

## CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE PENETRAÇÃO DE BARREIRA EM FENÔMENO DE EMISSÃO POR CAMPO

**Nei Lopes da Silva Júnior<sup>1</sup>; Antônio Vieira de Andrade Neto<sup>2</sup>**

1. Bolsista PROBIC/UEFS, Licenciando em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: [geloxs@yahoo.com.br](mailto:geloxs@yahoo.com.br)
2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: [aneto@uefs.br](mailto:aneto@uefs.br)

**PALAVRAS-CHAVE:** Penetração de barreira, Emissão por Campo, Superfícies metálicas.

### INTRODUÇÃO

Existem inúmeros processos de significado tecnológico que dependem, sobretudo, do uso de superfícies sólidas. Vários dispositivos estão baseados na emissão de elétrons através de superfícies metálicas como, por exemplo, *Emissão Termiônica* e *Emissão por Campo*. Na emissão termiônica é fornecida uma energia mínima necessária para que sejam arrancados elétrons do metal, conhecida como *Função Trabalho* ( $\Phi$ ). Porém, no processo de emissão por campo, os elétrons podem ser removidos através da aplicação de um campo elétrico externo, da ordem de  $10^{-2}$  [V/Å], o qual modifica a barreira de potencial do sistema, pois o campo elétrico quase não afeta os níveis de energia do metal devido a blindagem eletrostática.

O efeito físico fundamental que caracteriza este fenômeno é conhecido como efeito túnel ou penetração de barreira, que é uma manifestação da dualidade onda-partícula e que consiste na possibilidade de uma partícula com energia  $E$  penetrar em uma região de energia potencial  $V$ , onde  $E < V$ . Tal efeito, impossível na mecânica clássica, é muito comum em sistemas atômicos e moleculares. Fowler e Nordheim, em 1928, foram os primeiros a explicar o processo de emissão por campo como um efeito de tunelamento.

Neste trabalho investigamos alguns aspectos teóricos relativos à emissão por campo em superfícies metálicas. Utilizamos alguns modelos unidimensionais que representam a energia potencial de um elétron no nível de Fermi em um metal sujeito a um campo elétrico externo. Utilizando a aproximação *JWKB* (devido à Jeffreys, Wentzel, Kramers e Brillouin), calculamos a probabilidade de penetração de barreira e obtivemos expressões semi-analíticas do tipo *Fowler-Nordheim*, relativamente gerais.

O tema do presente trabalho, além de proporcionar um aprofundamento nos conceitos fundamentais da teoria quântica, também se reveste de grande interesse tecnológico, principalmente na tecnologia de materiais digitais (displays de emissão por campo).

### METODOLOGIA

A fundamentação teórica do presente trabalho tem como base a teoria quântica. Podemos escrever a equação de Schrödinger para as mais variadas situações que descrevem os fenômenos de emissão por campo. Apesar de existirem variados formalismos capazes de abordar o problema, utilizamos a aproximação semiclássica, mais comumente conhecida como método *JWKB*. Este método fornece a seguinte expressão para a probabilidade de penetração de barreira.

$$P = \exp \left[ -2 \int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]} dx \right] , \quad (1)$$

onde  $m$  é a massa do elétron,  $\hbar$  é a constante de Planck,  $E$  e  $V(x)$  são, respectivamente, a energia total e a energia potencial da partícula e  $a$  e  $b$  são os pontos de retorno.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, consideramos um modelo bastante simples, no qual o campo elétrico reduz a barreira de potencial que impede que o elétron escape do metal. Conforme podemos observar na Figura 1 abaixo:

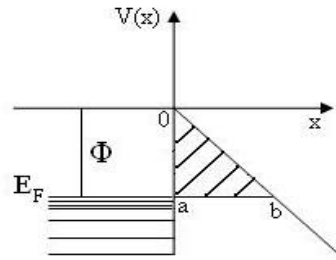


Figura 1: Modelo simples que representa a energia potencial dos elétrons de condução em um sólido.  $E_F$  é a energia de Fermi e  $\Phi$  é a função trabalho do material,  $a$  e  $b$  são os pontos de retorno.

A energia potencial desse modelo é escrito como:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x < 0 \\ -eFx, & x > 0 \end{cases} \quad (2)$$

onde  $V_0 = E_F + \Phi$  é a profundidade do poço de potencial,  $e$  é a carga elementar e  $F$  é a magnitude do campo elétrico. Utilizando a expressão acima na equação (1), obtemos:

$$P = \exp \left[ -\frac{4\sqrt{2}\sqrt{m\Phi\Phi}}{3heF} \right] \quad (3)$$

Este modelo é muito simples e não leva em conta efeitos como o potencial imagem. Entretanto, este fornece uma descrição qualitativa do fenômeno, onde vemos que a probabilidade de penetração depende fortemente da função trabalho do material e decai exponencialmente com a largura da barreira que é dada por  $b = \Phi/eF$ .

Levando em conta o potencial imagem, o esquema da Figura 1 é modificado, sendo utilizado agora os esquemas das Figuras 2 e 3, onde estas descrevem melhor a ação do potencial imagem para o nosso problema.

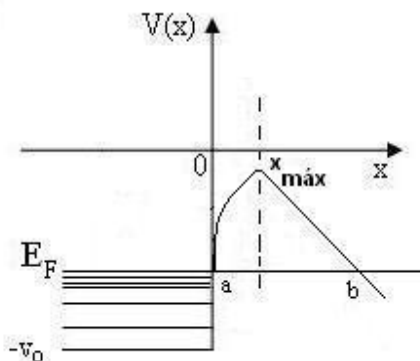


Figura 2: Modelo separando a contribuição do potencial imagem e do campo elétrico, onde  $E_F$  é a Energia de Fermi,  $V_0$  o potencial,  $x_{m\acute{a}x}$  até onde o potencial imagem atua e  $a$  e  $b$  são os pontos de retorno.

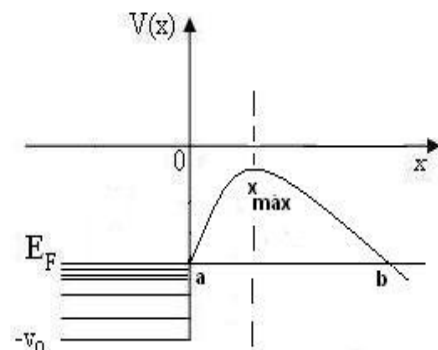


Figura 3: Modelo considerando o potencial imagem em todo intervalo, onde  $V_0$  é o potencial,  $x_1$  e  $x_2$  os limites de integração, e  $E_F$  é a energia de Fermi.

Para calcular a probabilidade de penetração de barreira na barreira para esta configuração, utiliza-se a seguinte expressão para a energia potencial:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, x < 0 \\ -\frac{e^2}{4x} - eFx, x > 0 \end{cases} \quad (4)$$

Na primeira versão desse modelo, (Figura 2), separamos a contribuição do potencial imagem, que atua até o  $x_{m\acute{a}x}$ , e a do campo elétrico, o que facilita a resolução das integrais resultantes. Assim obtemos a seguinte expressão para a probabilidade de penetração da barreira de potencial.

$$P = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \left[ \int_{x_1}^{x_{m\acute{a}x}} \sqrt{2m \left( \Phi - \frac{e^2}{4x} \right)} dx + \int_{x_{m\acute{a}x}}^{x_2} \sqrt{2m(\Phi - eFx)} dx \right] \right] \quad (5)$$

onde  $\Phi$  é a função trabalho,  $x_1 = \frac{e^2}{4\Phi}$  e  $x_2 = \frac{\Phi}{eF}$ , que é o intervalo de integração, e foram obtidos através da hipótese de que  $\Phi^2 \gg e^3F$ ,  $x_{m\acute{a}x} = \frac{e}{2\sqrt{eF}}$ . Já na segunda versão, (Figura 3), considerarmos que o potencial imagem atua em todo o intervalo, e temos que:

$$P = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \left( \Phi - \frac{e^2}{4x} - eFx \right)} dx \right] \quad (6)$$

Neste modelo que é o análogo unidimensional do modelo real em três dimensões, com o mesmo intervalo de integração, a energia potencial coulombiana entre as cargas imagens é considerada em todo o espaço, o que leva a uma integral que deixa de ser trivial. A integral resultante é resolvida em termos de integrais elípticas completas que são desenvolvidas em séries para a obtenção da expressão semi-analítica. Conseguimos obter expressões do tipo *Fowler-Nordheim*, relativamente gerais, que são dadas pelas expressões abaixo. Quando separamos as contribuições do potencial imagem e do campo elétrico, obtemos:

$$P = \exp \left\{ -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left( \frac{\Phi}{eF} - \frac{e}{2\sqrt{eF}} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ e + \frac{4\sqrt{eF}}{3} \left( \frac{\Phi}{eF} - \frac{e}{2\sqrt{eF}} \right) \right] \right\} \left| \frac{e}{\sqrt{\frac{2e\Phi}{\sqrt{eF}} - e^2} - \sqrt{\frac{2e\Phi}{\sqrt{eF}}}} \right|^{\left( \frac{e^2}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} \right)} \quad (7)$$

Já para o modelo onde se considera que a interação coulombiana está presente em todo o intervalo obtemos:

$$P = \exp \left\{ A \left[ 1 + \frac{e^2 eF}{16\Phi^2} \left( \frac{e^2}{2\Phi} - 1 \right) \right] \right\} \left( \frac{8\Phi}{e\sqrt{eF}} \right)^{\left[ \frac{Ae^2}{2\Phi} \left( -1 + \frac{eF}{4\Phi} - \frac{e^2 eF}{16\Phi^2} \right) \right]} \quad (8)$$

$$\text{onde } A = -\frac{4\sqrt{2m}\Phi}{3\hbar eF} \quad (9)$$

Os valores obtidos através dos modelos teóricos propostos são dados na tabela abaixo:

<b><u>COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO- Campo Elétrico</u></b>							
$F \left[ \frac{stv}{cm} \right]$	$\frac{1}{3} \times 10^4$	$\frac{5}{3} \times 10^4$	$\frac{1}{3} \times 10^5$	$\frac{2}{3} \times 10^5$	$10^5$	$\frac{5}{3} \times 10^5$	$\frac{1}{3} \times 10^6$
<b><u>Modelo 1</u></b>							
$\Phi = 2 \text{ eV}$	$1.08 \times 10^{-84}$	$1.61 \times 10^{-17}$	$4 \times 10^{-9}$	$6.33 \times 10^{-5}$	$1.58 \times 10^{-3}$	0.02	0.14
$\Phi = 3 \text{ eV}$	$5.55 \times 10^{-155}$	$1.41 \times 10^{-31}$	$3.75 \times 10^{-16}$	$1.94 \times 10^{-8}$	$7.21 \times 10^{-6}$	$8.2 \times 10^{-4}$	0.029
$\Phi = 5 \text{ eV}$	$1.24 \times 10^{-332}$	$4.16 \times 10^{-67}$	$6.45 \times 10^{-34}$	$2.54 \times 10^{-17}$	$8.64 \times 10^{-12}$	$2.30 \times 10^{-7}$	$4.80 \times 10^{-4}$
<b><u>Modelo 2</u></b>							
$\Phi = 2 \text{ eV}$	$2.62 \times 10^{-82}$	$1.29 \times 10^{-15}$	$1.96 \times 10^{-7}$	0.0018	0.03	0.28	0.96
$\Phi = 3 \text{ eV}$	$7.64 \times 10^{-153}$	$8 \times 10^{-30}$	$1.44 \times 10^{-14}$	$4.97 \times 10^{-7}$	0.00014	0.012	0.26
$\Phi = 5 \text{ eV}$	$8.65 \times 10^{-331}$	$1.47 \times 10^{-65}$	$1.70 \times 10^{-32}$	$4.95 \times 10^{-16}$	$1.41 \times 10^{-10}$	$2.98 \times 10^{-6}$	0.0045
<b><u>Modelo 3</u></b>							
$\Phi = 2 \text{ eV}$	$6.45 \times 10^{-86}$	$1.93 \times 10^{-18}$	$6.52 \times 10^{-10}$	0.000014	0.00042	0.0068	0.064
$\Phi = 3 \text{ eV}$	$4.17 \times 10^{-156}$	$1.87 \times 10^{-32}$	$6.38 \times 10^{-17}$	$4.21 \times 10^{-9}$	$1.81 \times 10^{-6}$	0.00025	0.01
$\Phi = 5 \text{ eV}$	$1.26 \times 10^{-333}$	$6.58 \times 10^{-68}$	$1.23 \times 10^{-34}$	$5.88 \times 10^{-18}$	$2.24 \times 10^{-12}$	$6.85 \times 10^{-8}$	$1.73 \times 10^{-4}$

Tabela 1

### CONSIDERAÇÕES FINAIS:

Utilizando a aproximação JWKB e potenciais unidimensionais que levam em conta o potencial imagem, conseguimos obter expressões semi-analíticas para a probabilidade de penetração de barreira em fenômenos de emissão por campo. Os valores obtidos possuem ordem de grandeza próxima dos valores encontrados na literatura, GOL'DMAN, além de uma descrição mais real do problema. O próximo passo é calcular estes valores numericamente, ou seja, substituindo-os diretamente na fórmula da probabilidade de penetração, para uma melhor comparação entre os modelos.

### REFERÊNCIAS

- GOL'DMAN, I. I and V.D. KRIVCHENKOV. 1961. *Problems in Quantum Mechanics*; edited by B.T. Geilikman; translated from the Russian by E. Marquit and E. Lepa. London: Pergamon Press.
- ANDRADE-NETO, A.V; ABREU SILVA, ARIEL ALMEIDA. 2009. Efeito Túnel e Microscopia com Resolução Atômica. In: Caderno de Física da UEFS, Feira de Santana, vol.7, p.115-132.
- COSTA JÚNIOR, ÂNGELO AZEVEDO. 2005. Medidas de Emissão de Campo em Carbono Amorfo Hidrogenado. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Tese.
- EISBERG, Robert. *Física Quântica*. 1979. Robert Eisberg e Robert Resnick; Rio de Janeiro: Elsevier, 28ª impressão.