

Expressões analíticas para a probabilidade de tunelamento em fenômeno de emissão por campo

(Analytical expressions for the tunneling probability in the field emission process)

N.L. Silva Júnior, A.V. Andrade-Neto¹

Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, Feira de Santana, BA, Brasil
Recebido em 30/10/2012; Aceito em 2/3/2013; Publicado em 9/9/2013

O fenômeno de emissão por campo é um processo no qual elétrons, por efeito túnel, são extraídos de superfícies sólidas sob influência de campo elétrico externo. Neste artigo apresentamos um cálculo para a probabilidade de tunelamento de elétrons através de superfícies metálicas. Consideramos uma barreira de potencial unidimensional e utilizamos a aproximação JWKB para o cálculo da probabilidade de penetração da barreira. São propostos dois modelos de potenciais unidimensionais e em ambos são incluídos explicitamente o potencial imagem e o campo elétrico. Esses modelos são semelhantes aos utilizados em trabalhos anteriores que tratam do processo de ionização por campo. No primeiro modelo separamos em regiões distintas as contribuições do potencial imagem e do campo elétrico externo, o que permite uma solução exata da integral a ser resolvida. No segundo modelo, o potencial imagem e o campo elétrico são considerados em todo o espaço, o que leva a uma integral cuja solução deixa de ser trivial. Contudo, conseguimos obter expressões analíticas, do tipo Fowler-Nordheim, relativamente gerais. Os resultados obtidos são discutidos e comparados com outros da literatura.

Palavras-chave: emissão por campo, probabilidade de tunelamento, equação de Fowler-Nordheim.

Field emission is a process whereby electrons tunnel through a barrier in the presence of a strong electric field. The electron sources of field electron emission can be utilized in many applications such as field emission microscope, field electron emission flat panel displays and many other vacuum microelectronic devices. In this work we describe calculations of the tunneling transmission coefficient using two model potentials that simulate the field electron emission process from a solid. These models potentials were presented in previous works, in which the tunnelling rate was calculated. We utilize one-dimensional model potentials which is chosen to yield a reasonable physical representation of the real system. An external electric field F is applied in order to narrow the potential barrier, allowing the electrons to tunnel out of the metal. In model 1 the image potential is used only near the surface. In model 2 the image potential is used in all regions. In order to calculate the electronic transmission through the surface barrier we have used the semi-classical (JWKB) approximation. We present analytical Fowler-Nordheim-type equations for the electron tunneling probability.

Keywords: field emission, tunneling probability, Fowler-Nordheim equation.

1. Introdução

Os processos de emissão de elétrons através de superfícies sólidas, como a emissão termiônica e a emissão por campo, são de grande interesse científico e tecnológico. No efeito termiônico, os elétrons são emitidos aquecendo-se o material a temperaturas suficientemente altas (da ordem de 2000 K para metais) e, dessa forma, fornecendo energia aos elétrons para que eles consigam transpor a barreira de potencial que os mantém ligados aos sólidos [1].

Pode-se também extrair elétrons de um sólido mesmo sem o fornecimento da energia mínima necessária para sua remoção. Isso pode ser feito pela

aplicação de um campo elétrico externo suficientemente intenso (da ordem de 10^7 V/cm para um metal [2]), o qual reduz a barreira de potencial vista pelo elétron. Esse processo é denominado emissão por campo ou emissão fria. Um dos primeiros pesquisadores a descrever esse efeito foi Robert W. Wood, o qual observou esse fenômeno ao realizar experimentos em tubos de raios X [3]. Walter Schottky [4] deu uma importante contribuição no entendimento desse efeito ao propor que um campo elétrico externo reduz a barreira de potencial na superfície do metal facilitando, dessa forma, a emissão de elétrons. No contexto desse modelo seria necessário um campo da ordem de 10^8 V/cm para se observar emissão de elétrons em um material

¹E-mail: aneto@uefs.br.

cuja função trabalho fosse da ordem de 5 eV. Contudo, experimentalmente é possível observar emissão por campo com magnitude de campo elétrico com, pelo menos, uma ordem de grandeza menor. Essa diferença é explicada pelo efeito mecânico quântico de penetração de barreira ou tunelamento, que consiste na possibilidade de uma partícula com energia E penetrar em uma região de energia potencial V , onde $E < V$. Fowler e Nordheim [5], em 1928, foram os primeiros a explicar com sucesso o fenômeno de emissão por campo tendo como base o efeito túnel. Em 1936 E.W. Müller desenvolveu o microscópio de emissão por campo, conhecido pela sigla FEM (da acrossemia em inglês Field Emission Microscope), que tem como princípio básico de funcionamento esse efeito [6]. Desde então o problema de emissão por campo tem sido investigado por muitos autores [7, 8].

Mais recentemente, abriu-se a perspectiva da utilização de nanotubos de carbono em dispositivos de emissão por campo [9]. Um dos principais dispositivos, objeto de pesquisa atual, é o display de emissão por campo (field emission display - FED).

Neste trabalho apresentamos uma abordagem teórica do fenômeno de emissão por campo de superfícies sólidas, particularmente de superfícies metálicas. A probabilidade de penetração da barreira é calculada usando a aproximação semiclássica ou JWKB (devido a Jeffreys, Wentzel, Kramers e Brillouin). Para a realização desse cálculo utilizamos dois modelos de potenciais unidimensionais que levam em conta o potencial imagem. No primeiro modelo separamos em regiões distintas as contribuições do potencial imagem e do campo elétrico, o que facilita a resolução das integrais resultantes. No segundo modelo, que é o análogo unidimensional do modelo realista em três dimensões, 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 analítica. Modelos semelhantes aos apresentados aqui foram utilizados em outros trabalhos [10, 11] para o cálculo da taxa de ionização por campo para um átomo no vácuo e próximo a uma superfície metálica. No presente trabalho conseguimos obter expressões analíticas, do tipo Fowler-Nordheim, relativamente gerais. Os resultados são apresentados e discutidos.

2. Modelos unidimensionais para o cálculo da probabilidade de tunelamento

O objetivo principal do presente trabalho é calcular a probabilidade de penetração da barreira, P , no processo de emissão por campo. Para esse cálculo utilizaremos a aproximação JWKB. Esse método, também conhecido

como semiclássico, fornece a seguinte expressão para P [12].

$$P = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right], \quad (1)$$

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 x_1 e x_2 são os pontos de retorno clássicos.

Precisamos, então, determinar a energia potencial do sistema. Admitiremos que os elétrons de condução do metal obedecem ao modelo de elétrons livres de Sommerfeld e assumiremos como plana a superfície do material. Consideraremos o metal como um poço de potencial de altura $V_0 = E_F + \Phi$ onde E_F é a energia de Fermi e Φ é a função trabalho do metal, que corresponde à energia mínima necessária para remover um elétron do metal. Como a escolha do nível de referência para a energia potencial é arbitrária deve-se deixar clara a opção feita. Devido à blindagem eletrostática, o campo elétrico externo quase não afeta os níveis de energia dos elétrons de condução no metal. Assim, o seu efeito principal é reduzir a largura da barreira de potencial a qual impede que os elétrons escapem do metal. Esse efeito torna possível que os elétrons, cujas energias são menores que a altura da barreira, tenham uma probabilidade não nula de escaparem do metal. Se F é a magnitude do campo elétrico, o termo $-eFx$ representa a energia potencial devida ao campo onde e é a carga elementar e x é a distância medida a partir da interface metal-vácuo na direção perpendicular a essa interface (Fig. 1). Quando um elétron escapa do metal, cuja superfície é considerada como um plano condutor, ele interage com uma carga imagem positiva ($+e$) situada a uma mesma distância atrás do plano, *i.e.*, no interior do metal. A energia potencial associada a essa interação coulombiana é dada por $-e^2/(4x)$ (no sistema cgs).

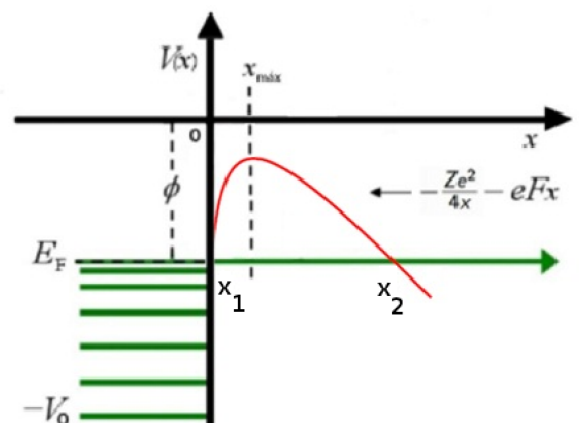


Figura 1 - Energia potencial de um elétron em um metal na presença de um campo elétrico externo. E_F é a energia de Fermi, Φ é a função trabalho do metal e x_1 e x_2 indicam os pontos de retorno clássicos.

Considerando as contribuições descritas acima, a energia potencial pode ser escrita como (Fig. 1)

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

onde Z é um parâmetro do modelo que pode ser utilizado para simular alguns efeitos que podem afetar a probabilidade de tunelamento como a rugosidade da superfície, camadas de adsorção, fenômeno de blindagem, dentre outros. Contudo, no presente trabalho não investigaremos esses efeitos, *i.e.*, tomaremos $Z = 1$.

A energia total do elétron no nível de Fermi será $E = -\Phi$. Desse modo, a barreira de potencial será

$$V(x) - E = \Phi - \frac{Ze^2}{4x} - eFx. \quad (3)$$

Os pontos de retorno clássico são as raízes da Eq. (3) dadas pela expressão

$$x_{1,2} = \frac{\Phi \pm \sqrt{\Phi^2 - Ze^3F}}{2eF}. \quad (4)$$

Para metais $\Phi \approx 5$ eV. Por sua vez, o termo $e\sqrt{(eF)} \approx 0.4$ eV para um campo de magnitude $F \approx 10^6$ V/cm e ≈ 3.8 eV para um campo de magnitude $F \approx 10^8$

V/cm. Desse modo, para $\Phi \approx 5$ eV podemos considerar que $\Phi^2 \gg Ze^3F$. Com essa hipótese podemos escrever

$$x_1 \approx \frac{Ze^2}{4\Phi}, \quad (5)$$

e

$$x_2 \approx \frac{\Phi}{eF}. \quad (6)$$

A barreira de potencial apresenta um máximo em

$$x_{max} = \frac{e\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}}. \quad (7)$$

O ponto de retorno clássico interno, x_1 , dado pela Eq. (5), não depende do campo elétrico e é inversamente proporcional ao valor da função trabalho. Por sua vez, o ponto de retorno clássico externo x_2 , dado pela Eq. (6), depende linearmente da função trabalho e é inversamente proporcional ao campo elétrico.

Na Tabela 1 são mostrados os valores de x_1 , x_{max} e x_2 (em angstroms) para dois valores da função trabalho (3 e 5 eV) e para alguns valores de campo elétrico. Para esse cálculo consideramos $Z = 1$. Vemos que, para um valor de campo fixo, quanto maior o valor da função trabalho mais larga é a barreira de potencial e, portanto, a probabilidade de tunelamento será menor.

Tabela 1 - Valores numéricos para os pontos de retorno interno, externo e x_{max} para diversos valores de campo elétrico e para dois valores da função trabalho (3 e 5 eV).

F (V/cm)	$\Phi = 3$ eV			$\Phi = 5$ eV		
	x_1 (Å)	x_{max} (Å)	x_2 (Å)	x_1 (Å)	x_{max} (Å)	x_2 (Å)
10^6	1,2	19	300	0,72	19	500
10^7	1,2	6	30	0,72	6	50
10^8	1,2	1,9	3	0,72	1,9	5

Para resolver a Eq. (1) vamos considerar dois modelos para o potencial, que denominaremos modelo 1 e modelo 2, descritos a seguir.

2.1. Modelo 1

No modelo 1 separaremos em regiões distintas as influências do campo elétrico e do potencial imagem, conforme mostrado na Fig. 2. Próximo à superfície a influência do potencial imagem predomina em comparação com a do campo elétrico no potencial total, ocorrendo o inverso a medida que nos afastamos da superfície. Desse modo, próximo à superfície vamos utilizar apenas o potencial imagem mas, a partir do máximo, a barreira decresce linearmente com a distância. Temos, então, a seguinte expressão para a probabilidade de tunelamento

$$P_1 = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \left(\int_{x_1}^{x_{max}} \sqrt{2m \left(\Phi - \frac{Ze^2}{4x} \right)} dx + \int_{x_{max}}^{x_2} \sqrt{2m (\Phi - eFx)} dx \right) \right]. \quad (8)$$

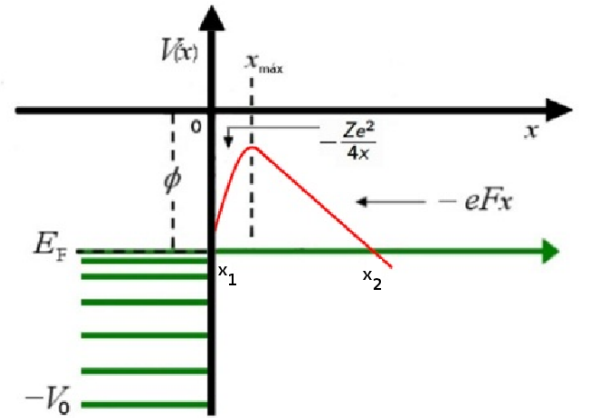


Figura 2 - Energia potencial de um elétron em um metal na presença de um campo elétrico do modelo 1. O potencial imagem atua até o ponto x_{max} .

A segunda integral na equação acima é trivial. A primeira integral é resolvida fazendo-se a substituição $y^2 = \Phi - Ze^2/4x$. Após alguns cálculos obtemos para a probabilidade de penetração na barreira

$$P_1 = \left| \frac{1}{\sqrt{\frac{2\Phi}{\sqrt{e^3 F \sqrt{Z}}} - 1} - \sqrt{\frac{2\Phi}{\sqrt{e^3 F \sqrt{Z}}}}} \right| \left(\frac{Ze^2 \sqrt{2m}}{2\hbar \sqrt{\Phi}} \right) \times \exp \left\{ -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left(\frac{\Phi}{eF} - \frac{e\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}} \right) \frac{1}{2} \left[e\sqrt{Z} + \frac{4\sqrt{eF}}{3} \left(\frac{\Phi}{eF} - \frac{e\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}} \right) \right] \right\}, \quad (9)$$

que é a expressão para a probabilidade de tunelamento calculada via modelo 1.

2.2. Modelo 2

Esse modelo é o análogo unidimensional do potencial real em três dimensões para uma superfície plana. Substituindo a Eq. (3) na Eq. (1) a probabilidade de penetração da barreira fica agora

$$P_2 = \exp \left[-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\Phi - \frac{Ze^2}{4x} - eFx} dx \right]. \quad (10)$$

A integral que aparece na equação acima, comparada com as integrais do modelo 1, é muito mais difícil de resolver. Contudo, podemos expressá-la em termos de integrais elípticas [13]. Para isso vamos reescrevê-la da seguinte forma

$$I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{eF(x_2 - x)(x - x_1)}{x}} dx, \quad (11)$$

onde

$$x_1 + x_2 = \frac{\Phi}{eF}, \quad (12)$$

$$x_1 x_2 = \frac{Ze^2}{4eF}. \quad (13)$$

Utilizando os resultados acima encontramos para a probabilidade de penetração da barreira

$$P_2 = \left(\frac{8\Phi}{\sqrt{e^3 F Z}} \right) \left[\frac{\sqrt{2m\Phi\Phi} Ze^3 F}{\hbar e F} \frac{Ze^3 F}{2\Phi^2} \left(1 + \frac{Ze^3 F}{12\Phi^2} \right) \right] \times \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2m\Phi\Phi}}{3\hbar e F} \left[1 + \frac{Ze^3 F}{16\Phi^2} \left(\frac{Ze^3 F}{2\Phi^2} - 1 \right) \right] \right\}, \quad (18)$$

que é a expressão para a probabilidade de tunelamento calculada via modelo 2.

3. Resultados e discussões

Na Tabela 2 são mostrados alguns valores numéricos para a probabilidade de penetração da barreira, calculadas pelos dois modelos, para vários valores de campo

A integral (11) tem a seguinte solução ([14, p. 265])

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{(x_1 - x)(x - x_2)}{x}} dx = \frac{2}{3} \sqrt{x_2} [(x_1 + x_2)E(p) - 2x_1 K(p)], \quad (14)$$

onde $p^2 = \frac{x_2 - x_1}{x_2}$ e $E(p)$ e $K(p)$ são integrais elípticas completas que podem ser desenvolvidas em séries da seguinte forma [14]

$$E(p') = 1 + \frac{1}{2} \left[\ln \left(\frac{4}{p'} \right) - \frac{1}{2} \right] p'^2 + \dots \quad (15)$$

$$K(p') = \ln \left(\frac{4}{p'} \right) + \left[\ln \left(\frac{4}{p'} \right) - 1 \right] \frac{p'^2}{4} + \dots \quad (16)$$

onde

$$p' = \sqrt{1 - p^2} = \left(\frac{x_1}{x_2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (17)$$

elétrico no intervalo entre 10^6 e 10^8 V/cm e para dois valores da função trabalho (3 e 5 eV). Vemos que a probabilidade de penetração depende fortemente da função trabalho, já que pequenas alterações no valor da sua magnitude faz a probabilidade de tunelamento mudar

por várias ordens de grandeza. Observamos igualmente uma forte dependência do campo elétrico já que pequenas alterações no valor dessa grandeza também muda a probabilidade de tunelamento por várias ordens de

grandeza. Vemos também que a probabilidade de tunelamento calculada pelo modelo 1 é menor do que a calculada pelo modelo 2. Os resultados do modelo 2 são próximos dos calculados na Ref. [16].

Tabela 2 - Valores numéricos para a probabilidade de penetração da barreira para diversos valores de campo elétrico e para dois valores da função trabalho (3 e 5 eV).

$F(V/cm)$	Campo elétrico					
	10^6	5×10^6	10^7	3×10^7	5×10^7	10^8
Probabilidade de tunelamento - Modelo 1						
$\Phi = 3 \text{ eV}$	9.8×10^{-153}	8.4×10^{-30}	1.5×10^{-14}	1.5×10^{-4}	1.2×10^{-2}	0.3
$\Phi = 5 \text{ eV}$	1.5×10^{-330}	3.2×10^{-65}	1.8×10^{-32}	1.4×10^{-10}	3.0×10^{-6}	4.5×10^{-3}
Probabilidade de tunelamento - Modelo 2						
$\Phi = 3 \text{ eV}$	7.0×10^{-151}	2.7×10^{-28}	3.4×10^{-13}	2.1×10^{-3}	0.1	1
$\Phi = 5 \text{ eV}$	6.0×10^{-329}	3.5×10^{-64}	3.0×10^{-31}	1.6×10^{-9}	2.8×10^{-5}	3.4×10^{-2}

As Eqs. (9) e (18) são demasiadas complicadas para permitirem uma interpretação imediata simples. Contudo, podemos fazer os seguintes comentários sobre nossos resultados. Inicialmente podemos observar que se fazemos $Z = 0$ nas Eqs. (9) e (18) (o que equivale a desprezar o potencial imagem), P_1 e P_2 reduzem-se a seguinte expressão

$$P = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m\Phi}\Phi}{3\hbar eF}\right), \quad (19)$$

que é a probabilidade de penetração de uma barreira triangular de largura $\Phi/(eF)$. Esse foi o caso tratado por Fowler e Nordheim em seu artigo de 1928 [5].

Em alguns trabalhos disponíveis na literatura [15, 16], também utilizando a aproximação JWKB, é fornecida a seguinte expressão para a probabilidade de tunelamento

$$P = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m\Phi}\Phi}{3\hbar eF}\varphi(y)\right), \quad (20)$$

com $\varphi(y)$ dado por

$$\varphi(y) = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - y^2}}{2}} \left[E(\lambda) - (1 - \sqrt{1 - y^2})K(\lambda) \right], \quad (21)$$

onde $E(\lambda)$ e $K(\lambda)$ são integrais elípticas completas e

$$\lambda^2 = \frac{2\sqrt{1 - y^2}}{1 + \sqrt{1 - y^2}}, \quad (22)$$

com

$$y = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi}. \quad (23)$$

Comparando os nossos resultados com a expressão acima, claramente vemos que as Eqs. (9) e (18) são mais fáceis de serem manipuladas numericamente bem

como mais fáceis de serem interpretadas do ponto de vista analítico. Essa é a grande vantagem do método apresentado neste trabalho.

4. Conclusões

Utilizando modelos unidimensionais para a energia potencial de elétrons em um sólido metálico, na presença de um campo elétrico externo, calculamos, utilizando a aproximação JWKB, a probabilidade dos elétrons localizados no nível de Fermi escaparem do metal. Conseguimos obter expressões analíticas, do tipo Fowler-Nordheim, relativamente gerais. Vale ressaltar que cálculos semelhantes para a probabilidade de tunelamento encontradas na literatura são expressas, em geral, em termos de funções especiais. Já no presente trabalho, as expressões são dadas em termos de funções elementares e, portanto, são muito mais simples de serem manipuladas.

O modelo 2, que é uma versão unidimensional do potencial real tridimensional, resulta em uma integral do tipo elíptica, que não é trivial, e para sua solução fizemos expansões em séries. Por essa razão, também utilizamos o modelo 1 que, além do mesmo conter todas as características físicas importantes do sistema, as integrais a serem resolvidas são simples e permitem soluções analíticas exatas.

Nos modelos considerados no presente trabalho levamos em conta explicitamente o campo elétrico e o potencial imagem, que são efeitos físicos fundamentais na abordagem do problema. Obviamente, para sistemas reais, há outros efeitos importantes que foram negligenciados nos modelos relativamente simples tratados aqui. Dentre esses efeitos podemos citar a rugosidade da superfície (consideramos uma superfície perfeitamente plana), adsorção de átomos na superfície (consideramos uma superfície limpa) e efeitos de carga espacial, entre outros.

Apesar de sua grande relevância teórica, a probabi-

lidade de penetração de barreira não é uma quantidade física determinada experimentalmente. Uma grandeza física de grande interesse é a densidade de corrente eletrônica pois o seu valor teórico pode ser comparado com o seu valor experimental. Assim, uma perspectiva do presente trabalho é calcular a densidade de corrente levando em conta os resultados aqui obtidos.

Agradecimentos

Um dos autores, N.L. Silva Júnior, agradece à FAPESB e a UEFS, através do programa PROBIC, pelo apoio financeiro. Os autores agradecem ao árbitro pelas valiosas sugestões.

Referências

- [1] Nilson S. de Andrade, A.V. Andrade-Neto, Thierry Lemaire e J.A. Cruz, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **35**, 1308 (2013).
- [2] P.H. Cutler, Jun He, J. Miller, N.M. Miskovsky, B. Weiss and T.E. Sullivan, *Prog. Surf. Sci.* **42**, 169 (1993).
- [3] R.W. Wood, *Phys. Rev. (Series I)* **5**, 1 (1897).
- [4] W. Schottky, *Physik Z.* **5**, 1 (1914).
- [5] R.H. Fowler and L. Nordheim, *Proc. Roy. Soc. Lond.* **A119**, 173 (1928).
- [6] A.V. Andrade-Neto e Ariel Almeida Abreu Silva, *Caderno de Física da UEFS* **7**, 115 (2009).
- [7] E.L. Murphy and R.H. Good, *Phys. Rev.* **102**, 1464 (1956).
- [8] R.G. Forbes and J.H.B. Deane, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **463**, 2907 (2007).
- [9] W.B. Choi, D.S. Chung, J.H. Kang, H.Y. Kim, Y.W. Jin, I.T. Han, Y.H. Lee, J.E. Jung, N.S. Lee, G.S. Park and J.M. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3129 (1999).
- [10] Ariel Almeida Abreu Silva e A.V. Andrade-Neto, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **32**, 2306 (2010).
- [11] Ariel Almeida Abreu Silva e A.V. Andrade-Neto, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **34**, 1304 (2012).
- [12] David Bohm, *Quantum Theory* (Prentice-Hall, New Jersey, 1960).
- [13] Aurino Ribeiro Filho e Dionicalros Soares de Vasconcelos, *Matemática Universitária* **15**, 240 (1993).
- [14] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic, New York, 1965).
- [15] Albert Haug, *Theoretical Solid State Physics* (Pergamon Press, Oxford, 1975), v. 1, p. 142.
- [16] I.I. Goldman and V.D. Krivchenkov, *Problems in Quantum Mechanics*, edited by B.T. Geilikman, translated from the Russian by E. Marquit and E. Lepa (Pergamon Press, London, 1961), p. 74.