredientes básicos dessa consolidada teoria.

CAPÍTULO 1 – OSCILAÇÕES DE BAIXA FREQUÊNCIA EM GaAs SEMI-ISOLANTE

Neste capítulo mostraremos alguns resultados experimentais de oscilações de corrente elétrica de baixa frequência (*low frequency oscillations* - LFO) presentes em circuitos com amostras semi-isolantes (SI) de GaAs crescidas por epitaxia por feixe molecular a baixas temperaturas (LTMBE). Esses resultados experimentais são as motivações para realizarmos os estudos teóricos contidos nessa tese. Faremos aqui uma breve descrição dos resultados experimentais e para uma descrição mais detalhada dos experimentos recomendamos as referências contidas nesse capítulo.

1.1 – Domínios de Campo Elétrico em GaAs SI

Oscilações de corrente elétrica em semicondutores surgem quando se aplica uma alta tensão dc na amostra. Essas oscilações são conhecidas desde a década de 60 [1-9] e em vários trabalhos são discutidas as causas das oscilações como sendo a formação de domínios de campo elétrico que atravessam a amostra do catodo ao anodo [10-14]. Enquanto o domínio está propagando na amostra mas em regiões longe dos contatos, a corrente elétrica tem um baixo valor. Quando o domínio atinge o anodo e desaparece, a corrente no circuito sofre um aumento e um novo domínio é formado no catodo. Nesse momento, a corrente volta a diminuir. A formação de domínios de campo elétrico está relacionada com a presença de regiões de condutividade diferencial negativa (NDC) na curva característica $I(V)$ da amostra. Um exemplo desse tipo de comportamento, pode ser encontrado no caso do efeito Gunn [15]. A origem física para a presença da região de NDC, advém da transferência de elétrons de um vale na banda de condução com baixa energia e alta mobilidade para outro com alta energia e baixa mobilidade. Essa transferência leva à formação da região de NDC e à formação de domínios de campo. O efeito Gunn ocorre, por exemplo, em amostras de GaAs tipo- n altamente dopadas [15]. Em amostras de GaAs SI, ao contrário, os domínios de campo são de propagação muito mais lenta do que os observados em GaAs tipo- n , sugerindo que o efeito Gunn possa não ser o fenômeno dominante para a formação de domínios nesse tipo de amostra [12,16]. De fato, as regiões de NDC e os domínios de campo em GaAs SI são formados pela captura assistida por campo

elétrico nos defeitos [12-14]. Alguns trabalhos tratam os defeitos que são responsáveis pela captura de elétrons como os defeitos EL2 [10,11,17].

Na figura 1.1, mostramos uma curva $I(V)$ característica, obtida da literatura, para uma amostra de GaAs SI crescida por LEC (*Liquid Encapsulated Czochralski*) [18]. A medida foi realizada no escuro a uma temperatura de 313 K. O espaçamento entre os contatos, l , foi de 7 mm. Podemos observar que para baixas tensões na amostra, a lei de Ohm é obedecida. Para voltagens ligeiramente abaixo da voltagem crítica, V_C , emergem oscilações de pequena amplitude na corrente e, para voltagens maiores que V_C , a amplitude cresce. Para voltagens muito acima de V_C tem-se a ruptura elétrica, que não é mostrado na figura.

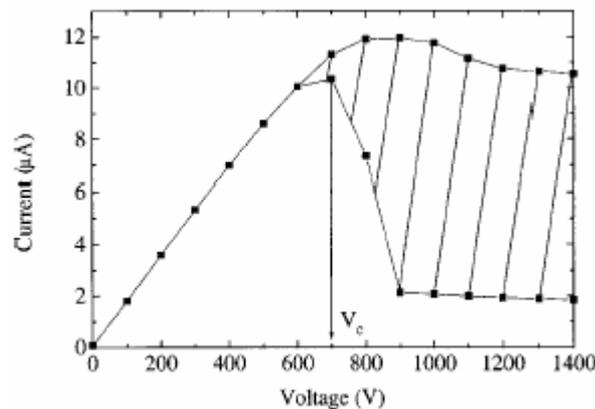


Figura 1.1: Característica $I(V)$ para uma amostra de GaAs SI crescida por LEC. A medida foi realizada no escuro a 313 K. A região hachurada é a região de oscilação. A linha superior representa o máximo da corrente e a linha inferior representa o mínimo da corrente [18].

Uma aproximação para o campo elétrico crítico, E_C , pode ser obtido de:

$$E_C = \frac{V_C}{l}. \quad (2.1)$$

No caso mostrado tem-se E_C da ordem de 1 kV/cm. Valores próximos foram encontrados em outros trabalhos [3,9,19,20]. Esse valor de E_C é cerca de três vezes menor que o valor encontrado para o efeito Gunn [21]. Para as amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE, foram encontrados valores de E_C em cerca de 0,62 kV/cm [9(a)] e 1,0 kV/cm [9(b)], que concordam com os dados disponíveis na literatura.

Na figura 1.1, para tensões acima de V_C , tem-se o regime de NDC e surgem as oscilações espontâneas de corrente como mostrado na figura 1.2 [18]. A frequência de oscilação para esta

amostra é de 56 Hz e a velocidade de propagação do domínio é 39 cm/s. Tais valores de velocidade são comuns em amostras de GaAs SI [9,16,20,22] e eles são incompatíveis com os valores observados no efeito Gunn [21]. Ridley [23] argumentou que a mobilidade do domínio, bem como a sua velocidade, depende da mobilidade efetiva de todos os portadores ativos. Isso significa que devemos considerar não somente os portadores que estão livres durante o intervalo de tempo de propagação do domínio, mas também portadores que estão livres somente uma parte do tempo já que, por exemplo, um elétron pode estar livre na banda de condução ou capturado num defeito. No estado capturado, ele não responde ao campo elétrico aplicado não contribuindo para os fenômenos de transporte. Isso implica que a mobilidade efetiva de um elétron temporariamente capturado é menor do que a mobilidade efetiva de um elétron que está livre o tempo todo. Assim, a captura de elétrons por defeitos deve ser considerada neste processo.

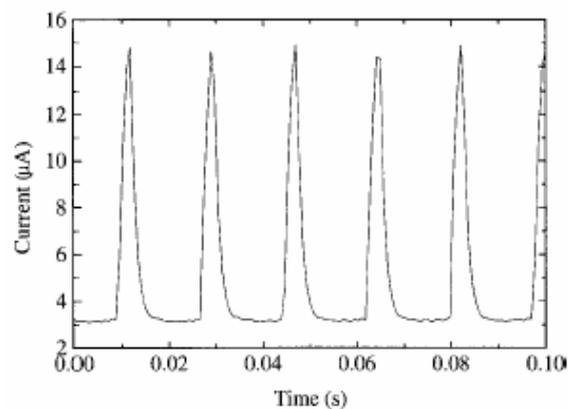


Figura 1.2: Oscilações espontâneas de corrente em GaAs SI. As medidas foram realizadas no escuro e a 318 K. A tensão aplicada foi de 1400 V [18].

Nas amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE [9], a velocidade de propagação do domínio de campo é cerca de 35 cm/s [9(a)] e 63 cm/s [9(b)]. Esses valores são compatíveis com o descrito acima para amostras de GaAs SI.

Utilizando técnicas para observar os domínios de campo elétrico, vários resultados foram obtidos com relação à gênese dos domínios, sua propagação através da amostra e suas correlações com as oscilações espontâneas de corrente elétrica [12,13,19,24].

Um resultado importante descrito na ref. [19] tem relação com o campo elétrico crítico, E_C , que é um parâmetro relacionado com o aparecimento dos domínios de campo elétrico. Os resultados experimentais indicam a presença de duas faixas de campo crítico. A primeira faixa de

campo crítico, E_{C1} , que varia de 0,5 a 1,25 kV/cm e está relacionada com o aparecimento das oscilações de corrente e onde elas apresentam pequenas amplitudes. Essas oscilações são causadas por domínios que surgem e rapidamente desaparecem no catodo sem percorrer grandes distâncias no interior da amostra. A segunda faixa de campo crítico, E_{C2} , que varia de 3,1 a 8,8 kV/cm é fundamental para a formação de domínios estáveis com envergadura para poderem se mover ao longo de toda a amostra, do catodo para o anodo. O ciclo de um domínio se inicia com o seu nascimento no catodo que é instável pela presença de regiões de NDC. O domínio não pode nascer em regiões intermediárias da amostra, entre o catodo e o anodo, pois a distribuição de cargas é homogênea e estável, caracterizando uma condição de equilíbrio. Portanto, são as instabilidades na proximidade do catodo que levam à formação de um domínio no catodo. Quando a tensão aplicada é alta o suficiente para formar uma região de NDC também no *bulk*, a região do catodo torna-se estável e a região de *bulk* instável e, em decorrência, o domínio pode propagar. Numa analogia com uma tsunami que aumenta sua amplitude ao se aproximar da praia, o valor da corrente que chega no anodo é alto gerando um pico na corrente do circuito com o conseqüente desaparecimento do domínio de campo elétrico. Enquanto o domínio está desaparecendo no anodo, simultaneamente começa a surgir e a mover um segundo domínio, o qual causa a queda de corrente.

Outros trabalhos confirmam os resultados descritos acima [12,13]. Além disso, a forma do domínio varia durante um tempo inicial, constituindo um transiente nas vizinhanças do catodo. Durante esse tempo de formação, o domínio cresce e diminui sua velocidade de propagação, mas já estando em regime de propagação. Nessa condição de estado estacionário, a forma do domínio não muda e a sua velocidade torna-se constante, dependendo linearmente com a tensão na amostra. Nesses experimentos, foi observado que para tensões acima de 2,2 kV os domínios não conseguiam atingir o regime estacionário, pois eles chegavam ao anodo antes da estabilização e suas velocidades são, nesses casos, muito altas. Isto influencia a forma dos domínios, causando oscilações aperiódicas na corrente elétrica, caracterizando um regime caótico. A largura do domínio no estado estacionário é independente da tensão aplicada na amostra, enquanto a altura do domínio cresce linearmente com a tensão.

Na figura 1.3, mostramos um domínio de campo elétrico obtido por diferenciação da distribuição da voltagem medida [13]. O gráfico do campo elétrico é mostrado em função do tempo e da posição. Como já descrito, o domínio forma-se no catodo e, nas fases iniciais de propagação ele cresce, sua velocidade de propagação diminui atingindo o estado estacionário

para a velocidade e a forma. Quando o domínio atinge o anodo ele desaparece e outro é formado no catodo e o processo recomeça. Nesse caso, domínios estáveis com a mesma largura mas com amplitude e velocidade que variam linearmente com a tensão foram observados no intervalo de 1,3 – 1,9 kV. Para voltagens acima deste valor o domínio atinge o anodo e desaparece antes de atingir o sua forma estável e um comportamento caótico surge [13].

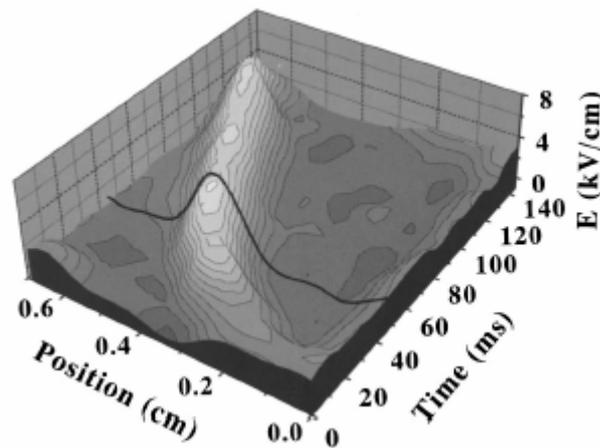


Figura 1.3: Domínio de campo elétrico em função do tempo e da distância entre os contatos a partir do catodo. A linha fina representa a distribuição do campo elétrico em função da posição [13].

Utilizando a equação de Poisson, os autores [13] obtiveram também a distribuição espacial da densidade de carga. Na figura 1.4 mostramos esta distribuição bem como a densidade de portadores livres e a densidade de portadores capturados nos defeitos. Pode-se concluir dos resultados que a distribuição espacial de carga forma um dipolo e tem um máximo em $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$. Este valor é muito maior que a densidade de elétrons livres na banda de condução, e segundo os autores, isto pode ser explicado se considerarmos os processos de geração-recombinação dos elétrons nos defeitos. Assim, os domínios de campo elétrico formam-se de uma pequena variação em torno do equilíbrio do número de elétrons capturados.

A alta resistividade do domínio é a responsável pela alta porcentagem de repulsão dos elétrons da banda de condução, enquanto o dipolo de carga, que é necessário para sustentar o domínio, está quase todo dentro do domínio devido às flutuações na ocupação dos níveis dos defeitos. Apesar de n_t ser quatro ordens de grandeza maior que n , é ainda cinco ordens de grandeza menor que a densidade de defeitos, que neste caso foi estimado em $1,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Portanto, a variação na razão entre a densidade de elétrons na banda de condução e a densidade

de elétrons nos defeitos é praticamente determinada por n e a redução de n na região do domínio é uma evidência direta da captura assistida por campo (*field-enhanced trapping*). Além disso, os autores [13] argumentam que na equação para o cálculo de n em função da posição, o baixo valor da velocidade dos domínios e a pequena contribuição da difusão faz com que a corrente de deslocamento seja irrelevante para a formação dos domínios, ao contrário dos domínios formados pelo efeito Gunn, onde a corrente de deslocamento é relevante. Resultados similares também foram encontrados na ref. [12].

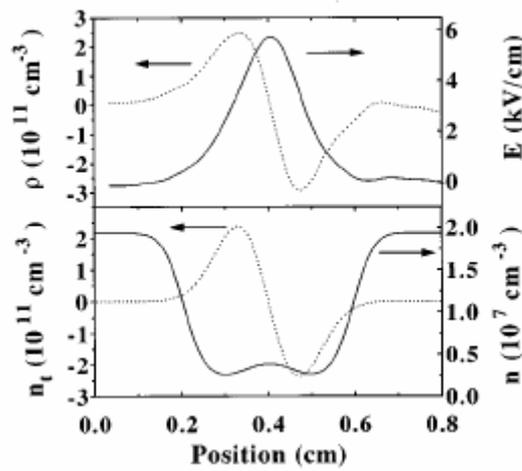


Figura 1.4: Na parte superior tem-se a distribuição do campo elétrico e da densidade de carga em função da posição e na parte inferior tem-se a densidade de elétrons na banda de condução, n , e a densidade de elétrons capturados no defeito, n_t , em função da posição [13].

1.2 – Oscilações de Baixa Frequência e Caos em GaAs SI

Comportamento caótico vem sendo estudado de maneira significativa em semicondutores como por exemplo GaAs tipo- n a baixas temperaturas e Ge tipo- p , onde filamentos de corrente causam as oscilações de corrente [25,26]. Em semicondutores semi-isolantes, onde os domínios de campo causam as oscilações de corrente, por exemplo, GaAs, InP e Si, também vêm sendo estudados de maneira significativa [8,18,25,26].

Com relação ao GaAs SI, Smith [27] foi um dos primeiros a observar o comportamento caótico das oscilações de corrente elétrica. Ele observou que para tensões elevadas e na presença de iluminação, dois domínios aparecem simultaneamente na amostra. Como cada domínio é responsável por um pico na corrente, o comportamento geral das oscilações de corrente torna-se

complexo. Willing [19,24] observou que para tensões elevadas, um domínio atravessa a amostra e ao desaparecer no anodo encontra com outro domínio ainda desaparecendo no contato, resultando em oscilações caóticas de corrente. Piazza [12,13] observou que os domínios precisam de um certo tempo para atingir o seu estado estacionário em relação à forma e velocidade de propagação na amostra. Para tensões acima de 2,2 kV, ele observou que os domínios formados não têm o tempo necessário para atingir os seus estados estacionários. Isto influencia a formação dos demais domínios, tendo todos formas diferentes, gerando oscilações aperiódicas na corrente elétrica da amostra.

A seguir descreveremos alguns resultados da literatura sobre o comportamento caótico das oscilações de corrente elétrica em GaAs SI e utilizaremos alguns termos relativos à Dinâmica Caótica e à Análise de Séries Temporais. Para uma descrição resumida sobre os conceitos envolvidos nestas duas áreas, consulte o Apêndice I deste trabalho e para uma descrição mais detalhada consulte as referências [28-32].

Knap *et al.* [4], utilizou o método da transformada rápida de Fourier nas oscilações de corrente de uma amostra iluminada. O mapa da frequência, isto é, o gráfico das frequências obtido do espectro de Fourier para as oscilações em função da tensão aplicada na amostra, mostrou que a amostra atingiu o comportamento caótico por uma rota via duplicação de período. Para baixas tensões, suficiente para produzir alguma oscilação de corrente, foi encontrada somente uma única frequência característica. Para tensões um pouco mais elevadas, foram encontradas duas frequências características e as oscilações são quasi-periódicas. Para tensões ainda maiores, estas duas frequências fundiram-se em uma única frequência e surgiu uma outra frequência igual à metade desta nova frequência (bifurcação via duplicação de período). Com tensões ainda mais elevadas, surgiu uma frequência principal e duas outras com frequências iguais a um terço e dois terços da frequência principal. Continuando a aumentar a tensão foram encontradas oscilações de quasi-periodicidade e bifurcações via duplicação de período até atingir o comportamento caótico.

Pozela *et al.* [5], não só trabalhou com o espectro de Fourier para as oscilações como também trabalhou com os espaços de fase. O espaço de fase foi obtido quando fizeram uma representação gráfica de dois sinais independentes, um em função do outro. No presente caso, Pozela utilizou a corrente elétrica e sua derivada temporal. A curva resultante é chamada de atrator e representa os estados do sistema. No caso de oscilações periódicas, o espaço de fase é uma curva em ciclo (atrator periódico ou ciclo limite) em duas dimensões. O comportamento

caótico observado por Pozela resultou em um atrator altamente irregular que não pode ser representado de maneira ideal em duas dimensões. Para caracterizar este comportamento de maneira mais quantitativa, eles determinaram a dimensão mínima para o espaço de fase de maneira a representar corretamente este atrator. Geralmente em sistemas caóticos, o atrator desse sistema tem uma dimensão não inteira (fractal). A dimensão mínima que Pozela estava procurando para este atrator fractal é o próximo inteiro acima do valor da dimensão fractal. Pozela encontrou que a dimensão aumenta de 1 (sistema estável sem nenhuma oscilação), para 2 (oscilações periódicas), para 4 e valores acima de 10 (caos).

Maracas *et al.* [6], utilizou a integral de correlação, $C(I)$, para calcular a dimensão de correlação (uma aproximação da dimensão fractal) das oscilações de corrente elétrica. Para uma de suas amostras, eles encontraram uma dimensão em torno de 1,17, o que significa que o atrator neste caso é estranho e que as oscilações de corrente são caóticas.

Neumann *et al.* [33] estudou o comportamento das oscilações de corrente em função do campo magnético. Como nestes experimentos a corrente é a única variável independente acessível, os atratores foram construídos pela técnica de Takens. Esta técnica consiste em representar graficamente a corrente no tempo $t + \tau$ em função da corrente no tempo t , onde τ é uma constante a ser determinada. Para campos magnéticos baixos, as oscilações de corrente são periódicas, apresentando uma única frequência característica no espectro de Fourier e atratores periódicos em duas dimensões no espaço de fase. Para campos magnéticos superiores a 4 T, onde medidas ópticas mostraram que os domínios desaparecem no interior da amostra, as oscilações mudam de periódicas para quasiperiódicas. Para campos iguais ou superiores a 6 T, o espectro de potência é ruidoso sugerindo que os atratores são caóticos. Os cálculos das integrais de correlação, $C(I)$, levam ao resultado da dimensão de correlação igual a 0,95.

Nesta seção vimos alguns resultados da literatura para o comportamento caótico das oscilações de baixa frequência da corrente elétrica em amostras de GaAs SI. Na próxima seção iremos apresentar alguns resultados obtidos pelo nosso grupo de pesquisa ao estudar o comportamento oscilatório da corrente elétrica em amostras de GaAs SI crescidas pela técnica de MBE a baixas temperaturas (LTMBE).

1.3 – LFO e Caos em amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE

Foram observadas oscilações de corrente elétrica em amostras de GaAs SI crescidas pela técnica de MBE a baixas temperaturas [9(a)]. As oscilações de corrente elétrica observadas foram gravadas em forma de séries temporais e a partir dessas séries temporais foram realizadas análises baseadas na Teoria do Caos e de Sistemas Não-lineares para caracterizar a dinâmica das oscilações de corrente. Para essas análises utilizou-se o pacote TISEAN [29,34]. Como resultado desses estudos, foi observada uma rota de bifurcação para as séries de corrente elétrica levando o sistema ao comportamento caótico. A seguir, iremos apresentar resumidamente esse trabalho desenvolvido e suas conclusões. Os vários termos técnicos relativos à análise de séries temporais e suas interpretações, bem como a teoria de sistemas dinâmicos não-lineares, podem ser encontradas no Apêndice I e nas referências citadas [28-32].

Nesse estudo [9(a)] foi utilizada uma amostra de GaAs SI crescida a 315 °C por MBE sobre um substrato de GaAs SI crescido por LEC. A figura 1.5 mostra a curva $I(V)$ da amostra com as seguintes condições experimentais: temperatura de medida 200 K e iluminação do LED $i_{LED} = 30$ mA. Podemos observar uma região de NDC acentuada em torno de 30 a 40 V. Esta região está associada ao processo de recombinação do portador de carga (*field enhanced trapping*) que será discutido no capítulo 3. Em torno de 55 V foi observada uma ruptura na corrente elétrica, associada ao processo de geração do portador de carga (*impact ionization*). Os círculos na região de NDC indicam os pontos onde a tensão foi mantida fixa para medir as oscilações de corrente em função do tempo, $I(V,t)$. A figura 1.6 mostra as séries temporais para as tensões 31 V, 32 V, 33 V e 34 V. Cada um destes valores equivale a um ponto na curva $I(V)$ da figura 1.5.

Para se obter uma análise mais precisa nas medidas de oscilações de corrente elétrica, foi utilizado um algoritmo de redução de ruído, cujo objetivo é limpar as séries temporais o máximo possível, sem prejudicar a dinâmica do sistema. Na figura 1.6, podemos observar para a tensão de 31 V uma periodicidade nas oscilações de corrente elétrica, cuja frequência é constante. Para a tensão de 32 V, observamos também uma periodicidade nas oscilações de corrente, mas ao contrário do caso anterior, existem duas frequências características. Para a tensão de 33 V e 34 V, a periodicidade das oscilações de corrente desaparece, sendo impossível identificar frequências características.

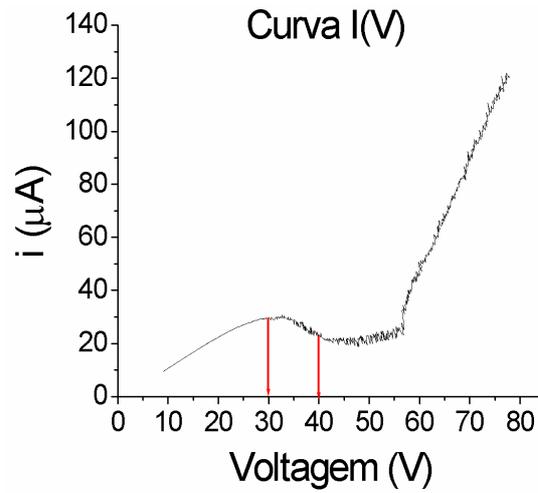


Figura 1.5: Curva $I(V)$ para uma temperatura de 200 K e $i_{LED} = 30$ mA. A região entre as duas setas indica os pontos onde a tensão foi mantida fixa para medir as séries temporais da corrente.

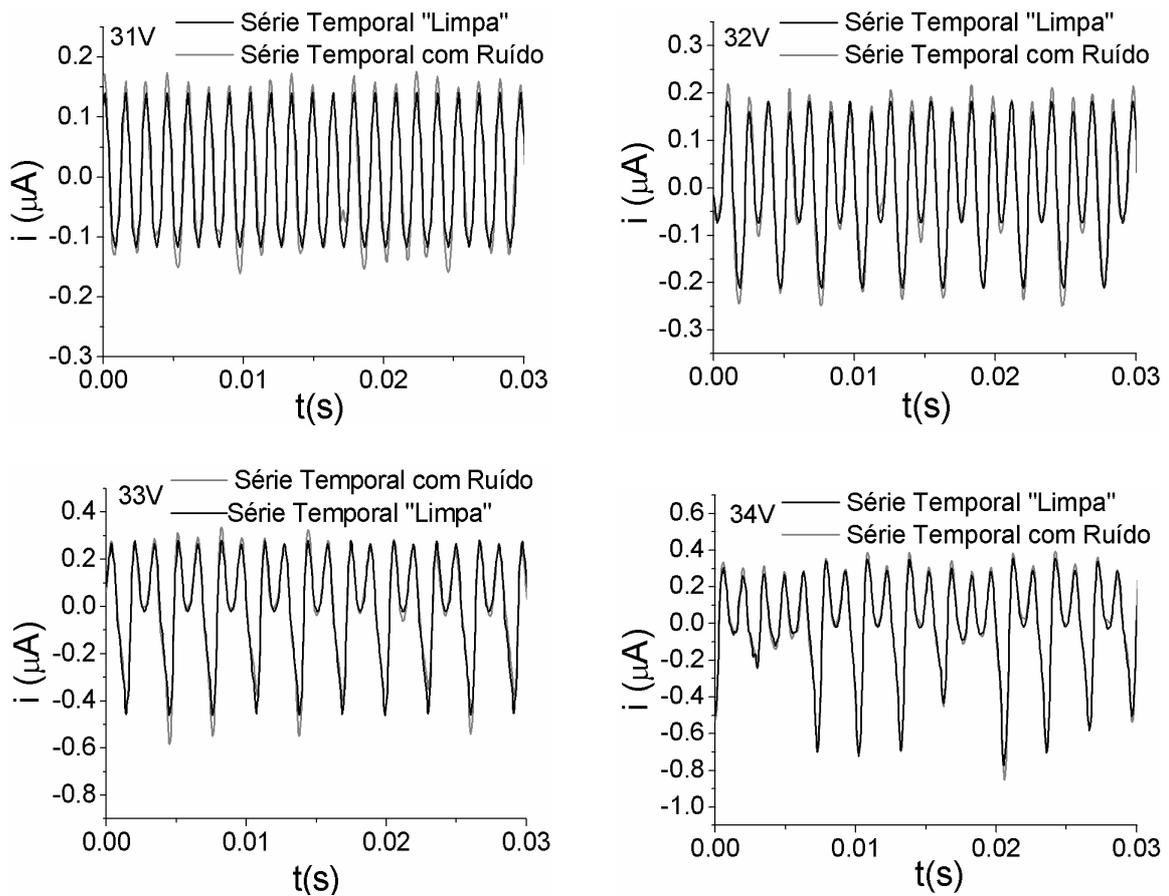


Figura 1.6: Series temporais da corrente elétrica para a amostra de GaAs SI crescida por LTMBE a 200 K. A tensão foi mantida constante em 31 V, 32 V, 33 V e 34 V.

A figura 1.7 mostra os atratores reconstruídos a partir das séries temporais apresentadas na figura 1.6 para os quatro valores da tensão. A técnica utilizada para a reconstrução está discutida no Apêndice I. O eixo horizontal é o valor da corrente em um dado intervalo de tempo enquanto o eixo vertical é o valor da corrente atrasada de um certo tempo τ . Foi utilizado um espaço bidimensional para a reconstrução do atrator, apesar de esta dimensão somente ser aceitável para o atrator de 31 V (ciclo-1). Os demais atratores requerem um espaço de reconstrução maior que dois. Observamos, para uma tensão de 31 V, um ciclo limite de período-1 seguido de um ciclo limite de período-2, para 32 V, seguido de um comportamento transitório para o caos, 33 V, e por fim o comportamento caótico para uma tensão de 34 V.

Na figura 1.8 mostramos as dimensões de correlação para os quatro atratores. A dimensão de correlação é uma aproximação da dimensão fractal do atrator. Os valores das dimensões de correlação encontrados foram $0,9 \pm 0,1$, $1,3 \pm 0,1$, $1,5 \pm 0,2$ e $2,4 \pm 0,1$ para os atratores relativos às tensões de 31 V, 32 V, 33 V e 34 V, respectivamente.

Na figura 1.9 mostramos o cálculo dos maiores expoentes de Lyapunov para as quatro séries temporais de corrente elétrica. Para a tensão de 31 V e 32 V, encontramos o maior expoente igual a zero, seguido de 0,095 bits/s para 33 V e 0,57 bits/s para 34 V.

Combinando a dimensão de correlação e o expoente de Lyapunov, concluímos que para os valores de tensão igual a 31 V e 32 V, as respectivas séries temporais não são caóticas, ou seja, apresentam um comportamento periódico. Para a tensão de 33 V, encontramos uma transição para o comportamento caótico com um valor positivo do expoente de Lyapunov mas uma dimensão de correlação inferior a 2. Para a tensão de 34 V encontramos uma dinâmica caótica com um expoente de Lyapunov positivo e dimensão de correlação maior que dois.

A seguir, iremos mostrar outro resultado obtido por nosso grupo de pesquisa, onde foi obtido um diagrama de bifurcação para as oscilações de corrente elétrica com alto grau de resolução [9(b)]. Neste estudo, foram observadas oscilações de corrente de ciclo-4 em uma amostra de GaAs SI crescida por LTMBE a 315 °C. Para visualizar este ciclo, foi aplicada novamente a técnica de redução de ruído no sinal experimental. A figura 1.10 mostra os diagramas de bifurcação antes (fig. 1.10(a)) e depois (fig. 1.10(b)) da remoção do ruído. Esses diagramas foram obtidos a partir dos mínimos das séries temporais, S_n , para cada tensão na amostra. Como podemos observar nesta figura, a seqüência de bifurcação nas oscilações de corrente é: período-1, período-2, período-4, período-2 e caos. Só foi possível observar o ciclo de período-4 após a remoção do ruído nas respectivas séries temporais. Para analisar esta dinâmica,

foram reconstruídos os espaços de fase do sistema utilizando a técnica do atraso temporal e depois foram feitos a transformada de Fourier para as séries temporais de corrente elétrica.

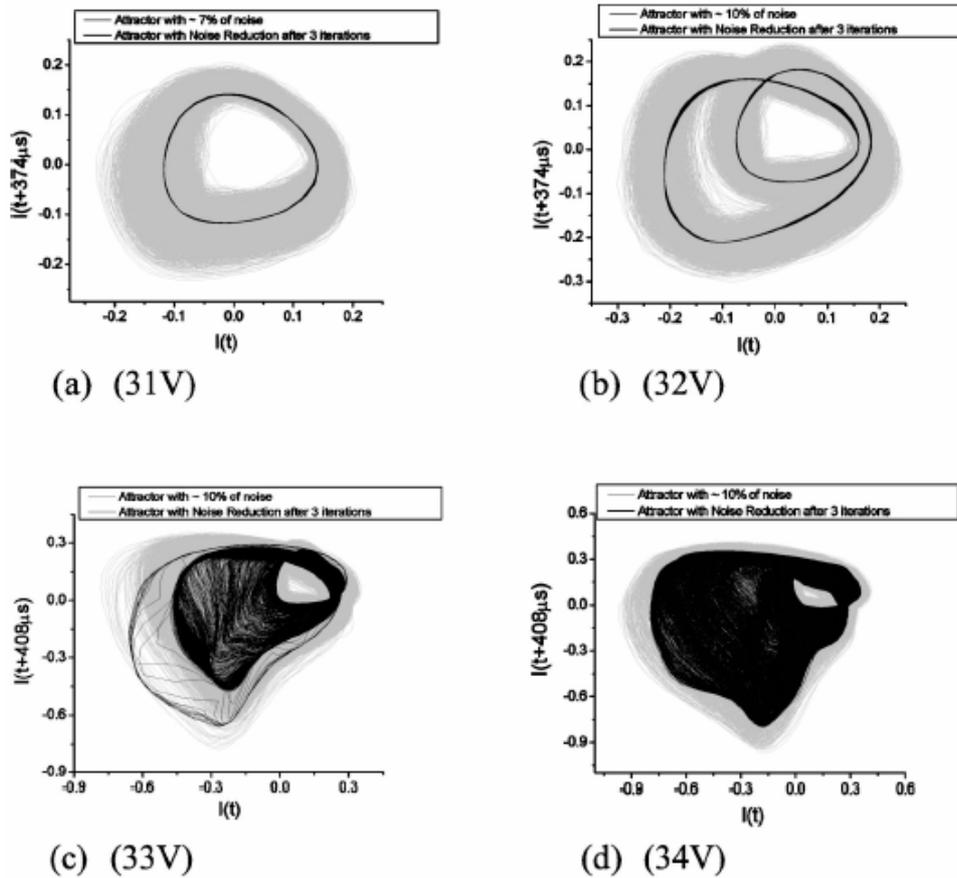


Figura 1.7: Atratores para (a) 31 V, (b) 32 V, (c) 33 V e (d) 34 V. Atratores sem redução de ruído estão em cinza e depois da redução de ruído estão em preto.

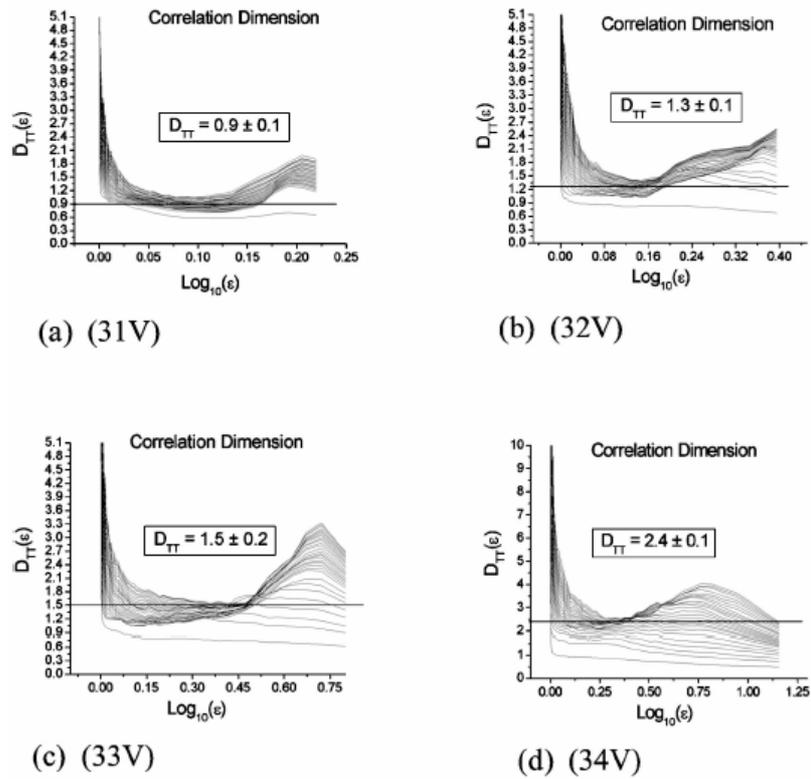


Figura 1.8: Dimensão de correlação para (a) 31 V, (b) 32 V, (c) 33 V e (d) 34 V.

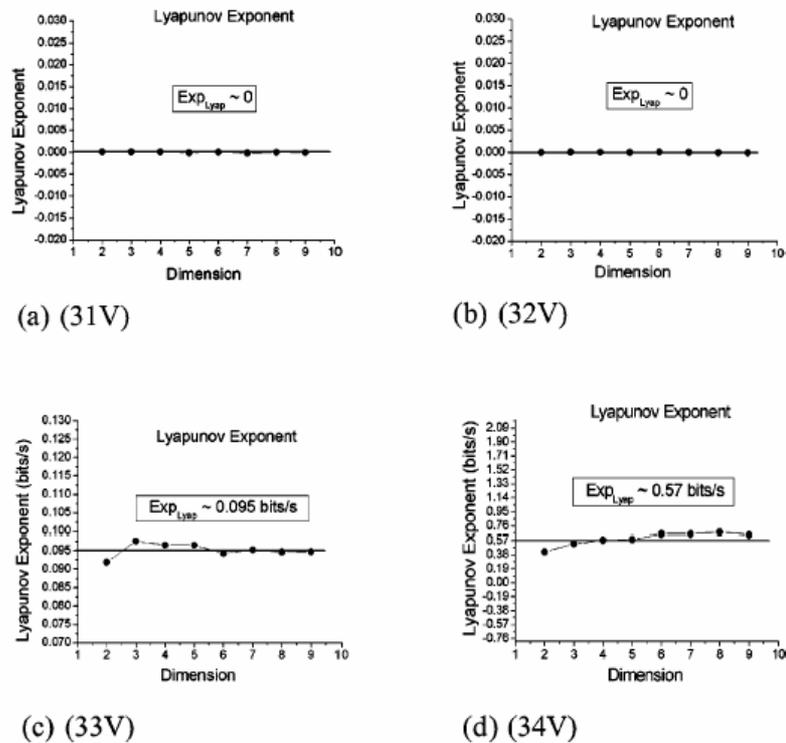


Figura 1.9: Expoentes de Lyapunov em função da dimensão de imersão para (a) 31 V, (b) 32 V, (c) 33 V e (d) 34 V.

As figuras 1.11, 1.12 e 1.13 apresentam os cinco atratores reconstruídos seguido das transformadas de Fourier das séries temporais antes e depois da redução de ruído. As transformadas de Fourier nos permitem identificar as frequências fundamentais das séries temporais. As frequências fundamentais encontradas foram: 315,2 Hz, 156,9 Hz, 76,9 Hz e 152,3 Hz para os quatro atratores periódicos mostrados nestas figuras. Estas frequências correspondem ao inverso do período do atrator. Por exemplo, o ciclo de período-2 tem por volta de duas vezes o período do ciclo de período-1. Estas frequências mantêm uma relação aproximada de 1:1/2:1/4:1/2. Os outros picos do espectro de Fourier correspondem aos múltiplos das frequências fundamentais.

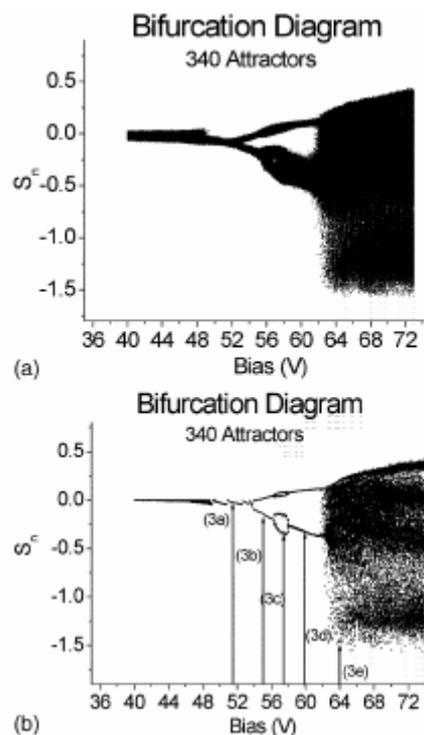


Figura 1.10: Diagramas de bifurcação: (a) sem redução de ruído e (b) com redução de ruído. As setas indicam os atratores das figuras 1.11-13. S_n significa os mínimos da corrente na respectiva série temporal.

Um regime possivelmente caótico foi observado na figura 1.13. Observamos que o espectro de frequências para esta série temporal tem uma mudança pouco significativa em relação à série antes e depois da redução de ruído. A transformada de Fourier para esta série

temporal não apresenta uma frequência característica. O espectro de frequências é todo preenchido, característico de comportamento caótico.

Através desses estudos, foram observados que as LFO's da corrente elétrica em amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE são fenômenos com alto grau de não-linearidade. A primeira evidência da não-linearidade surge nas curvas $I(V)$ dessas amostras, que apresentam regiões de NNDC (condutividade diferencial negativa tipo- N). Esta não-linearidade surge dos processos de $g-r$ do portador de carga que são dependentes do campo elétrico (Capítulo 3). Outra evidência de não-linearidade foi apresentada através das oscilações de corrente elétrica de baixa frequência (LFO). Vimos que o comportamento dessas oscilações segue uma rota de bifurcação culminando num regime caótico. Esta rota foi caracterizada através de métodos de dinâmica não-linear e diagramas de bifurcação foram encontrados.

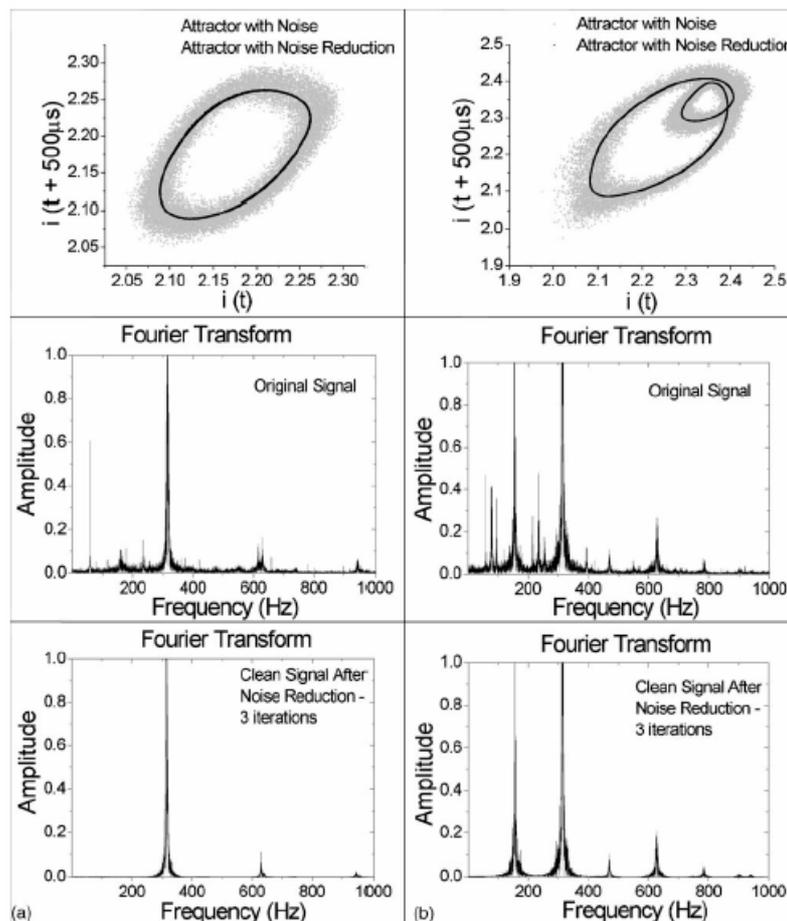


Figura 1.11: Atratores para 51,6 V de tensão na amostra em (a) e para 55,0 V em (b). Os atratores sem redução de ruído estão representados em cinza e após redução de ruído estão representados em preto, seguidos pelas respectivas transformadas de Fourier.

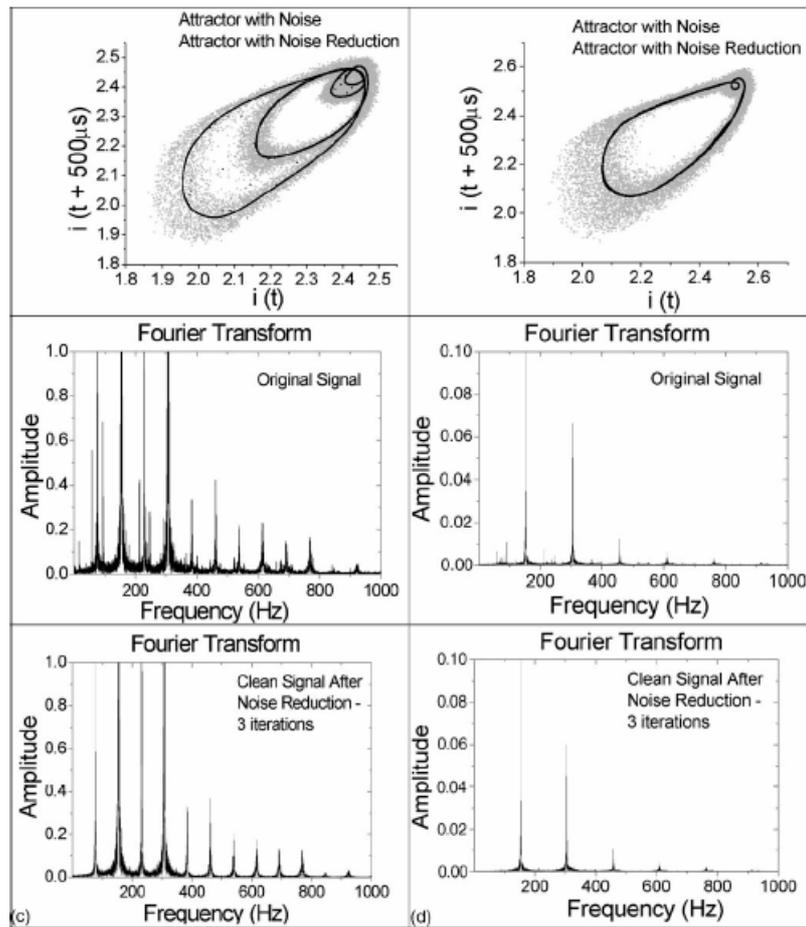


Figura 1.12: Atratores para 57,5 V em (c) e para 60,0 V em (d). Os atratores sem redução de ruído estão representados em cinza e após redução de ruído estão representados em preto, seguidos pelas respectivas transformadas de Fourier.

Os resultados da literatura apresentados neste capítulo, sobre a formação de domínios de campo elétrico de baixas velocidades e oscilações de corrente elétrica em amostras de GaAs SI crescidas por LEC e MBE, supõem que a formação desses domínios é devido à formação de regiões de NDC por causa do processo de recombinação assistida por campo elétrico e o principal defeito responsável seria o EL2 com seu estado excitado $EL2^+$. Outra conclusão é que estes domínios são os responsáveis pelas oscilações de corrente elétrica de baixa frequência presentes nessas amostras.

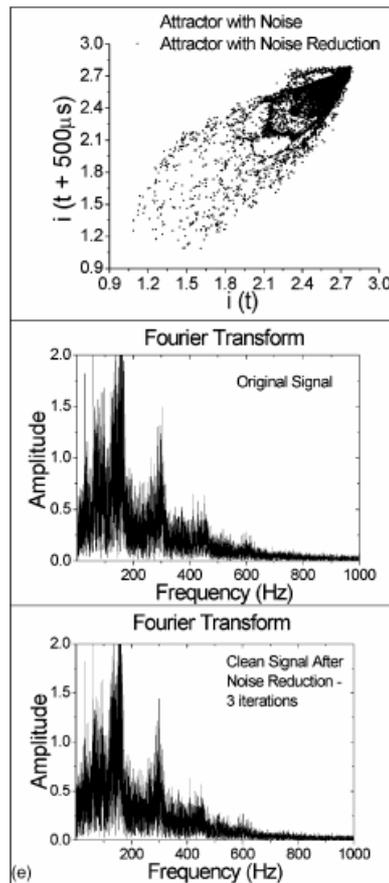


Figura 1.13: Atrator para 64,0 V. O atrator sem redução de ruído está representado em cinza e após redução de ruído estão representados em preto, seguidos pelas respectivas transformadas de Fourier.

Nas amostras de GaAs crescidas por MBE a baixas temperaturas, a densidade de defeitos profundos é da ordem de 10^{19} cm^{-3} [17]. Estas amostras apresentam comportamentos não-lineares nas curvas $I(V)$ (regiões de NDC) que podem ser explicadas através dos processos de geração-recombinação (g-r) do portador de carga entre o defeito e a banda de condução (Capítulo 3). Baseado em resultados experimentais e teóricos, provavelmente o principal fenômeno para a ocorrência de regiões de NDC nessas amostras é a captura assistida por campo elétrico (*field enhanced trapping*), um processo de recombinação do portador de carga. Foram observadas também nessas amostras oscilações de corrente elétrica de baixa frequência. Com os resultados obtidos para essas amostras e comparados com os resultados da literatura, podemos inferir que nessas amostras também existem domínios de campo elétrico de baixas velocidades que atravessam a amostra de um contato para outro gerando oscilações de corrente elétrica. Os

resultados são compatíveis com os resultados da literatura em relação ao campo crítico para a formação de domínios de baixa velocidade, em torno de 1 kV/cm. Numa estimativa, a velocidade de propagação dos domínios nas amostras é em torno de 35 cm/s [9(a)] e 63 cm/s [9(b)], que também são compatíveis com as velocidades dos domínios medidas na literatura.

No capítulo seguinte, iremos estudar um modelo para interpretar as oscilações de corrente elétrica em semicondutores. Este modelo é geral no sentido de não especificar o tipo de semicondutor que está sendo modelado e é baseado nos processos de g-r do portador de carga no material.

Referências do Capítulo 1

- [1] D. C. Northrop, P. R. Thornton and K. E. Trezise, *Solid State Electron.* **7**, 17 (1964).
- [2] H. K. Sacks and A. G. Milnes, *Int. J. Electronics* **28**, 565 (1970).
- [3] G. N. Maracas, W. Porod, D. A. Johnson, D. K. Ferry and H. Goronkin, *Physica B* **134**, 276 (1985).
- [4] W. Knap, M. Jezewski, J. Lusakowski and W. Kuszko, *Solid State Electron.* **31**, 813 (1988).
- [5] J. Pozela, A. Tamasevicius and J. Ulbikas, *Solid State Electron.* **31**, 805 (1988).
- [6] G. N. Maracas, D. A. Johnson, R. A. Puechner, J. L. Edwards S. Myhajlemko, H. Goronkin, and R. Tsui, *Solid State Electron.* **32**, 1887 (1989).
- [7] K. Karpierz, J. Lusakowski and W. Knap, *Acta Phys. Pol.* **A75**, 207 (1989).
- [8] V. A. Samuilov, *Nonlinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors and Devices*, F.-J Niedernostheide, ed., p. 220, Springer, Berlin (1995).
- [9] (a) R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, H. A. Albuquerque, W. N. Rodrigues and M. V. B. Moreira, *Chaos* **13**, 457 (2003); (b) R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro and W. N. Rodrigues, *Physica D* **194**, 166 (2004).
- [10] M. Kiyama, M. Tatsumi and M. Yamada, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 012102 (2005).
- [11] M. Kiyama, M. Yamada and M. Tatsumi, *Eur. Phys. J.: Appl. Phys.* **27**, 185 (2004).
- [12] F. Piazza, P. C. M. Christianen and J. C. Maan, *Phys. Rev. B* **55**, 15591 (1997).
- [13] F. Piazza, P. C. M. Christianen and J. C. Maan, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1909 (1996).
- [14] M. Kaminska, J. M. Parsey, J. Lagowski and H. C. Gatos, *Appl. Phys. Lett.* **41**, 989 (1982).
- [15] J. B. Gunn, *Solid State Commun.* **1**, 88 (1963).

- [16] A. Barraud, C. R. Acad. Sci. **256**, 3632 (1963).
- [17] K. Krambrock, M. Linde, J. M. Spaeth, D. C. Look, D. Bliss and W. Walukiewics, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 1037 (1992).
- [18] A. Neumann, *J. Appl. Phys.* **90**, 1 (2001).
- [19] B. Willing and J. C. Mann, *Phys. Rev. B* **49**, 13995 (1994).
- [20] G. N. Maracas, D. A. Johnson and H. Goronkin, *Appl. Phys. Lett.* **46**, 305 (1985).
- [21] K. Seeger, *Semiconductor Physics – An Introduction*, 4th ed, Springer, Berlin, 1989.
- [22] H. Rajbenbach, J. M. Verdiell and J. P. Huignard, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 541 (1988).
- [23] B. K. Ridley and P. H. Wisbey, *Brit. J. Appl. Phys.* **18**, 761 (1967).
- [24] B. Willing and J. C. Mann, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 7493 (1996).
- [25] K. Aoki, *Nonlinear dynamics and Chaos in Semiconductors*, Series in Condensed Matter Physics, Institute of Physics Publishing, Bristol, 2001.
- [26] E. Schöll, *Nonlinear Spatio-Temporal Dynamics and Chaos in Semiconductors*, Cambridge Nonlinear Science Series 10, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [27] A. W. Smith, *Solid State Electron.* **8**, 833 (1965).
- [28] H. D. I. Abarbanel, R. Brown, J. J. Sidorowich, and L. Sh. Tsimring, *Rev. Mod. Phys.* **65** 1331 (1993).
- [29] R. Hegger, H. Kantz and T. Schreiber, *Chaos* **9** 413 (1999).
- [30] J.-P. Eckmann and D. Ruelle, *Rev. Mod. Phys.* **57** 617 (1985).
- [31] R. C. Hilborn, *Chaos and Nonlinear Dynamics: An Introduction for Scientists and Engineers*, Oxford University Press, Oxford, 1994.
- [32] N. Fiedle-Ferrara, C. P. C. do Prado, *Caos: Uma Introdução*, Editora Edgard Blücher Ltda., 1994.
- [33] A. Neumann, B. Willing, A. G. M. Jansen, P. Winder and R. Deltour, *J. Appl. Phys.* **78**, 5186 (1995).
- [34] <http://www.mpipks-dresden.mpg.de/~tisean>.

CAPÍTULO 2 – UM MODELO DE EQUAÇÕES DE TAXAS PARA OS PROCESSOS DE GERAÇÃO E RECOMBINAÇÃO EM SEMICONDUTORES

Neste capítulo iremos estudar e propor uma modificação em um modelo de equações de taxas para os processos de geração e recombinação do portador de carga em um material semiconductor. Este modelo se presta a explicar as oscilações espontâneas em semicondutores. É importante esclarecer que este modelo é um conjunto de equações diferenciais acopladas de primeira ordem no tempo, não considerando as variações espaciais das variáveis. Primeiramente, a partir do modelo padrão, iremos aplicar técnicas de análise de dinâmica não-linear nas séries temporais de campo elétrico geradas pelo modelo. Após este estudo, modificaremos este modelo numa primeira tentativa na sua adequação à realidade das amostras de GaAs semi-isolantes (SI) crescidas por epitaxia de feixe molecular (MBE) e aos dados experimentais. Com essa modificação obtivemos resultados que reproduziram alguns aspectos dos resultados experimentais que não apareciam em modelos anteriores, indicando que estamos seguindo em um caminho adequado.

2.1 – Transporte Elétrico em Semicondutores

A teoria de transporte elétrico em semicondutores descreve como os portadores de cargas se movem sob a influência de campos elétrico e magnético externos. Assim, esta teoria pode ser usada para se construir uma explicação quantitativa da condutividade diferencial negativa. Existem várias teorias nas quais o fenômeno de transporte elétrico em semicondutores pode ser modelado, entre elas são:

- 1- Equações diferenciais clássicas para as densidades médias de portadores e campos;
- 2- Equações de balanço semiclássicas para o número médio de partículas, energia média e momento dos portadores;
- 3- Equação de Boltzmann para as funções distribuição do momento e posição dos portadores;
- 4- Teoria de transporte quântico baseado na equação de Neumann para a matriz densidade;

5- Simulação Monte Carlo da dinâmica de portadores individuais.

Neste trabalho, utilizamos a aproximação 1, observando os limites de validade na qual negligenciamos flutuações estatísticas como também efeitos quânticos. Todas as alternativas são não-lineares para regime de campo elétrico alto onde instabilidades e condutividade diferencial negativa ocorrem. Para as demais teorias recomendamos a referência [1,2] para um maior detalhamento.

2.1.1 – Equações Clássicas para Semicondutores

Estas equações são dadas pelas equações da continuidade para as densidades de elétrons na banda de condução (n), de buracos na banda de valência (p) e de elétrons capturados nos vários níveis de impureza ($n_{t1}, n_{t2}, \dots, n_{tM}$: escritos numa notação compacta \vec{n}_t):

$$\dot{n} - \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j}_n = f_n(n, p, \vec{n}_t, \vec{E}) \quad (2.1)$$

$$\dot{p} + \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j}_p = f_p(n, p, \vec{n}_t, \vec{E}) \quad (2.2)$$

$$\dot{\vec{n}}_t = f_t(n, p, \vec{n}_t, \vec{E}) \quad (2.3)$$

Elas são suplementadas pelas equações de Maxwell para o campo elétrico \vec{E} e campo magnético \vec{H} :

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{4\pi e}{\epsilon_S} \left(N_D^* - n - \sum_{i=1}^M n_{ti} + p \right) \quad (2.4)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{H}} \quad (2.5)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.6)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\epsilon_S}{c} \dot{\vec{E}} + \frac{4\pi}{c} (\vec{j}_n + \vec{j}_p) \quad (2.7)$$

em unidades gaussianas e admitindo um material homogêneo, isotrópico, não magnético caracterizado por uma constante dielétrica ϵ_S . Os pontos referem-se a derivadas em relação ao tempo, $e > 0$ é a carga elétrica elementar e $N_D^* := N_D - N_A$ é a concentração efetiva de doadores, onde N_D e N_A são as concentrações de doadores e aceitadores, respectivamente. As densidades de corrente de elétrons e buracos, \vec{j}_n e \vec{j}_p , respectivamente, são as componentes de “drift” e

difusão (assumindo temperaturas espacialmente homogêneas e negligenciando correntes eletrotérmicas, bem como correntes de transporte magnético):

$$\vec{j}_n = e\mu_n n \vec{E} + eD_n \nabla n \quad (2.8)$$

$$\vec{j}_p = e\mu_p p \vec{E} - eD_p \nabla p \quad (2.9)$$

onde μ_n e μ_p são as mobilidades de elétrons e buracos, e D_n e D_p são as constantes de difusão para elétrons e buracos. O sinal negativo em (2.1) resulta do fato de que a densidade de corrente de elétrons \vec{j}_n é oposta ao fluxo de portadores por causa da carga negativa dos elétrons.

As funções f_n, f_p e $f_i(f_{i1}, f_{i2}, \dots, f_{iM})$ em (2.1-3) são as taxas de geração e recombinação; elas dependem não-linearmente das densidades dos portadores envolvidas nos respectivos processos de g-r, e, através dos coeficientes de g-r, do campo elétrico. Como os processos de g-r conservam o número total de portadores,

$$f_n - f_p + \sum_{i=1}^M f_i = 0 \quad (2.10)$$

a equação (2.10) é sempre válida. As equações (2.1 – 2.9) representam equações diferenciais parciais não-lineares que devem ser resolvidas para condições iniciais e de contorno adequadas.

2.1.2 – Semicondutores como Sistemas fora do equilíbrio Termodinâmico

Para que um semicondutor apresente comportamentos não-lineares, devemos estudá-lo como um sistema fora do equilíbrio termodinâmico. No equilíbrio termodinâmico, isto é, na ausência de campos elétrico e magnético externos ou excitações óticas, o semicondutor caracteriza-se: (a) pela uniformidade entre a distribuição de defeitos e cargas livres; (b) pelo equilíbrio térmico – mesma temperatura entre os portadores de cargas (elétrons e buracos) e a rede cristalográfica (fônons); (c) pelo equilíbrio químico – um potencial eletroquímico uniforme dos portadores, nível de Fermi E_F . Fora do equilíbrio termodinâmico, o semicondutor pode se apresentar nas seguintes formas:

- i. há uma distribuição espacial da temperatura no semicondutor;
- ii. há uma dependência espacial para o nível de Fermi;
- iii. a temperatura dos portadores livres e da rede é diferente;
- iv. o nível de Fermi se divide em *quase* níveis de Fermi distintos para elétrons e buracos.

Ou, numa combinação destas opções.

Ocorrendo os casos (i) ou (ii) para gradientes de temperatura não muito altos, o sistema pode ser estudado como sendo próximo ao equilíbrio. O caso (i) se aplica ao aquecimento local devido ao efeito Joule e, o caso (ii) se aplica aos casos de injeção de corrente, que resulta em alta corrente de difusão.

O caso (iii) ocorre quando os portadores recebem energia cinética, do campo elétrico ou por excitação óptica, mais rápido do que a transferência desta energia para a rede. A energia média dos elétrons, ou buracos, é então maior do que o valor de equilíbrio: $(3/2)kT_L$, então define-se a temperatura do elétron $T_e > T_L$ como:

$$\langle E_e \rangle = \frac{3}{2}kT_e. \quad (2.11)$$

O caso (iv) ocorre quando os elétrons e buracos não estão em equilíbrio entre si, mas estão em quase equilíbrio com as bandas. Desta forma temos $E_{Fn} \neq E_{Fp}$ (*Quase-energia de Fermi* para elétrons e buracos respectivamente) e, conseqüentemente, temos $T_e \neq T_h$ (temperatura de elétrons livres e temperatura de buracos livres).

O caso (iv) é a condição de não-equilíbrio fundamental para as instabilidades de geração-recombinação que iremos tratar neste trabalho, apesar dele estar acoplado em muitas situações com os casos (iii) e (ii). Se estados de impurezas nas amostras semicondutoras estiverem envolvidos nos processos de g-r, um *quase-nível* de Fermi deverá também ser associado a cada nível de impurezas.

Assim, os processos de geração e recombinação de elétrons e buracos em amostras semicondutoras que geram as suas instabilidades, caso estas estejam fora do equilíbrio termodinâmico, são os pontos de partida para entendermos os fenômenos não-lineares e caóticos apresentados nestas amostras. Na seção seguinte aborda-se os processos de g-r.

2.2 – Processos de Geração e Recombinação em Semicondutores

Os processos mais comuns de recombinação de portadores envolvendo a banda de condução, de valência, e níveis de impurezas estão representados esquematicamente na figura 2.1.

As setas representam transições de elétrons; nos casos em que são envolvidos buracos ($T_2^S, B_2, T_2, T_3, T_4$) a transição deles é oposta às setas. Os três primeiros processos são processos de um único elétron: recombinação banda-banda (B^S), e captura banda-defeito (T_1^S, T_2^S). Os processos contrários são geração banda-banda (Y^S) ativados por processos óticos, térmicos ou assistidos por campo e emissão de elétrons capturados (X_1^S) ou buracos (X_2^S). Os outros são processos de 2 elétrons: recombinação Auger envolvendo duas bandas (B_1, B_2), ou uma banda e um nível de captura (T_1, T_2, T_3, T_4), e os contrários, chamados de ionização por impacto ($Y_1, Y_2; X_1, X_2, X_3, X_4$) [3]. As taxas de geração e recombinação para os processos da figura 2.1 podem ser inferidas em forma de equação de reação como mostra a tabela 2.1.

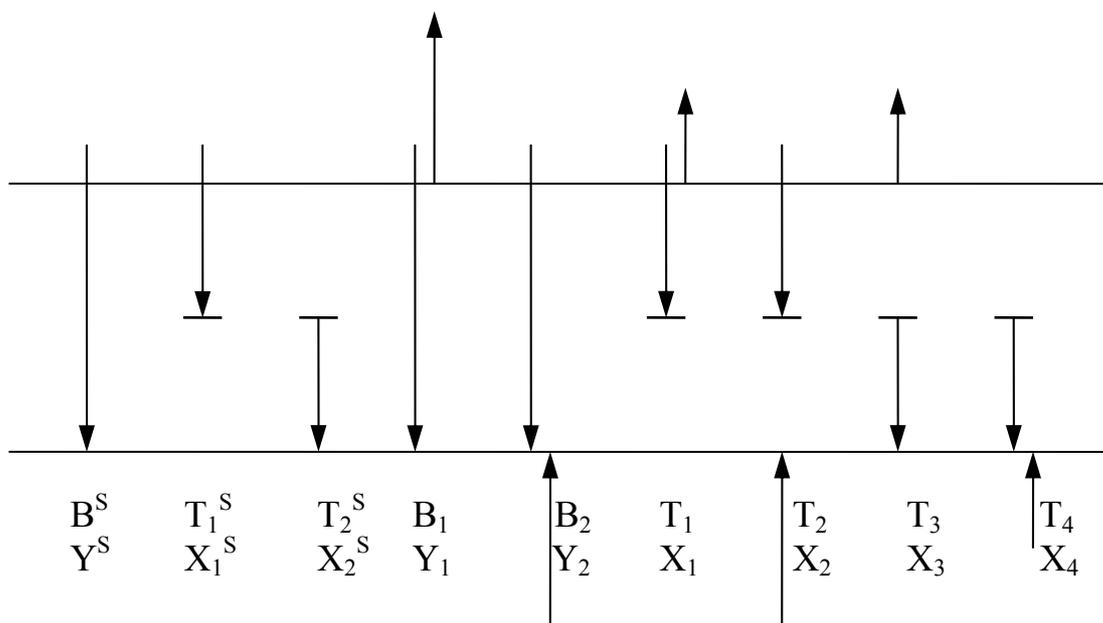


Figura 2.1: Processos de geração e recombinação em semicondutores. As setas representam transições que envolvem elétrons. Os símbolos B^S, T_1^S, T_2^S representam processos envolvendo 1 elétron e os símbolos $B_1, B_2, T_1 \rightarrow T_4$ processos envolvendo 2 elétrons. Os símbolos citados se referem a processos de recombinação e os símbolos correspondentes (linha de baixo) são os coeficientes de geração.

As taxas de geração e recombinação f_n, f_p e $f_i(f_{i1}, f_{i2}, \dots, f_{iM})$ introduzidas nas equações da continuidade (2.1-3) incluem os vários termos da tabela 2.1. Eles são não-lineares nas concentrações dos portadores. Somente se as concentrações de portadores estiverem próximas dos seus valores de equilíbrio n_0, p_0, n_{i0}, p_{i0} , as equações de taxas podem ser linearizadas em

torno do equilíbrio, e uma constante chamada *tempo de vida* (τ) de elétrons (τ_n) ou buracos (τ_p) pode ser definida por:

$$\delta \dot{n} = -\frac{\delta n}{\tau_n}, \quad \delta \dot{p} = -\frac{\delta p}{\tau_p} \quad (2.12)$$

onde $\delta n := n - n_0$, $\delta p := p - p_0$. Entretanto, se o semiconductor está fora do equilíbrio termodinâmico como no caso (iv) da seção 2.1.2, as não-linearidades das taxas de g-r são essenciais, e o conceito de tempo de vida não é útil. Este caso se aplica às instabilidades de g-r que serão abordados neste capítulo.

Tabela 2.1: O subscrito t se refere a portadores de carga capturados em defeitos. Os coeficientes B^S e Y^S se referem à transição banda-banda, que no equilíbrio se igualam e, fora do equilíbrio, a reação de geração é favorecida, quando a excitação óptica possui energia maior ou igual a do *gap* do semiconductor.

Coeficiente de recombinação / geração	Equação de balanço de cargas	Taxas de recombinação / geração
B^S/Y^S	$e + h \rightarrow \gamma$ (fóton)	$B^S_{np} \text{ --- } Y^S$
T_1^S/X_1^S	$e + h_t \rightleftharpoons e_t$	$T_1^S_{np_t} \text{ --- } X_1^S_{n_t}$
T_2^S/X_2^S	$h + e_t \rightleftharpoons h_t$	$T_2^S_{pn_t} \text{ --- } X_2^S_{p_t}$
B_1/Y_1	$2e + h \rightleftharpoons e$	$B_{1n^2p} \text{ --- } Y_{1n}$
B_2/Y_2	$2h + e \rightleftharpoons h$	$B_{2p^2n} \text{ --- } Y_{2p}$
T_1/X_1	$2e + h_t \rightleftharpoons e + e_t$	$T_{1n^2p} \text{ --- } X_{1nn_t}$
T_2/X_2	$e + h + h_t \rightleftharpoons h + e_t$	$T_{2npp_t} \text{ --- } X_{2pn_t}$
T_3/X_3	$e + h + e_t \rightleftharpoons e + h_t$	$T_{3npp_t} \text{ --- } X_{3np_t}$
T_4/X_4	$2h + e_t \rightleftharpoons h + h_t$	$T_{4p^2n_t} \text{ --- } X_{4pp_t}$

Além disso, os coeficientes de g-r dependem, em geral, do campo elétrico E . Esta dependência é particularmente pronunciada no caso dos coeficientes de ionização por impacto $Y_1, Y_2, X_1, X_2, X_3, X_4$. A dependência mais simples é dada pelo modelo de Shockley [4]:

$$Y_1, Y_2; X_1, X_2, X_3, X_4 \sim \exp[-E_i/(e \lambda E)]$$

onde E_i é uma energia de ionização limite característica e λ é o livre caminho médio dos portadores.

2.3 – Equações de Taxas para os Processos de Geração e Recombinação

Nesta seção veremos um mecanismo de geração-recombinação que dá origem a três estados estacionários homogêneos (dois dos quais são estáveis) em um certo intervalo de campo elétrico e parâmetros do material. Isto resulta numa relação SNDC para a densidade de corrente e campo elétrico. A ionização por impacto torna-se um processo essencial para este fenômeno.

2.3.1 – Modelo para um único portador

Consideraremos um modelo onde é envolvido somente um tipo de portador (elétrons ou buracos). Neste trabalho, iremos considerar semicondutores do tipo- n . Assim, todas as fórmulas são dadas para o caso de elétrons, mas a extensão para o caso de um semicondutor tipo- p não apresenta dificuldades, observando que as concentrações de elétrons e de doadores devem ser trocadas pelas concentrações de buracos e aceitadores e trocando as constantes de geração-recombinação.

Podemos assumir que o semicondutor tipo- n tem N_D doadores, parcialmente compensados com N_A aceitadores ($< N_D$). Para baixas temperaturas podemos desprezar os processos de g-r envolvendo a banda de valência. Também podemos supor que os aceitadores estão todos ocupados, assim não entram explicitamente nos processos de g-r. Os elétrons podem ser capturados pelas impurezas da amostra: um átomo doador, ou – para altas temperaturas onde todos doadores estão ionizados termicamente – por um defeito profundo. Incluímos também a possibilidade de um elétron ser capturado pelo estado fundamental do defeito ou por um estado excitado deste.

As soluções espacialmente homogêneas das equações de transporte (2.1-9) tornam n e n_{ii} independentes da posição e $\vec{E} = E_0 \hat{e}_z = (V/L) \hat{e}_z$, onde E_0 é o campo elétrico aplicado na amostra ao longo do eixo Z , V é a voltagem aplicada na amostra e L é o comprimento da amostra. Assim, a partir de (2.8), as equações de transporte são reduzidas a:

$$j_0 = e\mu_n n(E_0)E_0 \quad (2.13)$$

Supondo a independência da mobilidade pelo campo elétrico no intervalo de campo elétrico usado. A equação de Maxwell (2.4) reduz à condição de neutralidade local,

$$N_D^* - n - \sum_{i=1}^M n_{ii} = 0 \quad (2.14)$$

onde $N_D^* := N_D - N_A$ é a densidade de doadores efetiva. De (2.14) uma das densidades de elétrons capturados, n_{tM} , pode ser eliminada em (2.1-3). Então, teremos as equações de taxa para os processos de g-r:

$$\dot{n} = g_0(n, n_{t1}, \dots, n_{tM-1}, E_0) \quad (2.15)$$

$$\dot{n}_{ti} = g_i(n, n_{t1}, \dots, n_{tM-1}, E_0) \quad i = 1, \dots, M-1 \quad (2.16)$$

onde

$$g_\lambda(n, n_{t1}, \dots, n_{tM-1}, E_0) := f_{t\lambda} \left(n, n_{t1}, \dots, n_{tM-1}, n_{tM} = N_D^* - n - \sum_{i=1}^{M-1} n_{ti}, E_0 \right)$$

$$\lambda = 0, 1, \dots, M-1; t_0 \equiv n \quad (2.17)$$

Os estados estacionários homogêneos $n(E_0)$ são dados pela solução simultânea do sistema de M equações não-lineares:

$$0 = g_\lambda(n, n_{t1}, \dots, n_{tM-1}, E_0) \quad \lambda = 0, 1, \dots, M-1 \quad (2.18)$$

Logo, (2.13) representa a característica $j(E)$ da amostra.

No que se segue, iremos ilustrar esse procedimento para um caso específico de processo de geração-recombinação.

Um modelo de geração-recombinação com dois níveis de defeitos (o estado fundamental e o primeiro estado excitado) é mostrado na figura 2.2.

Segundo a figura 2.2, as equações de taxas (2.15-16) são dadas por:

$$\dot{n} = X_1^S n_{t2} - T_1^S n p_t + X_1^* n n_{t2} + X_1 n n_{t1} \quad (2.19)$$

$$\dot{n}_{t1} = -X^* n_{t1} + T^* n_{t2} - X_1 n n_{t1} \quad (2.20)$$

$$\dot{n}_{t2} = -\dot{n} - \dot{n}_{t1} \quad (2.21)$$

Eliminando p_t e n_{t2} pela condição de conservação de impurezas e neutralidade das cargas:

$$p_t + n_{t1} + n_{t2} = N_t, \quad n_{t1} + n_{t2} = N_D^* - n \quad (2.22)$$

obtemos duas equações de taxas para as duas variáveis independentes n e n_{t1} :

$$\dot{n} = a_0 + a_1 n + a_2 n_{t1} + a_3 n n_{t1} + a_4 n^2 \quad (2.23)$$

$$\dot{n}_{t1} = b_0 + b_1 n + b_2 n_{t1} + b_3 n n_{t1} \quad (2.24)$$

com

$$a_0 = X_1^S N_D^* \quad b_0 = T^* N_D^*$$

$$a_1 = X_1^* N_D^* - X_1^S - T_1^S (N_t - N_D^*) \quad b_1 = -T^*$$

$$\begin{aligned}
 a_2 &= -X_1^S & b_2 &= -(T^* + X^*) \\
 a_3 &= X_1 - X_1^* & b_3 &= -X_1 \\
 a_4 &= -(T_1^S + X_1^*) & & (2.25)
 \end{aligned}$$

No estado estacionário, $\dot{n} = 0; \dot{n}_{t1} = 0$, obtemos:

$$n_{t1} = \frac{T^*(N_D^* - n)}{T^* + X^* + X_1 n} \quad (2.26)$$

$$0 = P_3(n) = an^3 + bn^2 + cn + d \quad (2.27)$$

com

$$\begin{aligned}
 a &= -(T_1^S + X_1^*)X_1 \\
 b &= X_1^*X_1N_D^* - [X_1^S + T_1^S(N_t - N_D^*) + T^*]X_1 - X^*X_1^* - T_1^S(T^* + X^*) \\
 c &= (X_1^S + T^*)N_D^*X_1 + X^*N_D^*X_1^* - X_1^SX^* - T_1^S(N_t - N_D^*)(T^* + X^*) \\
 d &= X_1^SX^*N_D^* \quad (2.28)
 \end{aligned}$$

Assim, dependendo dos valores dos coeficientes podemos ter três valores reais, ou três valores físicos para n .

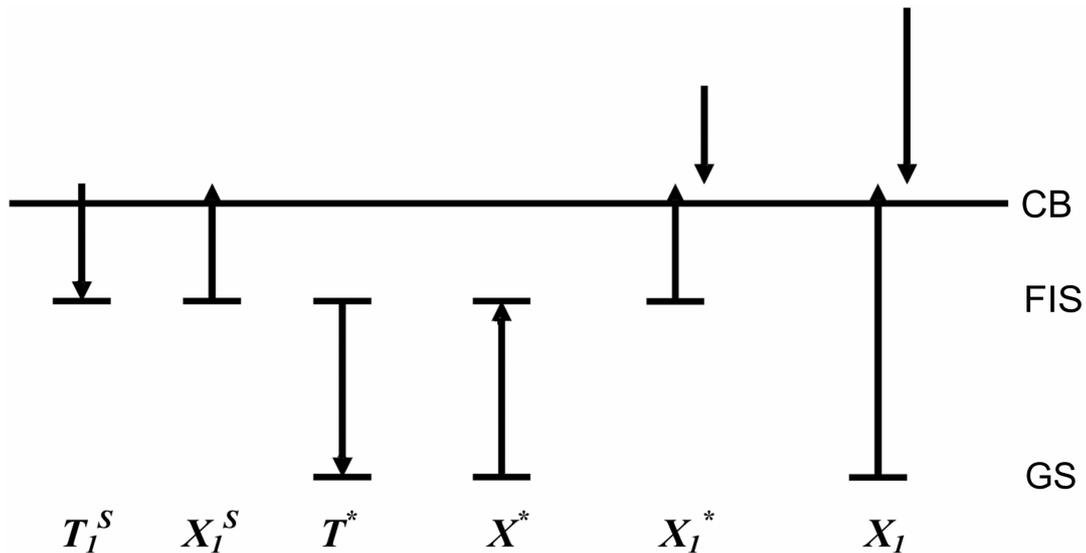


Figura 2.2: Modelo de geração-recombinação envolvendo a banda de condução (CB) e o defeito – estado fundamental (GS) e o primeiro estado excitado (FIS).

A ocorrência de uma curva tipo-S para $j(E)$ não está ligada a nenhuma dependência particular dos coeficientes de ionização por impacto com o campo elétrico, apesar de $X_1(E_0)$ e

$X_I^*(E_0)$ serem funções crescentes de E_0 . Como já foi mencionado, utilizamos o modelo de Shockley [3-5] para os coeficientes:

$$X_1 = X_1^0 \exp\left(-\frac{E_D}{e\lambda E_0}\right), \quad X_1^* = X_1^{*0} \exp\left(-\frac{E_D^*}{e\lambda E_0}\right) \quad (2.29)$$

onde E_D e E_D^* são as energias do estado fundamental e do nível excitado dos doadores, λ é o livre caminho médio dos elétrons e X_1^0, X_1^{*0} são constantes aproximadas.

2.4 – Oscilações Induzidas por Ionização por Impacto

Iremos estudar nesta seção um mecanismo de oscilações de campo elétrico e de densidade de corrente originadas na amostra [3,5]. Essas oscilações são devidas às instabilidades geradas pelos processos de geração-recombinação dos portadores de carga da amostra. A ionização por impacto é o fator principal para a ocorrência deste processo, uma vez que os coeficientes de ionização por impacto $Y_1, Y_2, X_1, X_2, X_3, X_4$ têm uma dependência não-linear com o campo elétrico. Para o estudo destas oscilações, iremos trabalhar com uma amostra com dois níveis de impurezas e a banda de condução. Além de uma das bandas, dois níveis de impurezas é o mínimo que um sistema deve ter para apresentar as oscilações espontâneas [3,5].

Antes de darmos continuidade, retornaremos às equações de transporte (2.1-3) e densidade de corrente (2.8) para um único portador majoritário, n , na amostra semicondutora tipo- n e definiremos algumas grandezas adimensionais [3,5] que serão utilizadas no restante deste capítulo. Para isto, normalizaremos todas as concentrações pela concentração efetiva de doadores: $N_D^* := N_D - N_A$,

$$v := \frac{n}{N_D^*} \quad (2.30)$$

$$\dot{\vec{v}}_t := \frac{\dot{\vec{n}}_t}{N_D^*} \equiv (v_{t1}, \dots, v_{tM}) \quad (2.31)$$

e introduziremos uma variável de tempo e espaço adimensionais:

$$\tau := \frac{t}{\tau_M} \quad (2.32)$$

$$\xi := \frac{\vec{x}}{L_D} \quad (2.33)$$

onde,

$$\tau_M := \frac{\varepsilon_S}{4\pi e \mu_0 N_D^*} \quad (2.34)$$

é o tempo efetivo de relaxação-dielétrica, e

$$L_D := (D_0 \tau_M)^{1/2} \quad (2.35)$$

é o comprimento efetivo de Debye. Os termos D_0 , μ_0 e ε_S são respectivamente, a constante de difusão e mobilidade para campos baixos, e constante dielétrica. Usando a relação de Einstein: $eD_n = \mu_n kT$, definimos o campo elétrico adimensional $\vec{\varepsilon}$ como,

$$\vec{\varepsilon} := \left(\frac{\mu_0 L_D}{D_0} \right) \vec{E} = \left(\frac{e L_D}{kT} \right) \vec{E} \quad (2.36)$$

Com estas definições, as equações de transporte (2.1-3) para as concentrações de elétrons livres e capturados na forma adimensional são:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \nu - \nabla \cdot (\vec{\varepsilon} \nu + \nabla \nu) = \varphi_0(\nu, \vec{\nu}_t, \varepsilon) \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \vec{\nu}_t = \vec{\varphi}_t(\nu, \vec{\nu}_t, \varepsilon) \quad (2.38)$$

supondo que $\mu_n = \mu_0$, $D_n = D_0$, sejam independentes do campo. As concentrações e o campo estão acoplados pela equação de Maxwell para a densidade de cargas (2.4) adimensional,

$$\nabla \cdot \vec{\varepsilon} = 1 - \nu - \sum_{i=1}^M \nu_{ti} \quad (2.39)$$

$\varphi_0, \vec{\varphi}_t$ são as taxas de geração e recombinação. Estas taxas dependem implicitamente do campo elétrico $\vec{\varepsilon}$ através dos coeficientes de ionização por impacto. Reescrevendo a densidade de corrente para os elétrons j_n , equação (2.8), de maneira mais completa, onde introduzimos a corrente de deslocamento e a velocidade de *drift* $V(\varepsilon)$ [3,5],

$$\vec{j} = \nu \vec{V}(\varepsilon) + D(\varepsilon) \nabla \nu + \frac{\partial \vec{\varepsilon}}{\partial \tau} \quad (2.40)$$

Assim, para o caso de dois níveis de impurezas, as equações (2.37-40), podem ser reduzidas a um sistema de três equações diferenciais ordinárias não-lineares. Supondo um campo elétrico espacialmente homogêneo temos, a partir de (2.39),

$$0 = 1 - \nu - \nu_{t1} - \nu_{t2} \quad (2.41)$$

Supondo também uma homogeneidade espacial dos portadores de cargas, temos de (2.37-38-40) que,

$$\dot{\nu} = \psi_0(\nu, \nu_{t1}, \varepsilon) \quad (2.42)$$

$$\dot{\nu}_{t1} = \psi_1(\nu, \nu_{t1}, \varepsilon) \quad (2.43)$$

$$\dot{\varepsilon} = j - \nu W(\varepsilon) \quad (2.44)$$

onde as taxas de geração-recombinação são:

$$\psi_0(\nu, \nu_{t1}, \varepsilon) := \varphi_0(\nu, \nu_{t1}, \nu_{t2} = 1 - \nu - \nu_{t1}, \varepsilon) \quad (2.45)$$

$$\psi_1(\nu, \nu_{t1}, \varepsilon) := \varphi_{t1}(\nu, \nu_{t1}, \nu_{t2} = 1 - \nu - \nu_{t1}, \varepsilon) \quad (2.46)$$

Note que ν_{t2} é agora uma variável dependente das demais concentrações.

Para uma densidade de corrente independente do tempo, (2.42-44) representa um sistema dinâmico autônomo, independe explicitamente do tempo e o estado estacionário é determinado por:

$$\psi_0(\nu, \nu_{t1}, \varepsilon_0) = \psi_1(\nu, \nu_{t1}, \varepsilon_0) = 0 \quad (2.47)$$

e

$$j = \nu W(\varepsilon_0) \quad (2.48)$$

A equação (2.48) representa a curva característica $j(\varepsilon)$ da amostra.

Para o sistema de dois níveis de impurezas (estado fundamental e o primeiro estado excitado) estudados na seção 2.3., reconstruiremos o espaço de fase das trajetórias do sistema não-linear (2.42-44). As taxas de g-r (2.45-46) serão dadas por:

$$\psi_0 / \tau_M = X_1 N_D^* \nu \nu_{t1} + (X_1^S + X_1^* N_D^* \nu) \nu_{t2} - T_1^S N_D^* \left(\frac{N_A}{N_D^*} + \nu \right) \nu \quad (2.49)$$

$$\psi_1 / \tau_M = -(X^* + X_1 N_D^* \nu) \nu_{t1} + T^* \nu_{t2} \quad (2.50)$$

com $\nu_{t2} = 1 - \nu - \nu_{t1}$. Os coeficientes de ionização por impacto para os estados fundamental e excitado são dados pela formula de Shockley (2.29) [4,5],

$$X_1 = X_1^0 \exp(-6E_t / \varepsilon), \quad X_1^* = X_1^{*0} \exp(-1.5E_t / \varepsilon) \quad (2.51)$$

E_t é a energia do estado fundamental da impureza normalizada. Os outros coeficientes são aproximações independentes do campo. A velocidade de *drift* é dada pela forma empírica [6]:

$$V(\varepsilon) = \frac{(\arctan r_2 \varepsilon)}{r_2} \quad (2.52)$$

a qual cresce linearmente com o campo para pequenos ε e satura em $\nu(\varepsilon) = \pi / (2r_2)$ para grandes ε . Na equação (2.52) r_2 é um parâmetro de saturação adimensional dado por

$r_2 := (\pi\mu_0 kT)/(2v_S eL_D)$, onde μ_0 é a mobilidade para campos baixos e v_S é a velocidade de saturação em unidades físicas.

Integrando numericamente o sistema (2.42-44), utilizando o método Runge-Kutta de 4ª ordem, usando (2.49-52) e (2.48) no estado estacionário, para os valores numéricos da tabela 2.2 [3], obtemos a figura 2.3.

Tabela 2.2 – Parâmetros de g-r adimensionais usados na figura 2.3.

$T_I^S N_D^*$	T^*	X_I^S	X^*	$X_I^0 N_D^*$	$X_I^{*0} N_D^*$	E_t	N_A/N_D^*	r_2
$10^{-2}/\tau_M$	$10^{-5}/\tau_M$	$5 \times 10^{-6}/\tau_M$	$5 \times 10^{-6}/\tau_M$	$5 \times 10^{-4}/\tau_M$	$10^{-2}/\tau_M$	1	0.5	0.3

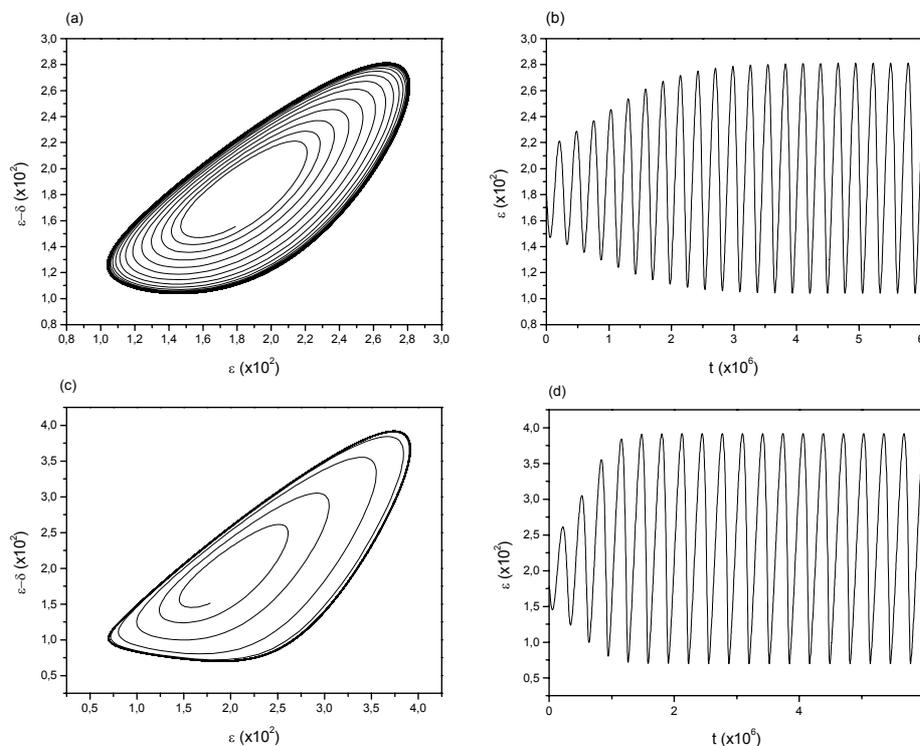


Figura 2.3: Ciclo limite e série temporal para: (a) e (b) $\varepsilon_0 = 180.0$, (c) e (d) $\varepsilon_0 = 190.0$. Os atratores foram reconstruídos usando o método do *delay*, onde $\delta = 10$. O campo elétrico ε está em unidades de $kTE_V/(eL_D)$ e o tempo em unidades de τ_M .

Observa-se na figura 2.3 as oscilações de ciclo limite para o campo elétrico normalizado ε . O parâmetro de controle é o campo elétrico estático ε_0 , relativo à característica $j(\varepsilon_0)$ do sistema, equação (2.48). Para os valores listados na tabela 2.2, encontramos somente oscilações de ciclo limite sem rota de bifurcação [3]. Os atratores foram reconstruídos utilizando o método

do atraso temporal (*delay*) na série do campo elétrico (ver Apêndice I para mais detalhes desta técnica de análise). Também podemos observar o transiente do campo elétrico, a partir das condições iniciais, antes de atingir o ciclo limite.

Mostramos acima que as equações de taxas para os processos de g-r do portador de carga em um semicondutor hipotético apresentam um comportamento oscilatório para uma faixa do campo elétrico estático ε_0 e para certos valores dos coeficientes de g-r. Mostraremos agora um estudo que realizamos neste modelo com o intuito de aplicar as técnicas de análise de dinâmica não-linear de dados experimentais nos dados gerados pela integração do sistema dado pelas equações (2.42-44). Para isto, reproduziremos a dinâmica deste sistema para certos valores do parâmetro de controle e dos coeficientes de g-r. Schöll [5] propôs este modelo com o intuito de fornecer uma pista teórica sobre a origem das oscilações de corrente observadas em amostras semicondutoras [7-9].

Reescreveremos o modelo para as variáveis normalizadas n , n_1 e ε , mantendo os fatores de normalização (2.30-35). Assim, o modelo [2] é escrito como:

$$\dot{n} = X_1^S n_2 - T_1^S n p_t + X_1 n n_1 + X_1^* n n_2, \quad (2.53)$$

$$\dot{n}_1 = T^* n_2 - X^* n_1 - X_1 n n_1, \quad (2.54)$$

$$\dot{\varepsilon} = J - nV(\varepsilon). \quad (2.55)$$

Uma curva J - ε característica do sistema é apresentada na figura 2.4. Observamos nesta curva uma condutividade diferencial negativa tipo-S (SNDC). Este modelo gera curvas J - ε estáticas tipo-S.

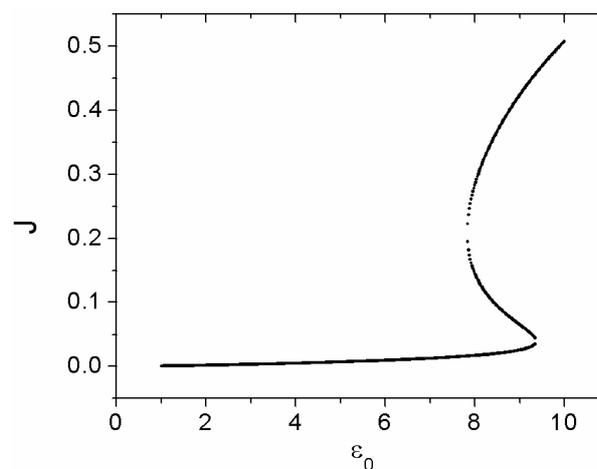


Figura 2.4: Curva característica para a densidade corrente em função do campo elétrico estático para o sistema (2.53-55) no estado estacionário. J está em unidades de $e\mu N_D^*$ e ε_0 em V/cm .

Os métodos de análise de dinâmica não-linear em sistemas físicos experimentais, como por exemplo, as análises realizadas nas medidas experimentais de corrente elétrica em amostras de GaAs descritas no capítulo 2 [9], são baseados nas séries temporais experimentais de alguma variável do sistema. Os procedimentos de análises de séries temporais experimentais funcionam bem em sistemas no qual não temos acesso direto às equações dinâmicas do sistema. Em geral, o primeiro procedimento na investigação de sistemas não-lineares experimentais é a reconstrução do atrator via as séries temporais experimentais aplicando a técnica dos *vetores de atraso temporal* [10] (ver apêndice I). Após este procedimento, é possível estimar a dimensão de correlação do atrator e os expoentes de Lyapunov. A dimensão de Kaplan-Yorke também pode ser estimada, pois é uma correlação entre os expoentes de Lyapunov. A presença de um atrator com dimensão fractal e um expoente de Lyapunov positivo são características de sistemas caóticos [11]. Por isto a importância de realizar estes cálculos. Devemos, entretanto, ter cuidado nestas análises, uma vez que a dinâmica de alguns sistemas é altamente sensível a efeitos estocásticos levando a uma falsa identificação da dinâmica caótica. Como exemplo, expoentes de Lyapunov positivos podem ocorrer mesmo para sistemas não-caóticos que estejam contaminados com ruído [12,13]. Assim, é necessário um baixo nível de ruído nas séries temporais experimentais para uma análise mais confiável. Em dados experimentais [9], foram obtidas séries temporais de corrente elétrica contaminadas com uma certa porcentagem de ruído, mesmo desenvolvendo um aparato experimental para a sua redução. Assim, técnicas de redução de ruído foram utilizadas nas séries temporais medidas para obter resultados das análises de dinâmica não-linear mais confiáveis. Uma outra maneira de evitar interpretações errôneas nas análises é descrever o sistema físico por um modelo de equações diferenciais não-lineares incluindo os processos mais relevantes de geração-recombinação dos portadores de carga do sistema real e aplicar nesse modelo as técnicas de análise de séries temporais não-lineares. Este procedimento é válido, uma vez que as séries temporais para as variáveis deste modelo são livres de ruídos, tornando as análises mais confiáveis.

Neste primeiro momento, iremos trabalhar com o modelo original [5] e gerar séries temporais de campo elétrico, ou seja, para a variável ε , e aplicar as técnicas de análises de séries temporais não-lineares (Apêndice I). Schöll [2,3,5] focou o estudo do modelo principalmente na análise de bifurcação em torno dos pontos fixos do sistema (2.53-55) e a dependência da matriz Jacobiana com o parâmetro de controle. Assim, iremos ampliar estes estudos, realizando cálculos baseados em análises de séries temporais não-lineares nas séries temporais do campo elétrico,

geradas pela integração numérica do sistema (2.53-55). Nós calculamos as dimensões de correlação e os expoentes de Lyapunov para os atratores em função do parâmetro de controle do sistema. Além de estarmos trabalhando com análises de dinâmica não-linear, este estudo pode ser visto como um teste da eficiência dos algoritmos de análises de séries temporais experimentais em séries provenientes de medidas elétricas em materiais semicondutores uma vez que, foram realizados estes cálculos em séries temporais experimentais [9] e, neste trabalho, em séries livres de efeitos externos como ruídos. Assim, podemos comparar os resultados obtidos neste estudo teórico com os resultados obtidos nos estudos experimentais de uma maneira qualitativa.

2.5 – Análise das Séries Temporais

Como já mencionado utilizamos o conjunto de equações nas variáveis normalizadas n , n_1 e ε , dado pelo sistema (2.53-55). Neste sistema de equações, a densidade de portadores no estado excitado, n_2 , foi eliminada segundo a condição da 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 de doadores efetivos e a densidade de aceitadores são representados por N_D^* e N_A , respectivamente. Os coeficientes X_1^S e T_1^S são os coeficientes de ionização térmica e captura, respectivamente (fig. 2.2). T^* e X^* são os coeficientes de transição do estado fundamental para o estado excitado e vice-versa, respectivamente. Os coeficientes X_1 e X_1^* são os coeficientes de geração via ionização por impacto do estado fundamental e excitado, respectivamente, os quais são dependentes do campo elétrico seguindo o modelo de Schockley, enquanto os demais são independentes do campo elétrico.

Integrando o sistema de equações (2.53-55) utilizando o método Runge-Kutta de 4º ordem, ajustando o parâmetro de controle ε_0 com os coeficientes de g-r adequados, a rota para o caos por duplicação de período encontrado por Schöll também foi observada por nós. A partir deste ponto, nós realizamos análises de dinâmica não-linear nas séries temporais de campo elétrico. As análises seguem o procedimento padrão de análises de séries temporais não-lineares, isto é, primeiramente reconstruímos o atrator do sistema no espaço de fase pelo método do vetor atraso temporal [10,12,13] na série temporal do campo elétrico; depois calculamos os expoentes de Lyapunov [14,15] e a partir deles, calculamos a dimensão de Kaplan-Yorke (D_{KY});

calculamos também a dimensão de correlação (D_C) [16,17] no espaço de fase (D_{CF}) e na seção de Poincaré (D_{CM}).

Os valores dos coeficientes de g-r usados para integrar o sistema (2.53-55) e os valores dos demais parâmetros encontram-se na tabela 2.3. Os coeficientes de ionização por impacto X_1 e X_1^* seguem a relação: $X_1 = X_1^0 \exp\left(-6.0E_t/\varepsilon\right)$ e $X_1^* = X_1^{*0} \exp\left(-1.5E_t/\varepsilon\right)$. A energia E_t é o

valor normalizado da energia da impureza no estado fundamental. A razão N_A/N_D^* é o fator de compensação. O parâmetro r_2 é um valor de saturação que está relacionado com a velocidade de

drift empírica [6] $V(\varepsilon)$ como: $V(\varepsilon) = \frac{\arctan\left(r_2/\varepsilon\right)}{r_2}$. Estes parâmetros e coeficientes

dependem do material semicondutor. Schöll [2,3,5] trabalhou com um conjunto de parâmetros para um material tipo-n de *gap* direto que apresenta uma condutividade diferencial negativa (NDC) tipo-S (fig. 2.4) e com doadores rasos a baixa temperatura.

Tabela 2.3 – Coeficientes de g-r e parâmetros para o sistema (2.53-55). Os coeficientes estão em unidades de τ_M [2,3,5].

T_1^S	T^*	X_1^S	X^*	X_1^0	X_1^{*0}	E_t	N_A / N_D^*	r_2
10^{-2}	10^{-5}	5×10^{-6}	5×10^{-6}	5×10^{-4}	10^{-2}	1	0.3	0.3

A figura 2.5 mostra as séries temporais do campo elétrico geradas pela integração numérica do sistema (2.53-55). A figura 2.6 mostra os atratores construídos a partir das variáveis do sistema (2.53-2.55). Optamos no presente estudo dar enfoque nas técnicas de análise via a série temporal de uma única variável e calcular os parâmetros de interesse via essa série. As figuras 2.7 a 2.9 mostram os atratores reconstruídos para seis valores do parâmetro de controle ε_0 : 102, 105, 105.3, 105.42, 105.5 e 105.9. A dimensão de correlação D_C para os atratores e o espectro dos expoentes de Lyapunov também são mostrados. A variável do eixo vertical é a mesma do eixo horizontal, mas atrasada de um valor constante que está em parênteses. Este valor foi obtido pelo algoritmo da informação mútua [10] (Apêndice I) que nos fornece o atraso temporal que devemos fazer na série temporal para a reconstrução do atrator. Podemos observar

nestas figuras que a rota de bifurcação para o regime caótico é por duplicação de período. De fato, um ciclo de período-1, fig. 2.7(a), é seguido por um ciclo de período-2, fig. 2.7(b), seguido por um ciclo de período-4, fig. 2.8(a), seguido por um ciclo de período-8, fig. 2.8(b), e por fim seguido por um regime caótico, fig. 2.9. Após o ciclo de período-8, existem ciclos de períodos maiores antes de atingir o regime caótico. Porém, o passo utilizado no parâmetro de controle não é suficiente para identificar tais ciclos e a diferença entre os máximos das séries temporais torna-se muito pequena dificultando a visualização de tais períodos nos atratores reconstruídos. Assim, não visualizamos ciclos de períodos superiores a 8 antes de atingir o regime caótico. A figura 2.10 mostra o diagrama de bifurcação. O eixo horizontal é o parâmetro de controle ε_0 e o eixo vertical é a seqüência de máximos das séries temporais de campo elétrico. Na tabela 2.4, apresentamos um resumo dos resultados obtidos, como o espectro dos expoentes de Lyapunov e as dimensões de correlação para os fluxos (D_{CF}) e para os mapas (D_{CM}), bem como a dimensão de Kaplan-Yorke (D_{KY}) para os parâmetros de controle ε_0 .

Tabela 2.4 – Dimensão de correlação e expoentes de Lyapunov para o parâmetro de controle ε_0 . D_{CF} , D_{CM} , λ_i e D_{KY} são a dimensão de correlação para o atrator, a dimensão de correlação para a seção de Poincaré, o i -ésimo expoente de Lyapunov e a dimensão de Kaplan-Yorke, respectivamente.

ε_0	D_{CF}	D_{CM}	λ_1	λ_2	λ_3	D_{KY}
102.0	1.000 ± 0.002	0	0.00	-0.07	-0.57	1.12
105.0	1.001 ± 0.001	0	-0.02	-0.13	-0.54	1.30
105.3	1.003 ± 0.001	0	0.03	-0.09	-0.32	1.41
105.42	1.02 ± 0.01	0	0.04	-0.05	-0.20	1.77
105.5	1.78 ± 0.02	0.84 ± 0.02	0.17	0.01	-0.39	2.44
105.7	1.80 ± 0.02	0.80 ± 0.02	0.13	0.01	-0.31	2.45
105.8	1.92 ± 0.01	0.95 ± 0.01	0.13	0.01	-0.30	2.48
105.9	1.97 ± 0.02	0.97 ± 0.02	0.15	0.02	-0.34	2.49

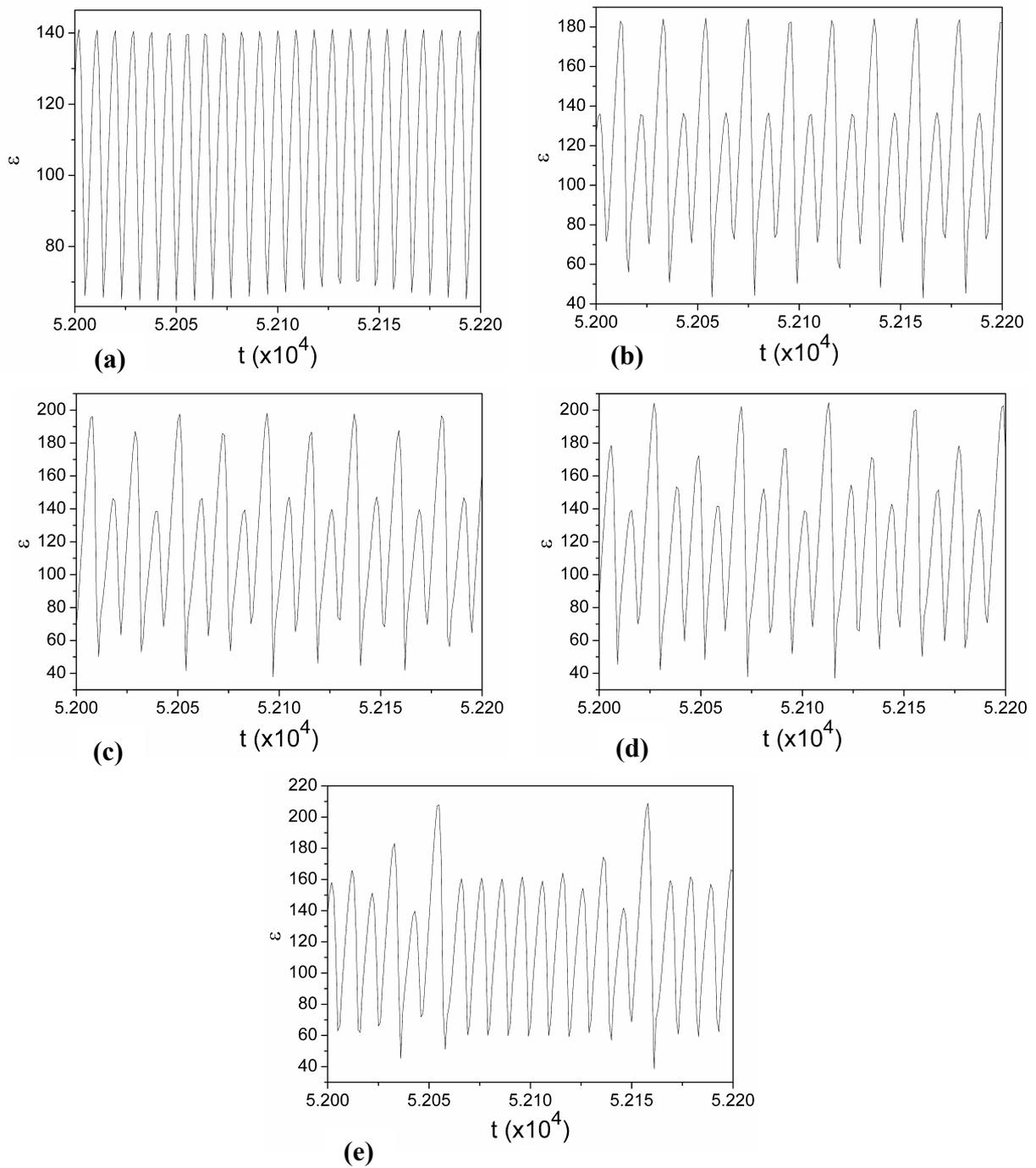


Figura 2.5: Séries temporais do campo elétrico para o parâmetro de controle ε_0 igual 102 (a), 105 (b), 105.3 (c), 105.42 (d) e para 105.5 (e). O campo elétrico ε está em unidades de $(kTE_t)/(eL_D)$ e t está em unidades de τ_M .

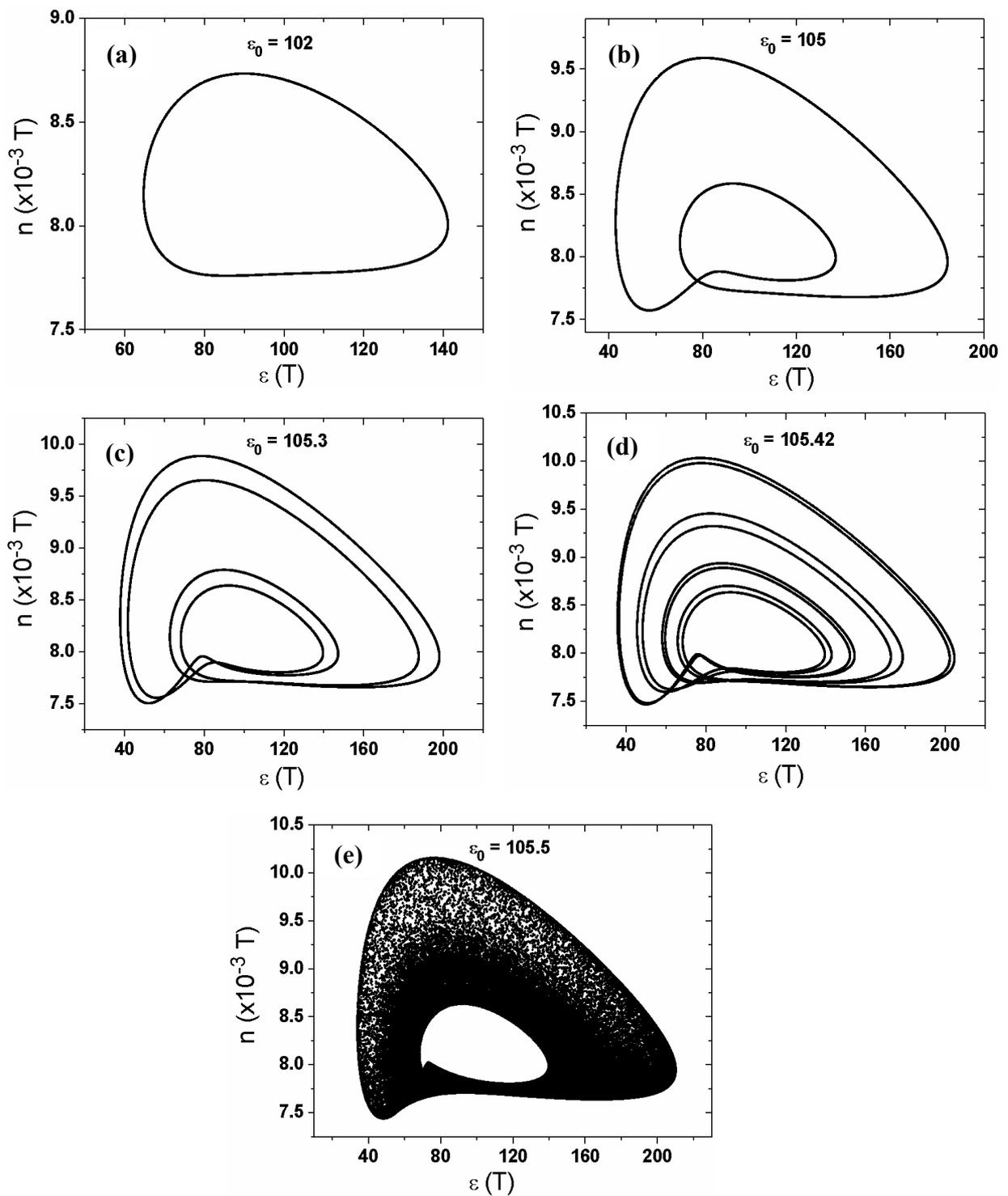


Figura 2.6: Atratores do sistema (2.53-55) nas variáveis campo elétrico ε e densidade de portadores n com parâmetro de controle ε_0 igual 102 (a), 105 (b), 105.3 (c), 105.42 (d) e para 105.5 (e).

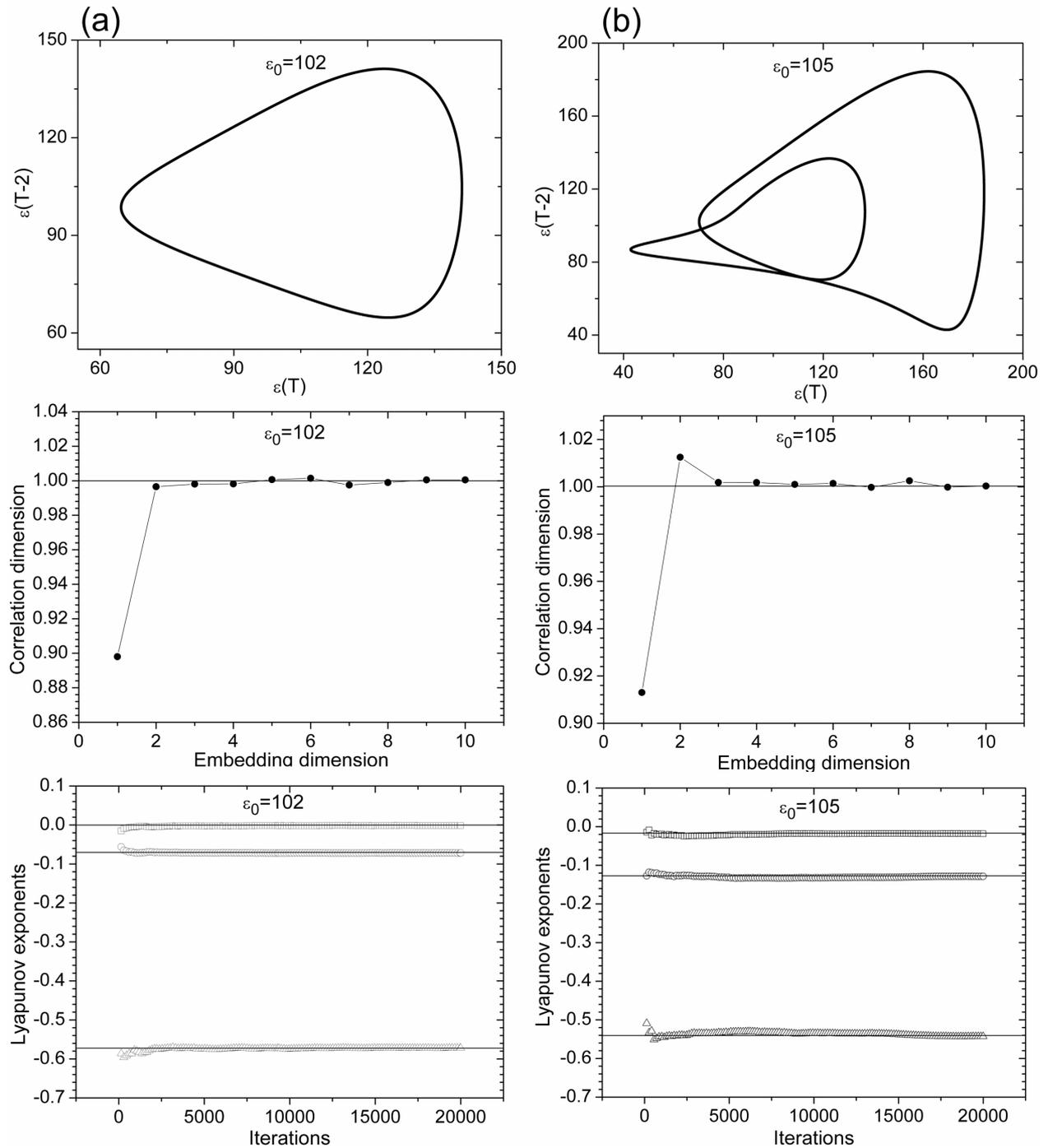


Figura 2.7: Os atratores reconstruídos para ε_0 igual 102 (a) e 105 (b), seguidos pela dimensão de correlação e pelos expoentes de Lyapunov para cada atrator.

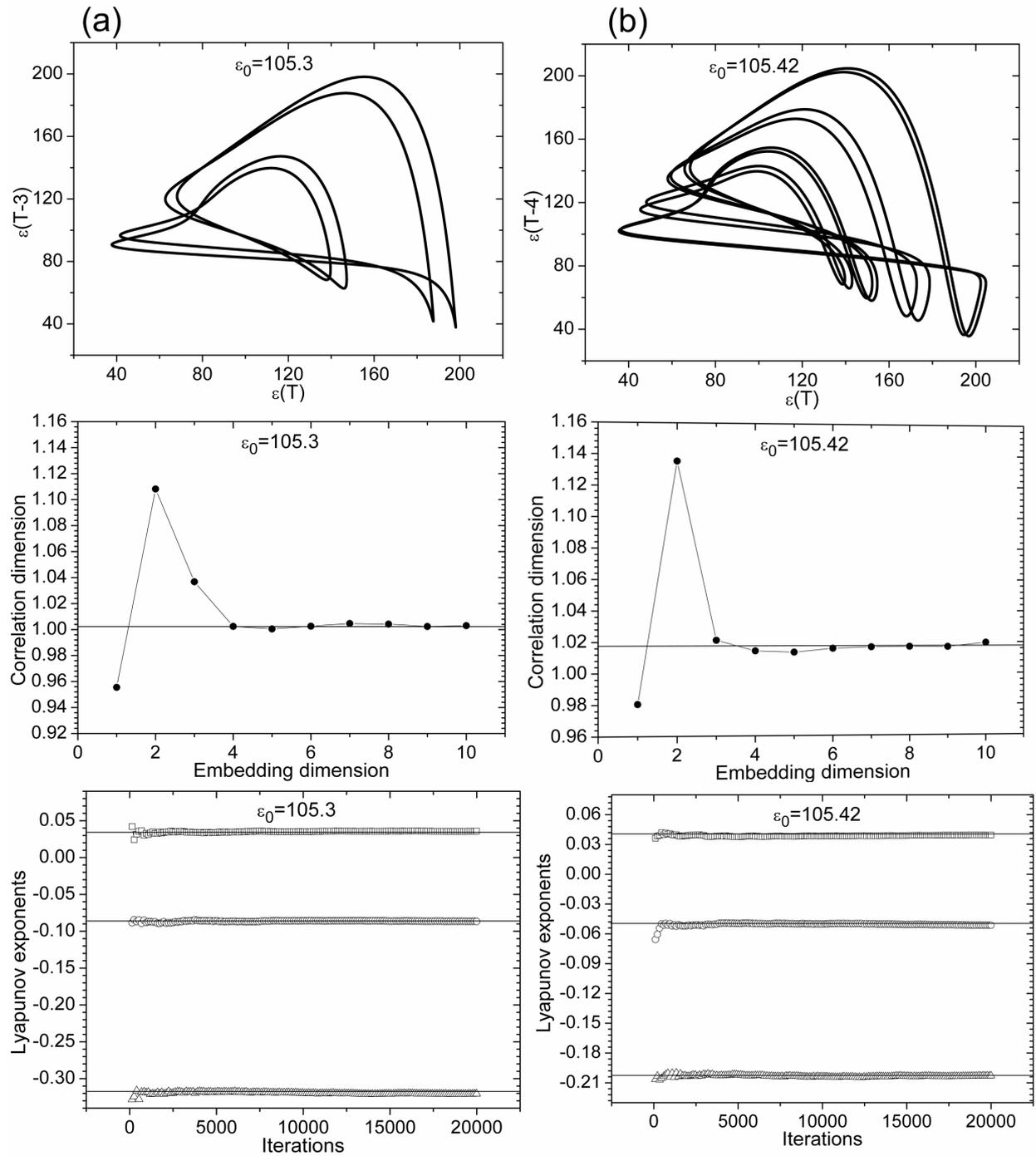


Figura 2.8: Os atratores reconstruídos para ϵ_0 igual 105.3 (a) e 105.42 (b), seguidos pela dimensão de correlação e pelos expoentes de Lyapunov para cada atrator.

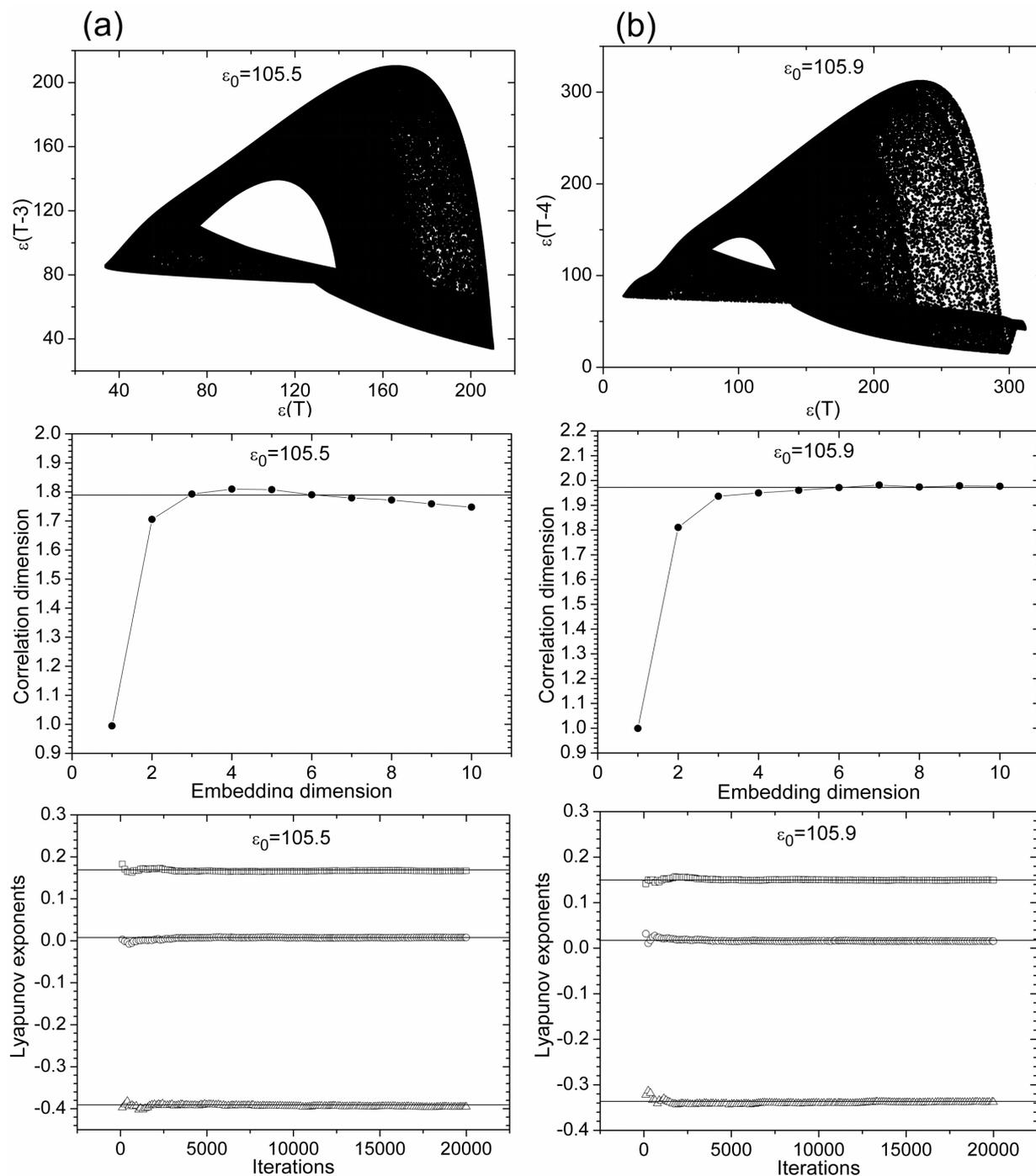


Figura 2.9: Os atratores reconstruídos para ϵ_0 igual 105.5 (a) e 105.9 (b), seguidos pela dimensão de correlação e pelos expoentes de Lyapunov para cada atrator.

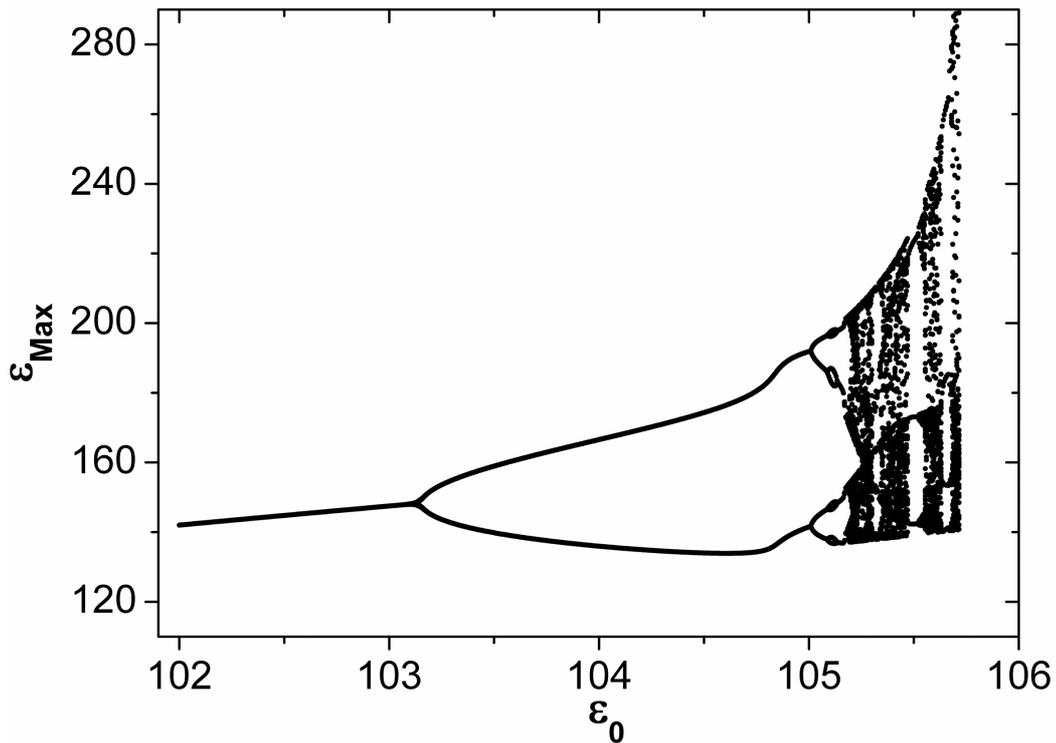


Figura 2.10: Diagrama de bifurcação para o sistema. ε_0 é o parâmetro de controle e ε_{Max} é o máximo da série temporal do campo elétrico.

Nós observamos a evolução da dimensão de correlação e dos expoentes de Lyapunov em função do parâmetro de controle ε_0 . O valor da dimensão de correlação (D_{CF}) para os ciclos limites de periodicidade 1, 2, 4 e 8 mostrados na figura 2.7 e 2.8, aumenta com a periodicidade dos atratores mas permanece dentro do intervalo de 1.00 a 1.02 de tal maneira que pode ser considerado constante. A dimensão de Kaplan-Yorke (D_{KY}) está no intervalo de 1.12 a 1.77. As dimensões de correlação (D_{CM}), calculadas via o mapa (seção de Poincaré), dos atratores periódicos são nulas, como esperado, por consistirem de um conjunto finito de pontos. O maior expoente de Lyapunov para os atratores periódicos são praticamente nulos, e os outros dois expoentes são negativos. O mais negativo dos expoentes de Lyapunov aumenta com a periodicidade do atrator resultando no aumento de D_{KY} . A soma dos três expoentes é sempre negativa, indicando um sistema dissipativo limitado em uma certa região do espaço de estados. Assim, estes atratores são altamente estáveis e os resultados sugerem que suas dimensões topológicas (D_T) são 1 com uma dimensão de imersão (D_E) igual a 3, o qual é necessário para a obtenção de atratores com trajetórias que não se cruzam.

Os atratores da figura 2.9 correspondem ao ε_0 igual a 105.5 e 105.9 e têm um valor de D_{CF} igual a 1.78 e 1.97, respectivamente, os quais são quase duas vezes maiores que os valores de D_{CF} para os atratores periódicos. Isto é razoável uma vez que os atratores caóticos são mais densos no espaço de estados do que os periódicos. Apesar de que D_{CF} aumenta de valor, ele ainda permanece um pouco abaixo de 2.00, devido a uma distribuição não-uniforme de pontos no atrator como podemos observar na figura 2.9. Por outro lado, existe uma tendência dos métodos usuais de cálculos da dimensão de correlação em subestimar a dimensão real do sistema [17]. Entretanto, é conhecido que D_{CF} é um limite inferior para a dimensão fractal da mesma maneira que D_{KY} é um limite superior [18,19].

Comparando os atratores que têm um expoente de Lyapunov nulo com os mapas (seções de Poincaré), Eckmann e Ruelle [11] encontraram uma diferença entre as dimensões fractais do fluxo e do mapa igual a 1, o qual foi associado com o fato de que a dimensão associada com a direção do espaço de estados que tem um expoente de Lyapunov nulo é 1. Ao fazermos a seção de Poincaré do atrator (fluxo), eliminamos esta direção. De fato, na tabela 2.4, observamos que as análises realizadas para D_{CM} de todos os atratores caóticos, diferem praticamente de 1 das análises realizadas para D_{CF} , o qual indica que estes valores são cálculos confiáveis.

A exigência de que $D_E \geq 3$ pode ser claramente observado nas figuras 2.7(b), 2.8 e 2.9, que foram representadas em duas dimensões. Estes atratores apresentam trajetórias que se cruzam em alguns pontos, violando o princípio dinâmico do não-cruzamento das trajetórias. Usamos um espaço bi-dimensional para os atratores por motivos práticos, representando as projeções dos atratores em três dimensões em um espaço 2D. Observamos que para obtermos os atratores, integramos um conjunto de três equações diferenciais, sugerindo um espaço de estados 3D.

Se fizermos a diferença de D_{KY} e D_{CF} entre os atratores para ε_0 igual a 105.42 e 105.5, $[D_{KY}(105.5) - D_{KY}(105.42) = \Delta D_{KY}]$ e $[D_{CF}(105.5) - D_{CF}(105.42) = \Delta D_{CF}]$, obtemos $\Delta D_{KY} = 0.67$ e $\Delta D_{CF} = 0.74$. Ambas as diferenças não são nulas pois um regime é periódico e outro caótico. A diferença entre ΔD_{KY} e ΔD_{CF} é pequena, indicando que ambas as medidas são, de maneira semelhante, sensitivas à mudança de regime. D_{KY} , entretanto, apresenta algumas diferenças em relação a D_C . D_{KY} cresce de maneira significativa para os atratores periódicos e é bem acima de 2 para os atratores caóticos. Os valores de D_{KY} estão relacionados com a redução do módulo do expoente de Lyapunov mais negativo. Esta mudança afeta D_{KY} sem estar relacionado com uma mudança significativa da forma do atrator. O conceito de forma do atrator

significa que o caráter de ser uma trajetória fina e fechada é preservada para regimes periódicos. Para o regime caótico, D_{KY} está relacionado com a dimensão fractal do atrator, apesar de não ser uma medida direta dele. D_{KY} pode ser considerado como um limite superior para qualquer atrator que tenha o mesmo espectro dos expoentes de Lyapunov [16].

A figura 2.11 mostra a curva característica $J(\varepsilon_0)$ do sistema de equações (2.53-55) para os valores dos coeficientes e parâmetros da tabela 2.3. Observamos uma curva com região de NDC tipo-S. O intervalo do parâmetro de controle do sistema (2.53-55), ε_0 , no qual encontramos a rota de bifurcação apresentada nas figuras 2.6-10, é uma pequena região na curva $J(\varepsilon_0)$. Observe que pode haver até três pontos de operação possíveis nesta curva, mas somente o ponto que está na região de NDC é instável para a ocorrência das oscilações. Nos *insets* da figura, mostramos a região instável, NDC, e a região estável, PDC (condutividade diferencial positiva).

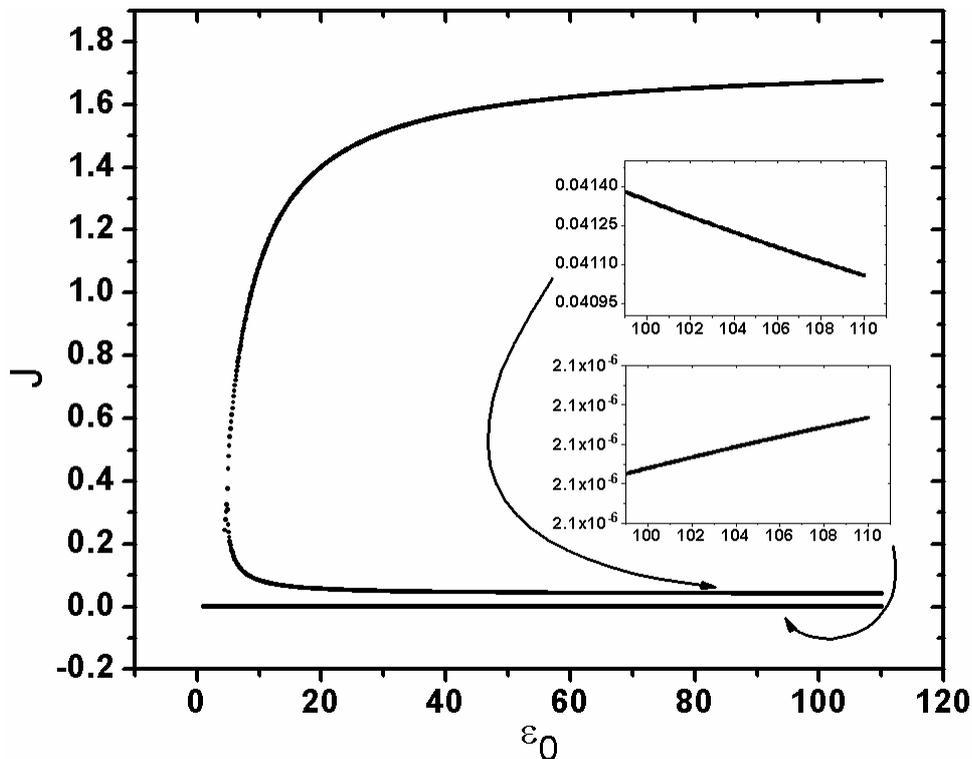


Figura 2.11: Curva característica para a densidade corrente em função do campo elétrico estático para o sistema (2.53-55) no estado estacionário. J está em unidades de $e\mu N_D^*$ e ε_0 em V/cm . Esta curva foi gerada com os valores dos coeficientes da tabela 2.3.

Neste estudo aplicamos técnicas de análises de séries temporais não-lineares experimentais em séries geradas por um modelo teórico. Este método nos permitiu inferir

questões importantes a respeito do espectro dos expoentes de Lyapunov e da dimensão de correlação dos atratores. Além disso, testamos a validade da técnica de análise de dinâmica não-linear aplicada em sistemas experimentais no modelo de equações de taxas para os processos de g-r do portador de carga em um semicondutor hipotético. Observamos uma concordância dos resultados obtidos com a teoria de dinâmica não-linear. Este tipo de abordagem também foi utilizado num estudo de dinâmica não-linear em dados experimentais [9] (capítulo 1) obtendo também resultados compatíveis com a teoria do caos. Com isto, a técnica de análise de dinâmica não-linear se aplica tanto aos dados experimentais quanto aos dados teóricos de comportamento oscilatório em sistemas semicondutores.

O estudo realizado nesta seção está publicado no periódico *Physica D* [23].

2.6 – O modelo de Ionização por Impacto com a Captura Assistida por Campo Elétrico

Nesta seção, iremos apresentar um estudo preliminar realizado no modelo de equações de taxas descrito nas seções anteriores. Este estudo consiste em alterar o coeficiente de recombinação T_1^S , que no modelo original é constante para a região de campo elétrico utilizado. 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*) que será descrito no capítulo 3 desta tese [20-21]. O objetivo é incorporar no modelo de equações de taxas para os processos de g-r descrito nas seções anteriores, os principais fenômenos de g-r do portador de carga do sistema GaAs SI crescido por LT-MBE que julgamos essenciais para a ocorrência de oscilações de baixa frequência.

Com esta alteração do modelo de equações de taxas, geramos uma série de diagramas de bifurcação para o campo elétrico em função do parâmetro de controle. Observamos que os diagramas de bifurcação são dependentes da energia do defeito. Assim, geramos um conjunto de diagramas de bifurcação para um intervalo de valores da energia e do parâmetro de controle, que como no caso da seção anterior, é o campo elétrico estático ε_0 .

O modelo de equações é o mesmo descrito na seção 2.4, ou seja, o sistema composto das eqs. (2.53-55). A modificação proposta é a troca do coeficiente T_1^S , que é constante na faixa do campo elétrico estático usado, por T_1 , que assume uma dependência com o campo elétrico segundo o modelo de captura assistida por campo elétrico, que será discutido no capítulo 3 [20-21]. Assim, esta dependência com o campo elétrico pode ser escrita como:

$T_1 \propto -\exp\left(-\frac{E_1}{e\lambda E}\right)$, onde E_1 é uma energia de captura limite, e é a carga do elétron e λ é o livre caminho médio. Como descrito nas seções anteriores, iremos trabalhar com variáveis normalizadas. Assim, o coeficiente T_1 é escrito como: $T_1 = -T_1^0 \exp\left(-\frac{E_1}{\varepsilon}\right)$. Todos os valores dos outros coeficientes e parâmetros foram mantidos iguais aos utilizados na seção anterior. No caso da tabela 2.3, a única mudança é a troca do coeficiente T_1^S por T_1^0 mantendo-se o valor numérico.

Para os valores da tabela 2.3 e para E_1 igual a $1.7E_t$, obtemos o diagrama de bifurcação mostrado na figura 2.12. O eixo horizontal é o parâmetro de controle ε_0 e o eixo vertical é a seqüência de máximos das séries temporais do campo elétrico geradas pelo sistema (2.53-55) com as modificações descritas acima. No intervalo do parâmetro de controle ε_0 mostrado na figura 2.12, encontramos somente oscilações de campo elétrico com um período fundamental, ou seja, oscilações de período-1. Para valores de ε_0 abaixo de 38 e acima de 43, o sistema converge para pontos fixos.

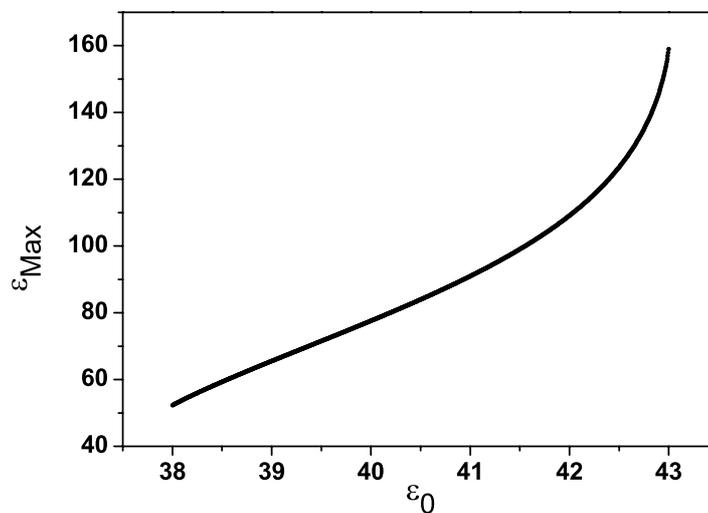


Figura 2.12: Diagrama de bifurcação para $E_1 = 1.7E_t$.

A figura 2.13 mostra o diagrama de bifurcação para E_1 igual a $1.55E_t$. Neste caso, o sistema bifurca de período-1 para período-2, com duas frequências fundamentais, e retorna para período-1 no intervalo de ε_0 entre 50.0 a 55.2. A figura 2.14 mostra o diagrama de bifurcação para E_1 igual a $1.50E_t$. Neste caso, o sistema apresenta uma rota de bifurcação em cascata por

duplicação de período, seguida de uma cascata inversa (figura 2.14(a)). A figura 2.14(b) mostra uma ampliação da figura 2.14(a) no intervalo de 56.15 a 57.20 para ε_0 . Observamos nesta ampliação rotas de bifurcação por duplicação de período e crise do tipo interior. Este tipo de bifurcação é caracterizado por uma mudança abrupta de um comportamento caótico para um ciclo de período-1.

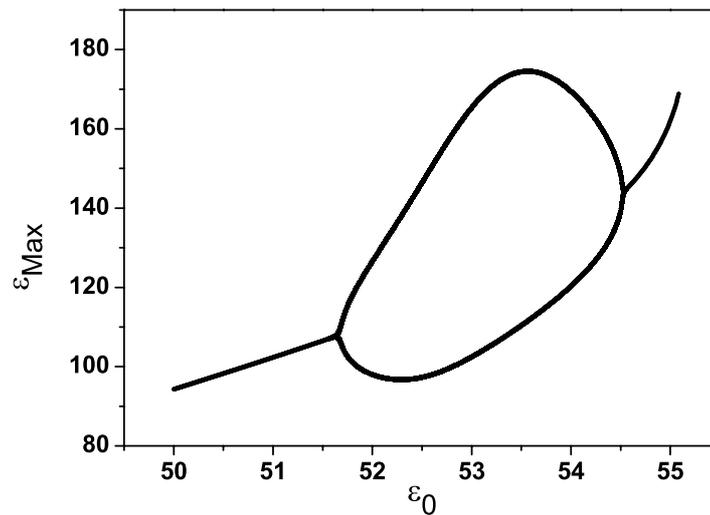


Figura 2.13: Diagrama de bifurcação para $E_1 = 1.55E_t$.

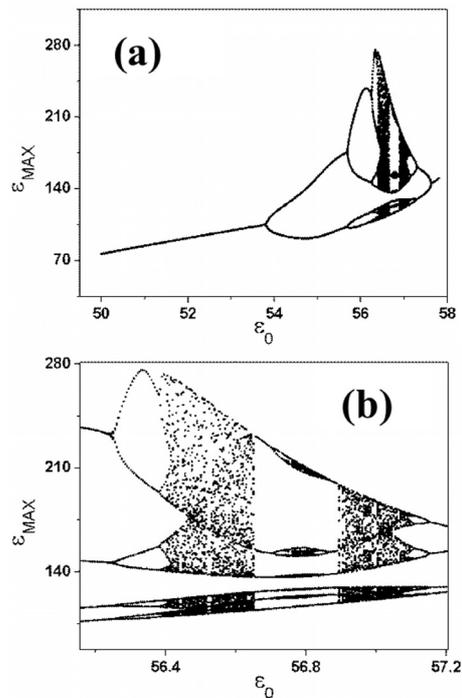


Figura 2.14: Diagrama de bifurcação para $E_1 = 1.50E_t$. Em (b) uma ampliação de (a).

A figura 2.15 mostra o diagrama de bifurcação para para $E_1 = 1.00E_t$. 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. Esta seqüência de bifurcação, período-1 \rightarrow período-2 \rightarrow período-4 \rightarrow período-2, é observada nas medidas experimentais de oscilações de corrente de amostras de GaAs SI como pode ser observado na figura 1.10(b) do capítulo 1 [9].

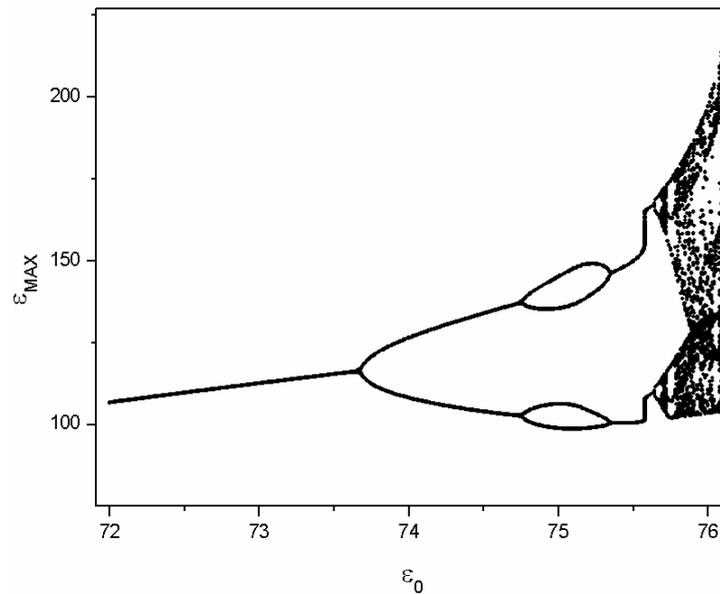


Figura 2.15: Diagrama de bifurcação para $E_1 = 1.00E_t$.

A figura 2.16 mostra o diagrama de bifurcação para $E_1 = 0.1E_t$. Neste caso a seqüência de bifurcação vista na figura 2.15 desaparece do segundo braço de bifurcação, surgindo no terceiro braço seguida de uma bifurcação por duplicação de período comum.

Neste modelo, nós geramos oscilações de campo elétrico ao invés de oscilações de corrente elétrica como nas medidas experimentais [9]. Entretanto, a relação entre as variáveis pode ser obtida da relação $J = n(\varepsilon)V(\varepsilon)$, onde $n(\varepsilon)$ é a variável dinâmica dos sistema (2.53-55) e $V(\varepsilon)$ é a velocidade de *drift* dinâmica como definida na seção anterior. Todas as variáveis e parâmetros são normalizados como no caso da seção 2.5, e os fatores de normalização são dados pelas equações (2.30-36). Assim, como exemplo, para a amostra da figura 1.10(b), capítulo 1 [9], na temperatura de 300 K com $\mu_0 = 670 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $\varepsilon_S = 12.9$, $N_D^* = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e o nível do defeito em 0.7 eV, teremos $\tau_M \sim 10 \text{ } \mu\text{s}$ e $kTE_t/eL_D \sim 1 \text{ V/cm}$.

Observamos através dos resultados apresentados nesta seção que, ao incluir a dependência do coeficiente de recombinação T_1 com o campo elétrico no modelo de equações de taxas, o sistema (2.53-55) apresentou uma rica variedade de comportamento periódico e caótico. Vimos estes resultados através de diagramas de bifurcação. Esta complexidade nos diagramas de bifurcação, além de ser dependente do parâmetro de controle, também depende do nível de energia do defeito responsável pelo efeito da captura assistida por campo elétrico. Podemos observar este fato nas figuras 2.12-16. Por exemplo, para altos valores de E_1 , fig. 2.12, o sistema apresentou um comportamento periódico para todos os valores de campo elétrico estático. Podemos inferir que neste caso o efeito de captura assistida por campo elétrico não é um efeito predominante para a faixa de campo elétrico utilizado. Para valores entre $1.55E_t \leq E_1 \leq 0.3E_t$, figuras 2.13-15, encontramos um variedade de bifurcação incluindo duplicação de período, crise e uma seqüência da forma: período-1 – período-2 – período-4 – período-2. Podemos inferir que nesta faixa de valores para E_1 , o efeito de captura domina ou compete com o efeito de ionização. Abaixo de $0.3E_t$, figura 2.16, o sistema apresenta uma bifurcação por duplicação de período, no qual podemos inferir que o efeito de ionização domina.

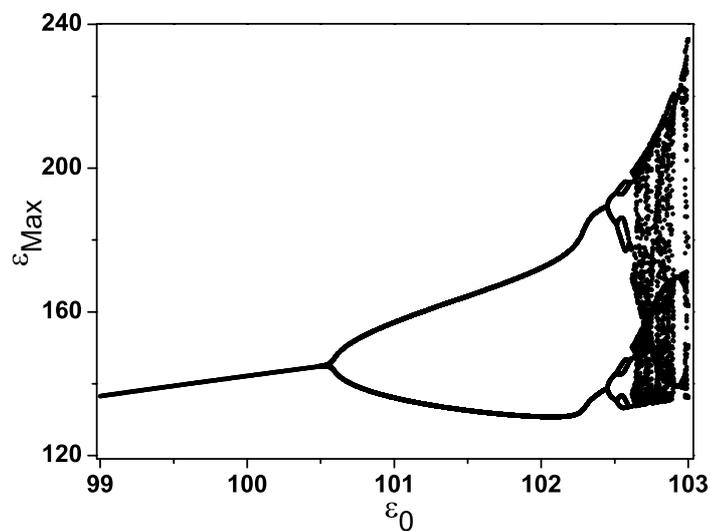


Figura 2.16: Diagrama de bifurcação para $E_1 = 0.1E_t$.

Os resultados apresentados nesta seção são preliminares necessitando de uma maior investigação para melhor compreender a relação do modelo descrito acima com os dados experimentais. Entretanto, podemos inferir destes resultados que o efeito de captura dependente do campo elétrico tem um papel importante na dinâmica dos portadores de carga do modelo,

como no caso experimental, onde o efeito de captura assistida por campo elétrico tem um papel importante nas oscilações de corrente elétrica em amostras de GaAs SI [22]. O efeito de ionização também tem um papel importante na dinâmica, de fato a grande riqueza de oscilações está na competição entre os fenômenos de captura assistida por campo elétrico e ionização por impacto.

O estudo apresentado nessa seção foi apresentado no 12th *Brazilian Workshop on Semiconductor Physics* e aceito para publicação no *Proceedings* do encontro que sairá no periódico *Brazilian Journal of Physics*.

Referências do Capítulo 2

- [1] K. Aoki, *Nonlinear dynamics and Chaos in Semiconductors*, Series in Condensed Matter Physics, Institute of Physics Publishing, Bristol, 2001.
- [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, Berlin (1987).
- [4] W. Shockley, *Solid State. Electron.* **2**, 35 (1961).
- [5] E. Schöll, *Phys. Rev. B* **34**, 1395 (1986).
- [6] R. M. Westervelt and S. W. Teitsworth, *J. Appl. Phys.* **57**, 5457 (1985).
- [7] W. Knap, M. Jezewski, J. Lusakowski and W. Kuszko, *Solid State Electron.* **31**, 813 (1988).
- [8] G. N. Maracas, W. Porod, D. A. Johnson, D. K. Ferry and H. Goronkin, *Physica B* **134**, 276 (1985); G. N. Maracas *et al.*, *Solid State Electron.* **32**, 1887 (1989).
- [9] R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, H. A. Albuquerque, W. N. Rodrigues and M. V. B. Moreira, *Chaos* **13**, 457 (2003); R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro and W. N. Rodrigues, *Physica D* **194**, 166 (2004).
- [10] A. M. Fraser and H. L. Swinney, *Phys. Rev. A* **33**, 1134 (1986).
- [11] J.-P. Eckmann and D. Ruelle, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 617 (1985).
- [12] H. D. I. Abarbanel, R. Brown, J. J. Sidorowich and L. Sh. Tsimring, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 1331 (1993).
- [13] R. Hegger, H. Kantz and T. Schreiber, *Chaos* **9**, 413 (1999).
- [14] J.-P. Eckmann, S. Oliffson Kamphorst, D. Ruelle and S. Ciliberto, *Phys. Rev. A* **34**, 4971

(1986).

- [15] M. Sano and Y. Sawada, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1082 (1985).
- [16] P. Grassberger and I. Procaccia, *Physica D* **9**, 189 (1983).
- [17] J. C. Sprott and G. Rowlands, *Int. J. Bifur. Chaos* **11**, 1865 (2001).
- [18] K. E. Chlouverakis and J. C. Sprott, *Physica D* **200**, 156 (2005).
- [19] H. G. E. Hentschel and I. Procaccia, *Physica D* **8**, 435 (1983).
- [20] 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).
- [21] 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**, 1647 (2003).
- [22] A. Neumann, *J. Appl. Phys.* **90**, 1 (2001).
- [23] H. A. Albuquerque, R. L. da Silva, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, and W. N. Rodrigues, *Physica D* **208**, 123 (2005).

CAPÍTULO 3 – CONDUTIVIDADE DIFERENCIAL NEGATIVA EM GaAs SEMI-ISOLANTE

Neste capítulo iremos estudar o principal fenômeno responsável pelas instabilidades apresentadas em amostras de GaAs semi-isolantes (SI) crescidas por epitaxia por feixe molecular a baixa temperatura (LTMBE) e em outros semicondutores. Esse fenômeno é a condutividade diferencial negativa (NDC). Iremos apresentar alguns resultados obtidos na interpretação desse fenômeno.

3.1 – Condutividade Diferencial Negativa

As propriedades elétricas de um semicondutor podem ser observadas diretamente na relação corrente *versus* voltagem, $I(V)$, em condições independentes do tempo (cc = corrente contínua). Esta relação é originada pelas propriedades microscópicas do *bulk* do material semicondutor que fornecem a densidade de corrente, \vec{j} , em função do campo elétrico local, \vec{E} . Se a característica $j(E)$ apresenta um regime de condutividade diferencial negativa (NDC)

$$\sigma_{dif} \equiv \frac{dj}{dE} < 0, \quad (3.1)$$

isto é, se a densidade de corrente diminui com o aumento do campo elétrico, ou vice-versa, instabilidades podem ocorrer na amostra, como por exemplo, formação de domínios de campo elétrico ou de densidade de corrente [1,2].

Para uma descrição mais detalhada, considere um semicondutor com uma densidade de elétrons livres n . Para uma grande faixa de campo elétrico \vec{E} , a densidade de corrente \vec{j} que flui através da amostra obedece a lei de Ohm

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad (3.2)$$

onde σ é dado por

$$\sigma = ne\mu, \quad (3.3)$$

e é a carga elétrica elementar e μ é a mobilidade elétrica. Na ausência de campo elétrico, os elétrons livres estão em equilíbrio térmico com a rede cristalina. Este equilíbrio é mantido através de colisões entre os elétrons e os átomos da rede. O campo elétrico acelera os elétrons entre as colisões, o que lhe confere uma certa quantidade de energia. Parte desta energia é

perdida em calor durante as colisões (efeito Joule), e a outra parte deixa a “temperatura” do elétron um pouco maior do que a temperatura da rede. Se o campo elétrico for muito alto, a “temperatura” do elétron aumenta muito em relação à temperatura da rede e os elétrons são denominados de “quentes”. Neste regime de campo elétrico alto, a relação entre \bar{j} e \bar{E} torna-se não-ôhmica e surgem fenômenos não-lineares.

No regime ôhmico, n e μ são independentes do campo elétrico. Mas na presença de campo elétrico elevado um destes parâmetros ou ambos pode variar. n pode variar devido à ionização por impacto ou captura de elétrons. No caso de μ , este é influenciado pela transferência de elétrons de um vale da banda de condução para outro vale com massa efetiva diferente (efeito Gunn). Assim, para campos elétricos bem elevados, longe do efeito ôhmico, o produto nE ou μE diminui ou aumenta, gerando regiões de NDC, eq. (3.1). Na seção seguinte, 3.2, iremos estudar com mais detalhes estes casos.

O fenômeno de NDC permite uma diferenciação quanto à forma da curva característica $j(E)$; genericamente, ela pode ser SNDC e NNDC. Essa notação decorre da semelhança da curva característica com as letras S e N no sentido de que a região de derivada negativa é a perna central do S ou do N. Isso é ilustrado na Figura 3.1.

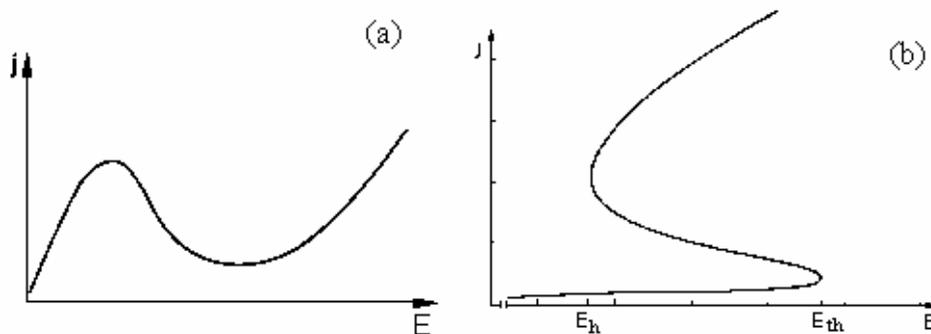


Figura 3.1: Densidade de corrente j em função do campo elétrico E para os dois tipos de NDC: (a) NNDC e (b) SNDC.

Os fenômenos de NNDC e SNDC estão associados, respectivamente, com instabilidades de tensão ou corrente, quando cada um desses parâmetros é controlado. No caso de NNDC, a densidade de corrente é uma função unívoca do campo, mas o campo apresenta três valores distintos para alguns valores de j . O caso SNDC é o inverso, no sentido que E e j trocam de papel. A ocorrência simultânea dos dois fenômenos também é possível de acontecer. Em

sistemas que apresentam NNDC é comum observar a formação de domínios de campo elétrico estacionários ou que se movem através do material. Já em sistemas que apresentam SNDC, o comum é a formação de filamentos de alta corrente com vizinhança em baixa corrente.

Para o caso específico de NNDC, a lei de Ohm é válida para campos elétricos abaixo de um valor crítico E_C , figura 3.2(a). Para uma tensão muito alta, a amostra sofre um “colapso” elétrico e a corrente cresce abruptamente. A instabilidade na região de NDC pode ser estudada analisando a estabilidade elétrica. Por exemplo, considere a equação da continuidade para a densidade de elétrons livres, n

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j} = 0. \quad (3.4)$$

Suponha que exista uma pequena flutuação local da densidade espacial de carga em torno do valor de equilíbrio n_{eq} . A equação de Poisson pode ser escrita como

$$\nabla \cdot \vec{E} = -\frac{e(n - n_{eq})}{\varepsilon}, \quad (3.5)$$

onde ε é a permissividade (supondo que seja constante para qualquer flutuação do campo elétrico). A densidade de corrente é dado por

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} + eD \nabla n, \quad (3.6)$$

onde D é o coeficiente de difusão. Tomando o divergente da equação (3.6) e usando a equação (3.5), encontramos

$$\frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{j} = -\frac{\sigma(n - n_{eq})}{\varepsilon} + D \nabla^2 n. \quad (3.7)$$

Esta equação junto com a equação (3.4), torna-se

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\sigma(n - n_{eq})}{\varepsilon} - D \nabla^2 n = 0. \quad (3.8)$$

A solução temporal da equação (3.8) é

$$n - n_{eq} \propto \exp(-e\mu n t / \varepsilon). \quad (3.9)$$

Podemos observar que uma NDC faz com que o desequilíbrio inicial de carga cresça exponencialmente com o tempo, o que significa que a amostra é instável na região de NDC.

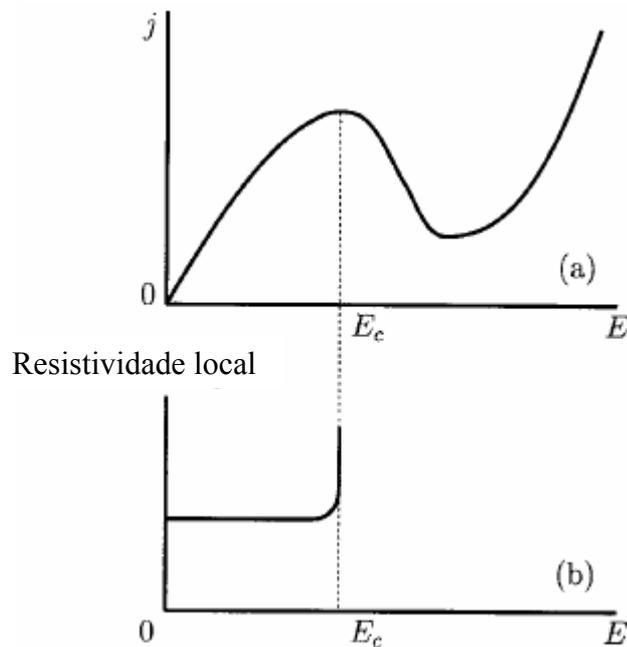


Figura 3.2: (a) NNDC; (b) Dependência com o campo da resistividade diferencial local.

Conforme a amostra é levada para perto da região de NDC, a resistividade diferencial positiva local aumenta com o campo aplicado, como é mostrado na figura 3.2 (b). Isto significa que se em uma região da amostra houver uma pequena flutuação do campo elétrico, sua resistividade aumenta. Com isso, a corrente que flui através desta região diminui, permitindo que a região de alta resistividade aumente. A figura 3.3 mostra que devido a este fato, geralmente há uma formação de domínio de campo de alta resistividade. O domínio cresce até a largura total da amostra para depois mover do catodo para o anodo em virtude da presença do campo elétrico externo. A velocidade dos elétrons livres em amostras de GaAs tipo- n é em torno de 10^7 cm/s, o qual limita a velocidade dos domínios na amostra nesse valor.

Nas considerações acima, mostramos que sob certas circunstâncias a aplicação de um campo elétrico elevado em materiais semicondutores, pode surgir regiões de NDC e domínios de campo elétrico dentro da amostra. Na próxima seção iremos estudar os mecanismos que levam à formação de regiões de NDC em amostras de GaAs tipo- n e SI.

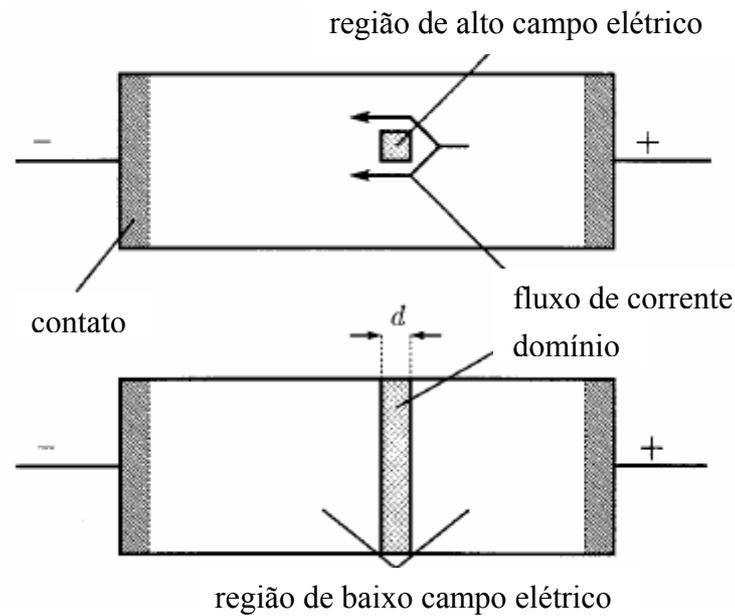


Figura 3.3: Formação de domínio iniciando em uma pequena região de alto campo elétrico.

3.2 – Mecanismos para NDC em GaAs do tipo SI e do tipo-*n*

Nesta seção estudaremos os mecanismos que levam a formação de regiões de NDC em amostras de GaAs semi-isolante (SI) e tipo-*n*. Ambas apresentam curvas $I(V)$ do tipo NNDC e formação de domínios de campo elétrico no seu interior. Conseqüentemente ambas apresentam oscilações de corrente elétrica. Contudo, existem diferenças nessas oscilações. No caso de amostras de GaAs tipo-*n* a velocidade dos domínios de campo elétrico que são formados no interior das amostras é da ordem de 10^7 cm/s, gerando oscilações de corrente da ordem de GHz. Enquanto em amostras de GaAs SI, as oscilações de corrente são da ordem de poucas centenas de Hz e a velocidade dos domínios de campo elétrico é da ordem de 10^2 cm/s. Portanto, os principais mecanismos responsáveis pelas instabilidades elétricas nestas amostras são de natureza física diferentes.

As regiões de NDC nestas amostras podem ser divididas em duas classes de mecanismos, todos dependentes do campo elétrico:

- Não-linearidade da mobilidade (instabilidade de *drift*);
- Não-linearidade da densidade dos portadores de carga (instabilidade de geração-recombinação).

3.2.1 – Instabilidade de *drift*

O efeito responsável por este tipo de instabilidade em GaAs tipo-*n* e em outros semicondutores III-V é conhecido como efeito Gunn [3]. Ele é utilizado no diodo Gunn, por exemplo, para gerar e amplificar frequências além de 1GHz. O mecanismo é baseado na transferência de elétrons entre dois vales da banda de condução, no espaço dos *k*'s, com massas efetivas diferentes [4]. Por exemplo, a transferência de elétrons de um estado com pequena massa efetiva, alta mobilidade, para um estado com alta massa efetiva, baixa mobilidade, para campo elétrico intenso ($E_C > 3$ kV/cm), ver figura 3.4.

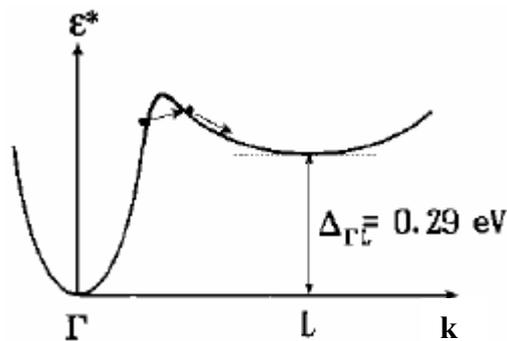


Figura 3.4: Transferência de elétrons do vale- Γ para o vale-L na banda de condução.

A baixos campos elétricos os elétrons estão praticamente no mínimo do vale- Γ , o qual corresponde a uma pequena massa efetiva m^* (para o GaAs $m^* = 0.07m_0$) e assim uma alta mobilidade. Conforme o campo elétrico E aumenta, os elétrons “aquecidos” ganham energia suficiente para serem transferidos para o vale-L com um mínimo de energia maior do que no vale- Γ , mas com um massa efetiva maior ($m^* = 0.55m_0$) e assim com uma mobilidade menor. Quanto mais elétrons são transferidos, a mobilidade média μ diminui intensamente tal que a densidade de corrente $j = en\mu(E)E$ também diminui com o aumento do campo, resultando em uma mobilidade diferencial negativa $d(\mu E)/dE < 0$ (NDM). Quando a maioria dos elétrons estiver no vale-L, a densidade de corrente j cresce novamente. Assim uma região de NNDC na curva característica $j(E)$ é formada.

Aplicando um campo elétrico intenso o suficiente para haver uma transferência de elétrons entre vales (~ 3 kV/cm para o GaAs), um domínio de campo elétrico é formado no

interior da amostra em uma região de não-homogeneidade. Sendo a mobilidade de *drift* dos elétrons no vale-L pequena, elétrons do vale- Γ tendem a acumular atrás do domínio, enquanto os portadores à frente do domínio são repelidos, gerando o perfil da densidade de portadores e conseqüentemente o perfil do campo elétrico da figura 3.5.

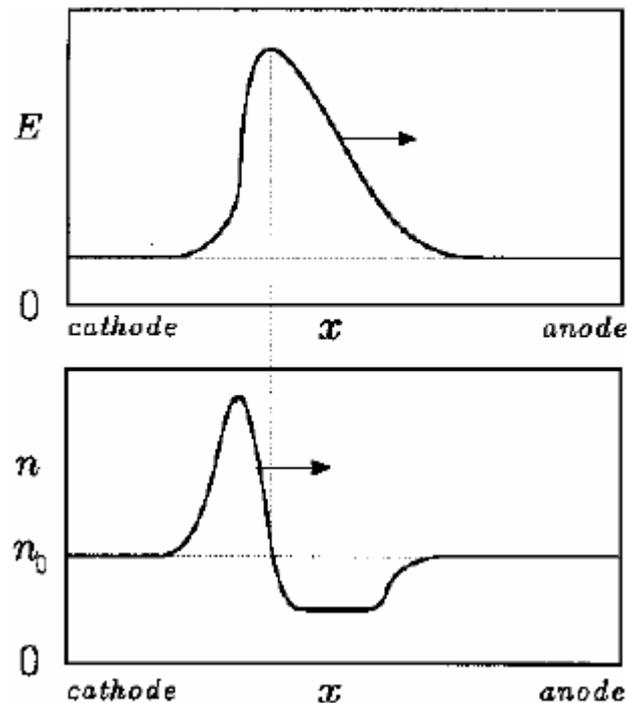


Figura 3.5: Diagrama esquemático do campo elétrico e da densidade de elétrons em função da posição para o domínio de campo movendo-se em direção ao anodo.

No efeito Gunn, o domínio de campo elétrico gerado no catodo move-se em direção ao anodo, que se encontra num potencial positivo relativo ao catodo, com uma velocidade $v_{dom} \approx 10^7 \text{ cm/s}$. Durante a propagação, a amplitude do domínio é uma função crescente. Ao atingir o anodo, como mostrado na figura 3.6, o domínio em propagação desaparece e, simultaneamente, um novo domínio é formado no catodo. Esse processo ocorrendo de forma repetitiva é que conduz às conhecidas oscilações Gunn, que constituem uma característica intrínseca da amostra. A frequência de oscilação cresce com a distância entre o catodo e o anodo, já que o tempo de transito é aproximadamente $\tau = L/v_{dom}$. Assim, para uma oscilação de 5 GHz e para um $L = 0,1 \text{ mm}$, tem-se uma velocidade de $v_{dom} = 2 \times 10^7 \text{ cm/s}$.

Na literatura, o efeito Gunn é também identificado pela sigla TEE que significa efeito da transferência de elétrons e foi previsto por Ridley e Watkins [5] e Hilsum [6] há mais de 40 anos. Imediatamente após, Kroemer [7] mostrou que esses dois trabalhos explicam os dados experimentais que haviam sido obtido por Gunn [3].

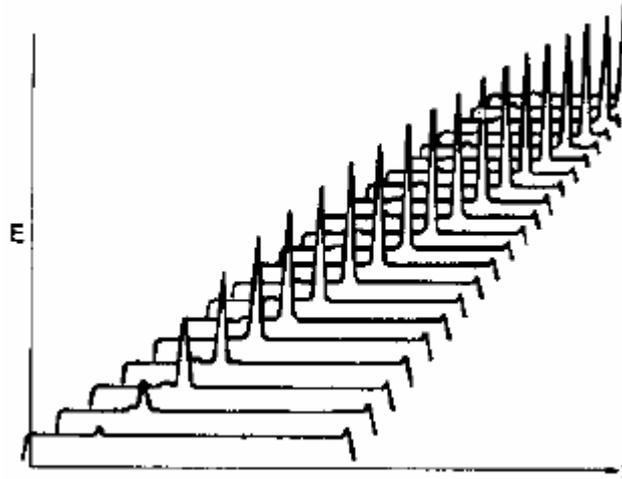


Figura 3.6: Ilustração do crescimento da intensidade de um domínio de campo elétrico durante a sua propagação do catodo para o anodo.

Experimentalmente, aplica-se uma tensão dc, V_{ap} , em uma amostra de GaAs tipo- n a temperatura ambiente e mede-se a corrente I . Para baixos valores de tensão, a lei de Ohm é obedecida. Para valores de tensão acima de um valor crítico, V_C , a corrente oscila em uma frequência de gigahertz, correspondendo ao tempo de transito dos elétrons livres movendo através da amostra [1]. Estas oscilações são causadas, como discutido acima, por domínios de campo que atravessam o *bulk* da amostra [1].

3.2.2 – Instabilidades de Geração-Recombinação

As instabilidades advindas dos processos de geração-recombinação (g-r) estão relacionadas com a dependência não-linear da densidade de portadores n com o campo elétrico E , o qual leva a uma relação não-monotônica entre a densidade de corrente e o campo elétrico, $j = en(E)\mu E$, que levam às presenças de regiões de condutividade diferencial negativa (NDC) que podem ser na forma de um N ou um S estilizados. A presença de regiões de NDC é devida a uma redistribuição de elétrons entre a banda de condução e os defeitos (e possivelmente a banda

de valência) com o aumento do campo elétrico. As probabilidades de transições microscópicas dos portadores entre estados diferentes, os coeficientes de geração-recombinação (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*) e emissão Poole-Frenkel (*Poole-Frenkel emission*) dos centros de impureza, os quais geralmente levam a formação de regiões do tipo NNDC; e a ionização por impacto, o qual é o principal processo para a formação de regiões do tipo SNDC.

A captura assistida por campo elétrico ocorre, por exemplo, no semicondutor Ge dopado com Au [9]. Os átomos de Au formam níveis profundos de impureza, correspondendo a íons simples ou duplamente carregados negativamente. A captura de elétrons nestes níveis requer uma penetração da barreira de potencial Coulombiano. Portanto, o coeficiente de captura aumenta com o campo E enquanto a emissão (térmica) 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: $dn/dE < 0$, e a condutividade diferencial $dj/dE = e\mu(n + Edn/dE)$ torna-se negativa. Para campos ainda maiores, o coeficiente de ionização aumenta e a densidade de portadores continua a aumentar com o campo, levando a uma condutividade diferencial positiva. Assim uma curva característica $j(E)$ na forma de um N estilizado é formada.

As oscilações de baixa frequência (LFO) em amostras de GaAs semi-isolante (SI) [10-15] foram explicadas como advindas de domínios de campo elétrico que atravessam a amostra [16]. Esses domínios são induzidos pelo fenômeno de captura assistida por campo elétrico, e eles são observados experimentalmente por técnicas eletro-ópticas [17].

Outro fenômeno que pode levar à formação de regiões de NDC, diferente da captura assistida por campo elétrico, é o de ionização por impacto de portadores de impurezas, como doadores rasos, aceitadores ou defeitos profundos ou ainda através de transições interbandas. Se um portador livre ganhar 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. Assim, este processo leva a um rápido aumento da densidade de portadores livres. O coeficiente de ionização por impacto aumenta muito com o campo elétrico E . Se este campo estiver acima do limiar necessário para “esquentar” os portadores livres, estes ganham energia suficiente para ionizar outros portadores. Modelos para este tipo de processo de

geração são relevantes para uma variedade de materiais e para várias faixas de temperatura [18]. Estes modelos podem explicar a formação de regiões de NDC tipo-S (SNDC) em curvas características $j(E)$ em regime de baixa temperatura para vários semicondutores [19].

3.3 – Condutividade diferencial negativa do tipo-N em amostras de GaAs crescidas a baixas temperaturas por MBE

Amostras de GaAs semi-isolantes (SI), não-dopadas intencionalmente, são materiais que apresentam curva característica $I(V)$ da forma de NNDC como pode ser visto na figura 3.7, em que apresentamos algumas curvas da literatura.

Na figura 3.7 (d), apresentamos uma curva $I(V)$ característica para uma amostra de GaAs SI crescida por epitaxia por feixe molecular a baixas temperaturas (LTMBE). A temperatura de crescimento T_C para esta amostra foi de 315 °C. Para amostras de GaAs crescidas por MBE, quanto menor a temperatura de crescimento maior é, em princípio, a concentração de defeitos profundos [21], que são responsáveis pelas características semi-isolantes (SI) das amostras [22]. Em geral, quanto mais próximo do meio do *gap* estiver o nível do defeito, maior a sua capacidade de capturar portadores livres da banda de condução e, em consequência, a de produzir um aumento considerável na resistividade do semiconductor gerando o caráter SI. Este tipo de defeito torna-se, então, um instrumento relevante para aqueles casos em que se pretende obter um material base, o substrato, sobre o qual se deseja construir estruturas com propriedades elétricas específicas, mas sem que o substrato participe ativamente do processo de condução.

No caso específico de GaAs crescido por LTMBE, o defeito responsável pela característica SI é um defeito de anti-sítio, com o átomo de As ocupando a posição cristalográfica do Ga, representado por As_{Ga} , e sua concentração pode chegar a 10^{19} cm^{-3} . Esse defeito, em alguns trabalhos e em algumas situações específicas, tem sido também identificado como o Centro EL2 [21,23]. Essa confusão advém do fato de ainda existir dúvidas quanto à natureza química do Centro EL2. Entretanto, parece conclusivo que o EL2 contém um As_{Ga} . Esse defeito de anti-sítio é encontrado em GaAs crescido pela técnica de *Liquid-Encapsulated Czochralski* (LEC) em virtude de características próprias da técnica. Sua geração pode também ser induzida em GaAs preparados por MBE, reduzindo a temperatura de crescimento de forma a diminuir a migração dos átomos de As na camada epitaxial. Dessa forma, a chance dos átomos de As ficarem no sítio do Ga pode ser aumentada significativamente.

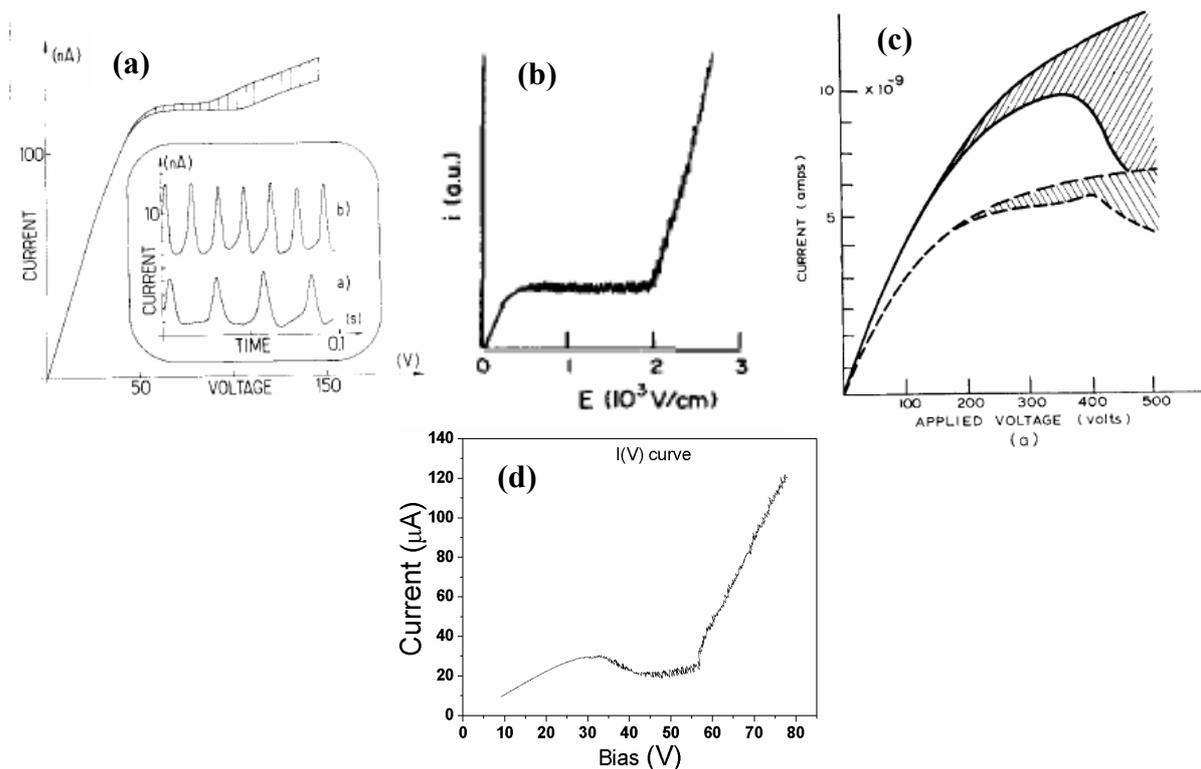


Figura 3.7: Curvas $I(V)$ para amostras de GaAs SI obtidas na literatura: (a) Ref. [12], (b) Ref. [20], (c) Ref. [10] e (d) Ref. [15].

As medidas de corrente em função da voltagem, $I(V)$, nos permitem obter uma série de informações sobre os centros de recombinação presentes em amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE. A partir dessas medidas, podemos obter informações sobre o tipo de processos de g-r e suas dependências com iluminação e temperatura. Podemos identificar processos como ionização por impacto (geração) e captura assistida pelo campo elétrico (*field-enhanced trapping* - recombinação). Em geral, tais processos de g-r estão associados às oscilações de baixa frequência (LFO) e aos domínios de campo elétrico que são formados em um dos contatos elétricos e que se movem em direção ao outro, produzindo pulsos na corrente [1,2,10-15]. A figura 3.8 mostra um circuito esquematizado que é utilizado para os estudos de curvas $I(V)$ em amostras semicondutoras que apresentam regiões NDC. É mostrado também o gráfico $I(V)$. Sendo I a corrente do circuito e V_A a voltagem da amostra, temos: $V = RI + V_A$, ou explicitando para I temos: $I = (V - V_A)/R$. Essa é a equação para a linha de carga também representada na figura 3.8. Sua intercessão com a curva característica $I(V)$ da amostra define os pontos de operação do circuito. Para amostras apresentando SNDC e NNDC podem existir até três pontos de operação

para o circuito, dependendo de como se varia V e R . Para R constante V torna-se o parâmetro para variar a linha de carga e os pontos de operação movem-se ao longo da curva $I(V)$. Para V constante, R torna-se o parâmetro de controle. O ponto de operação que corta a curva característica $I(V)$ na região de NDC é geralmente instável para a formação de padrões de densidade de corrente e campo e efeitos oscilatórios do circuito. Os outros dois são pontos de operação estáveis no sentido de que não há formação de padrões e nem comportamento oscilatório do sistema. Assim, o ponto de operação instável está relacionado com a presença de oscilações espontâneas e com o regime caótico do sistema [1,2,18].

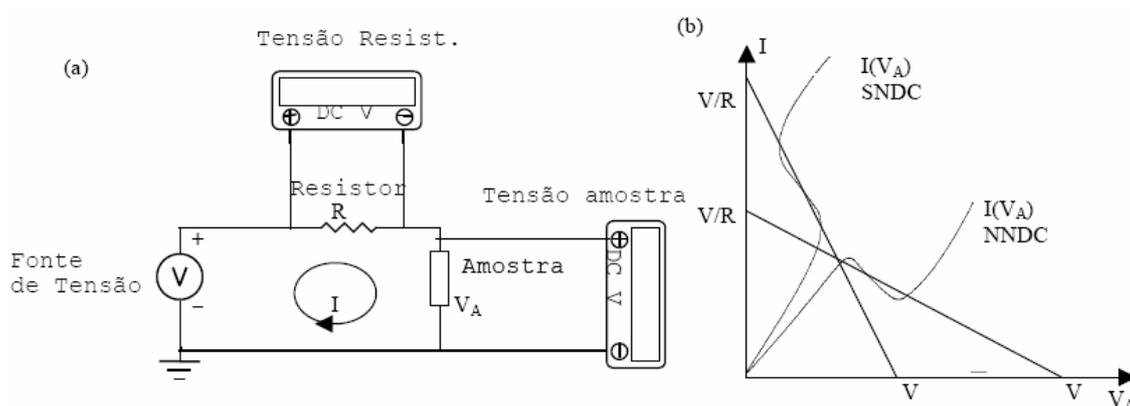


Figura 3.8: (a) Circuito esquemático utilizado em montagens experimentais para medidas $I(V)$ de amostras com NDC. (b) Análise por linhas de carga para as curvas do tipo SNDC e NNDC.

Como suporte experimental para nossos trabalhos teóricos, nos apoiamos em curvas $I(V)$ experimentais de amostras semi-isolantes de GaAs crescidas por LTMBE (low-temperature molecular-beam epitaxy) sobre um substrato de GaAs semi-isolante crescido por LEC (Liquid encapsulated Czochralski). É conhecido que em tais amostras existem defeitos rasos e profundos [24] e elas apresentam propriedades elétricas fortemente dependentes da temperatura e de condições de iluminação. As curvas $I(V)$ foram medidas em várias amostras e em várias condições de temperatura e iluminação onde se puderam identificar as regiões em que os principais processos de g-r dominam. Para temperaturas acima de 200 K as curvas $I(V)$ apresentaram um comportamento ôhmico para um amplo domínio de valores do campo elétrico aplicado e acima de um valor crítico, encontrou-se um comportamento super-linear caracterizado por um aumento abrupto da corrente. Este comportamento é apresentado na figura 3.9. Este tipo de comportamento sugere a presença do efeito de ionização por impacto. De fato, Paracchini *et*

al. [20] observou este efeito em amostras de GaAs SI para uma faixa de temperatura entre 200 a 300 K (figura 3.7b). Entretanto, sob iluminação e com o abaixamento da temperatura, um comportamento sub-linear foi observado. Este comportamento é apresentado na figura 3.10. De uma forma geral, podemos dizer que a sub-linearidade aumenta com a iluminação e com o abaixamento da temperatura. Este comportamento sugere a presença do efeito de captura assistida por campo elétrico (*field enhanced trapping*).

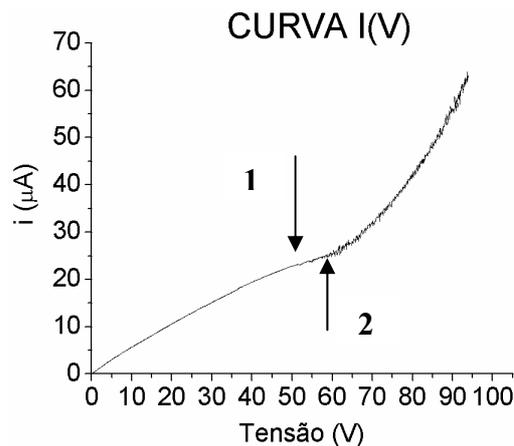


Figura 3.9: Curva $I(V)$ característica para uma amostra de GaAs SI crescida por LTMBE. A medida foi realizada a 200 K com uma iluminação do LED produzida por passar uma corrente de 10 mA. Para voltagens até o ponto indicado por 1, observamos o comportamento ôhmico da corrente. Do ponto 2 em diante, um comportamento não-linear na corrente.

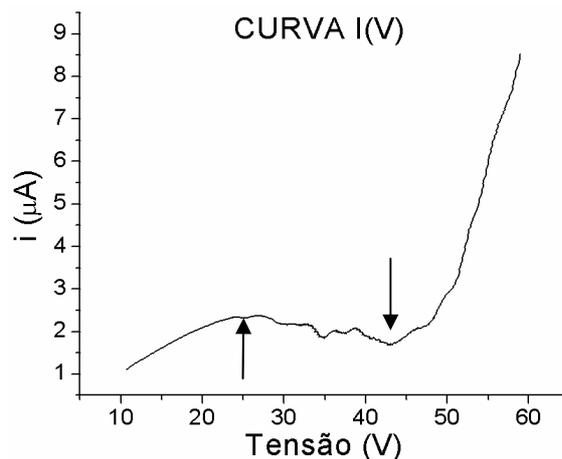


Figura 3.10: Curva $I(V)$ característica para uma amostra de GaAs SI crescida por LTMBE. A medida foi realizada a 175 K com uma iluminação pelo LED com 1 mA. As setas definem a região de sub-linearidade.

3.3.1 – Captura Assistida por Campo Elétrico

Nesta seção iremos apresentar uma descrição fenomenológica para o efeito e um modelo baseado no aumento da captura por um processo não radioativo, envolvendo a emissão de múltiplos fônons (*multiple phonon emission* – MPE), induzida pelo campo elétrico aplicado [25].

De uma forma geral, transições envolvendo defeitos profundos em semicondutores resultam na criação ou destruição de fônons e, por isso, dizemos que são transições assistidas por fônons. Esse tipo de transição é usualmente descrito, de uma maneira simples, num diagrama de energia potencial em função das coordenadas configuracionais (CC) que envolvem o defeito e sua vizinhança. A justificativa para trabalhar com CC advém do fato da energia dos níveis profundos depender da posição relativa dos átomos que constituem o defeito em relação à rede. Na descrição de CC, o eixo das abscissas representa o defeito e a suas vizinhanças e, o eixo das ordenadas representa a combinação das energias potenciais vibracionais (fônons) e eletrônicas. A energia potencial vibracional é representada pelas linhas horizontais igualmente espaçadas de $\hbar\omega$. A figura 3.11 (Ref [26]) representa o processo de Franck-Condon (a) e o processo de MPE (b). Para o processo de Franck-Condon, a energia de fotoionização $h\nu_a$ é maior que a de relaxação radiativa $h\nu_b$ em $2S\hbar\omega$. Esta diferença de energia deve-se ao fato de que os elétrons emitem fônons ao relaxar da posição U_a para U_b e novamente de L_b para L_a . Esta emissão de fônons deve-se ao fato de os mínimos da energia potencial do defeito vazio e ocupado não coincidirem no diagrama de coordenadas configuracionais.

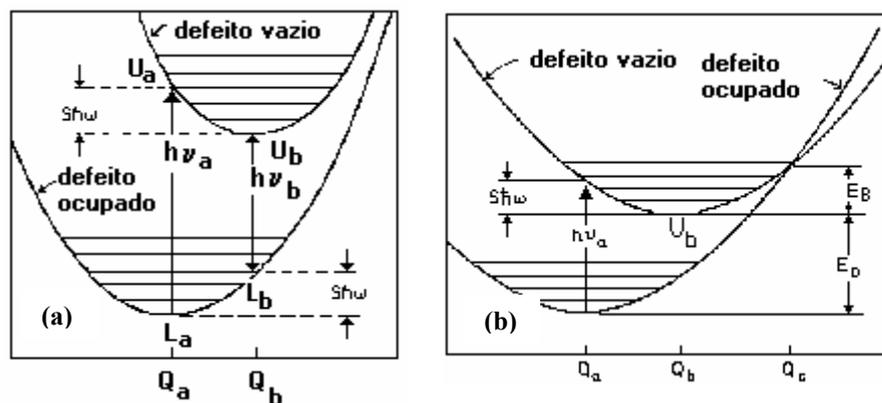


Figura 3.11: Diagrama de coordenada configuracional para fotoionização e recombinação por (a) Franck-Condon (radiativa) e (b) por MPE (não radiativa). O eixo das abscissas representa a coordenada configuracional do defeito e o eixo das ordenadas a energia potencial eletrônica e vibracional (veja a ref. 26).

Em algumas situações, a relaxação que ocorre após a fotoionização é completamente não radiativa pois toda a energia que é convertida em fônons. A emissão de fônons em cascata, que ocorre durante o amortecimento de vibrações, é conhecida como emissão de múltiplos fônons MPE e está representada na figura 3.11(b). Em algumas situações particulares, que é o caso de GaAs, a taxa de captura por MPE é bem mais eficiente que a de Franck-Condon devido a um forte acoplamento elétron-fônon que ocorre em virtude do cruzamento das energias potenciais do estado vazio e ocupado do defeito em Q_c [27]. Devido a este cruzamento e às vibrações da rede, o defeito pode ser encontrado em Q_c e, quando isto ocorre, ele pode capturar um elétron sem que haja emissão de fótons. Quando o defeito captura um elétron, ele adquire um estado quântico vibracional bastante elevado, comparado ao equilíbrio térmico e passa, portanto, por forte amortecimento das vibrações, seguido pela emissão de fônons múltiplos. Como a amplitude das vibrações da rede é proporcional à temperatura, a probabilidade de ocorrer captura por MPE cresce com a temperatura. Esta dependência com a temperatura é exatamente o inverso do que ocorre para a captura por Franck-Condon. Para esta última, a probabilidade de um elétron ir de U_a para U_b e recombinar sem absorver fônons da rede cresce com a redução de fônons disponíveis, ou seja, cresce para temperaturas decrescentes. A dependência da recombinação por MPE com a temperatura é, portanto, a razão de termos semicondutores com característica SI à temperatura ambiente. Este é exatamente o caso de GaAs com elevadas densidades de defeitos de anti-sítio (As_{Ga}).

A figura 3.12 ilustra o processo de captura por MPE. Antes da captura, o defeito vibra com a amplitude da seta menor esquerda, no instante imediatamente posterior à captura, o defeito vibra com amplitude representada pela seta maior sendo amortecida até a condição de equilíbrio caracterizada pela seta menor da direita.

De acordo com o relatado na ref. [27], a dependência da seção de choque de recombinação de MPE com a temperatura é proporcional a $\exp\{-E_B/kT^*\}$, onde: $kT^* = (1/2)(\hbar\omega) \coth(\hbar\omega/2kT)$ e T^* é a temperatura efetiva para a combinação de fônons térmicos com os fônons de ponto zero e E_B é a barreira de energia para a recombinação MPE (veja E_B na figura 3.11). Esta relação representa o equilíbrio térmico dos elétrons com a rede a uma temperatura T .

Para valores de E_B pequenos, o processo de MPE domina em toda a faixa de temperatura e, para valores de E_B crescentes, existe uma temperatura abaixo da qual a recombinação de

Franck-Condon se torna mais intensa. Num caso limite em que as duas parábolas não se cruzam ocorre somente a recombinação via o processo de Franck-Condon.

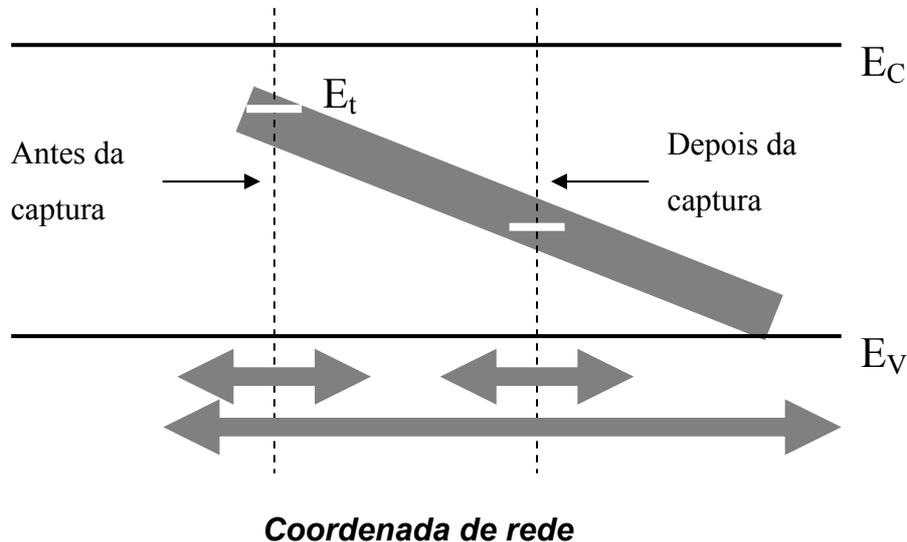


Figura 3.12: Diagrama ilustrando como ocorre a captura não radiativa de um elétron. As posições de equilíbrio da coordenada da rede e os níveis de energia antes e depois da captura são indicados pelas linhas pontilhadas. A região em cinza no interior do gap indica como a energia dos níveis muda com a vibração da rede. As setas duplas menores representam a amplitude das vibrações térmicas antes e depois da captura de um elétron. A seta dupla maior representa a amplitude das vibrações da rede na nova posição de equilíbrio imediatamente após a captura.

Nosso maior interesse é em estabelecer a dependência da relaxação não radiativa por MPE com a aplicação de campo elétrico externo E . Neste caso, os elétrons na banda de condução são acelerados pelo campo elétrico e transferem energia para a rede ao colidirem com as impurezas ionizadas (mecanismo de espalhamento predominante em baixas temperaturas). A energia média transferida por um elétron para a impureza com que colide é dada por $e\lambda E$ onde “ e ” é a carga do elétron, λ o livre caminho médio ou distância média entre colisões e E o módulo do campo elétrico aplicado.

Ao colidir com uma impureza ionizada (que pode ser um centro As_{Ga} carregado positivamente uma vez) o elétron transfere momento para a impureza que então passa a vibrar com amplitude em CC determinada pela fração da energia que recebeu. Podemos chamar esta fração de $e\lambda E$, para efeito de simplificação. Nessa situação, a impureza vibra fortemente,

podendo atingir a coordenada de cruzamento Q_c várias vezes até que capture um elétron e relaxe por MPE. Para este modelo, temos uma dependência da taxa de recombinação com o campo elétrico mais relevante do que com a temperatura, de forma a caracterizar o processo de *field enhanced trapping*. O conhecimento da forma funcional desta dependência é de grande importância para o estudo de fenômenos de dinâmica não-linear como as oscilações LFO e suas rotas para o caos.

Assim, devido ao fato do sistema se encontrar em equilíbrio com as colisões entre elétrons quentes e impurezas, ao invés de equilíbrio termodinâmico, é razoável trocar-se a equi-partição de energia kT por $e\lambda E$ na dependência da seção de choque de recombinação. Desta forma, em analogia com Shockley [28], obtemos uma taxa de recombinação na forma

$$T_1^S(E) = T_1^S(0) \exp\left(-\frac{\varepsilon_B}{e\lambda E}\right) = T_1^S(0) \exp\left(-\frac{E_c}{E}\right) \quad (3.10)$$

onde $E_c = \varepsilon_B/e\lambda$ é o campo elétrico crítico.

Assim, mostramos o efeito do campo elétrico no processo de recombinação por MPE a baixas temperaturas, em uma amostra de GaAs SI crescida por LTMBE. Esta é uma amostra rica em defeitos de anti-sítio, As_{Ga} . Acreditamos que a redução na densidade de elétrons livres em baixas temperaturas sob iluminação e em função do aumento do campo elétrico aplicado deve-se a uma ativação da recombinação por MPE.

O conhecimento da forma funcional da dependência do efeito de *field enhanced trapping* é de extrema importância na formulação de modelos para simular e prever o comportamento de oscilações de baixa frequência (LFO) e suas rotas para o regime caótico. Uma discussão mais detalhada sobre este efeito e sua primeira interpretação com dados experimentais pode ser encontrada na Ref. [25].

3.3.2 – Um modelo para as curvas características $I(V)$ em GaAs SI

Nesta seção iremos apresentar os resultados que obtivemos no estudo de curvas características $I(V)$ de amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE ajustando nestas curvas expressões analíticas. O objetivo deste estudo foi identificar simultaneamente os processos de recombinação (captura assistida por campo) e de geração (ionização por impacto), descritos nas seções anteriores, nas curvas $I(V)$ dessas amostras. Isso foi feito ajustando nessas curvas uma

expressão analítica para $j(E)$ que considerou as formas de dependência com o campo E desses dois processos. Estudos de ajustes de curvas $j(E)$ com expressões analíticas considerando estes dois processos simultaneamente são inéditos e apenas estudos considerando os dois processos isoladamente foram realizados [20,25]. Assim, essa é uma contribuição inédita do nosso trabalho.

Nesse estudo, partimos de medidas $I(V)$ já realizadas em amostras de GaAs SI crescidas entre 215 e 315 °C por MBE sobre substratos semi-isolantes de GaAs crescidos por LEC (Liquid encapsulated Czochralski). A densidade de corrente j foi obtida a partir da medida de corrente nas amostras dividida pela sua seção transversal. O campo elétrico E foi obtido dividindo a tensão nas amostras pela distância entre os contatos. Desta forma, temos a chance de trabalhar com parâmetros intensivos através das curvas $j(E)$.

Versões simplificadas para as características $j(E)$ em sistemas que apresentam regiões de NDC foram propostas com objetivos específicos de estudar os comportamentos oscilatórios desses sistemas [29-31]. Nesses trabalhos, o modelo para a curva $j(E)$ é constituído de três regiões lineares. Uma para o regime ôhmico, outra para a região de inclinação negativa e outra para a região de inclinação positiva. Um modelo geral para a característica $j(E)$, onde considera a fenomenologia dos processos microscópicos de g-r dos portadores de carga, não tinha sido considerado até o presente estudo. No nosso modelo para a característica $j(E)$, consideramos o regime ôhmico para campos elétricos baixos, o regime de NDC para campos intermediários, no qual incluímos a relação matemática proposta na literatura [25] para o processo de recombinação (captura assistida por campo), e o regime de avalanche para campos intensos, no qual incluímos a relação matemática proposta na literatura [28] para o processo de geração (ionização por impacto). Assim, a expressão analítica proposta neste estudo tem a forma

$$j(E) = \left[\sigma_0 - \sigma_1 \exp\left(\frac{-E_0}{E}\right) + \sigma_2 \exp\left(\frac{-E_1}{E}\right) \right] E. \quad (3.11)$$

O primeiro termo é a lei de Ohm, enquanto o segundo e o terceiro termos são, respectivamente, os fenômenos de captura assistida por campo e ionização por impacto. Nesta expressão, σ_0 , σ_1 e σ_2 são constantes de proporcionalidade positivas. E_0 e E_1 são os campos críticos.

De acordo com Shockley [28], a dependência do coeficiente de ionização por impacto com o campo elétrico é dada por

$$X_1(E) = X_{1-0} \exp\left(\frac{-E_1}{E}\right). \quad (3.12)$$

Onde X_{1-0} é o limite máximo para a taxa de geração, isto é, o valor assintótico para alto campo elétrico.

De acordo com o modelo proposto na Ref. [25], a dependência do coeficiente de captura assistida por campo elétrico é dada por

$$T_1^*(E) = -T_{1-0}^* \exp\left(\frac{-E_0}{E}\right). \quad (3.13)$$

onde T_{1-0}^* é o limite máximo para a taxa de recombinação. Para obter esta equação, foi utilizado $\varepsilon_B/e\lambda E$ ao invés da equi-partição da energia $\varepsilon_B/k_B T$ na relação proposta por Henry e Lang [27]. O parâmetro ε_B é a energia de recombinação, e é a carga do elétron e λ é o livre caminho médio dos portadores de carga. A justificativa é de que em baixas temperaturas a presença de fônons termicamente excitados é desprezível e, portanto, as colisões de elétrons quentes com impurezas produzem oscilações amortecidas e fônons gerando o processo de recombinação dependente do campo. Os campos críticos E_0 e E_1 estão relacionados com as energias de ativação ε_B e ε_i pelas expressões $E_0 = \varepsilon_B/e\lambda$ e $E_1 = \varepsilon_i/e\lambda$, onde o parâmetro ε_i é a energia de ativação para a ionização dos defeitos.

Na figura 3.13 mostramos duas curvas geradas pela eq. (3.11). Em (a), os coeficientes de g-r utilizados foram: $X_1 = X_1^0 \exp\left(-6.0E_t/\varepsilon\right)$, $X_1^* = X_1^{*0} \exp\left(-1.5E_t/\varepsilon\right)$ e $T_1 = -T_1^0 \exp\left(-1.0E_t/\varepsilon\right)$. Os valores para as constantes estão na tabela 2.3 do capítulo 2. Em (b), utilizamos valores para os coeficientes baseados no ajuste da figura 3.14: $j = (0.0003 - 0.0025 \exp(-2000/E) + 0.006 \exp(-4000/E))E$. As unidades da fig. 3.13(a) para j e E são $e\mu N_D^*$ e V/cm , respectivamente, e para a fig. 3.13(b) são A/cm^2 e V/cm , respectivamente.

Observamos que a eq. (3.11) gera curvas $j(E)$ do tipo-N. Observamos que a competição entre os coeficientes de g-r na eq. (3.11) pode aumentar ou diminuir a inclinação da região de NDC nessas curvas. Portanto, o modelo de curva $j(E)$, representado pela eq. (3.11), gera curvas características semelhantes às curvas $j(E)$ experimentais. O conhecimento da relação dos

coeficientes de g-r, ionização por impacto (g) e captura assistida por campo (r), na curva $j(E)$ de amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE é importante para implementar o modelo de equações de taxas para os processos de g-r vistos no capítulo 2 (eqs. 2.53-55).

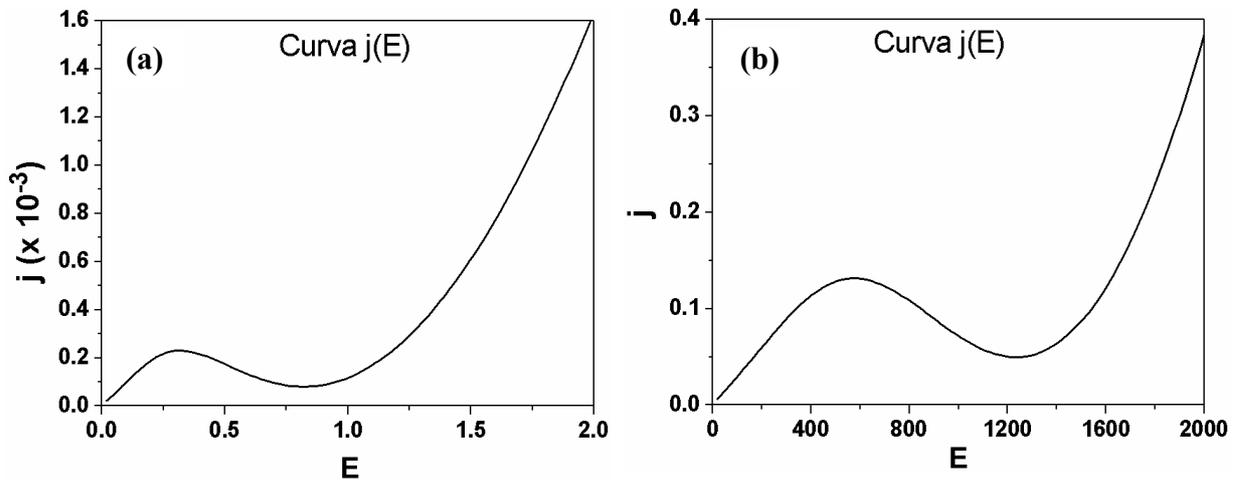


Figura 3.13: Curvas $j(E)$ geradas pela eq. (3.11). (a) Os coeficientes de g-r utilizados foram os da tabela 2.3 do capítulo 2 e com as equações para X_1 , X_1^* e T_1 . (b) Os coeficientes de g-r utilizados foram baseados na fig. 3.14.

As figuras 3.14, 3.15 e 3.16 mostram os resultados obtidos dos ajustes via a eq. (3.11) nas curvas características $j(E)$ das amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE. Os valores encontrados para os parâmetros σ_0 , σ_1 , E_0 , σ_2 e E_1 estão descritos nas figuras. O resultado do ajuste para as medidas em 150 K e $i_{LED} = 1$ mA esta representado na figura 3.14. Na figura 3.15 mostramos o ajuste para $j(E)$ em 175 K e $i_{LED} = 20$ mA. Na figura 3.16 mostramos o ajuste para $j(E)$ em 200 K e $i_{LED} = 10$ mA. Podemos observar nas figuras que a inclinação das regiões de NDC está diminuindo.

O campo crítico para a captura assistida por campo E_0 e o campo crítico para a ionização por impacto E_1 em função dos parâmetros experimentais, temperatura de medida e corrente no LED, são apresentados na Tabela 3.1. Na tabela podemos observar que E_1 é maior que E_0 , como era de se esperar, pois o processo de ionização por impacto ocorre para campos mais elevados do que para o processo de captura assistida por campo. Para uma temperatura fixa, E_1 aumenta com a iluminação, com exceção em 175 K e $i_{LED} = 10$ mA. Também para uma temperatura fixa, E_0 aumenta com a iluminação. Ou seja, a iluminação tem um papel importante nos processos de g-r, alterando os campos críticos para estes processos.

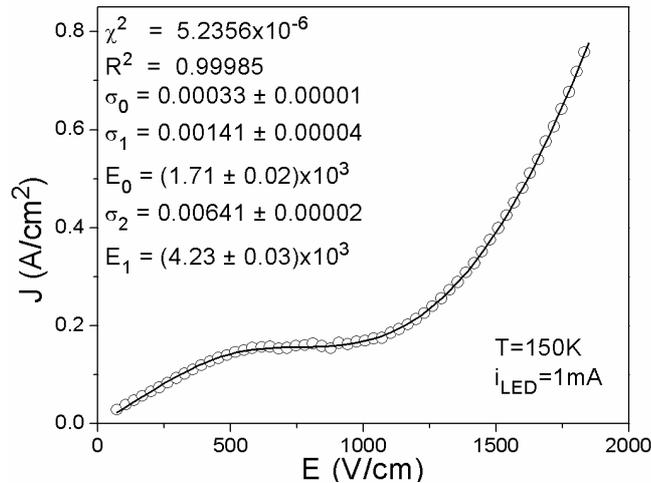


Figura 3.14: Ajuste da curva experimental $j(E)$ com a eq. (3.11). A curva foi obtida em 150 K e $i_{LED} = 1$ mA.

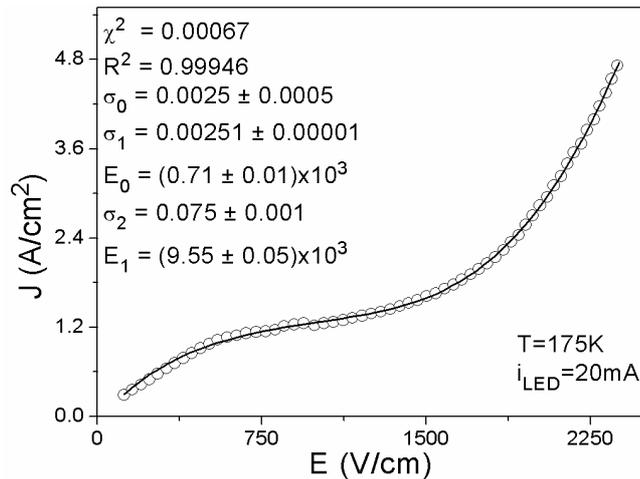


Figura 3.15: Ajuste da curva experimental $j(E)$ com a eq. (3.11). A curva foi obtida em 175 K e $i_{LED} = 20$ mA.

Em algumas faixas de campo elétrico, principalmente na região de NDC, as curvas $j(E)$ apresentam grandes oscilações. Nas figuras 3.14 – 3.16 são pouco visíveis estas oscilações porque o tipo de símbolo utilizado para representar os dados experimentais não permite tal observação. Mas na fig. 3.7(d), podemos ver com mais clareza estas oscilações. Estas oscilações são os fenômenos de LFO (oscilações de baixa frequência). Estas medidas foram realizadas numa escala de tempo de poucos minutos, que permitiu observações simultâneas da característica estática $j(E)$ e LFO.

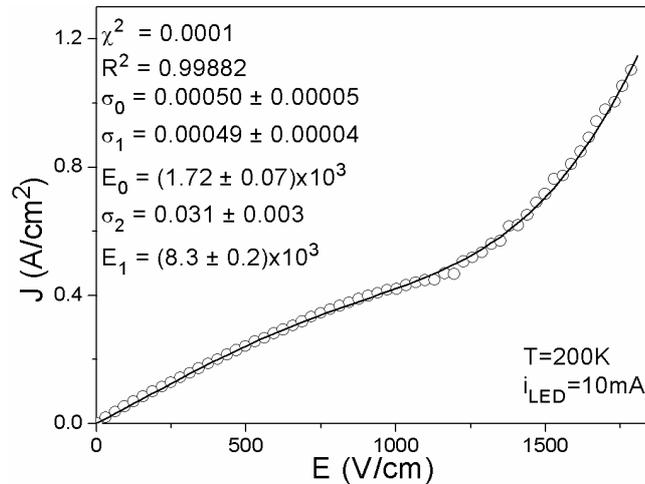


Figura 3.16: Ajuste da curva experimental $j(E)$ com a eq. (3.11). A curva foi obtida em 200 K e $i_{LED} = 10$ mA.

Tabela 3.1. Valores dos campos críticos em função da temperatura e iluminação. E_0 está associado com a captura assistida por campo e E_1 com a ionização por impacto.

TEMPERATURE (K)	i_{LED} (mA)	E_0 (kV/cm)	E_1 (kV/cm)
150	1.0	1.71 ± 0.02	4.23 ± 0.03
150	1.5	1.82 ± 0.03	7.56 ± 0.02
150	2.0	1.95 ± 0.05	8.60 ± 0.07
175	5.0	0.40 ± 0.02	8.90 ± 0.04
175	10.0	0.55 ± 0.01	8.32 ± 0.05
175	20.0	0.71 ± 0.01	9.55 ± 0.05
200	10.0	1.72 ± 0.07	8.3 ± 0.2

As curvas características $j(E)$ de amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE ricas em defeitos profundos (anti-sítio de As) são altamente dependentes da temperatura e iluminação. Portanto, estes dois parâmetros experimentais afetam as taxas (coeficientes) dos processos de g-r do portador de carga. A equação (3.11) contempla somente dois processos de g-r: a captura assistida por campo elétrico (recombinação) e ionização por impacto (geração). Demais processos que envolvem a banda de condução-defeito ou banda-banda ou até condução por

hopping não são considerados neste modelo. Portanto, para temperaturas entre 150 e 175 K e iluminação entre 1 e 20 mA, obtemos os melhores ajustes com o modelo descrito pela equação (3.11). Enquanto para temperaturas de 200 K e acima, obtivemos resultados menos satisfatórios com o modelo. Isto sugere que na faixa de temperatura acima de 200 K e para iluminação acima de 20 mA existam outros processos de g-r não considerados pelo modelo da eq. (3.11). É conhecido que sob iluminação com um LED de GaAs, a contribuição para as propriedades de transporte via processos banda-banda não pode ser desconsiderada [32]. Além disso, em altas temperaturas há muitos fônons que auxiliam o processo de recombinação por MPE (multiple phonons emission) além do campo elétrico [25,26]. É possível também que outros defeitos intrínsecos presentes nas amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE sejam ativados em certas faixas de temperatura e iluminação, contribuindo nos processos de g-r do portador de carga. E estes processos podem afetar a forma da curva $j(E)$, conseqüentemente influenciando na qualidade do ajuste. Assim, para temperaturas e iluminações nas quais vários processos de g-r, além daqueles considerados no modelo, estejam presentes a eq. (3.11) é inadequada, uma vez que ela considera apenas dois processos de g-r via banda de condução-defeito. Incluir mais termos na eq. (3.11) introduziria mais parâmetros de ajuste, tornando o valor destes pouco confiável. Assim decidimos concentrar nossos esforços em dados experimentos nos quais o modelo, baseado nos dois processos dominantes de g-r, seja suficiente para reproduzir estes dados. Com isso, para não aumentar a complexidade da eq. (3.11), decidimos não incluir mais termos nesta equação e apresentamos os resultados obtidos para 150 e 175 K como os mais ilustrativos.

Outro ponto relevante é que o modelo utilizado para os ajustes considera somente processos estáticos. Como já foi mencionado, algumas curvas $j(E)$ apresentam oscilações devido ao fenômeno de LFO e dependendo das condições experimentais são muito intensas, interferindo também nos ajustes.

Com este estudo mostramos que em certas faixas de temperatura e iluminação, os principais processos de g-r em amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE são: a captura assistida por campo elétrico (*field enhanced trapping*) – processo de recombinação; e a ionização por impacto – processo de geração. Em estudos anteriores [25] foi mostrado que a região de NDC presentes nas curvas $I(V)$ destas amostras são devido ao fenômeno de captura assistida por campo elétrico por um processo não-radiativo envolvendo emissão de múltiplos fônons. Isto não exclui outros processos de formação de regiões de NDC, como por exemplo o efeito Gunn. Mas

esse processo não é dominante nessas amostras, principalmente por ser ativado para campos elétricos bem mais altos, desempenhando, portanto, um papel desprezível. É importante ressaltar também que, nas faixas de temperatura e iluminação onde obtivemos os melhores ajustes, são também as melhores condições experimentais para observar o fenômeno de oscilações de baixa frequência (LFO) [15]. O conhecimento da forma funcional da dependência do efeito de *field enhanced trapping* com o campo elétrico é de extrema importância na formulação de modelos para simular e prever o comportamento de oscilações de baixa frequência (LFO) e suas rotas para o regime caótico (Capítulo 2). O modelo proposto no estudo aqui descrito nos fornece também uma visão útil dos mecanismos que afetam o transporte de carga nessas amostras.

Os resultados apresentados nesta seção estão publicados no periódico *Journal of Applied Physics* [33].

Referências do Capítulo 3

- [1] K. Aoki, *Nonlinear dynamics and Chaos in Semiconductors*, Series in Condensed Matter Physics, Institute of Physics Publishing, Bristol, 2001.
- [2] E. Schöll, *Nonlinear Spatio-Temporal Dynamics and Chaos in Semiconductors*, Cambridge Nonlinear Science Series 10, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [3] J. B. Gunn, *Solid State Commun.* **1**, 88 (1963).
- [4] K. Seeger, *Semiconductor Physics – An Introduction*, 4th ed, Springer, Berlin, 1989.
- [5] B. K. Ridley and T. B. Watkins, *Proc. Phys. Soc. London* **78**, 293 (1961).
- [6] C. Hilsum, *Proc. IRE* **50**, 185 (1962).
- [7] H. Kroemer, *Proc. IEEE* **52**, 1736 (1964).
- [8] A. R. Hutson, A. Jayaraman, A. G. Chynoweth, A. S. Coriell and W. L. Feldman, *Phys. Rev. Lett.* **14**, 639 (1965).
- [9] R. G. Praat and B. K. Ridley, *J. Phys. Chem. Solids* **26**, 11 (1965).
- [10] D. C. Northrup, P. R. Thornton and K. E. Tresize, *Solid State Electron.* **7**, 17 (1964).
- [11] H. K. Sacks and A. G. Milnes, *Int. J. Electron.* **28**, 565 (1970).
- [12] W. Knap, M. Jezewski, J. Lusakowski and W. Kuszko, *Solid State Electron.* **31**, 813 (1988).
- [13] G. N. Maracas, W. Porod, D. A. Johnson, D. K. Ferry and H. Goronkin, *Physica B* **134**, 276 (1985); G. N. Maracas *et al.*, *Solid State Electron.* **32**, 1887 (1989).
- [14] V. A. Samuilov, *Nonlinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors and*

- Devices*, Editor F.-J. Niedernostheide, Springer, Berlin, 1995.
- [15] R. M. Rubinger, R. L. da Silva, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro, H. A. Albuquerque, W. N. Rodrigues and M. V. B. Moreira, *Chaos* **13**, 457 (2003); R. L. da Silva, H. A. Albuquerque, R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, G. M. Ribeiro and W. N. Rodrigues, *Physica D* **194**, 166 (2004).
- [16] A. Neumann, *J. Appl. Phys.* **90**, 1 (2001).
- [17] F. Piazza, P. C. M. Christianen and J. C. Maan, *Physical Review B* **55**, 15591 (1997).
- [18] E. Schöll, *Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors*, Springer, Berlin (1987).
- [19] F. Brown, D. Parker, J. Heyman, N. Newbury, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1548 (1986); R. P. Khosla, J. R. Fischer, B. C. Burkey, *Phys. Rev. B* **7**, 2551 (1973).
- [20] C. Paracchini and V. Dallacasa, *Solid State Commun.* **69**, 49 (1989).
- [21] K. Krambrock, M. Linde, J. M. Spaeth, D. C. Look, D. Bliss and W. Walukiewicz, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 1037 (1992).
- [22] D. C. Look, *Thin Solid Films* **231**, 61 (1993).
- [23] G. M. Martin, A. Mitonneau and A. Mircea, *Electron. Lett.* **13**, 191 (1977).
- [24] R. M. Rubinger, J. C. Bezerra, E. F. Chagas, J. C. Gonzales, W. N. Rodrigues, G. M. Ribeiro, M. V. B. Moreira, and A. G. de Oliveira, *J. Appl. Phys.* **84**, 3764 (1998).
- [25] 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).
- [26] J. S. Blakemore, S. Rahimi, *Semiconductors and Semimetals*, Academic Press, New York, Vol. 20, p. 234, 1984.
- [27] C. H. Henry and D. V. Lang, *Phys. Rev. B* **15**, 989 (1977).
- [28] W. Shockley, *Solid State. Electron.* **2**, 35 (1961).
- [29] P. R. Solomon, M. P. Shaw and H. L. Grubin, *J. Appl. Phys.* **43**, 150 (1972).
- [30] M. P. Shaw and I. J. Gastman, *Appl. Phys. Lett.* **19**, 243 (1971).
- [31] M. P. Shaw, H. L. Grubin and I. J. Gastman, *IEEE Trans. Electron Devices* **20**, 169 (1973).
- [32] R. M. Rubinger, A. G. de Oliveira, J. C. Bezerra, G. M. Ribeiro, W. N. Rodrigues and M. V. B. Moreira, *Phys. Rev. B* **62**, 1859 (2000).
- [33] 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**, 1647 (2003).

CONCLUSÕES

No período de realização deste trabalho, estudamos instabilidades elétricas com um enfoque teórico. Para validação dos nossos resultados teóricos, utilizamos as medidas elétricas experimentais de amostras de GaAs semi-isolantes (SI) crescidas por epitaxia por feixe molecular à baixa temperatura (LTMBE), comparando qualitativamente com os resultados gerados pelos modelos. Nas medidas experimentais, as instabilidades surgem como uma descontinuidade na curva $I(V)$, apresentando uma região de NDC (condutividade diferencial negativa), fazendo surgir as oscilações de corrente elétrica de baixa frequência (LFO), cujo comportamento segue uma rota de bifurcação para o caos. Essas instabilidades estão relacionadas com os processos de geração e recombinação (g-r) dos portadores de carga nas amostras. Dois importantes processos de g-r podem ser identificados nessas amostras, quais sejam: a ionização por impacto (a geração) e a captura assistida por campo elétrico (a recombinação).

No nosso trabalho teórico, propusemos um modelo baseado nos dois processos descritos com vistas a descrever o comportamento da curva $I(V)$ das amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE (Capítulo 3). Conseguimos bons ajustes para as curvas $I(V)$ numa condição no qual podemos entender que, nitidamente, os dois processos de g-r estão presentes. Experimentalmente, esse modelo é útil para localizar a faixa de temperatura e iluminação onde os dois processos de g-r acima mencionados são relevantes. Como as instabilidades nessas amostras originam principalmente desses dois processos de g-r, torna-se fundamental inferir sobre as faixas de temperatura e iluminação para as quais estes processos são dominantes. E, além disso, teoricamente, o conhecimento da curva característica $j(E)$ dessas amostras é importante para implementar o modelo de equações de taxas para os processos de g-r numa tentativa de descrever as oscilações de corrente elétrica presentes em amostras de GaAs SI (Capítulo 2). Este trabalho está publicado no periódico *Journal of Applied Physics* [J. Appl. Phys. **93**, 1647 (2003)].

Como já foi mencionado, a instabilidade elétrica presente nas amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE são as LFO de corrente elétrica. Medidas experimentais de LFO foram realizadas nessas amostras e foram observados comportamentos não-lineares nas séries temporais de corrente elétrica. Análises realizadas nessas séries temporais, baseadas na teoria do caos, mostram que os comportamentos das LFO apresentam uma rota de bifurcação para o caos.

Estas séries temporais foram caracterizadas e cálculos de expoentes de Lyapunov, dimensão de correlação e diagrama de bifurcação foram feitos para estas séries temporais. Esses resultados originaram em dois artigos, um publicado no periódico Chaos [Chaos **13**, 457 (2003)] e outro no Physica D [Physica D **194**, 166 (2004)], nos quais participei como co-autor. As oscilações estão diretamente relacionadas com os processos de g-r já mencionados via a região de NDC das curvas $I(V)$ tipo-N dessas amostras. Por isso, é importante ter um conhecimento sobre as características das curvas $I(V)$ dessas amostras (Capítulo 3).

Na perspectiva de formulação de nosso modelo teórico, baseado nos processos de g-r do portador de carga em materiais semicondutores, para simular temporalmente o comportamento caótico apresentado nesses materiais, propusemos um conjunto de equações de taxas que incorporam ingredientes que julgamos os principais para gerar, teoricamente, as principais características do sistema. Nesse modelo, trabalhamos com a banda de condução e dois níveis de defeitos – o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Baseado nisso, escrevemos um conjunto de três equações acopladas para as taxas de gerações e recombinação do portador de carga. No capítulo 2, estudamos um dos modelos existente na literatura, e realizamos cálculos via teoria do caos determinístico nas séries temporais. Cálculos de expoentes de Lyapunov, dimensão de correlação e diagrama de bifurcação foram realizados, seguindo a metodologia de análises de séries temporais não-lineares experimentais. Esse sistema apresenta uma rota de bifurcação por duplicação de período. Resultados condizentes com a teoria do caos e com os resultados experimentais disponíveis foram encontrados e como este tipo de abordagem em modelos teóricos é pouco estudado, este trabalho está publicado no periódico Physica D [Physica D **208**, 123 (2005)]. Em suma, além de termos reproduzidos os resultados da literatura, tivemos a necessidade de considerar os aspectos inéditos (trabalhar com séries temporais e encontrar valores adequados para a dimensão de correlação) e avançamos na modelagem e criamos condições para construir os modelos teóricos para explicar os resultados experimentais que são observados no laboratório.

Este modelo é importante para tentarmos simular as oscilações de corrente presentes nas amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE. Ele incorpora os processos de g-r do portador de carga, mas somente o processo de ionização por impacto (a geração) tem uma dependência não-linear com o campo elétrico e sabemos que, via resultados anteriores, não só a ionização por impacto está presente nas amostras de GaAs SI crescidas por LT-MBE como também a captura assistida por campo elétrico e este é também dependente do campo elétrico de forma não-linear.

Assim, num estudo preliminar, incluímos também a dependência não-linear do coeficiente de recombinação (captura assistida por campo). Realizamos simulações com este modelo que, ao nosso ver, incorpora os principais processos de g-r responsáveis pelas instabilidades apresentadas nas amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE (capítulo 2). Obtivemos resultados animadores quanto à validade desse novo modelo proposto, uma vez que nesse modelo obtivemos padrões complexos nos diagramas de bifurcação. Padrões complexos significam aqui que o sistema apresenta rotas de bifurcação, não só por duplicação de período, que se assemelham bastante com os diagramas de bifurcação experimentais. Este estudo preliminar foi apresentado no 12th *Brazilian Workshop on Semiconductor Physics* em abril desse ano e foi aceito para publicação no *Proceedings* do encontro que será publicado no periódico *Brazilian Journal of Physics*.

Portanto, obtivemos resultados importantes para a compreensão das instabilidades apresentadas em amostras de GaAs SI crescidas por LTMBE. Conseguimos, através de ajustes das curvas $I(V)$ experimentais, interferir na escolha das condições experimentais (de iluminação e temperatura) para obter curvas $I(V)$ que apresentam os dois principais processos de g-r (ionização por impacto e captura assistida por campo) responsáveis pelas oscilações de corrente elétrica presentes nessas amostras. Além disso, através dos ajustes, obtivemos a forma funcional da curva $j(E)$ para implementar o modelo de equações de taxas para os processos de g-r numa tentativa de simular as oscilações de corrente elétrica em amostras de GaAs SI. Estudamos um modelo de equações de taxas para os processos de g-r proposto na literatura, via a série temporal do campo elétrico, e obtivemos resultados que estão de acordo com a teoria do caos e com os resultados experimentais. Este tipo de análise em sistemas teóricos tem sido muito pouco utilizado e, dos nossos resultados, podemos inferir que este tipo de análise é também confiável em modelos teóricos. Os resultados preliminares que obtivemos, na modificação do modelo de equações de taxas para os processos de g-r, no qual incluímos a captura assistida por campo elétrico, irá elucidar as origens das LFO, uma vez que os resultados preliminares indicam que o modelo microscópico é adequado ao que se observa na corrente do circuito elétrico contendo a amostra.

APÊNDICE I – CAOS E ANÁLISE DE SÉRIES TEMPORAIS

Neste apêndice, iremos revisar de maneira sucinta os principais procedimentos para caracterização da dinâmica caótica de um sistema não-linear. Existe uma grande quantidade de literatura sobre este tema e não queremos aqui fazer um trabalho inédito e sim uma revisão geral sobre o assunto e fornecer referências para consultas mais detalhadas.

I.1 – Dinâmica não-linear e Caos

Um ponto importante em dinâmica não-linear é a noção da não-linearidade de um sistema físico. Podemos desenvolver uma idéia intuitiva de não-linearidade em um sistema caracterizando o seu comportamento em termos de estímulo e resposta. Em um sistema físico real, composto de um circuito elétrico com um dispositivo eletrônico ôhmico (regido pela Lei de Ohm) e uma fonte de voltagem, ao aplicarmos uma voltagem V (estímulo) medimos a corrente I (resposta) que passa pelo dispositivo. No regime linear vale a relação:

$$V = RI \quad (\text{I.1})$$

onde R é a resistência do dispositivo e representa a constante de proporcionalidade do sistema. Ou seja, se razão entre estímulo e resposta é constante e vale a Lei de Ohm.

Um sistema é dito não-linear quando o dispositivo apresenta um comportamento não-ôhmico, ou seja, o comportamento entre V e I é não-linear. O estudo de comportamentos não-lineares em sistemas físicos é chamado de *dinâmica não-linear*, isto é, o estudo do comportamento dinâmico (dependência temporal) de um sistema não-linear. Um sistema não-linear pode, assim, ser entendido como um sistema onde a evolução temporal das equações é não linear, ou seja, as variáveis dinâmicas que descrevem as propriedades do sistema (por exemplo, corrente elétrica, posição, velocidade, aceleração, etc.) e suas derivadas aparecem nas equações de uma forma não-linear.

Mudanças feitas em sistemas não-lineares podem dar origem aos comportamentos complexos que têm sido rotineiramente denominado sistemas complexos. O substantivo *caos* e o adjetivo *caótico* são usados para descrever o comportamento temporal de um sistema quando este comportamento é simultaneamente aperiódico (nunca se repetindo exatamente) e

determinístico. Esse comportamento pode parecer aleatório ou ruidoso, embora existam características que o possam distinguir um do outro. Temos aqui uma aparente contradição - um sistema é dito *determinístico* se tivermos três ingredientes para determinar o seu comportamento:

- 1- as equações temporais;
- 2- os valores dos parâmetros que descrevem o sistema;
- 3- as condições iniciais;

- este sistema não-linear apresenta equações que o descreve, assim, com os valores dos parâmetros e as condições iniciais, podemos determinar completamente o comportamento subsequente deste sistema. Então como dizer que o comportamento do sistema não-linear é aleatório se ele apresenta os três ingredientes para ser determinístico? Podemos esclarecer este problema usando argumentos tradicionais. Ao vermos um sistema com comportamento complexo, aleatório, podemos tentar explicar o comportamento tanto com um argumento baseado na noção de ruído ou com um argumento baseado na complexidade. De acordo com a definição de ruído, o comportamento complexo poderia ser devido à influência de efeitos externos incontroláveis. Pelo fato destas influências externas mudarem de maneiras incontroláveis é que o comportamento do sistema parece aleatório. De acordo com o argumento baseado na complexidade, um sistema complexo tem vários graus de liberdade e é o movimento relacionado com esses vários graus de liberdade que leva ao aparente comportamento aleatório. Claro que em muitos casos, ruído e complexidade poderiam ser fatores que contribuem com a aleatoriedade do sistema. Mas a importância crucial do caos é que ele fornece uma explicação alternativa para esta aparente aleatoriedade – que não depende nem de ruído ou complexidade. Comportamento caótico pode aparecer em sistemas relativamente simples, livres de ruídos e com poucos graus de liberdade ativos. Para se certificar que um sistema se comporta caoticamente em um experimento, precisamos estabelecer que o ruído não é um fator predominante e deve-se conhecer o número de graus de liberdade ativos. A teoria de Caos nos fornece as ferramentas para executarmos estas análises. Recomendamos as referências [1-2] como textos básicos para uma introdução à Dinâmica não-linear e Teoria de Caos.

I.2 – Caracterização da Dinâmica Caótica

Em sistemas dissipativos, as trajetórias podem convergir para uma região limitada do espaço de fase, chamada de *atrator*. Um sistema dinâmico, que apresenta comportamento

caótico, possui um *atrator estranho*, no seu espaço de fase. Ele é estranho porque apresenta detalhes em escalas infinitesimais. Tal figura geométrica é chamada de *fractal*.

Nesta seção iremos definir os expoentes de Lyapunov, as dimensões fractal e de correlação e o método de reconstrução do espaço de fase.

I.2.1 – Definição de atrator

Um conjunto fechado de pontos A , no espaço de fase de um sistema dinâmico, é definido como atrator se:

- A é um conjunto invariante: ou seja, qualquer trajetória $\bar{x}(t)$ que começa em A , permanece em A por todo o tempo;
- A atrai um conjunto de condições iniciais: isto é, há um hiper-volume esférico B , que contém A , tal que para qualquer condição inicial $\bar{x}(0)$ pertencente a B , então a distância entre a trajetória $\bar{x}(t)$ e A tende a zero, quando $t \rightarrow \infty$. O maior conjunto de condições iniciais que satisfaz essa propriedade é chamado *bacia de atração* de A .
- A é mínimo: ou seja, não há sub-conjunto de A que satisfaça as duas condições anteriores.

Num sistema dinâmico de tempo contínuo autônomo e bidimensional temos que a figura atratora pode ser de dois tipos:

- o ponto de equilíbrio, que corresponde a uma solução cujo comportamento dinâmico é independente do tempo;
- o ciclo-limite, que descreve um comportamento periódico no tempo, com amplitude e período determinados pela forma das equações e pelos valores dos seus parâmetros.

Num sistema tridimensional, existem mais duas figuras atradoras, que são:

- a superfície toroidal, que representa um regime periódico ou quasi-periódico, com 2 frequências fundamentais independentes;
- o atrator estranho, que apresenta dependência sensível às condições iniciais.

Um sistema dinâmico determinístico, cuja evolução temporal leva assintoticamente para um atrator estranho, apresenta dinâmica caótica. Para que possa existir comportamento caótico

em sistemas contínuos dissipativos, é necessário que ele seja não-linear e pelo menos tridimensional, como o sistema de Lorenz.

Caos advém de uma dependência sensível às condições iniciais. Diz-se que um mapa $x_{j+1} = F(x_j)$ depende sensivelmente das condições iniciais se há um número $\varepsilon > 0$, tal que para qualquer condição inicial x_0 e para qualquer número $\delta > 0$, existe pelo menos um ponto x'_0 com $|x'_0 - x_0| < \delta$, tal que $|F^{(k)}(x'_0) - F^{(k)}(x_0)| \geq \varepsilon$. Assim, não importa o valor de x_0 e nem a vizinhança δ , pode-se sempre encontrar um ponto x'_0 nessa vizinhança cuja órbita separa-se da órbita de x_0 de pelo menos ε . Além disso, essa distância ε independe de x_0 .

Esta definição de sensibilidade às condições iniciais não exige que a órbita de x'_0 afaste-se da órbita de x_0 em todas as iterações. Ela exige somente que o k -ésimo ponto da órbita de x_0 esteja afastando do k -ésimo ponto da órbita de x'_0 por uma distância ε . Pode-se formular uma definição equivalente de dependência sensível para sistemas de tempo contínuo. Tanto para sistemas discretos, como para sistemas contínuos, a sensibilidade às condições iniciais é avaliada através do cálculo dos expoentes de Lyapunov.

I.2.2 – Expoentes de Lyapunov

Seja um sistema de n equações diferenciais ordinárias. Considere uma hiper-esfera de condições iniciais centrada num ponto $\vec{x}(t_0)$. Conforme o tempo passa, esse volume se deforma. Assuma que, ao longo de cada uma das n dimensões, o raio inicial $d_j(t_0)$ tenha variado exponencialmente no tempo, de maneira que a relação entre $d_j(t_0)$ e o valor correspondente no instante t , dado por $d_j(t)$, valha:

$$d_j(t) = d_j(t_0) \exp[\lambda_j(t - t_0)] \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Essa relação pode ser escrita como:

$$\lambda_j = \frac{\ln[d_j(t)/d_j(t_0)]}{t - t_0}$$

Os números λ_j são chamados de *expoentes de Lyapunov*.

Num instante $t > t_0$, o volume $V(t)$ da hiper-esfera deve ser proporcional ao produto das distâncias $d_j(t)$ que o caracterizam, isto é:

$$V(t) \propto \prod_{j=1}^n d_j(t) \propto V(t_0) \exp\left[(t-t_0) \sum_{j=1}^n \lambda_j\right]$$

sendo $V(t_0)$ o volume no instante inicial t_0 . Se o sistema é conservativo, então $V(t) = V(t_0)$ ou, em termos dos expoentes de Lyapunov:

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j = 0.$$

Se é dissipativo, $V(t) < V(t_0)$, o que equivale a:

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j < 0.$$

Sobre uma solução periódica, a distância entre duas condições inicialmente vizinhas se mantém constante, em média, de modo que o expoente de Lyapunov associado a essa direção é nulo. Nas direções perpendiculares ao atrator periódico, há contração de volume no espaço de fase. Portanto, os expoentes de Lyapunov correspondentes a essas direções são negativos.

Comportamento caótico é caracterizado pela divergência exponencial das trajetórias vizinhas. Nesse caso, há pelo menos um expoente de Lyapunov positivo, o que implica dependência sensível com as condições iniciais e a existência de um atrator estranho no espaço de fase.

Num sistema tridimensional, existem quatro tipos de atratores, conforme foi descrito na seção anterior. A tais atratores correspondem três expoentes de Lyapunov – $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ – com os seguintes sinais:

1. para o ponto de equilíbrio, tem-se $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 < 0$, já que o volume de condições iniciais deve se contrair ao longo das três direções do espaço de fase, a fim de que a trajetória convirja para o ponto;
2. para o ciclo-limite, tem-se $\lambda_1, \lambda_2 < 0$ e $\lambda_3 = 0$, sendo que o expoente nulo corresponde à direção ao longo da órbita fechada;

3. para o toro bidimensional, tem-se $\lambda_1 < 0$ e $\lambda_2, \lambda_3 = 0$, de modo que as trajetórias atratoras situam-se sobre uma superfície;
4. para o atrator estranho, tem-se $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 = 0$ e $\lambda_3 < 0$: um expoente deve ser positivo para que exista dependência sensível com as condições iniciais; aquele ao longo da trajetória deve ser nulo; e o outro deve ser negativo e maior do que o primeiro, para que o sistema seja dissipativo, isto é, $\sum_{j=1}^3 \lambda_j = \lambda_1 + \lambda_3 < 0$.

Um atrator ocupa um volume finito no espaço de fase. No caso de um atrator estranho, trajetórias que partem de condições iniciais vizinhas, além de permanecerem confinadas numa certa região do espaço de fase, devem ainda se distanciar exponencialmente. Como trajetórias podem se afastar exponencialmente e ocupar uma região limitada do espaço de fase? O mecanismo responsável por isso envolve repetidos esticamentos e dobras das trajetórias.

O fluxo responsável pela geração de um atrator estranho normalmente contrai um volume de condições iniciais numa direção, pois o sistema é dissipativo, e estica-o na outra, levando à sensibilidade às condições iniciais. Como o atrator ocupa um volume finito, o processo de esticamento das trajetórias deve ser concomitante ao processo de dobra.

I.2.3 – Dimensões de um atrator

A dimensão de um conjunto de pontos é o número mínimo de coordenadas necessárias para localizar cada ponto do conjunto. Por exemplo, uma curva é unidimensional, porque cada ponto é determinado por um único número, que é o comprimento do arco medido a partir de algum ponto de referência fixo nessa curva.

Seja um conjunto de pontos A num espaço de fase de dimensão n . Esse conjunto de pontos pode ser coberto por hiper-cubos iguais de lado ε . Em 1958, Kolmogorov definiu a *dimensão de contagem de caixas* (“box-counting dimension”) D_0 como:

$$D_0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log(1/\varepsilon)}$$

$N(\varepsilon)$ é o número mínimo de hiper-cubos idênticos de lado ε necessário para cobrir todo o conjunto de pontos A . Outro nome para D_0 é dimensão de capacidade.

Assim, se calcularmos a dimensão de um segmento de reta de comprimento L utilizando a relação acima encontraríamos:

$$D_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log 2^n}{\log(2^n/L)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log 2^n}{\log 2^n - \log L} = 1$$

pois, podemos cobrir o segmento de reta com uma caixa de comprimento L , ou por duas caixas de comprimento $L/2$, ou por quatro caixas de comprimento $L/4$, ou generalizando, por 2^n caixas de comprimento $L/2^n$. E podemos considerar que $\varepsilon \rightarrow 0$ é equivalente a tomar $n \rightarrow \infty$.

Se aplicarmos a relação de D_0 para calcular a dimensão do conjunto de Cantor, encontraríamos:

$$D_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log 2^n}{\log(3^n/L)} = \frac{\log 2}{\log 3} \approx 0.63.$$

Assim, o conjunto de Cantor é caracterizado por um valor de D_0 fracionário, ou seja, não-inteiro. O conjunto de Cantor, figura I.1, é construído se considerarmos um intervalo $S_0 = [0,1]$ e removemos seu terço central. Isso produz o par de intervalos $[0,1/3]$ e $[2/3,1]$. Removemos agora os terços centrais de S_1 , produzindo S_2 . Repetimos esse procedimento infinitas vezes. O conjunto limite S_∞ obtido é chamado de conjunto de Cantor, sendo formado por infinitos pedaços infinitesimais separados por infinitos intervalos de vários tamanhos. Sua estrutura é auto-similar, pois contém cópia de si próprio em todas as escalas.

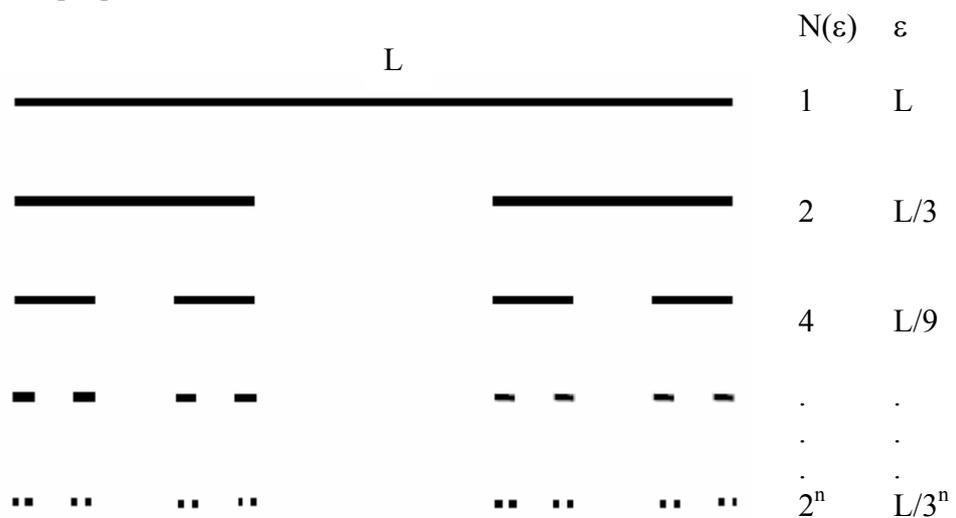


Figura I.1: Construção do conjunto de Cantor.

O termo fractal foi proposto por Mandelbrot, por volta de 1975. O que fractais têm a ver com caos? Nada, quando o fractal é produzido por uma regra do tipo Cantor. Rotinas para produzir figuras, cujo valor de D_0 é fractal, aparecem em livros de geometria do início do século XX. Outros exemplos clássicos são a curva de Koch e o triângulo de Sierpinski, figura I.2.

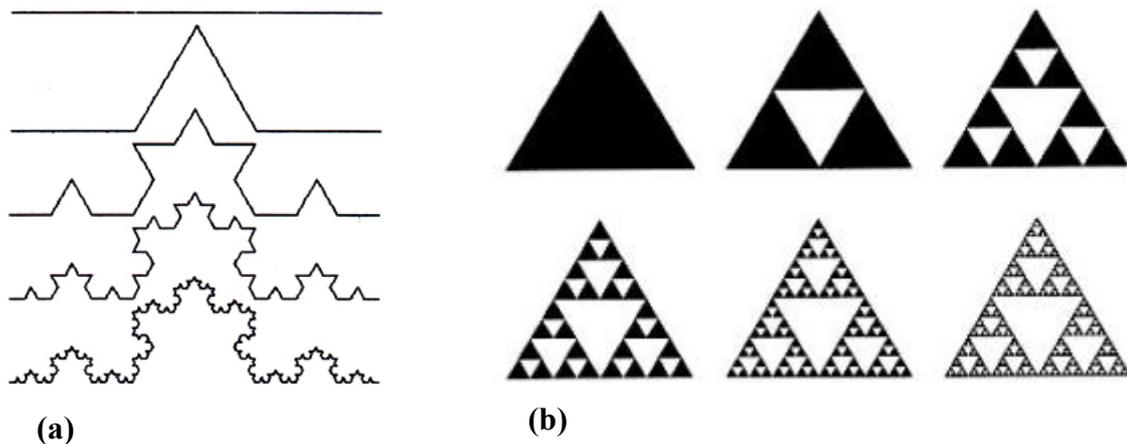


Figura I.2: (a) Curva de Koch com sua regra de formação, $D_0 \approx 1.26$, e (b) triângulo de Sierpinski também com sua regra de formação, $D_0 \approx 1.58$.

Fractais podem ser gerados pelo comportamento assintótico de um sistema dinâmico, representado no espaço de fase correspondente. Ou seja, fractais podem ser atratores de sistemas dinâmicos. E esses atratores podem ser caracterizados, por exemplo, pelo valor de D_0 . De fato, o cálculo de D_0 é útil na caracterização de atratores. A dimensão dos atratores de processos não-caóticos, em sistemas de tempo contínuo, é inteira. Por exemplo, para um sistema tridimensional, tem-se como atratores: o ponto de equilíbrio, que possui $D_0 = 0$; o ciclo limite, com $D_0 = 1$; o toro, com $D_0 = 2$. Para processos caóticos, os atratores possuem dimensão fracionária. Por exemplo, o sistema de Lorenz:

$$\begin{aligned}\dot{X} &= \sigma(Y - X) \\ \dot{Y} &= -XZ + rX - Y \\ \dot{Z} &= XY - bZ\end{aligned}$$

para $\sigma = 10$, $b = 8/3$ e $r = 28$, possui $D_0 \approx 2.06$. Assim, o atrator que parece uma asa de borboleta, figura I.3, é uma superfície com uma ligeira espessura. O valor de D_0 revela o número de variáveis necessárias para se descrever o comportamento assintótico do sistema.

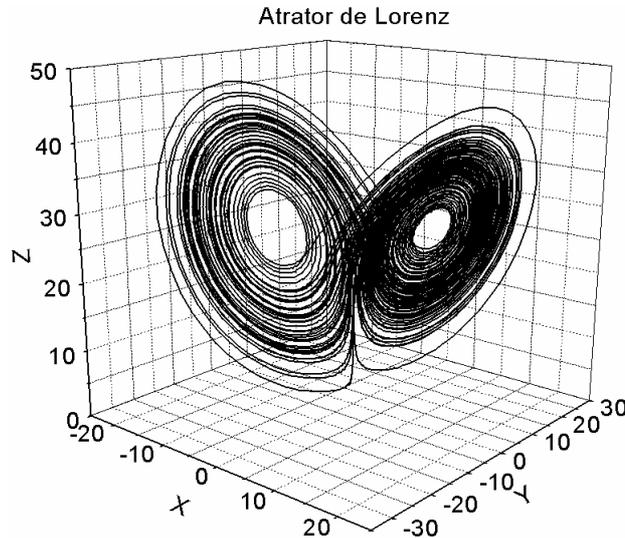


Figura I.3: Atrator de Lorenz representado em 3-D.

A dimensão de contagem de caixas é um caso especial da dimensão proposta por Hausdorff, em 1918. Para o cálculo da *dimensão de Hausdorff*, D_H , é necessário encontrar o conjunto de hiper-cubos de lados ε_j , com $\varepsilon_j \leq \varepsilon$, que cubra o hiper-volume ocupado pelo atrator, de modo que o número de hiper-cubos utilizados seja mínimo. É praticamente impossível determinar o valor de D_H para um atrator estranho, pois, de todas as maneiras possíveis para se cobrir tal atrator, deve-se encontrar a solução ótima. Pode-se mostrar que $D_H \leq D_0$. Tanto D_0 , quanto D_H , costumam ser chamados de *dimensão fractal*.

Muitos atratores estranhos não são homogêneos, de maneira que algumas de suas regiões são mais visitadas do que outras. Por isso, para se caracterizar um atrator, calculam-se outras dimensões que levam em conta suas não-homogeneidades. Tais dimensões se baseiam na frequência relativa f_j com que cada caixa j é visitada. A frequência f_j é definida simplesmente como:

$$f_j = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_j}{N}$$

sendo N o número total de pontos que pertencem ao atrator e N_j o número de pontos na caixa j .

Dentre as dimensões generalizadas, as mais relevantes (além de D_0) são a *dimensão de informação* D_I :

$$D_1 = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{N(\varepsilon)} \frac{f_j \log f_j}{\log(1/\varepsilon)}$$

e a dimensão de correlação D_2 :

$$D_2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{N(\varepsilon)} \frac{(f_j)^2}{\log(\varepsilon)} \quad (\text{I.2})$$

Pode-se mostrar que:

$$D_2 \leq D_1 \leq D_0 \quad (\text{I.3})$$

sendo que a igualdade só ocorre para atratores homogêneos.

O termo $(f_j)^2$ que aparece em (I.2) representa a frequência relativa com que dois pontos de um atrator caem na j -ésima caixa de tamanho ε . Em 1983, Grassberger e Procacia [3] sugeriram aproximar $(f_j)^2$ pela frequência relativa com que dois pontos estão separados por uma distância menor ou igual a ε . Seja $q(\varepsilon)$ a fração de pontos do atrator que está dentro de uma hiper-esfera de raio ε , centrada em \vec{x}_j . Essa fração é expressa pela relação:

$$q(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N H(\varepsilon - \|\vec{x}_j - \vec{x}_k\|)$$

sendo N o número de pontos no atrator. A função degrau $H(y)$ é tal que $H = 1$ se $y \geq 0$, e $H = 0$ se $y < 0$.

Defini-se a *função de correlação* $C(\varepsilon)$ como o valor médio de $q(\varepsilon)$, calculado sobre todos os pontos \vec{x}_j . Assim:

$$C(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{j=1(j \neq k)}^N q(\varepsilon)$$

Na prática, toma-se, aleatoriamente, N' pontos \vec{x}_j ($N' < N$) e determina-se o número de pontos que estão contidos na hiper-esfera de raio ε . Desse modo:

$$C(\varepsilon) \approx \frac{1}{N'} \sum_{j=1(j \neq k)}^{N'} q(\varepsilon)$$

O valor de C é proporcional a ε , se os pontos do atrator estão dispostos sobre uma reta; proporcional a ε^2 , se tais pontos estão uniformemente espalhados num plano. No caso de estarem sobre uma estrutura fractal, Grassberger e Procaccia [3] alegaram que C é proporcional a ε^{D_2} , ou seja:

$$D_2 \approx \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log C(\varepsilon)}{\log \varepsilon} \right)$$

Normalmente, calcula-se D_2 para vários ε e estima-se seu valor a partir da inclinação da parte linear do gráfico $\log C(\varepsilon)$ em função de $\log(\varepsilon)$.

Qual é a utilidade prática de estimar D_2 ? A resposta para essa questão tem duas partes. A primeira refere-se à dificuldade computacional de se calcular D_0 . Numericamente, D_0 é calculado usando-se um algoritmo de contagem de caixas. Tal algoritmo, entretanto, exige um esforço computacional (memória e tempo de processamento) muito maior do que o algoritmo de Grassberger e Procaccia [3], principalmente quando $D_0 > 2$. E, ao se estimar D_2 , obtém-se um limite inferior para o valor de D_0 , pois a relação I.3 é verdadeira. Obter D_0 é importante para a caracterização do atrator, já que este número revela quantas variáveis são necessárias para descrever o comportamento assintótico do sistema. Entretanto, a principal razão para se estimar D_2 aparece quando se trabalha com séries temporais reais.

I.2.4 – Teorema de reconstrução de Takens

Se as equações diferenciais que governam um sistema dinâmico são conhecidas, pode-se caracterizar o atrator desse sistema calculando as dimensões D_0 , D_1 , D_2 e os expoentes de Lyapunov. Entretanto, em problemas reais, normalmente tem-se uma série temporal de dados experimentais. Não sabe, de antemão, quais são as variáveis de estado desse sistema e nem a forma das equações diferenciais que governam a evolução dessas variáveis.

O sistema de Rössler é composto pelas equações diferenciais:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= -y - z \\ \frac{dy}{dt} &= x + ay \\ \frac{dz}{dt} &= b + (x - c)z\end{aligned}\tag{I.4}$$

sendo a , b e c constantes. Para $a = 0.2$, $b = 0.4$ e $c = 5.7$, existe um atrator estranho no espaço de fase desse sistema dinâmico. Esse espaço é, obviamente, formado pelo eixo- x , pelo eixo- y e pelo eixo- z . Packard *et al.* [4] analisaram o comportamento desse sistema no espaço formado pelo eixo- x , pelo eixo- dx/dt e pelo eixo- d^2x/dt^2 . Eles mostraram que, nesse novo espaço, a figura geométrica que caracteriza o comportamento assintótico do sistema é topologicamente equivalente ao atrator estranho original. Essa figura é chamada de *atrator reconstruído*. Assim, o atrator original, no espaço (x, y, z) , e o atrator reconstruído, no espaço $(x, dx/dt, d^2x/dt^2)$, são caracterizados pelos mesmos valores de dimensões e expoentes de Lyapunov. Portanto, a partir da evolução temporal de uma única variável, $x(t)$ no caso, pode-se determinar as características do atrator.

Como exemplo, seja um ciclo limite circular, assintoticamente estável no seu espaço de fase, descrito pelas expressões $x(t) = \sin(t)$ e $y(t) = \cos(t)$. Suponha que seja conhecida apenas a variação temporal de $x(t)$. Para reconstruir o atrator, faremos o espaço de fase constituído pelos eixos- x e $-dx/dt$, sendo o eixo- dx/dt aproximado por $[x(t+h)-x(t)]/h$. A figura I.4 ilustra o atrator reconstruído, tomando-se alguns valores diferentes de h . Nos três casos, o atrator reconstruído é topologicamente equivalente ao atrator original. Repare que para $h \rightarrow 0$, obtém-se o atrator original, pois, para ele, $dx/dt = y$. Esse exemplo é bastante artificial. Em geral tem-se que $dx/dt = f(x,y)$ e $dy/dt = g(x,y)$.

Como se sabe de antemão, qual a dimensão do espaço de fase no qual se fará a reconstrução do atrator? Ou seja, como se pode determinar a dimensão que é adequada para se fazer a reconstrução do atrator? Além disso, como descobrir qual o valor do passo h que é o mais conveniente?

Na verdade, o método de reconstrução de atrator proposto por Packard *et al.* [4] é ligeiramente diferente daquele que foi descrito acima. Sabe-se que dx/dt , d^2x/dt^2 ou derivadas de ordem superior podem ser representadas por equações de diferenças com passo infinitesimal. Assim:

$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{x(t+h) - x(t)}{h} \quad h \rightarrow 0$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} \approx \frac{x(t+2h) - 2x(t+h) + x(t)}{h^2} \quad h \rightarrow 0$$

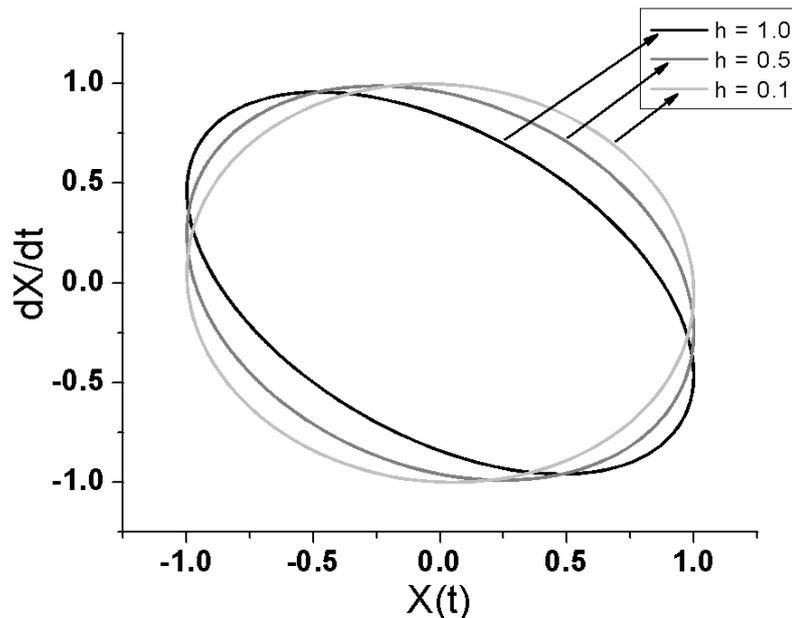


Figura I.4: Atrator reconstruído para h igual a 1.0, 0.5 e 0.1.

Uma série temporal real consiste de um conjunto $x_j = x(t_j)$ de valores, obtidos nos instantes de tempo t_j , para $j = 1, \dots, N$. A determinação numérica de derivadas a partir de um conjunto discreto de pontos é bastante sensível a ruído, o que torna seu cálculo muito impreciso. Além disso, o passo h possui um valor finito, de maneira que a qualidade da aproximação de uma derivada por uma equação de diferença diminui com o aumento da ordem da derivada.

Em vez de usar $x(t)$, dx/dt , d^2x/dt^2 ... como as variáveis que formarão o espaço no qual o atrator será reconstruído, Packard *et al.* [4] sugeriram usar, diretamente, $x(t)$, $x(t+h)$, $x(t+2h)$... etc. Note que, no exemplo da figura I.3, o atrator original é perfeitamente reconstruído tomando-se $x(t)$ e $x(t+h)$ com $h = \pi/2$.

Takens [5] provou que, no espaço de fase formado pelo eixo- $x(t)$, pelo eixo- $x(t+h)$, pelo eixo- $x(t+2h)$... e pelo eixo- $x(t + (m-1)h)$, o atrator reconstruído é topologicamente equivalente

ao atrator real, sobre o qual conhece-se apenas a evolução em tempo discreto da variável de estado x . Na sua prova, Takens assumiu que a série é formada por infinitos pontos x_j e que não há ruído. Se essas condições são satisfeitas, as propriedades topológicas do atrator reconstruído são preservadas, tomando-se $m \geq 2D_0 + 1$, sendo D_0 a dimensão de contagem de caixas do atrator real. Chama-se *espaço de imersão* o espaço no qual realiza-se a reconstrução. Denomina-se m de *dimensão de imersão* e h de *passo da reconstrução*. Note que h deve ser múltiplo do tempo de amostragem do sinal contínuo $x(t)$.

Por exemplo, no caso do sistema de Lorenz, figura I.3, tem-se que a dimensão de contagem de caixas do atrator real vale $D_0 = 2.06$. Assim, segundo Takens [5], pode-se reconstruir o atrator a partir de $x(t)$, tomando-se $m > 2D_0 + 1$. Nesse caso, $m = 6$ parece ser suficiente. Entretanto, num problema real, não se conhece o atrator original, nem seu valor de D_0 . A seguir, mostra-se como m pode ser determinado, nesses casos.

Pelo *método dos atrasos temporais* de Takens, a cada instante t_j , assinala-se o ponto de coordenadas $x(t_j), x(t_j + h), \dots, x(t_j + (m-1)h)$ no espaço de imersão. Variando-se j de 1 até N , obtém-se a trajetória reconstruída.

Assuma que $\vec{\xi}_\alpha$ representa a posição do ponto no espaço de imersão, no instante t_α . Assim, a trajetória reconstruída é formada pela seqüência:

$$\begin{aligned}\vec{\xi}_1 &= (x(t_1), x(t_1 + h), \dots, x(t_1 + (m-1)h)) \\ \vec{\xi}_2 &= (x(t_2), x(t_2 + h), \dots, x(t_2 + (m-1)h)) \\ &\vdots \\ \vec{\xi}_\alpha &= (x(t_\alpha), x(t_\alpha + h), \dots, x(t_\alpha + (m-1)h))\end{aligned}$$

com $\alpha = 1, \dots, M$. As componentes m, h, N, M relacionam-se por $N = M + (m-1)h$.

A partir dos valores de $\vec{\xi}_\alpha$, pode-se estimar a dimensão de correlação D_2 , calculando-se $C(\varepsilon)$ pela seguinte fórmula:

$$C(\varepsilon) = \frac{1}{M^2} \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k(k \neq \alpha)}^M H\left(\varepsilon - \|\vec{\xi}_\alpha - \vec{\xi}_k\|\right)$$

Não se sabe, previamente, que dimensão de imersão m é conveniente para a reconstrução do atrator. Para se encontrar o valor de m mais adequado, calcula-se $C(\varepsilon)$ para vários valores de ε , variando m , por exemplo, entre 2 e 7; e representam-se esses resultados num gráfico $\log C(\varepsilon)$ em

função de $\log(\varepsilon)$. A inclinação da parte linear dos gráficos dá uma estimativa para o valor de D_2 , para cada m . O valor de m procurado é aquele acima do qual a inclinação da parte linear de $\log C(\varepsilon)$, em termos de $\log(\varepsilon)$, “praticamente” deixa de variar. Normalmente, D_2 aumenta com m , e acaba saturando a partir de um valor crítico. Essa é a dimensão de imersão que permite “desdobrar” o atrator adequadamente, de modo que suas trajetórias não se cruzem no espaço de imersão.

É interessante dizer que se $x(t)$ é um sinal aleatório, D_2 não satura para m algum. Lembre que o valor de saturação de D_2 é uma estimativa para a dimensão D_0 do atrator real.

O trabalho de Takens, no qual se considera uma série infinita e sem ruídos, não impõe restrições sobre o passo h . Entretanto, ao se trabalhar com séries finitas e ruidosas, a escolha de h torna-se crítica. Considere, por exemplo, o caso de $m = 2$. Se h é muito pequeno, então $x(t)$ e $x(t + h)$ são praticamente idênticos, e o atrator fica comprimido ao longo da diagonal principal do espaço de imersão. Se h é muito grande, então $x(t)$ e $x(t + h)$ não apresentam correlação alguma. Fraser e Swinney [6] sugeriram um método para a determinação de h em séries temporais experimentais.

I.3 – Considerações finais

Apresentamos neste apêndice uma descrição sucinta das principais análises realizadas em séries temporais para a sua caracterização quanto à dinâmica caótica. Existe uma quantidade grande de parâmetros além dos apresentados aqui que caracterizam a dinâmica caótica do sistema. Além disso, existem vários algoritmos propostos na literatura para implementação computacional destes parâmetros. Algumas referências podem ser consultadas para uma melhor revisão deste assunto. No caso de artigos de revisão recomendamos as referências [7-10]. No caso de livros temos as referências [2,11-13]

Focamos dois principais parâmetros, expoentes de Lyapunov e dimensão de correlação neste apêndice. Assim, em um sistema caótico, deve haver pelo menos um expoente positivo e uma dimensão fractal para a que a sua dinâmica seja considerada caótica. Esta dimensão está relacionada com a dimensão de imersão do sistema. Por exemplo, no capítulo 1, descrevemos um estudo realizado em análise de séries temporais para medidas de corrente elétrica em amostras de GaAs semi-isolantes (SI). Em um dos estudos, encontramos uma dimensão de correlação do atrator caótico aproximadamente igual a 2,4. Baseado no que foi exposto neste apêndice, para se

construir um modelo do sistema dinâmico que gera as oscilações de corrente, devemos ter pelo menos três equações diferenciais. Portanto, a partir de uma série temporal, pode-se estimar a dimensão do sistema dinâmico que deve estar gerando a série. Essa é uma informação importante para quem pretende fazer um modelo matemático sobre o sistema observado.

Referências do Apêndice I

- [1] R. C. Hilborn, *Chaos and Nonlinear Dynamics. An introduction for Scientists and Engineers* (Oxford University Press, Oxford, 1994).
- [2] N. Fiedler-Ferrara, C. P. C. do Prado, *Caos: Uma Introdução* (Editora Edgard Blücher Ltda, 1994).
- [3] P. Grassberger, I. Procaccia, *Physica D* **9**, 189 (1983).
- [4] N. Packard, J. Crutchfield, J. D. Farmer e R. Shaw, *Physical Review Letters* **45**, 712 (1980).
- [5] F. Takens, *Lect. Notes Math.* **898**, 366 (1981).
- [6] A. M. Fraser e H. L. Swinney, *Phys. Rev. A* **33**, 1134 (1986).
- [7] H. D. I. Abarbanel, R. Brown, J. J. Sidorowich, and L. Sh. Tsimring, *Rev. Mod. Phys.* **65** 1331 (1993).
- [8] R. Hegger, H. Kantz and T. Schreiber, *Chaos* **9**, 413 (1999).
- [9] Y.-C. Lai e N. Ye, *Int. J. Bifurcation and Chaos* **13**, 1383 (2003).
- [10] J.-P. Eckmann and D. Ruelle, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 617 (1985).
- [11] H. D. I. Abarbanel, *Analysis of Observed Chaotic Data* (Springer, New York, 1996).
- [12] H. Kantz e T. Schreiber, *Nonlinear Time Series Analysis* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [13] J. C. Sprott, *Chaos and Time-Series Analysis* (Oxford University Press, New York, 2004).