



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA - UEFS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROJETO FÍSICA NO CAMPUS

NEI LOPES DA SILVA JÚNIOR

**EXPRESSÕES ANALÍTICAS DO TIPO FOWLER-NORDHEIM
PARA A DENSIDADE DE CORRENTE DE EMISSÃO POR
CAMPO**

TRABALHO ACADÊMICO DE FINAL DE CURSO

FEIRA DE SANTANA, BA

JANEIRO, 2014

NEI LOPES DA SILVA JÚNIOR

**EXPRESSÕES ANALÍTICAS DO TIPO FOWLER-NORDHEIM
PARA A DENSIDADE DE CORRENTE DE EMISSÃO POR
CAMPO**

Monografia apresentada ao Curso de graduação em Física da Universidade Estadual de Feira de Santana, como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Antônio Vieira de Andrade Neto

FEIRA DE SANTANA, BA
JANEIRO, 2014

NEI LOPES DA SILVA JÚNIOR

**EXPRESSÕES ANALÍTICAS DO TIPO FOWLER-NORDHEIM
PARA A DENSIDADE DE CORRENTE DE EMISSÃO POR
CAMPO**

Monografia apresentada ao Curso de graduação em Física da Universidade Estadual de Feira de Santana, como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Física.

Data de aprovação: ___ / ___ / _____

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Antônio Vieira de Andrade Neto

DFIS - UEFS

Prof. Dr. Rainer Karl Madejsky

DFIS - UEFS

Prof. Msc. Pablo Pedreira Pedra

UFRB

A minha Mãe.

Agradecimentos

Agradeço a Deus por esta oportunidade;

A minha família pela dedicação e incentivo;

Em especial a meu irmão: Rodrigo;

Também em especial a meus pais: Nei e Nair;

Aos amigos, pelo apoio e suporte tanto nos momentos alegres quanto nos difíceis dessa jornada;

Ao curso de Física, por propiciar relações de amizade;

Aos professores que contribuíram nesta caminhada;

Em especial ao professor Neto, meu orientador, pela simplicidade, paciência, e competência;

Gostaria de agradecer também a RESI (Residência Universitária da UEFS), por me propiciar amadurecimento e amizades;

As agências de fomento que acreditaram no projeto e auxiliaram financeiramente durante o período da graduação (PROBIC/FAPESB/CNPq);

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para que este momento fosse possível;

...

"Tudo deveria se tornar o mais simples possível, mas não simplificado."

—ALBERT EINSTEIN

Resumo

Os processos de emissão de elétrons através de superfícies sólidas são de grande interesse científico e tecnológico. No efeito termiônico os elétrons são emitidos aquecendo-se o material a altas temperaturas (da ordem de 2000 K para metais), porém na emissão por campo pode-se emitir elétrons de um sólido mesmo sem o fornecimento da energia mínima necessária para a sua remoção. Isso pode ser feito pela aplicação de um campo elétrico externo (da ordem de 10^7 V/cm para um metal), que reduz a barreira de potencial vista pelo elétron, esse processo é denominado emissão por campo. Neste trabalho foi realizada uma abordagem teórica do fenômeno de emissão por campo de superfícies sólidas, particularmente superfícies metálicas. A probabilidade de penetração da barreira foi calculada usando a aproximação JWKB, considerando dois modelos de potenciais unidimensionais que consideram o potencial imagem. No primeiro modelo separamos em regiões distintas as contribuições do potencial imagem e do campo elétrico. No segundo modelo, a energia potencial coulombiana entre as cargas imagens é considerada em todo o espaço. Utilizando as expressões obtidas para a probabilidade de penetração conseguimos obter expressões analíticas para a densidade de corrente, do tipo Fowler-Nordheim, relativamente gerais. Cálculos semelhantes para esta grandeza são expressos em termos de funções especiais. As expressões obtidas neste trabalho foram representadas em termos de funções elementares e, portanto, mais simples de serem manipuladas.

Palavras-chave: Emissão por campo; Superfícies metálicas; Efeito túnel; Densidade de corrente; Microscopia.

Abstract

Electron emission processes through solid surfaces are of great interest in science and technology. In thermionic effect, electrons are emitted by heating the material at high temperatures (about 2000 K for metals), however in field emission electrons can be emitted from a solid even without provision of the minimum energy required for its removal. This can be done by applying an external electric field (in the order of 10^7 V/cm for a metal), which reduces the potential barrier seen by the electron, process called field emission. In this work we performed a theoretical analysis of the field emission from solid surfaces phenomenon, particularly on metal surfaces. The probability of barrier penetration was calculated using the JWKB approximation, considering two single-dimensional potential models that include the image potential. In the first model, the contributions of the image potential and the electric field were separated in distinct regions. In the second model, the coulomb's potential energy between image charges is considered throughout the space. Using the obtained expressions for the penetration probability, we managed to get analytical expressions for the current density that are Fowler-Nordheim type and relatively general. Similar calculations for this quantity are expressed in terms of special functions. The obtained expressions were represented in terms of elementary functions, and therefore easier to be handled.

Keywords: Field emission; Metal surfaces; Tunnel effect; Current density; Microscopy;

Sumário

Agradecimentos	ii
Resumo	iv
Abstract	v
Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	ix
Introdução	1
1 Uma visão geral sobre o fenômeno de emissão por campo	2
1.1 Introdução	2
1.2 Visão geral da mecânica quântica	2
1.3 Postulado de de Broglie - dualidade onda/partícula	3
1.4 Equação de Schrödinger	5
1.5 Aproximação semiclássica ou método JWKB	7
1.6 Penetração de barreira	9
1.7 Modelo do gás de Fermi em metais	10
1.7.1 Estado fundamental de um gás de férmions	11
1.7.2 Esfera de Fermi	13
1.8 Distribuição de elétrons em um metal no estado fundamental	14
1.9 Emissão de elétrons em metais	15
1.10 Probabilidade de Tunelamento em Fenômenos de Emissão por Campo	16
1.11 Densidade de Corrente em fenômenos de Emissão por Campo	18
2 Cálculo da probabilidade de tunelamento em fenômeno de emissão por campo	22
2.1 Introdução	22
2.2 Apresentando os modelos	23
2.2.1 Cálculo dos pontos de retorno clássicos	24
2.2.2 Cálculo da Probabilidade de tunelamento - Modelo 1	25
2.2.3 Cálculo da probabilidade de tunelamento - Modelo 2	28

3	Cálculo da densidade de corrente em fenômenos de emissão por campo	33
3.1	Introdução	33
3.2	Densidade de corrente eletrônica	33
3.2.1	Densidade de Corrente eletrônica - Modelo 1	35
3.2.2	Densidade de corrente eletrônica - Modelo 2	39
3.2.3	Valores numéricos para a densidade de corrente eletrônica para os dois modelos propostos	42
4	Conclusões e Perspectivas	44
4.1	Introdução	44
4.2	Analisando a Probabilidade de Tunelamento	44
4.3	Analisando a Densidade de corrente eletrônica	45
4.4	Perspectivas	46
	Referências	48

Lista de Figuras

1.1	Espaço recíproco	13
1.2	Modelo mais simples para analisar os elétrons de condução de um metal	15
1.3	Configuração da barreira de potencial devido à aplicação de um campo elétrico externo	16
1.4	Modelo simples que representa a energia potencial dos elétrons de condução em um sólido. E x_1 e x_2 são os pontos de retorno.	17
1.5	Modelo de barreira de potencial considerando a contribuição do potencial imagem	17
2.1	(1) Modelo separando a contribuição do potencial imagem e do campo elétrico, onde E_F é a Energia de Fermi, V_o o potencial, x_{max} até onde o potencial imagem atua e x_1 e x_2 são os pontos de retorno. (2) Modelo considerando o potencial imagem em todo intervalo.	23
2.2	Modelo separando a contribuição do potencial imagem e do campo elétrico.	26
2.3	Modelo considerando o potencial imagem em todo intervalo.	29

Lista de Tabelas

2.1	Valores numéricos para os pontos de retorno interno, x_{max} e externo para diversos valores de campo elétrico e para dois valores da função trabalho (3 e 5 eV).	25
2.2	Valores numéricos para a probabilidade de tunelamento para diversos valores de campo elétrico e dois valores de função trabalho para os dois modelos propostos.	31
3.1	Valores numéricos para a densidade de corrente eletrônica	43
4.1	Valores numéricos para a probabilidade de tunelamento para diversos valores de campo elétrico e dois valores de função trabalho para os dois modelos propostos.	45
4.2	Valores numéricos para a densidade de corrente eletrônica	46

Introdução

Os processos de emissão de elétrons através de superfícies sólidas, mais especificamente em metais, são de grande interesse científico e tecnológico. Há diversas formas de se extrair elétrons de um metal. No efeito termiônico, os elétrons são emitidos através do aquecimento do material a temperaturas suficientemente altas, da ordem de 2000 K para metais [1], o qual tem a função de fornecer energia aos elétrons para que eles consigam superar a barreira de potencial que os mantêm ligados aos sólidos. Um fenômeno similar é o efeito fotoelétrico, no qual se incide luz/radiação no metal, e a energia proveniente do feixe luminoso é absorvida pelos elétrons permitindo, assim, que estes consigam superar a barreira de potencial.

Podemos também extrair elétrons de um metal mesmo sem o fornecimento da energia mínima necessária para a sua remoção, a qual é conhecida como *função trabalho* (Φ). Isso pode ser feito através da aplicação de um campo elétrico externo suficientemente intenso, da ordem de 10^7 [V/cm] para metais [2], o qual tem a função de diminuir a barreira de potencial vista pelo elétron. Este processo é denominado *emissão por campo* ou *emissão fria*.

O efeito físico fundamental que caracteriza a *emissão por campo* 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 $E < V$ [3]. 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 [4].

Uma visão geral sobre o fenômeno de emissão por campo

1.1 Introdução

Os processos de emissão de elétrons através de superfícies sólidas são de grande interesse científico e tecnológico [5, 6, 7]. Há variadas formas de se extrair elétrons de materiais sólidos, os quais recebem denominações específicas.

No efeito termiônico, os elétrons são emitidos aquecendo-se o material a temperaturas suficientemente altas, da ordem de 2000 K para metais [1], fornecendo, dessa forma, energia suficiente aos elétrons para que eles consigam superar a barreira de potencial que os mantém ligados aos sólidos. Um fenômeno similar é o efeito fotoelétrico, no qual se incide radiação no metal e a energia proveniente do feixe luminoso é absorvida pelos elétrons possibilitando, assim, a superação da barreira de potencial.

Pode-se também extrair elétrons de um sólido mesmo sem o fornecimento da energia mínima necessária para a 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*. Neste trabalho é apresentado um estudo teórico desse fenômeno, particularmente de superfícies metálicas.

A emissão por campo é um fenômeno essencialmente mecânico quântico que consiste na penetração de barreira ou tunelamento através da barreira de potencial na superfície do metal. Desse modo, neste capítulo será discutido de forma elementar os conceitos fundamentais necessários ao entendimento do fenômeno de emissão por campo, bem como a apresentação do modelo mais simples reportado na literatura que aborda este assunto.

1.2 Visão geral da mecânica quântica

Em 1901, o físico alemão Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947) publicou um artigo intitulado *Sobre a lei de distribuição de energia no espectro normal* no *Annalen der Physik* [8], que foi considerado o marco inicial da teoria quântica. A teoria proposta neste artigo provo-

cou profundas mudanças nos conceitos da física conhecida até então, pois a Física Clássica não conseguia explicar alguns fenômenos intrigantes, que ficaram sem explicação por quase vinte anos. Estes fenômenos eram a *Radiação de Corpo Negro*, o *Efeito Fotoelétrico* e o *Espalhamento Compton*.

Do ponto de vista da Física Clássica, estes fenômenos eram incompreensíveis, tornando-se grandes enigmas para os físicos da época. Planck no seu artigo de 1901 [8], foi o primeiro a explicar a *Radiação de Corpo Negro*, fenômeno que consiste na radiação emitida por corpos quando estes se encontram a temperaturas elevadas, como ferro ou carvão em brasa nos fornos industriais da época, ou seja, estudava-se a radiação eletromagnética emitida pelos corpos quando aquecidos.

Planck conseguiu explicar a *Radiação de Corpo Negro* postulando que a troca de energia entre a radiação e os "osciladores" do corpo negro se dão de forma discreta, i.e., estes entes só poderiam emitir ou absorver energia em determinadas quantidades, quantizando assim a energia [8].

Mais tarde, a teoria de Planck foi utilizada pelo físico, também alemão, Albert Einstein (1879-1955) para explicar o efeito fotoelétrico, o que lhe rendeu o prêmio Nobel de Física em 1921, e posteriormente o efeito Compton foi explicado por Arthur Holly Compton em 1923, o qual também foi agraciado com o Nobel em Física de 1927. Assim, todos estes fenômenos que eram inexplicáveis através dos conceitos da Física Clássica passaram a ser descritos pela teoria quântica.

1.3 Postulado de de Broglie - dualidade onda/partícula

O efeito físico fundamental que caracteriza a emissão por campo, é o efeito túnel ou penetração de barreira, o qual é a manifestação da dualidade onda/partícula para a matéria. Este efeito foi teorizado pelo francês Louis de Broglie (1892-1987) em 1924, o que propiciou um grande avanço no entendimento da estrutura atômica, dez anos após o modelo atômico proposto por Bohr [9]. Einstein, baseado nas ideias de Planck, já tinha proposto que a luz/radiação teria uma natureza dual [10], comportando-se em algumas situações como onda e em outras como partícula e dependendo do experimento utilizado poderíamos perceber esses comportamentos.

Vale ressaltar que esta noção de onda/partícula é muito antiga e debatida na física desde o século XVII com Isaac Newton e Christiaan Huygens, na qual Newton, estudando o comportamento da luz, acreditava que esta seria corpuscular, enquanto Huygens se opunha a tal ideia, afirmando que a luz deveria se manifestar como onda. A visão de Newton se sobrepôs a visão de Huygens devido ao fato de o mesmo ter mais prestígio na comunidade científica da época.

Em 1923, em sua tese de doutorado, de Broglie postulou que este comportamento dual da

radiação também era válido para a matéria. Assim, elétrons e prótons que eram considerados como partículas, em determinadas situações poderiam ter um comportamento ondulatório, i.e., comportar-se como ondas. Entretanto, se uma partícula tem um comportamento ondulatório, é intrínseco que ela necessariamente tenha um comprimento de onda e uma frequência associados. Assim, de Broglie postulou que uma partícula livre da ação de forças externas, e com massa de repouso m , deslocando-se a uma velocidade não-relativística, deve ter um comprimento de onda associado a seu momento linear, dado pela expressão $p=mv$, da mesma forma que um fóton, dado pela expressão $\lambda=h/p$. O comprimento de onda de de Broglie é dado por,

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (1.1)$$

onde h é a constante de Planck.

Se tivermos velocidades relativísticas, devemos usar a expressão $p=\gamma mv$, no qual $\gamma = \left(\frac{1}{1-(v/c)^2}\right)^{1/2}$ é conhecida na literatura como constante de Lorentz. Também de acordo com as ideias de de Broglie, a frequência ν , é também relacionada com a energia da partícula E , da mesma forma que ocorre com um fóton $E = h\nu$. Segundo de Broglie, podemos utilizar a relação entre momento linear e comprimento de onda e a relação de frequência e energia tanto para partículas como para ondas.

Com esta hipótese, muito ousada, e sem comprovação experimental direta na época, de Broglie propôs uma mudança radical das concepções de partícula, apenas baseado em conceitos teóricos. Porém, esta ousadia era necessária, pois se sabe que a ideia, também revolucionária, da natureza dual das ondas eletromagnéticas nos levou ao conceito de fóton [10]. A relativa falta de êxito na explicação da estrutura atômica, com o modelo de Bohr, indicava que uma revolução semelhante era necessária na mecânica das partículas.

A proposta de de Broglie propiciou essa tal revolução. Após 1924, Schrödinger, Dirac e Born entre outros, desenvolveram uma teoria mais detalhada da mecânica quântica mesmo antes da comprovação experimental das ideias de de Broglie. Na mecânica quântica, a distribuição da partícula no espaço deixa de ser um ponto geométrico e passa a estar distribuída em uma região do espaço, descrita por uma função chamada de função de onda, a qual é intimamente relacionada com a função de onda que aplicamos para as ondas mecânicas. Assim, a função de onda para uma partícula livre, ou seja, uma partícula livre da ação de forças externas, com uma energia definida possui uma configuração ondulatória com valores bem definidos de frequência e comprimento de onda.

Podemos obter a eq. (1.1) proposta por de Broglie através do modelo de Bohr, que descreve os níveis de energia do átomo de Hidrogênio baseando-se em órbitas fixas para os elétrons. Porém, deve-se atentar para o fato de que Bohr, no seu modelo, propõe a existência de níveis de energia discretos e que existe uma relação com a frequência dos átomos emitidos ou absorvidos. Em átomos mais complexos o modelo de Bohr não é condizente com os valores experimentais

e a mecânica quântica fornece valores com uma precisão maior [9].

Utilizando a eq. (1.1), obteremos a condição de Bohr da quantização do momento angular, dado pela expressão $L = mrv$, na qual deve ser um número inteiro múltiplo da constante de Planck h . Assim, como uma onda estacionária não transmite energia, um elétron nas órbitas estacionárias propostas por Bohr não irradiaria energia. Para que esta trajetória circular seja fechada de modo contínuo na órbita, a circunferência deve ter um número inteiro de comprimentos de onda.

Para uma órbita de raio r e circunferência $2\pi r$, devemos ter $2\pi r = n\lambda$, onde $n=1,2,3,\dots$. Assim, combinando-se esta última relação com a eq. (1.1), temos

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} \quad (1.2)$$

Notando assim que esta condição, a eq. (1.2), é idêntica a equação de Bohr para o momento angular, i.e., vemos que o momento angular do elétron é quantizado. Esta relação sugere que as propriedades ondulatórias dos elétrons são relevantes e de Broglie estava correto na sua hipótese que depois teve a comprovação experimental, o que lhe rendeu o Prêmio Nobel em Física de 1929.

Hoje sabemos que tanto a visão de Newton quanto a de Huygens na descrição do comportamento da luz, onda ou partícula, são ambas corretas. Porém, esta concepção foi consolidada graças ao princípio de complementaridade [9] de Niels Bohr em 1928, na qual este afirma que a natureza da matéria e radiação é dual e ambos não são contraditórios, mas sim complementares. Assim, dependendo do tipo de experimento, ela se comportará ora como onda, ora como corpúsculo.

1.4 Equação de Schrödinger

Nesta seção será realizada uma descrição sucinta da equação de Schrödinger. Mais detalhes desta equação encontra-se em qualquer livro de Física Moderna [9, 11, 12, 13]. Iremos fazer essa explicação baseados em [9].

Sabemos que uma partícula microscópica age como se certos aspectos de seu comportamento fossem governados pelo comportamento de uma onda de de Broglie associada, ou seja, uma função de onda. Porém, a teoria de de Broglie só descreve os casos mais simples, como partículas livres, osciladores harmônicos simples, etc.

Certamente queremos tratar os casos mais complicados que ocorrem na natureza, pois eles nos dão uma descrição mais real e interessante sobre os fenômenos. Assim, a mecânica quântica necessitava de uma teoria mais geral que a proposta por de Broglie para explicar o comportamento de partículas de qualquer sistema microscópico.

A teoria de Schrödinger nos dá essa descrição, especificando quais as leis do movimento ondulatório que partículas de qualquer sistema microscópico obedecem. Esta teoria é uma extensão do postulado de de Broglie e está intimamente ligada com a teoria de Newton para o movimento de partículas em sistemas macroscópicos [9]. A teoria de Schrödinger é uma generalização, que inclui a teoria de Newton como um caso especial (no limite macroscópico), assim como a teoria da relatividade de Einstein é uma generalização que inclui a teoria de Newton para baixas velocidades.

No caso das funções mais simples, por conveniência utiliza-se uma expressão bastante conhecida que é a de uma onda senoidal.

Baseado no fato de que uma partícula livre tem um momento p de módulo constante, já que não sofre ação de nenhuma força externa, tem, portanto, um comprimento de onda de de Broglie associado constante. Como vimos na seção anterior, o postulado de de Broglie afirma que o movimento de uma partícula microscópica é governado pela propagação de uma onda associada, mas não diz como a onda se propaga. O postulado prevê com sucesso o comprimento de onda (λ) apenas em casos nos quais o comprimento de onda é constante. Vista de outra forma, se o momento de uma partícula não é constante, devido ao fato de que a partícula está sob a ação de uma força, serão necessárias funções mais complicadas que a senoidal para descrever esta onda associada.

A equação de Schrödinger vai nos fornecer essas funções, ou seja, nos fornece qual a função de onda $\Psi(x, t)$ caso saibamos qual a força que atua sobre a partícula em questão, especificando a energia potencial correspondente, i.e., a função de onda será a solução para a equação de Schrödinger para uma energia potencial específica. A equação de Schrödinger é uma equação diferencial, ou seja, existe uma relação entre a sua solução e as suas derivadas em relação as variáveis independentes x e t , posição e o tempo, respectivamente. Como há mais de uma variável independente, elas devem ser derivadas parciais.

Outro dado importante sobre a Equação de Schrödinger é o fato dela não ser deduzida e sim postulada. Ela obedece quatro hipóteses razoáveis que são levadas em conta e que são relacionadas com propriedades desejadas da equação de onda da mecânica quântica. Entre outras coisas, a equação de Schrödinger deve ser consistente com os postulados de de Broglie-Einstein e consistente com a equação que relaciona a energia total E de uma partícula de massa m com sua energia cinética e sua energia potencial [9]. Ela também deve ser linear, garantindo que pode-se somar funções de onda para produzir interferências construtivas e destrutivas que são características de ondas. E por fim, a energia potencial V é em geral uma função de x , e possivelmente até de t . No entanto, há um caso especial importante no qual $V(x, t) = V_0$, que é o caso da partícula livre, o que implica que o momento p da partícula será constante.

A partir dessas hipóteses, temos,

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (1.3)$$

Esta equação diferencial satisfaz todas as hipóteses acima, relativas à equação de onda da Mecânica Quântica. A equação (1.3), foi obtida pela primeira vez em 1926 por Erwin Schrödinger, e é portanto chamada na literatura de *Equação de Schrödinger*.

Utilizando o método de separação de variáveis, supondo uma solução do tipo $X(x)\phi(t)$, obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo, que é dada pela expressão,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x,t)}{dx^2} + V(x) \Psi = E \Psi \quad (1.4)$$

a qual será utilizada para a obtenção da aproximação semiclássica e conseqüentemente para o cálculo da probabilidade e da densidade de corrente de emissão por campo, o que estamos interessados neste trabalho.

1.5 Aproximação semiclássica ou método JWKB

O método *JWKB*, devido a Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin, é uma técnica bem conhecida na literatura [14] para se obter soluções aproximadas para a equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão. É normalmente utilizada para o cálculo de energias de estados ligados e nas taxas de tunelamento por meio de barreiras de potenciais.

A idéia de se utilizar este método é imaginar uma partícula de energia E movendo-se por uma região em que o potencial $V(x)$ é *constante*. Se $E > V$, já conhecemos a sua função de onda, e esta é da forma,

$$\Psi(x) = Ae^{\pm ikx} \quad (1.5)$$

com

$$k \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar} \quad (1.6)$$

Sabemos que o sinal positivo é referente a partícula se movendo para direita e o sinal negativo referente para a esquerda e que a solução geral pode ser dada pela combinação linear destas soluções. Como já sabemos das seções anteriores, a função de onda tem um comprimento de onda associado λ fixo e de amplitude A .

Quando não temos um potencial constante, mas que varia lentamente em comparação a λ , fazendo com que este potencial seja essencialmente constante [14] sobre uma região contendo muitos comprimentos de onda. Então, é razoável supor que Ψ permanece praticamente sinusoidal [14], exceto que o comprimento de onda e a amplitude mudam lentamente com x . Essa é a ideia principal por trás deste método. Assim, ela identifica dois níveis diferentes de dependência x : oscilações rápidas, moduladas por variação gradual na amplitude e comprimento de

onda.

Pelo mesmo motivo, se $E < V$ e V é constante, então Ψ é dado por,

$$\Psi(x) = Ae^{\pm ikx} \quad (1.7)$$

com

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} \quad (1.8)$$

Se $V(x)$ não é constante, mas varia lentamente em comparação com $1/\kappa$, a solução permanecerá praticamente exponencial, exceto que A e κ são agora funções que variam lentamente com x . Temos que ter atenção para os pontos de retorno, nos quais $E \equiv V$.

Utilizando a equação de Schrödinger independente do tempo, que é dada pela eq. (1.4),

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x,t)}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

que pode ser reescrita,

$$\frac{d^2\Psi(x,t)}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \quad (1.9)$$

onde,

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (1.10)$$

que é a fórmula clássica para o momento de uma partícula com energia total E e energia potencial $V(x)$. Se $p(x)$ é real, chamamos isso de região clássica, ou seja, classicamente a partícula está confinada a este intervalo de x . Em geral Ψ é complexa e pode ser expressar em termos da sua amplitude e de sua fase,

$$\Psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)} \quad (1.11)$$

Derivando a eq. (1.11) e substituindo na eq. (1.9), encontramos duas equações, uma para a parte real e outra para a parte imaginária, que são inteiramente equivalentes à eq. de Schrödinger original. De uma dessas equações surge a aproximação *JWKB*, na qual pressupomos que a amplitude A varia lentamente, dessa forma obtem-se,

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x)dx, \quad (1.12)$$

Logo,

$$\Psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x)dx} \quad (1.13)$$

e a solução geral (aproximada) será uma combinação linear de dois termos, um com cada sinal.

1.6 Penetração de barreira

Para entender como ocorre a emissão por campo, lembremos que a energia total (E) de uma partícula se movimentando em um sistema conservativo, adotando um movimento unidimensional, é expressa por,

$$E = V(x) + \frac{p^2}{2m} \quad (1.14)$$

onde $V(x)$ é a energia potencial em função da posição x e $(p^2/2m)$ é a energia cinética expressa em função do momento linear e da massa da partícula. A equação (1.14) expressa a conservação da energia mecânica de uma partícula.

Sabe-se que a energia cinética não pode ser negativa, assim a mecânica clássica garante que uma partícula só pode ter acesso a regiões nas quais $E > V(x)$, denominadas de regiões classicamente permitidas. Os pontos para os quais $E = V(x)$ são chamados de pontos de retorno ou pontos de inversão que é onde $p(x)$ se anula. Entretanto, utilizando conceitos da Mecânica Quântica pode-se prever a possibilidade de uma partícula com energia total E penetrar em uma região classicamente proibida, ou seja, região na qual $E < V(x)$, o que contraria a teoria da mecânica clássica. Este efeito é conhecido como *efeito túnel* ou *penetração de barreira*, impossível na mecânica clássica, é muito comum em sistemas atômicos e moleculares. O qual é o princípio básico de vários dispositivos tecnológicos, como microscópios que apresentam resolução atômica [3].

Como citado nas seções anteriores, o efeito túnel ou tunelamento é uma manifestação da dualidade onda-partícula a qual é uma característica fundamental dos objetos quânticos, que são caracterizados por um comprimento de onda (λ), que é conhecido como comprimento de onda de de Broglie.

Em 1928, Ralph Howard Fowler (1889-1944) e Lothar Wolfgang Nordheim (1899-1985) foram os primeiros a explicar o processo de emissão por campo como um efeito de tunelamento [4]. Eles utilizaram um potencial de uma barreira triangular simples e consideraram uma onda mecânica, sem levar em conta a contribuição do potencial imagem. No mesmo ano, Julius Robert Oppenheimer (1904-1967) demonstrou que o átomo de hidrogênio em um campo elétrico tem uma probabilidade finita de ser ionizado por tunelamento do seu elétron, efeito que é conhecido como ionização por campo [3].

Um dos primeiros pesquisadores a descrever o efeito de emissão por campo foi Robert W. Wood (1868-1955) [15], o qual observou esse fenômeno ao realizar experimentos em tubos de raios X. Walter Hans Schottky (1886-1976) 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 elétron [3]. No contexto desse modelo seria necessário um campo da ordem de 10^8 V/cm para se observar emissão de elétrons em um

material 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*, conforme já discutido.

Em 1936, Erwin Wilhelm Muller (1911-1977) criou o microscópio de Emissão por Campo - FEEM (da acrossemia em inglês Field Emission Electron Microscope), este foi o primeiro dispositivo a obter imagens de resolução próxima na escala atômica (cerca de 20 Angströms). O princípio físico associado à obtenção de um campo elétrico com magnitude suficiente para provocar a emissão dos elétrons baseia-se no fato de que a densidade superficial de carga e , conseqüentemente, o campo elétrico serem muito maiores nas regiões pontiagudas de um condutor. Uma aplicação importante deste efeito é o funcionamento do pára-raios [16].

Em 1950, foi criado o Microscópio de Ionização por Campo (FIM), o qual foi o primeiro instrumento inventado pelo homem no qual se pôde obter imagens individuais de átomos [3].

Em meados da década de 1980, os físicos Gerd Binnig (1947) e Hernrich Rohrer (1933-2013) criaram o Microscópio de Varredura por Tunelamento (STM - Scanning Tunneling Microscope), invenção que levou ao ganho do prêmio Nobel de Física de 1986, juntamente com Ernest Ruska (1906-1988) que inventou o microscópio eletrônico.

As fontes de elétrons de emissão por campo podem ser utilizadas em muitas aplicações tais como Field Emission Microscope (FEM), Field Electron Emission flat panel displays e muitos outros dispositivos microeletrônicos à vácuo. Desde então o problema de emissão por campo tem sido investigado por muitos autores [5, 6, 7]. Mais recentemente, abriu-se a perspectiva da utilização de nanotubos de carbono em dispositivos de emissão por campo [7]. Um dos principais dispositivos, objeto de pesquisa atual, é o display de emissão por campo (field emission display - FED).

1.7 Modelo do gás de Fermi em metais

Quando os átomos de um elemento metálico se juntam, para formar um sólido, os elétrons das camadas mais externas dos átomos, conhecidos como elétrons de valência, adquirem a capacidade de se moverem quase livremente ao longo deste sólido, e nesse contexto, são chamados de elétrons de condução. Já, os elétrons que encontram-se mais internos, ligados ao núcleo atômico, continuam fortemente ligados. Assim, podemos entender um sólido metálico como baseado em dois subsistemas, os elétrons próximos do núcleo e os elétrons de condução. A interação elétron-rede é a responsável por manter os elétrons de condução confinados no metal [13]. Os elétrons de condução podem ser tratados em primeira aproximação, como partículas livres, i.e., um gás de elétrons, os quais por serem férmions obedecem o princípio de exclusão

de Pauli [9, 13].

1.7.1 Estado fundamental de um gás de férmions

Queremos calcular as propriedades do estado fundamental de N elétrons confinados em um volume V . Como os elétrons não interagem entre si (aproximação dos elétrons independentes) podemos achar o estado fundamental dos N elétrons achando os níveis de energia de um único elétron em um volume V e em seguida preenchendo esses níveis de acordo com o princípio de exclusão de Pauli.

Assim, no modelo de Sommerfield, os elétrons são considerados partículas livres em uma caixa de volume V . Observe, portanto, que não há íons nem colisões. Temos que resolver a equação de Schrodinger para uma partícula livre, dada pela expressão

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.15)$$

onde $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$ é a função de onda do elétron e E é a energia do elétron.

Como os elétrons estão confinados em um cubo de volume $V=L^3$, a função de onda satisfaz as condições de contorno periódica, chamada de condição de *Born-Von Karmen*:

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z) \quad (1.16)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z) \quad (1.17)$$

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z) \quad (1.18)$$

A razão para escolhermos condições de contorno deste tipo e não a função de onda se anulando nas faces do cubo é que, no segundo caso, os autoestados seriam estacionários e não teríamos propriedades de transporte.

É fácil verificar que as soluções normalizadas da eq. (1.15), são:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (1.19)$$

Notando que,

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, y, z) = ik_x\psi(\vec{r}), \quad (1.20)$$

implica

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, y, z) = -k_x^2\psi(\vec{r}) \quad (1.21)$$

Com expressões semelhantes tanto para $\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi$ quanto para $\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi$. Substituindo a eq. (1.19), na eq. (1.15), obtemos

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (1.22)$$

e assim, encontramos para a autoenergia:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \quad (1.23)$$

Podemos ver o significado do vetor \vec{k} notando que o autoestado $\Psi_k(\vec{r})$ é um autoestado do operador $\vec{p} = -i\hbar\nabla$. De fato,

$$\vec{p}\Psi_k(\vec{r}) = -i\hbar\nabla\Psi_k(\vec{r}) = -i\hbar\nabla\frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} = \hbar\vec{k}\Psi_k(\vec{r}) \quad (1.24)$$

com autovalor $\hbar\vec{k}$. Isso significa que um elétron no estado $\Psi_k(\vec{r})$ tem um momento definido que vale $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ e uma velocidade dada por,

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} \quad (1.25)$$

Podemos também observar que $\Psi_k(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}$ representa uma onda plana. Então, \vec{k} é interpretado como o vetor de onda relacionando como comprimento de onda pela relação

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (1.26)$$

que é o comprimento de onda de de Broglie.

Utilizando as condições de *Born-Von Karmen* na eq. (1.15), obtemos que,

$$e^{ik_xL} = e^{ik_yL} = e^{ik_zL} = 1 \quad (1.27)$$

Isso implica que

$$e^{ik_xL} = \cos(k_xL) + i\text{sen}(k_xL) = 1 \quad (1.28)$$

Logo, $\text{sen}(k_xL) = 0$ e $\cos(k_xL) = 1$.

Então, $k_xL = 2\pi n_x$; onde n_x é um inteiro:

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x \quad (1.29)$$

$$k_y = \frac{2\pi}{L}n_y \quad (1.30)$$

$$k_z = \frac{2\pi}{L}n_z \quad (1.31)$$

onde n_x , n_y e n_z são inteiros. Vemos então que os valores de k_x , k_y e k_z são quantizados e possuem um valor mínimo não nulo igual a $\frac{2\pi}{L}$.

As eqs. (1.29), (1.30) e (1.31) sugerem uma maneira interessante e útil de representarmos os estados eletrônicos em um espaço tridimensional com eixos k_x , k_y e k_z (espaço recíproco). A Fig. 1.1 mostra os pontos em um espaço bidimensional.

O volume elementar desse espaço que contém apenas um ponto $(k_x, k_y \text{ e } k_z)$ é,

$$\Delta V_k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{V} \quad (1.32)$$

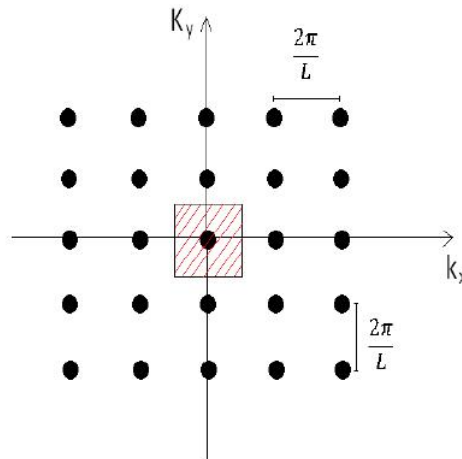


Figura 1.1 Espaço recíproco

1.7.2 Esfera de Fermi

Cada ponto no espaço recíproco (espaço - k), i.e., cada conjunto de três números (k_x , k_y e k_z) = $\frac{2\pi}{L}(n_x, n_y$ e $n_z)$ representa um estado eletrônico possível que, devido ao princípio de exclusão de Pauli, pode encontrar no máximo dois elétrons.

Freqüentemente precisamos saber quantos valores permitidos de \vec{k} estão contidos em um certo volume Ω do espaço - k . Determinar este número significa determinar também o número de elétrons no volume Ω . Então, se o volume elementar ΔV_k contém um estado, o número de estados ($N_{estados}$) contidos no volume Ω será:

$$N_{estados} = \frac{\Omega}{\Delta V_k} = \frac{\Omega V}{8\pi^3} \quad (1.33)$$

O número de elétrons dentro de Ω será duas vezes o exposto pela eq. (1.33). O estado fundamental do gás de Fermi é obtido distribuindo-se os N elétrons nos diversos estados \vec{k} em ordem ascendente de energia, obedecendo o princípio de exclusão de Pauli. O valor de \vec{k} correspondente ao autovalor mais energético é chamado de *vetor de onda de Fermi* (k_F).

O vetor de Fermi define o raio de uma esfera no espaço recíproco, cujo volume é dado por,

$$\Omega_F = \frac{4\pi k_F^3}{3} \quad (1.34)$$

Assim, o número total de elétrons no sistema, que é igual a duas vezes o número de estados, será,

$$N = 2N_{estados} = 2 \times \frac{4\pi k_F^3}{3} \times \frac{V}{8\pi^3} \quad (1.35)$$

$$N = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V \quad (1.36)$$

Fazendo $n = \frac{N}{V}$, o qual é definido como a densidade de estado eletrônica, temos,

$$n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (1.37)$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \quad (1.38)$$

k_F é da ordem de 10^8 cm^{-1} .

A partir do vetor de Fermi, pode-se definir várias outras grandezas úteis na descrição do gás de Fermi como a velocidade de Fermi ou a temperatura de Fermi, mas estaremos interessados, mais especificamente na energia de Fermi, que é dada pela expressão,

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (1.39)$$

Para os metais, a energia de Fermi está no intervalo entre 1,5 e 15 elétron-volts.

1.8 Distribuição de elétrons em um metal no estado fundamental

Como vimos na seção anterior, podemos estudar inúmeras propriedades em sólidos cristalinos, considerando-os como um arranjo periódico perfeito, infinito, de átomos em três dimensões [13]. Contudo, na prática, quando temos um sólido real e finito, levamos em conta os efeitos provocados pela superfície que o delimita espacialmente. Alguns fenômenos de emissão de elétrons em metais podem ser considerados, como a emissão termiônica [1], efeito fotoelétrico [10], ou mesmo o efeito túnel entre outros que ocorrem na superfície de um sólido.

No modelo mais simples que podemos considerar para analisar os elétrons de condução de um metal submetidos a uma barreira de potencial de profundidade finita (Fig. 1.2), temos que no estado fundamental, ou seja, a uma temperatura de 0 K , pelo princípio de exclusão de Pauli, no qual afirma que duas partículas de spin $1/2$ (no nosso caso, o elétron) não podem ocupar o mesmo estado quântico, os níveis de energia são preenchidos até um valor máximo, conhecido como nível de Fermi E_F [13, 16].

A função trabalho (Φ) é definida como energia mínima necessária para extrair o elétron do metal, ou seja, esta energia é a diferença de energia entre o nível de vácuo e o nível de Fermi E_F (Fig. 1.2). O nível de vácuo é a energia de um elétron em repouso em um ponto suficientemente afastado da superfície do metal. Para os metais, os valores típicos para a energia de Fermi encontram-se entre 2 e 14 eV e para a função trabalho temos valores entre 2 e 5 eV [3] (1 eV é a energia adquirida por um elétron quando o mesmo é acelerado através de uma diferença de potencial de 1 volt) [16].

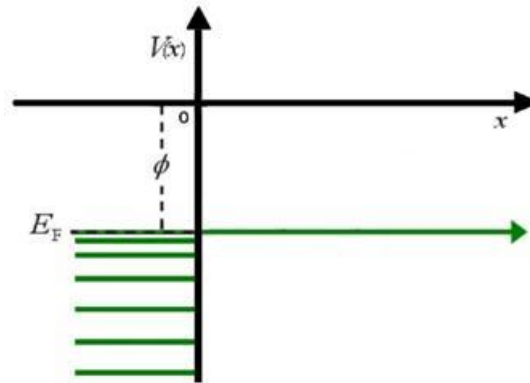


Figura 1.2 Modelo mais simples para analisar os elétrons de condução de um metal

1.9 Emissão de elétrons em metais

Os processos de emissão de elétrons através de superfícies sólidas, mais especificamente em metais, são de grande interesse científico e tecnológico. No efeito termiônico, os elétrons são emitidos através do aquecimento do material a temperaturas suficientemente altas, da ordem de 2000 K para metais [1], o qual tem a função de fornecer energia aos elétrons para que eles consigam superar a barreira de potencial que os mantém ligados aos sólidos. Um efeito similar que se pode citar é o efeito fotoelétrico, no qual se incide luz/radiação no metal, e a energia proveniente do feixe luminoso é absorvida pelos elétrons para que estes consigam superar a barreira de potencial.

Podemos também ter a emissão de elétrons de um sólido, neste trabalho estaremos interessados especificamente em metais, mesmo sem o fornecimento da energia mínima necessária para a sua remoção, a qual é conhecida como função trabalho. Isso pode ser feito através da aplicação de um campo elétrico externo suficientemente intenso, da ordem de 10^7 V/cm para um metal [2], o qual tem a função de diminuir a barreira de potencial vista pelo elétron. Esse processo é denominado emissão por campo ou emissão fria.

A aplicação do campo elétrico externo não alterará a configuração eletrônica do material devido à blindagem eletrostática [16]. Assim, a função da aplicação deste campo elétrico externo encontra-se em modificar a barreira de potencial vista pelo elétron, conforme ilustrado na Figura 1.3.

Devido a aplicação do campo elétrico externo, a configuração da barreira de potencial vista pelo elétron é alterada (Fig. 1.3), e assim, pela mecânica quântica podemos calcular a probabilidade de tunelamento deste elétron, ou seja, a probabilidade que um elétron (vale salientar que neste trabalho estaremos interessados nos elétrons do nível de Fermi) tem de se encontrar na região classicamente proibida (entre x_1 e x_2), mesmo este elétron contendo uma Energia E menor que a energia potencial $V(x)$.

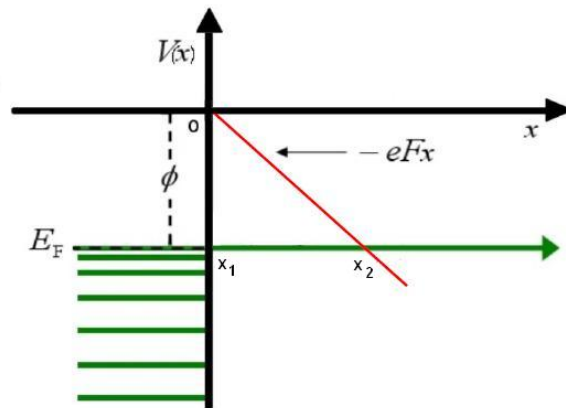


Figura 1.3 Configuração da barreira de potencial devido à aplicação de um campo elétrico externo

1.10 Probabilidade de Tunelamento em Fenômenos de Emissão por Campo

Quando queremos calcular a probabilidade (P) de um elétron ser emitido do metal através da aplicação de um campo elétrico externo intenso, vemos que a literatura nos fornece inúmeros métodos para esta tarefa, e o primeiro passo é especificar a energia potencial do sistema. Para o modelo mais simples que podemos ter de energia potencial (Fig. 1.4) [3, 12], a energia potencial é dada pela eq. (1.40),

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x < 0 \\ -eFx, & x > 0 \end{cases} \quad (1.40)$$

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.

Note que este modelo não considera a contribuição do potencial imagem [17], e se utilizarmos o método JWKB devemos resolver a seguinte expressão,

$$P = \exp \left[-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx \right] \quad (1.41)$$

onde 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 clássico.

Obtemos depois de um cálculo trivial:

$$P = \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m\Phi\Phi}}{3\hbar eF} \right] \quad (1.42)$$

Este modelo, que é muito abordado na literatura [12, 18] é muito simples. Entretanto, 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

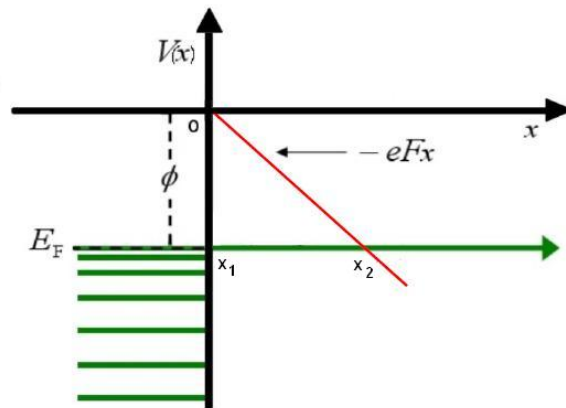


Figura 1.4 Modelo simples que representa a energia potencial dos elétrons de condução em um sólido. E x_1 e x_2 são os pontos de retorno.

barreira que é dada por $b = \Phi/eF$.

Em 1956, E.L. Murphy e R. H. Good utilizaram uma barreira de potencial mais realística para o cálculo da probabilidade de tunelamento, na qual inseriram o potencial imagem [17], que é a contribuição devido ao fato de que quando um elétron é emitido do metal, este fica carregado positivamente e ocorre assim a atração elétrica entre o elétron (negativo) e o metal (positivo), mudando assim a configuração barreira de potencial, a qual sai de um modelo simples e ideal (fig. 1.4) para um modelo mais real (fig. 1.5). Eles usaram o método semi-clássico, conhecido como aproximação JWKB [11, 14], para obtenção de uma expressão para o coeficiente de transmissão da barreira. Este cálculo é bastante aceito na literatura [12, 18].

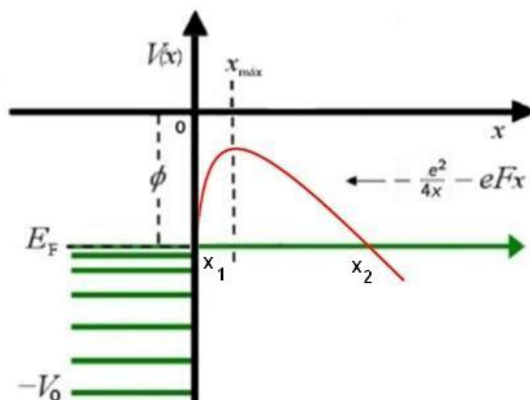


Figura 1.5 Modelo de barreira de potencial considerando a contribuição do potencial imagem

A energia potencial o sistema agora será descrita por,

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x < 0 \\ -\frac{e^2}{4x} - eFx, & x > 0 \end{cases} \quad (1.43)$$

onde F é a magnitude do campo elétrico e x é a distância medida a partir da interface metal-vácuo na direção perpendicular a essa interface (Fig. 1.5).

Novamente, a literatura [12, 18] nos afirma que substituindo a eq.1.43 na eq. 1.41 e realizando alguns cálculos algébricos, nos é fornecida a seguinte expressão para a probabilidade de tunelamento,

$$P = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m\Phi}\Phi}{3\hbar eF}\varphi(y)\right), \quad (1.44)$$

com $\varphi(y)$ dado por

$$\varphi(y) = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - y^2}}{2}} \left[\xi(\lambda) - (1 - \sqrt{1 - y^2})\nu(\lambda) \right] \quad (1.45)$$

onde $\xi(\lambda)$ e $\nu(\lambda)$ são integrais elípticas completas e

$$\lambda^2 = \frac{2\sqrt{1 - y^2}}{1 + \sqrt{1 - y^2}} \quad (1.46)$$

com

$$y = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi}. \quad (1.47)$$

A eq. 1.45 é uma expressão que é dada em termos de integrais elípticas completas, sendo notória a sua complexidade e a dificuldade na sua manipulação, bem como a dificuldade de ser interpretada do ponto de vista analítico. Embora seja possível resolvê-la numericamente, usando programas específicos, o tempo hábil para a obtenção de uma solução é muito demorado que inviabiliza o desenvolvimento da pesquisa. Os valores para a probabilidade de tunelamento em fenômenos de emissão por campo dados pela eq. 1.45 encontram-se em [12, 18].

Como a probabilidade de corrente é uma função elíptica completa, a densidade de corrente também será fornecida em termos desta função especial, pois a densidade de corrente eletrônica depende da probabilidade do elétron ser emitido do metal.

1.11 Densidade de Corrente em fenômenos de Emissão por Campo

A densidade de corrente \vec{J} (corrente por unidade de área) para um único portador de carga é dada pela expressão:

$$\vec{J} = nq\vec{v} \quad (1.48)$$

onde n é a concentração de portadores de carga q e \vec{v} é a velocidade de arraste das cargas.

No processo de emissão por campo, a densidade de corrente resulta da contribuição de

todos os elétrons que escapam do metal. O número total de elétrons N é a soma sobre todos os níveis de energia do número médio de cada nível, i.e.,

$$N = \sum_k f(E(k)) \quad (1.49)$$

onde $f(E(k))$ é a distribuição de Fermi-Dirac, então,

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{V} \sum_k f(E(k)) \quad (1.50)$$

no qual V é o volume do metal.

A densidade de corrente de emissão por campo é definida pelo produto da carga do elétron ($-e$) vezes a concentração de elétrons vezes a probabilidade de penetração da barreira vezes o componente da velocidade perpendicular à superfície metálica. Tomando o eixo x como perpendicular à direção da superfície, temos que,

$$J = -\frac{2e}{V} \sum_k f(E(k)) P(E) V_x(k) \quad (1.51)$$

onde $P(E)$ é a probabilidade de penetração de barreira e $V_x(k)$ é a velocidade do elétron na direção x , e o fator 2 é devido a degenerescência do elétron.

Podemos transformar a soma da eq. (1.51) pela conhecida regra,

$$\sum_k \rightarrow \frac{V}{8\pi^3} \int d^3k \quad (1.52)$$

Substituindo a eq. (1.52) na eq. (1.51), temos,

$$J = -\frac{e}{4\pi^3} \int f(E(k)) P(E) V_x(k) d^3k \quad (1.53)$$

No limite de baixas temperaturas e elevada intensidade de campo, que é nosso caso, podemos aproximar a distribuição de Fermi-Dirac por uma função degrau,

$$f(E(k)) = \begin{cases} 1, & E < E_F \\ 0, & E > E_F \end{cases} \quad (1.54)$$

A eq. (1.53), depois de um introduzirmos coordenadas polares, fica na forma,

$$J = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar} \int_0^{E_F} P(E) dE_X \int dk_y dk_z \quad (1.55)$$

Calculando a segunda integral na eq. (1.55), resulta em,

$$J = -\frac{em}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} (E_F - E_X) P(E_X) dE_X \quad (1.56)$$

Logo, quando queremos calcular a densidade de corrente eletrônica em fenômenos de emissão por campo temos que resolver a eq. (1.56). Existe uma expressão padrão para a densidade de corrente de emissão por campo na literatura [18] dada pela expressão,

$$J = \frac{e^3 F^2}{16\pi^2 \hbar \Phi} \frac{1}{t^2(y_0)} \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} f(y)\right) \quad (1.57)$$

onde e é a carga elementar do elétron, \hbar é a constante de Planck, F é o campo elétrico externo aplicado para reduzir a barreira de potencial vista pelo elétrons, Φ é a função trabalho e $f(y)$ e dado pela expressão,

$$f(y) = \left[\frac{1 + \sqrt{1 - y^2}}{2}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\xi(\lambda) - (1 - \sqrt{1 - y^2})\nu(\lambda)\right] \quad (1.58)$$

onde $\xi(\lambda)$ e $\nu(\lambda)$ são integrais elípticas completas de primeiro e segundo tipo e,

$$\lambda^2 = \frac{2\sqrt{1 - y^2}}{1 + \sqrt{1 - y^2}} \quad (1.59)$$

$$y = \frac{\sqrt{e^3 F}}{V_0 - E_x} < 1 \quad (1.60)$$

onde $V_0 = \Phi + E_F$ é a altura da barreira de potencial, E_F é o nível de Fermi e E_x é a energia do elétrons no nível.

Finalmente,

$$t(y_0) = \left[f(y) - \frac{2}{3}y \frac{df}{dy}\right]_{y=y_0} \quad (1.61)$$

com

$$y_0 = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi} \quad (1.62)$$

O cálculo da densidade de corrente via eq. (1.57) requer um cálculo numérico tedioso, como afirma Dolan [19]. Alguns cálculos numéricos para vários campos e funções trabalho são reportados em [12, 18, 19].

As expressões obtidas para explicação deste fenômenos carregam o nome dos responsáveis pela sua descrição pela primeira vez, ou seja, expressões que descrevam este fenômeno de forma qualitativa são chamadas de expressões do tipo Fowler-Nordheim.

Assim, apesar do fato de que o fenômeno de emissão por campo ser bem consolidado na literatura, observa-se que este se encontra deixado de lado pela comunidade científica devido aos potentes computadores existentes que nos auxiliam no cálculo desta grandeza. Este trabalho consiste em fazer uma abordagem teórica deste fenômeno de uma forma que possamos obter expressões analíticas para o fenômeno de emissão por campo, ou seja, tanto para a probabilidade quanto para a densidade de corrente e depois comparar com os valores encontrados na literatura, os quais estão bastante consolidados e aceitos pela comunidade científica.

Vale ressaltar que com a obtenção de expressões analíticas para este problema, estas seriam mais fáceis de serem manipuladas, mesmo com o fato de termos os computadores/softwarees como aliados nesta missão, bem como do ponto de vista analítico a obtenção de informações do comportamento do fenômeno diretamente através das expressões seria muito interessante, o que não é possível com as expressões que temos hoje na literatura, as quais são aceitas pela comunidade científica para descrever este fenômeno.

O fenômeno de emissão por campo voltou a ganhar destaque nos dias de hoje com as inovações tecnológicas, mais especificamente com os nanotubos de carbono [7], o que nos garante que esta é uma área que deve estar buscando avanços, propiciando uma constante busca de aprimoramento dos seus mecanismos de explicação. Obtendo expressões analíticas do tipo Fowler-Nordheim relativamente gerais sem perder a descrição real do problema ajudará nos avanços desta área bem como num aperfeiçoamento do fenômeno pela comunidade científica.

Cálculo da probabilidade de tunelamento em fenômeno de emissão por campo

2.1 Introdução

A probabilidade de penetração de barreira ou probabilidade de tunelamento (P) é uma quantidade fundamental a ser determinada no estudo de emissão por campo. Neste trabalho será utilizada a aproximação *JWKB* para calcular essa grandeza. Esse método fornece a seguinte expressão para P [12, 18],

$$P = \exp \left[-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx \right] \quad (2.1)$$

onde 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 clássico.

Precisamos, então, para resolver a eq. (2.1), determinar a energia potencial do sistema. Adotaremos o modelo de Sommerfeld [13] para os elétrons de condução do metal, cuja superfície assumiremos como plana. O metal será considerado como um poço de potencial de altura $V_o = E_F + \Phi$, onde E_F é a energia de Fermi e Φ é a função trabalho do material.

Quando se aplica um campo elétrico externo F , o seu efeito principal é reduzir a largura da barreira de potencial que impede os elétrons de escaparem do metal. É justamente esse efeito que torna possível que os elétrons, cujas energias são menores que a altura da barreira, escapem do metal. Se F é a magnitude do campo elétrico, o termo $-eFx$ representa a energia devido ao campo.

Quando um elétron escapa do metal, cuja superfície é considerada um plano condutor, ele interage com uma carga imagem positiva ($+e$) situada a uma mesma distância através do plano, i.e., no interior do metal. A energia potencial associada a essa interação coulombiana é dada por $-e^2/4x$ (no c.g.s.).

Considerando essas duas contribuições podemos escrever a energia potencial como,

$$V(x) = \begin{cases} -V_o, & x < 0 \\ -\frac{Ze^2}{4x} - eFx, & x > 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

onde x é a distância medida a partir da interface metal-vácuo na direção perpendicular a essa interface (fig. 2.1) e Z é um parâmetro do modelo que pode ser utilizado para simular a rugosidade

da superfície, camadas de adsorção, fenômenos de blindagem, dentre outros.

2.2 Apresentando os modelos

Como estamos interessados no cálculo da probabilidade de penetração da barreira, P , no processo de emissão por campo (especificamente para metais) e iremos utilizar a aproximação JWKB. Temos a seguinte expressão para resolver,

$$P = \exp \left[-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx \right] \quad (2.3)$$

onde 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 clássico.

Sabemos também que a escolha da energia potencial do sistema é arbitrária para cada modelo, então temos que determiná-la. Adotamos assim dois modelos para a energia potencial que desse uma boa representação do sistema real, conforme ilustrado na Fig. 2.1, mas, ao mesmo tempo, permitisse um cálculo analítico de P .

Consideramos 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. O elétron que escapa do metal (estaremos interessados nos elétrons do nível de Fermi) está sujeito ao campo elétrico externo e ao potencial imagem.

No primeiro modelo (Figura 2.1(1)) separamos em regiões distintas as contribuições do

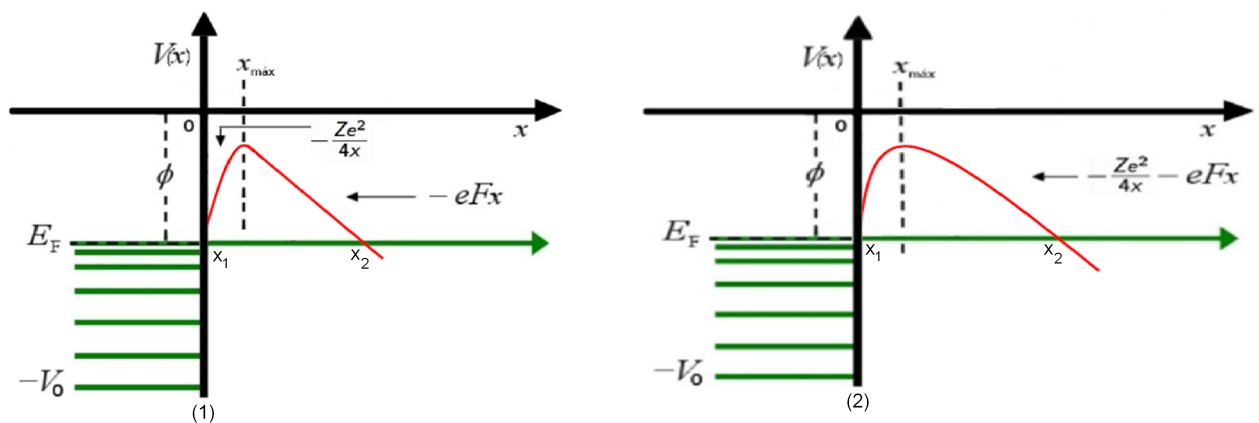


Figura 2.1 (1) Modelo separando a contribuição do potencial imagem e do campo elétrico, onde E_F é a Energia de Fermi, V_0 o potencial, x_{max} até onde o potencial imagem atua e x_1 e x_2 são os pontos de retorno. (2) Modelo considerando o potencial imagem em todo intervalo.

potencial imagem e do campo elétrico, o que facilita a resolução das integrais resultantes. Pró-

ximo à superfície a influência do potencial imagem predomina em comparação com a do campo elétrico no potencial total, ocorrendo o inverso à medida que nos afastamos da superfície.

Assim, a contribuição do potencial imagem encontra-se na região entre x_1 e x_{max} , o que é uma hipótese razoável já que o potencial imagem é dado pela expressão $Ze^2/4x$, que cai com o inverso da distância, onde e é a carga elementar do elétrons e x é a distância. Após o x_{max} , consideramos a contribuição do campo elétrico, que é dada pela expressão eFx , onde F é o campo elétrico aplicado. Desse modo, próximo à superfície utilizamos apenas o potencial imagem e a partir do máximo, a barreira decresce linearmente.

Já 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 (Figura 2.1(2)).

Assim, a energia potencial para ambos os sistemas pode ser escrita como,

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x < 0 \\ -\frac{Ze^2}{4x} - eFx, & x > 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

onde F é a magnitude do campo elétrico, Z é um parâmetro do modelo que pode ser utilizado para simular a rugosidade da superfície, camadas de adsorção, fenômeno de blindagem, dentre outros [2]. Porém, não analisaremos tais efeitos neste trabalho, i.e., utilizaremos Z igual a 1, que é o caso de uma superfície lisa e ideal, para comparação com os cálculos encontrados na literatura, e x é a distância medida a partir da interface metal-vácuo na direção perpendicular a essa interface.

2.2.1 Cálculo dos pontos de retorno clássicos

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

$$V(x) - E = \Phi - \frac{Ze^2}{4x} - eFx \quad (2.5)$$

Os pontos de retorno clássico são as raízes da Eq. (2.5) dadas pela expressão,

$$x_{1,2} = \frac{\Phi \pm \sqrt{\Phi^2 - Ze^3F}}{2eF} \quad (2.6)$$

Para metais $\Phi \cong 5eV$. Por sua vez, o termo $e\sqrt{eF} \cong 0.1eV$ para um campo de magnitude $F \cong 10^6V/m$. Desse modo podemos considerar a hipótese de que $\Phi^2 \gg Ze^3F$.

Com essa hipótese podemos escrever,

$$x_1 = \frac{Ze^2}{4\Phi} \quad (2.7)$$

e

$$x_2 = \frac{\Phi}{eF} \quad (2.8)$$

A barreira de potencial apresenta um máximo em,

$$\frac{dV}{dx} = 0 \Rightarrow \frac{d\left(-\frac{Ze^2}{4x} - eFx\right)}{dx} = 0 \quad (2.9)$$

Logo,

$$x_{max} = \frac{e\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}} \quad (2.10)$$

Vemos que o ponto de retorno clássico interno, x_1 , dado pela eq. (2.7), 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. (2.8), depende linearmente da função trabalho e é inversamente proporcional ao campo elétrico.

Na tabela 2.1 são mostrados os valores de x_1 , x_{max} e x_2 (em angströms) 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 2.1 Valores numéricos para os pontos de retorno interno, x_{max} e externo para diversos valores de campo elétrico e para dois valores da função trabalho (3 e 5 eV).

F (V/cm)	$\Phi = 3eV$			$\Phi = 5eV$		
	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. (2.3) vamos considerar dois modelos denominados modelo 1 e modelo 2, descritos a seguir.

2.2.2 Cálculo da Probabilidade de tunelamento - Modelo 1

Nesse modelo separamos em regiões distintas as influências do campo elétrico e do potencial imagem (Figura 2.2). 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

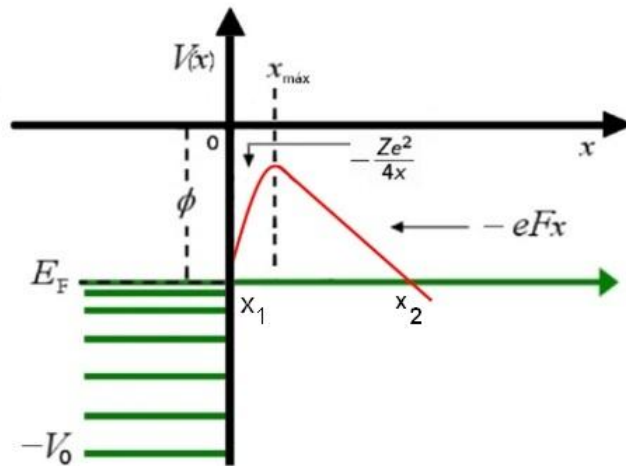


Figura 2.2 Modelo separando a contribuição do potencial imagem e do campo elétrico.

imagem, mas, a partir do máximo, a barreira decresce linearmente, i.e.,

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x < 0 \\ -\frac{Ze^2}{4x}, & 0 < x < x_{max} \\ -eFx, & x > x_{max} \end{cases} \quad (2.11)$$

Substituindo o valor do potencial, eq. (2.11), na eq. (2.3), temos, então, a seguinte expressão para a probabilidade de tunelamento,

$$P_1 = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_{max}} \sqrt{2m \left(\Phi - \frac{Ze^2}{4x} \right)} dx - \frac{2}{\hbar} \int_{x_{max}}^{x_2} \sqrt{2m (\Phi - eFx)} dx \right] \quad (2.12)$$

Teremos assim as duas contribuições, e devemos calculá-las separadamente, o que pode ser visto na eq. (2.12) devido ao fato de termos duas integrais à resolver. Vamos assim dividir o cálculo de P desse modelo em duas partes. Logo, a primeira e a segunda integral da eq. (2.12) serão resolvidas separadamente.

Para o cálculo da primeira integral da eq. (2.12), temos a expressão,

$$\int_{x_1}^{x_{max}} \sqrt{2m \left(\Phi - \frac{Ze^2}{4x} \right)} dx \quad (2.13)$$

A qual será resolvida fazendo a substituição de $y^2 = \Phi - \frac{Ze^2}{4x}$. Isolando-se o valor de x e calculando o dx , a eq. (2.13) pode ser reescrita como,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \frac{y^2}{(\Phi - y^2)^2} dy \quad (2.14)$$

Resolveremos a eq. (2.14) utilizando a técnica de resolução por frações parciais. Assim podemos reescrever a eq. (2.14) como,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \left[\frac{1}{y^2 - \Phi} + \frac{\Phi}{(\Phi - y^2)^2} \right] dy \quad (2.15)$$

Para resolver a eq. (2.15) teremos que novamente desmembrar em duas partes esta integral. Assim, para o cálculo da primeira parte da eq. (2.15) temos,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \frac{1}{y^2 - \Phi} dy = \frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \frac{1}{y^2 - \sqrt{\Phi^2}} dy \quad (2.16)$$

A eq. (2.16) pode ser reescrita como,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \frac{1}{(y - \sqrt{\Phi})(y + \sqrt{\Phi})} dy \quad (2.17)$$

Utilizando mais uma vez a técnica de resolução de integrais por frações parciais temos, $A = \frac{1}{2\sqrt{\Phi}}$ e $B = -\frac{1}{2\sqrt{\Phi}}$. Por fim, podemos escrever a eq. (2.17) como,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \left(\frac{\frac{1}{2\sqrt{\Phi}}}{y - \sqrt{\Phi}} - \frac{\frac{1}{2\sqrt{\Phi}}}{y + \sqrt{\Phi}} \right) dy \quad (2.18)$$

Que tem solução,

$$\frac{e^2}{4} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} \ln \left| \frac{y - \sqrt{\Phi}}{y + \sqrt{\Phi}} \right| \quad (2.19)$$

Precisamos agora calcular a segunda parte da eq. (2.15), que é dada por,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \frac{\Phi}{(\Phi - y^2)^2} dy \quad (2.20)$$

Para resolução da eq. (2.20), tomamos $y = \sqrt{\Phi} \operatorname{sen} \theta$ e conseqüentemente $dy = \sqrt{\Phi} \cos \theta d\theta$. Substituindo na eq. (2.20) podemos reescrevê-la como,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e^2 \int \sec^3 \theta d\theta \quad (2.21)$$

Assim, finalmente calculando a integral da eq. (2.21), resulta em,

$$\frac{e^2}{4} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} [tg \theta \sec \theta + \ln |\sec \theta + tg \theta|] \quad (2.22)$$

E, sabendo que $\operatorname{sen} \theta = \frac{y}{\sqrt{\Phi}}$, chegamos à,

$$\frac{e^2}{4} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} \left[\frac{y\sqrt{\Phi}}{\Phi - y^2} + \ln \left| \frac{\sqrt{\Phi} + y}{\sqrt{\Phi - y^2}} \right| \right] \quad (2.23)$$

Logo, a solução para a eq. (2.15) é a soma da eq. (2.19) com a eq. (2.23). Substituindo os limites de integração, teremos,

$$\frac{\sqrt{2m}}{2} e \sqrt{\frac{Z\Phi}{eF} - \frac{eZ\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}}} + \frac{Ze^2}{4} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} \ln \left| \frac{\sqrt{\frac{2e\Phi\sqrt{Z}}{\sqrt{eF}}} - Ze^2 - \sqrt{\frac{2e\Phi\sqrt{Z}}{\sqrt{eF}}}}{\sqrt{Ze^2}} \right| \quad (2.24)$$

Agora finalmente calculamos a segunda parte da eq. (2.12), que é dada por,

$$\int_{x_{max}}^{x_2} \sqrt{2m(\Phi - eFx)} dx \quad (2.25)$$

A resolução da integral da eq. (2.25) é trivial e tem como resultado,

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3} (eF)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\Phi}{eF} - \frac{e\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.26)$$

Assim, somando-se a eq. (2.24) com a eq. (2.26), temos a seguinte expressão para a probabilidade de corrente de emissão por campo,

$$P = \left| \frac{1}{\sqrt{\frac{2\Phi}{\sqrt{e^3FZ}} - 1} - \sqrt{\frac{2\Phi}{\sqrt{e^3FZ}}}} \right|^{\left(\frac{Ze^2}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} \right)} \exp \left\{ -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left(\frac{\Phi}{eF} - \frac{e\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}} \right)^{\frac{3}{2}} \right\} \quad (2.27)$$

que é a expressão para a probabilidade de tunelamento calculada via modelo 1 [2].

2.2.3 Cálculo da probabilidade de tunelamento - Modelo 2

Já para este modelo, que é análogo unidimensional do potencial real em três dimensões para uma superfície plana, consideramos o potencial imagem em todo intervalo (Figura 2.3), temos a seguinte configuração para a energia potencial,

$$V(x) = \begin{cases} -V_o, & x < 0 \\ -\frac{Ze^2}{4x} - eFx, & x > 0 \end{cases} \quad (2.28)$$

Para calcular a probabilidade de tunelamento para este modelo substituiremos a eq. (2.28) na eq. (2.3). Porém, como estamos considerando a contribuição do potencial imagem e do campo elétrico em todo espaço a probabilidade de penetração da barreira do elétron para este modelo fica agora na forma,

$$P = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \left(\Phi - \frac{Ze^2}{4x} - eFx \right)} dx \right] \quad (2.29)$$

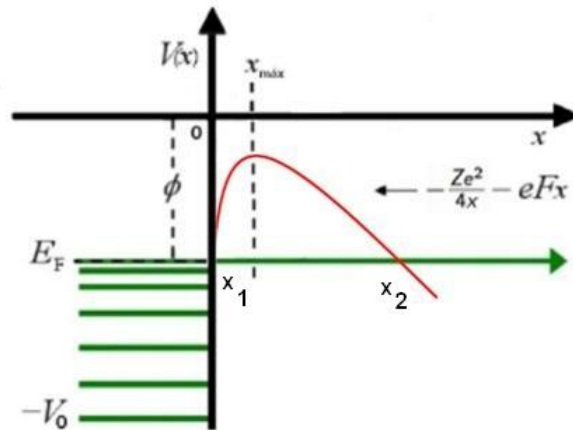


Figura 2.3 Modelo considerando o potencial imagem em todo intervalo.

A integral que aparece na eq. (2.29) comparada com as integrais do modelo 1, é muito mais difícil de ser resolvida. Contudo, podemos expressá-la em termos de integrais elípticas [20]. Para isso vamos reescrevê-la da seguinte forma,

$$I = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m} \sqrt{\frac{eF}{x} \left(-x^2 + \frac{\Phi x}{eF} - \frac{Ze^2}{4eF} \right)} dx \quad (2.30)$$

a qual pode ser escrita como,

$$I = \sqrt{2meF} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{(x_2 - x)(x - x_1)}{x}} dx \quad (2.31)$$

onde,

$$x_1 + x_2 = \frac{\Phi}{eF} \quad (2.32)$$

e

$$x_1 x_2 = \frac{Ze^2}{4\Phi} \quad (2.33)$$

A integral da eq. (2.31) tem a seguinte forma [20],

$$\int_u^a \sqrt{\frac{(a-x)(x-b)}{x-c}} dx = \frac{2}{3} \sqrt{a-c} [(a+b-2c)\xi(\lambda, p) - 2(b-c)\upsilon(\lambda, p)] - \frac{2}{3} \sqrt{(a-u)(u-b)(u-c)}$$

Comparando com a nossa expressão, vemos que $x_1 = u = b$; $c = 0$; e $x_2 = a$. Assim, a solução da integral da eq. (2.31) será dada por,

$$\int_u^a \sqrt{\frac{(a-x)(x-b)}{(x-c)}} = \frac{2}{3} \sqrt{x_2} [(x_1 + x_2)\xi(\lambda, p) - 2x_1\upsilon(\lambda, p)] \quad (2.34)$$

onde $\xi(\lambda, p)$ e $\nu(\lambda, p)$ são integrais elípticas completas da forma,

$$\lambda = \arcsin \sqrt{\frac{a-u}{a-b}} \Rightarrow \arcsin \sqrt{\frac{x_2-x_1}{x_2-x_1}} \Rightarrow \lambda = \frac{\pi}{2} \quad (2.35)$$

e

$$p = \sqrt{\frac{a-b}{a-c}} \Rightarrow \sqrt{\frac{x_2-x_1}{x_2}} \Rightarrow p^2 = 1 - \frac{x_1}{x_2} \quad (2.36)$$

Assim,

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{(x_2-x)(x-x_1)}{x}} dx = \frac{2}{3} \sqrt{x_2} \left[(x_1+x_2) \xi\left(\frac{\pi}{2}, p\right) - 2x_1 \nu\left(\frac{\pi}{2}, p\right) \right] \quad (2.37)$$

onde $p^2 = 1 - \frac{x_1}{x_2}$, $\xi(\lambda, p)$ e $\nu(\lambda, p)$ são integrais elípticas completas que podem ser desenvolvidas em séries, conforme reportado em Gradshteyn et.al. [20],

$$\xi\left(\frac{\pi}{2}, p\right) = 1 + \frac{1}{2} \left[\ln\left(\frac{4}{p'}\right) - \frac{1}{2} \right] p'^2 + \dots \quad (2.38)$$

e

$$\nu\left(\frac{\pi}{2}, p\right) = \ln\left(\frac{4}{p'}\right) + \ln\left(\frac{4}{p'} - 1\right) \frac{p'}{4} + \dots \quad (2.39)$$

onde

$$p' = \sqrt{1-p^2} = \left(\frac{x_1}{x_2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.40)$$

Logo, substituindo as eqs. (2.38) e (2.39) na eq. (2.37) temos,

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3} \sqrt{x_2} \left\{ (x_1+x_2) \left[1 + \frac{1}{2} \left(\ln\left(\frac{4}{p'}\right) - \frac{1}{2} \right) p'^2 \right] - \right. \\ & \left. - 2x_1 \left[\ln\left(\frac{4}{p'} + \left(\frac{1}{2}\right)^2 \ln\left(\frac{4}{p'} - 1\right) p'^2 \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Que por sua vez, pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3} \sqrt{x_2} (x_1+x_2) + \frac{x_1(x_1+x_2)\sqrt{x_2}}{3x_2} \ln\left(\left(\frac{4\sqrt{x_2}}{\sqrt{x_1}}\right) - \frac{1}{2}\right) - \\ & - \frac{4}{3} x_1 \sqrt{x_2} \ln\left(\frac{4\sqrt{x_2}}{\sqrt{x_1}}\right) - \frac{x_1^2 \sqrt{x_2}}{3x_2} \left(\ln\left(\frac{4\sqrt{x_2}}{\sqrt{x_1}}\right) - 1 \right) \end{aligned} \quad (2.42)$$

Lembremos que $x_1 = Ze^2/4\Phi$, $x_2 = \Phi/eF$ e que $x_1+x_2 = \Phi/eF$ e $x_1x_2 = Ze^2/4eF$.

Assim a eq. (2.42) fica na forma,

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\Phi}{eF}} \left\{ \frac{\Phi}{eF} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\ln\left(4\sqrt{\frac{x_2}{x_1}}\right) - \frac{1}{2} \right) \frac{x_1}{x_2} \right] - 2x_1 \left[\ln\left(4\sqrt{\frac{x_2}{x_1}}\right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{4} \left(\ln\left(4\sqrt{\frac{x_2}{x_1}}\right) - 1 \right) \frac{x_1}{x_2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Utilizando o fato de que $x_1/x_2 = (Ze^3)/(4\Phi^2)$ vemos que a eq. (2.43) pode ser reescrita como,

$$\frac{2}{3}\sqrt{\frac{\Phi}{eF}} \left\{ \frac{\Phi}{eF} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) - \frac{1}{2} \right) \frac{Ze^3F}{4\Phi^2} \right] - \frac{Ze^2}{2\Phi} \left[\ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) + \frac{1}{4} \left(\ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) - 1 \right) \frac{Ze^3F}{4\Phi^2} \right] \right\} \quad (2.44)$$

Rearrmando a eq (2.44),

$$\frac{2}{3}\sqrt{\frac{\Phi}{eF}} \frac{\Phi}{eF} \left\{ \left[1 + \frac{Ze^3F}{8\Phi^2} \ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) - \frac{Ze^3F}{16\Phi^2} \right] - \frac{Ze^3F}{2\Phi^2} \left[\ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) - \frac{Ze^3F}{16\Phi^2} + \frac{Ze^3F}{16\Phi^2} \ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) \right] \right\} \quad (2.45)$$

Assim, inserimos a eq. (2.45) na eq. (2.31) para o cálculo da probabilidade de penetração, temos

$$P_2 = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \sqrt{eF} \left[\frac{2}{3} \sqrt{\frac{\Phi}{eF}} \frac{\Phi}{eF} \left[1 - \frac{Ze^3F}{16\Phi^2} + \frac{Z^2e^6F^2}{32\Phi^4} + \frac{Ze^3F}{8\Phi^2} \ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) - \frac{Ze^3F}{2\Phi^2} \ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) - \frac{Z^2e^6F^2}{32\Phi^4} \ln \left(\frac{8\Phi}{e\sqrt{ZeF}} \right) \right] \right] \right\} \quad (2.46)$$

Que por fim, resulta em

$$P = \left(\frac{8\Phi}{\sqrt{e^3FZ}} \right)^{\left[\frac{\sqrt{2m\Phi\Phi}}{\hbar eF} \frac{Ze^3F}{2\Phi^2} \left(1 + \frac{Ze^3F}{12\Phi^2} \right) \right]} \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2m\Phi\Phi}}{3\hbar eF} \left[1 + \frac{Ze^3F}{16\Phi^2} \left(\frac{Ze^3F}{2\Phi^2} - 1 \right) \right] \right\} \quad (2.47)$$

Esta é a expressão para a probabilidade de tunelamento calculada via modelo 2 [2]. Os

Tabela 2.2 Valores numéricos para a probabilidade de tunelamento para diversos valores de campo elétrico e dois valores de função trabalho para os dois modelos propostos.

Campo Elétrico						
F (V/cm)	10^6	5×10^6	10^7	3×10^7	5×10^7	10^8
Probabilidade de Tunelamento - Modelo 1						
$\Phi = 3eV$	$9,8 \times 10^{-153}$	$8,4 \times 10^{-30}$	$1,5 \times 10^{-14}$	$1,5 \times 10^{-4}$	$1,2 \times 10^{-2}$	0,3
$\Phi = 5eV$	$1,5 \times 10^{-330}$	$3,2 \times 10^{-65}$	$1,8 \times 10^{-32}$	$1,4 \times 10^{-10}$	$3,0 \times 10^{-6}$	$4,5 \times 10^{-3}$
Probabilidade de Tunelamento - Modelo 2						
$\Phi = 3eV$	$7,0 \times 10^{-151}$	$2,7 \times 10^{-28}$	$3,4 \times 10^{-13}$	$2,1 \times 10^{-3}$	$1,0 \times 10^{-1}$	1*
$\Phi = 5eV$	$6,0 \times 10^{-329}$	$3,5 \times 10^{-64}$	$3,0 \times 10^{-31}$	$1,6 \times 10^{-9}$	$2,8 \times 10^{-5}$	$3,4 \times 10^{-2}$

valores para a penetração de barreira calculados para os dois modelos propostos, obtidos com as equações (2.27) e (2.47) são dados na tabela 2.2¹. Estes são bem próximos dos encontrados na literatura [12].

¹* Se o coeficiente de transmissão é igual a 1, então no caso da mecânica clássica o elétron pode escapar do metal".

Cálculo da densidade de corrente em fenômenos de emissão por campo

3.1 Introdução

Apesar de sua grande importância teórica no estudo do fenômeno de emissão por campo, a probabilidade de tunelamento não é uma quantidade física que pode ser determinada experimentalmente, já que é um número. Do ponto de vista experimental, uma grandeza física de interesse é a densidade de corrente elétrica, também denominada *densidade de corrente de emissão por campo*.

Neste capítulo vamos calcular teoricamente a densidade de corrente de emissão por campo levando em conta os modelos para a energia potencial do elétron em metais apresentados no capítulo anterior.

3.2 Densidade de corrente eletrônica

Sabe-se que a densidade de corrente \vec{J} para um único portador de carga é dada pela eq. (1.48), escrita como,

$$\vec{J} = nq\vec{v} \quad (3.1)$$

onde n é a concentração de portadores de carga q e \vec{v} é a velocidade de arraste das cargas.

No processo de emissão por campo, a densidade de corrente resulta da contribuição de todos os elétrons que escapam do metal. Assim, a densidade de corrente de emissão por campo será dada pelo módulo da carga do elétron vezes a concentração de elétrons vezes a probabilidade de penetração de barreira vezes a componente da velocidade perpendicular à superfície metálica (v_x), com o dado na eq. (1.51), $J = -\frac{2e}{V} \sum_k f(E(k)) P(E) v_x(k)$ (3.2) Vamos fazer algumas considerações acerca da definição da densidade de corrente com o objetivo de obter uma expressão que nos forneça o cálculo da mesma. Podemos transformar a soma da eq. (3.2) pela conhecida regra,

$$\sum_k \rightarrow \frac{V}{8\pi^3} \int d^3k \quad (3.3)$$

Substituindo a eq. (3.3) na eq. (3.2), temos,

$$J = -\frac{e}{4\pi^3} \int f(E(k)) P(E) v_X(k) d^3k \quad (3.4)$$

Lembremos que,

$$v_x(k) dk_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x} dk_x = \frac{1}{\hbar} dE_x \quad (3.5)$$

No modelo do gás de Fermi a energia cinética do elétron é dada por,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3.6)$$

Logo,

$$v_x = \frac{\hbar k_x}{m} \quad (3.7)$$

e

$$\frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{\hbar^2 k_x}{m} = \hbar v_x \quad (3.8)$$

Analogamente para as outras componentes de k_y e k_z com relação a dE . Assim, substituindo a eq. (3.8) na eq. (3.4), podemos reescrevê-la como,

$$J = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar} \int f(E(k)) P(E) dE_x dk_y dk_z \quad (3.9)$$

Usando que,

$$dE_x = \frac{\partial E}{\partial k_x} dk_x \quad (3.10)$$

a eq. (3.9) pode ser escrita como,

$$J = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar} \int P(E) dE_x \int f(E(k)) dk_y dk_z \quad (3.11)$$

No limite de baixas temperaturas e elevada intensidade de campo, que é o caso analisado aqui, podemos aproximar a distribuição de Fermi-Dirac por uma função degrau,

$$f(E(k)) = \begin{cases} 1, & E < E_F \\ 0, & E > E_F \end{cases} \quad (3.12)$$

A eq. (3.9) fica na forma,

$$J = -\frac{e}{4\pi^3 \hbar} \int_0^{E_F} P(E) dE_x \int dk_y dk_z \quad (3.13)$$

Introduzindo coordenadas polares para facilitar a resolução da segunda integral da eq. (3.13), ou seja,

$$k_y = \rho \cos(\theta) \quad (3.14)$$

$$k_z = \rho \sin(\theta) \quad (3.15)$$

temos

$$k_X^2 + k_y^2 = \rho^2 \quad (3.16)$$

Fazendo a mudança de coordenadas,

$$dk_y dk_z = \rho d\rho d\theta, \quad (3.17)$$

Temos,

$$\int dk_y dk_z = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \rho d\rho = 2\pi \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \rho d\rho \quad (3.18)$$

Para determinarmos os limites de integração da eq. (3.18), lembremos,

$$E = E_X + \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + k_z^2) = E_X + \frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} \quad (3.19)$$

Isolando, ρ na eq. (3.19),

$$\rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - E_X)} \quad (3.20)$$

Como ρ é uma quantidade positiva, temos, para ρ_{min} ,

$$E = E_X \Rightarrow \rho = \rho_{min} = 0 \quad (3.21)$$

Já para ρ_{max} ,

$$E = E_F \Rightarrow \rho = \rho_{max} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_F - E_X)} \quad (3.22)$$

Substituindo as eqs. (3.21) e (3.22) na eq. (3.18) e resolvendo a integral em $d\theta$, temos:

$$2\pi \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \rho d\rho = 2\pi \left[\frac{\rho^2}{2} \right]_0^{\rho_{max}} = \frac{2m\pi}{\hbar^2} (E_F - E_X) \quad (3.23)$$

Por fim, substituindo a eq. (3.23) na eq. (3.13), obtemos

$$J = -\frac{em}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} (E_F - E_X) P(E_X) dE_X \quad (3.24)$$

Assim, o nosso trabalho será substituir as expressões calculadas para a probabilidade de penetração de barreira, tanto para o modelo 1 quanto para o modelo 2, na eq. (3.24) e consequentemente encontrar uma maneira de obter expressões analíticas para esta grandeza.

3.2.1 Densidade de Corrente eletrônica - Modelo 1

Vamos agora determinar uma expressão para a densidade de corrente utilizando a probabilidade de penetração de barreira calculada via modelo 1. Manteremos o parâmetro Z igual a 1, novamente para comparar com os valores da literatura [19]. Mas, antes de calcular a densidade de corrente eletrônica propriamente dita, vamos fazer algumas considerações sobre a eq. (2.27)

para reescrevê-la de uma forma que facilite o nosso cálculo quando substituí-la na eq. (3.24).

A eq. (2.27), pode ser reescrita como,

$$P_1 = A_1 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left[\frac{V_0 - E_x}{eF} \left(1 - \frac{eeF\sqrt{Z}}{2(V_0 - E_x)\sqrt{eF}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{3}{4} e\sqrt{Z} + \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{eF} \left(\frac{V_0 - E_x}{eF} - \frac{e\sqrt{Z}}{2\sqrt{eF}} \right) \right] \right\} \quad (3.25)$$

onde

$$A_1 = \left| \frac{1}{\sqrt{\frac{2(V_0 - E_x)}{\sqrt{e^3 F Z}} - 1} - \sqrt{\frac{2(V_0 - E_x)}{\sqrt{e^3 F Z}}}} \right|^{\left(\frac{Ze^2}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{(V_0 - E_x)}} \right)} \quad (3.26)$$

Será necessário, a partir de agora, um pouco de algebrismo com o intuito de facilitar os nossos cálculos mais adiante. Colocando Φ/eF em evidência, e rearrumando, temos que

$$P_1 = A_1 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \left(1 - \frac{\sqrt{Z}}{2} \frac{e\sqrt{eF}}{(V_0 - E_x)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\sqrt{Z}}{4} \frac{e\sqrt{eF}}{(V_0 - E_x)} \right) \right\} \quad (3.27)$$

Podemos reescrever a eq. (3.27) como,

$$P_1 = A_1 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y) \right\} \quad (3.28)$$

Fazemos

$$\phi(y) = \left(1 - \frac{\sqrt{Z}}{2} Y \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\sqrt{Z}}{4} Y \right) \quad (3.29)$$

com

$$Y = \frac{e\sqrt{eF}}{(V_0 - E_x)} \quad (3.30)$$

Da nossa hipótese de que $\Phi^2 \gg e\sqrt{eF}$, implica que $Y \ll 1$. Assim, o primeiro termo da eq. (3.29) pode ser expandido na forma,

$$\left(1 - \frac{\sqrt{Z}}{2} Y \right)^{\frac{1}{2}} \simeq 1 - \frac{\sqrt{Z}}{4} Y \quad (3.31)$$

Substituindo o resultado da eq. (3.31) na eq. (3.29), temos

$$\phi(y) = \left(1 - \frac{\sqrt{Z}}{4} Y \right) \left(1 + \frac{\sqrt{Z}}{4} Y \right) = \left(1 - \frac{Z}{16} Y^2 \right) \quad (3.32)$$

com

$$Y = \frac{\sqrt{e^3 F}}{V_0 - E_x} < 1 \quad (3.33)$$

Na eq. (3.28) faremos $E_x = E_F$ no termo de A_1 devido ao fato dessa expressão ser governada pelo termo exponencial, e a parte exponencial será expandida em série em torno da Energia de Fermi E_F , onde utilizaremos os dois primeiros termos, pois apesar de estarmos interessados em todos os elétrons para a densidade de corrente de emissão por campo, ainda são os elétrons do nível de Fermi os mais energéticos e conseqüentemente aqueles com uma maior probabilidade de penetração de barreira. Além disso, se fizermos $E_x = E_F$, a eq. (3.33) se transforma em,

$$Y_0 = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi} \quad (3.34)$$

O que resulta ,

$$\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y) = g(E_x) = g(E_F) + (E_x - E_F) \left(\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \quad (3.35)$$

Substituindo a eq. (3.35) na eq. (3.28),

$$P_1 = A_1 \exp \left\{ - \left[g(E_F) + (E_x - E_F) \left(\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \right] \right\} \quad (3.36)$$

Aplicando a propriedade de exponenciais, temos,

$$P_1 = A_1 \exp[-g(E_F)] \exp \left[- (E_x - E_F) \left(\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \right] \quad (3.37)$$

Podemos tomar,

$$\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y_0) = g(E_F) \quad (3.38)$$

com

$$Y_0 = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi} \quad (3.39)$$

e

$$\phi(y_0) = 1 - \frac{Z}{16} Y_0^2 \quad (3.40)$$

Vêmos que a eq. (3.37) pode ser reescrita como,

$$P_1 = A_1 \exp[-g(E_F)] \exp \left\{ (E_x - E_F) \left(- \frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \right\} \quad (3.41)$$

Tomando η igual a menos a derivada na eq. (3.41), temos

$$\eta = \left(- \frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = - \left[\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(- \frac{3}{2} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{1}{2}}}{eF} \phi(y) + \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \frac{d\phi}{dE_x} \right) \right] \quad (3.42)$$

que pode ser reescrita como,

$$\eta = \left(- \frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = \left[\left[\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(\frac{3}{2} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{1}{2}}}{eF} \phi(y) - \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \frac{d\phi}{dE_x} \right) \right] \right] \quad (3.43)$$

Note que,

$$\frac{d\phi}{dE_x} = \frac{d\phi}{dY} \frac{dY}{dE_x} \quad (3.44)$$

Calculando estas derivadas separadamente, temos

$$\frac{dY}{dE_x} = \frac{\sqrt{e^3 F}}{(V_0 - E_x)^2} = \frac{Y}{V_0 - E_x} \quad (3.45)$$

$$\frac{d\phi}{dY} = -\frac{2Z}{16} Y = -\frac{Z}{8} Y \quad (3.46)$$

Logo,

$$\frac{d\phi}{dE_x} = -\frac{Z}{8} \frac{Y^2}{(V_0 - E_x)} \quad (3.47)$$

Assim, η resulta,

$$\eta = \left(-\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = \left[\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(\frac{3}{2} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{1}{2}}}{eF} \phi(Y_0) - \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \left(-\frac{Z}{8} \frac{Y^2}{(V_0 - E_x)} \right) \right) \right] \quad (3.48)$$

Sabendo que $\Phi = V_0 - E_F$

$$\eta = \left(-\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = \left[\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(\frac{3}{2} \frac{\Phi^{\frac{1}{2}}}{eF} \phi(Y_0) + \frac{\Phi^{\frac{1}{2}}}{eF} \frac{Z}{8} Y_0^2 \right) \right] \quad (3.49)$$

Rearrumando,

$$\eta = \left(-\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = \left[\frac{2\sqrt{2m\Phi}}{\hbar eF} \left(\phi(Y_0) + \frac{Z}{12} Y_0^2 \right) \right] \quad (3.50)$$

Substituindo a eq. (3.41) na eq. (3.24) temos que,

$$J_1 = -\frac{emA_1A_2}{2\pi^2\hbar^3} \int_{-\infty}^{E_F} (E_x - E_F) e^{(E_x - E_F)\eta} dE_x \quad (3.51)$$

Note que podemos tomar o limite inferior da integral na eq. (3.51) como $-\infty$ sem perda de generalidade devido ao fato de não termos mais níveis eletrônicos permitidos abaixo do 0, além do fato de estarmos interessados nos elétrons do nível de Fermi. Este é um artifício matemático que nos auxiliará no cálculo da eq. (3.51). Assim, a eq. (3.51) é resolvida pelo método de integração por partes, e tem como resultado

$$J_1 = \frac{emA_1A_2}{2\pi^2\hbar^3\eta^2} \quad (3.52)$$

onde

$$A_1 = \left| \frac{1}{\sqrt{\frac{2\Phi}{\sqrt{e^3 FZ}} - 1} - \sqrt{\frac{2\Phi}{\sqrt{e^3 FZ}}}} \right| \left(\frac{Ze^2}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} \right) \quad (3.53)$$

e

$$A_2 = \exp[-g(E_F)] \quad (3.54)$$

além de,

$$\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y_0) = g(E_F) \quad (3.55)$$

com

$$\phi(y_0) = 1 - \frac{Z}{16} Y_0^2 \quad (3.56)$$

e

$$Y_0 = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi} \quad (3.57)$$

$$\eta = \left[\frac{2\sqrt{2m}\Phi}{\hbar e F} \left(\phi(Y_0) + \frac{Z}{12} Y_0^2 \right) \right] \quad (3.58)$$

Que pode ser condensada numa única expressão, dada por

$$J_1 = \frac{e^3 F^2 A_1 \exp \left[-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \left(1 - \frac{Z e^3 F}{16 \Phi^2} \right) \right]}{16 \pi^2 \hbar \Phi \left(1 + \frac{Z e^3 F}{48 \Phi^2} \right)} \quad (3.59)$$

que é a expressão para o cálculo da densidade de corrente via modelo 1, i.e., considerando a contribuição do potencial imagem e do campo elétrico separadamente.

3.2.2 Densidade de corrente eletrônica - Modelo 2

Já para o cálculo da densidade de corrente eletrônica para o modelo 2 faremos o mesmo procedimento apresentado no modelo 1, porém com algumas sutilezas durante o processo. Vale ressaltar aqui, que o processo para a obtenção da densidade de corrente para o modelo 2 é muito similar ao calculado para o modelo 1.

Inicialmente, vamos novamente discorrer um pouco sobre a eq. (2.47), que é a expressão para a penetração de barreira do modelo 2. A qual para o cálculo da densidade de corrente de emissão por campo será dada por,

$$P = B_1 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \left[1 + \frac{Z e^3 F}{16(V_0 - E_x)^2} \left(\frac{Z e^3 F}{2(V_0 - E_x)^2} - 1 \right) \right] \right\} \quad (3.60)$$

onde

$$B_1 = \left(\frac{8(V_0 - E_x)}{\sqrt{e^3 F Z}} \right) \left[\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e F} (V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}} \frac{Z e^3 F}{2(V_0 - E_x)^2} \left(1 + \frac{Z e^3 F}{12(V_0 - E_x)^2} \right) \right] \quad (3.61)$$

Similarmente ao modelo 1, vamos fazer algumas manipulações matemáticas que irão facilitar os nossos cálculos quando substituirmos a eq. (3.60) na eq. (3.24) para calcular a densidade

de corrente eletrônica. A eq. (3.60) pode ser reescrita como,

$$P = B_1 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y) \right\} \quad (3.62)$$

Note que o nosso $\phi(y)$ agora vai ser da forma,

$$\phi(Y) = 1 + \frac{Z}{16} Y^2 \left(\frac{Z}{2} Y^2 - 1 \right) = 1 + \frac{Z}{16} \left(\frac{Z}{2} Y^4 - Y^2 \right) \quad (3.63)$$

Novamente com,

$$Y = \frac{\sqrt{e^3 F}}{V_0 - E_x} < 1 \quad (3.64)$$

Faremos então $E_x = E_F$ na expressão de B_1 e o termo entre colchetes da eq. (3.62) também pode ser expandido em série em torno da energia de Fermi, devido ao mesmo argumento do modelo 1. O que resulta em,

$$\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y) = g(E_x) = g(E_F) + (E_x - E_F) \left(\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \quad (3.65)$$

Substituindo a eq. (3.65) na eq. (3.62),

$$P = B_1 \exp \left\{ - \left[g(E_F) + (E_x - E_F) \left(\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \right] \right\} \quad (3.66)$$

Aplicando agora a propriedade de exponenciais temos,

$$P = B_1 \exp[-g(E_F)] \exp \left[- (E_x - E_F) \left(\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \right] \quad (3.67)$$

onde

$$\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y_0) = g(E_F) \quad (3.68)$$

e

$$Y_0 = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi} \quad (3.69)$$

além de,

$$\phi(Y_0) = 1 + \frac{Z}{16} \left[Y_0^2 \left(\frac{Z}{2} Y_0^2 - 1 \right) \right] \quad (3.70)$$

A expressão para a probabilidade de penetração será dada por,

$$P = B_1 B_2 \exp \left\{ (E_x - E_F) \left(-\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} \right\} \quad (3.71)$$

onde

$$B_2 = \exp[-g(E_F)] \quad (3.72)$$

e

$$\phi(y_0) \simeq 1 - \frac{Z}{16} Y_0^2 \quad (3.73)$$

Tomando η como sendo menos a derivada na eq. (3.71), temos,

$$\eta = \left(-\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = - \left[\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(-\frac{3}{2} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{1}{2}}}{eF} \phi(Y) + \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \frac{d\phi}{dE_x} \right) \right] \quad (3.74)$$

Que pode ser reescrita como,

$$\eta = \left(-\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = \left[\left[\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(\frac{3}{2} \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{1}{2}}}{eF} \phi(Y) - \frac{(V_0 - E_x)^{\frac{3}{2}}}{eF} \frac{d\phi}{dE_x} \right) \right] \right]_{E_F} \quad (3.75)$$

Note que,

$$\frac{d\phi}{dE_x} = \frac{d\phi}{dY} \frac{dY}{dE_x} \quad (3.76)$$

Vamos calcular estas derivadas separadamente,

$$\frac{dY}{dE_x} = \frac{\sqrt{e^3 F}}{(V_0 - E_x)^2} = \frac{Y}{V_0 - E_x} \quad (3.77)$$

$$\frac{d\phi}{dY} = \frac{Z}{16} \left(\frac{4ZY^3}{2} - 2Y \right) = \frac{ZY}{8} (ZY^2 - 1) \quad (3.78)$$

Que resulta em,

$$\frac{d\phi}{dE_x} = \frac{ZY^2}{8(V_0 - E_x)} (ZY^2 - 1) \quad (3.79)$$

Substituindo o resultado da eq. (3.79) na eq. (3.7) temos,

$$\eta = \left(-\frac{dg}{dE_x} \right)_{E_F} = \left[\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(\frac{(V_0 - E_F)^{\frac{1}{2}}}{eF} \frac{3}{2} \phi(Y_0) - \frac{(V_0 - E_F)^{\frac{3}{2}}}{eF} \frac{ZY_0^2}{8(V_0 - E_F)} (ZY_0^2 - 1) \right) \right] \quad (3.80)$$

Que também pode ser dado por,

$$\eta = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \left(\frac{\Phi^{\frac{1}{2}}}{eF} \frac{3}{2} \phi(Y_0) - \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \frac{ZY_0^2}{8(V_0 - E_F)} (ZY_0^2 - 1) \right) \quad (3.81)$$

Vamos condensar o valor de η ,

$$\eta = \left[\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \left(\frac{2\Phi^{\frac{1}{2}}}{eF} \phi(Y_0) - \frac{1}{6} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \frac{ZY_0^2}{\Phi} (ZY_0^2 - 1) \right) \right] \quad (3.82)$$

Que por fim, resulta em,

$$\eta = \left[\frac{2\sqrt{2m}\Phi}{\hbar eF} \left(\phi(Y_0) - \frac{ZY_0^2}{12} (ZY_0^2 - 1) \right) \right] \quad (3.83)$$

Substituindo a eq. (3.67) na eq. (3.24), que é a expressão que dará o cálculo da densidade de corrente eletrônica, vemos que a expressão que temos que resolver é da forma,

$$J_2 = -\frac{emB_1B_2}{2\pi^2\hbar^3} \int_{-\infty}^{E_F} (E_x - E_F) e^{(E_x - E_F)\eta} dE_x \quad (3.84)$$

Note que similarmente ao modelo 1, podemos tomar o limite inferior da integral da eq. (3.84) como $-\infty$. A eq. (3.84) pode ser resolvida pelo método de integração por partes, e tem como resultado,

$$J_2 = \frac{emB_1B_2}{2\pi^2\hbar^3\eta^2} \quad (3.85)$$

onde

$$B_2 = \left(\frac{8\Phi}{\sqrt{e^3 F Z}} \right) \left[\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e F} \Phi^{\frac{3}{2}} \frac{Ze^3 F}{2\Phi^2} \left(1 + \frac{Ze^3 F}{12\Phi^2} \right) \right] \quad (3.86)$$

e

$$B_1 = \exp[-g(E_F)] \quad (3.87)$$

Além de,

$$\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \phi(y_0) = g(E_F) \quad (3.88)$$

$$\phi(y_0) = 1 + \frac{Z}{16} \left[Y_0^2 \left(\frac{Z}{2} Y_0^2 - 1 \right) \right] \quad (3.89)$$

$$Y_0 = \frac{\sqrt{e^3 F}}{\Phi} \quad (3.90)$$

com,

$$\eta = \left[\frac{2\sqrt{2m}\Phi}{\hbar e F} \left(\phi(Y_0) - \frac{ZY_0^2}{12} (ZY_0^2 - 1) \right) \right] \quad (3.91)$$

Esta expressão também pode ser condensada. Assim, podemos reescrevê-la na forma

$$J_2 = \frac{e^3 F^2 B_2 \exp \left[-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{\Phi^{\frac{3}{2}}}{eF} \left(1 - \frac{Ze^3 F}{16\Phi^2} + \frac{Z^2 e^6 F^2}{32\Phi^4} \right) \right]}{16\pi^2 \hbar \Phi \left(1 + \frac{Ze^3 F}{48\Phi^2} - \frac{5Z^2 e^6 F^2}{96\Phi^4} \right)^2} \quad (3.92)$$

que é a expressão analítica para o cálculo da densidade de corrente eletrônica via modelo 2.

3.2.3 Valores numéricos para a densidade de corrente eletrônica para os dois modelos propostos

Os valores obtidos para a densidade de corrente eletrônica via eq. (3.59) e eq (3.92) são apresentados na tabela 3.1. Os valores J_1 e J_2 são reportados na tabela 3.1, os quais são os valores obtidos para a densidade de corrente eletrônica para os modelo 1 e 2, respectivamente.

Tabela 3.1 Valores numéricos para a densidade de corrente eletrônica

$F \times 10^7 \left[\frac{V}{cm} \right]$	$\Phi[eV]$		
	3,0	4,5	5,0
1	$J_1 = 0,6 \times 10^{-5}$	$J_1 = 3,8 \times 10^{-20}$	$J_1 = 4,5 \times 10^{-25}$
	$J_2 = 1,7 \times 10^{-5}$	$J_2 = 7,9 \times 10^{-19}$	$J_2 = 8,6 \times 10^{-24}$
	$J_D = 3,5 \times 10^{-5}$	$J_D = *$	$J_D = *$
5	$J_1 = 1,1 \times 10^7$	$J_1 = 2,0 \times 10^4$	$J_1 = 2,2 \times 10^3$
	$J_2 = 2,0 \times 10^8$	$J_2 = 2,4 \times 10^5$	$J_2 = 2,1 \times 10^4$
	$J_D = 3,9 \times 10^8$	$J_D = 4,4 \times 10^5$	$J_D = 3,8 \times 10^4$
10	$J_1 = 8,8 \times 10^8$	$J_1 = 3,7 \times 10^7$	$J_1 = 1,1 \times 10^7$
	$J_2 = 1,7 \times 10^{10}$	$J_2 = 3,9 \times 10^8$	$J_2 = 1,1 \times 10^8$
	$J_D = *$	$J_D = 6,8 \times 10^8$	$J_D = 1,8 \times 10^8$

Já J_D é o valor referência na literatura [19]. Note que alguns valores de J_D não são apresentados na tabela 3.1 devido ao fato da expressão encontrada na literatura, a eq. (1.57), ser elíptica completa e não fornecer resultados para alguns valores de campo elétrico e função trabalho. Já as nossas expressões para o cálculo desta grandeza, eq. (3.59) e eq. (3.92) não apresentam esta limitação. Outras considerações sobre os valores obtidos serão realizadas no capítulo seguinte.

Conclusões e Perspectivas

4.1 Introdução

Utilizamos dois modelos unidimensionais para o cálculo da probabilidade de tunelamento e da densidade de corrente de emissão por campo. No modelo 1 separamos em regiões distintas as influências do potencial imagem e do campo elétrico. Isso permite resolver de forma analítica as integrais resultantes. E no modelo 2, que é análogo unidimensional do modelo realista em três dimensões, as integrais resultantes são mais difíceis de resolver.

Fizemos a hipótese de que $\Phi^2 \gg Ze^3F$, o que é razoável para metais, e através desta calculamos os pontos de retorno clássicos. Sabendo que os elétrons do nível de Fermi são os mais energéticos, nos concentramos neles para o cálculo da probabilidade de tunelamento. Apesar do fato de que todos os elétrons contribuem para a densidade de corrente de emissão por campo, podemos fazer algumas considerações acerca dos elétrons do nível de Fermi e fazer uma expansão em série em torno deste nível energético, o que propiciou a obtenção de expressões analíticas para esta grandeza.

Neste capítulo serão discutidos e analisados os resultados obtidos tanto para a probabilidade de tunelamento quanto para a densidade de corrente eletrônica para os dois modelos propostos, bem como serão abordadas as conclusões e perspectivas para o trabalho.

4.2 Analisando a Probabilidade de Tunelamento

Inicialmente vamos fazer algumas considerações a respeito dos valores de penetração de barreira obtidos pelas equações (2.27) e (2.47). Na **tabela 4.1** são mostrados alguns valores numéricos para a probabilidade de barreira, calculados pelos dois modelos, para valores de campo elétrico no intervalo entre 10^6 a 10^8 V/cm e para dois valores de função trabalho (3 e 5 eV). Esta tabela é a mesma que a tabela 2.2, e foi inserida novamente nesta seção para facilitar a nossa análise dos valores obtidos. Observa-se claramente um aumento exponencial da probabilidade de penetração de barreira com o aumento do campo elétrico.

Vemos também que a probabilidade de penetração depende fortemente da função trabalho, já que pequenas alterações no valor da sua magnitude faz a probabilidade de tunelamento

Tabela 4.1 Valores numéricos para a probabilidade de tunelamento para diversos valores de campo elétrico e dois valores de função trabalho para os dois modelos propostos.

Campo Elétrico						
F (V/cm)	10^6	5×10^6	10^7	3×10^7	5×10^7	10^8
Probabilidade de Tunelamento - Modelo 1						
$\Phi = 3eV$	$9,8 \times 10^{-153}$	$8,4 \times 10^{-30}$	$1,5 \times 10^{-14}$	$1,5 \times 10^{-4}$	$1,2 \times 10^{-2}$	0,3
$\Phi = 5eV$	$1,5 \times 10^{-330}$	$3,2 \times 10^{-65}$	$1,8 \times 10^{-32}$	$1,4 \times 10^{-10}$	$3,0 \times 10^{-6}$	$4,5 \times 10^{-3}$
Probabilidade de Tunelamento - Modelo 2						
$\Phi = 3eV$	$7,0 \times 10^{-151}$	$2,7 \times 10^{-28}$	$3,4 \times 10^{-13}$	$2,1 \times 10^{-3}$	$1,0 \times 10^{-1}$	1
$\Phi = 5eV$	$6,0 \times 10^{-329}$	$3,5 \times 10^{-64}$	$3,0 \times 10^{-31}$	$1,6 \times 10^{-9}$	$2,8 \times 10^{-5}$	$3,4 \times 10^{-2}$

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.

Podemos citar ainda que a probabilidade de tunelamento calculada pelo modelo 1 é menor do que a calculada pelo modelo 2, o que já era esperado devido ao fato que no primeiro modelo deixamos a contribuição do potencial imagem de fora dos cálculos a partir do x_{max} , e utilizamos somente a contribuição do campo elétrico, ou seja, desprezamos essa contribuição do potencial imagem no primeiro modelo a partir do x_{max} . Os resultados do modelo 2 são muito próximos dos calculados na literatura [12, 18].

4.3 Analisando a Densidade de corrente eletrônica

É importante fazer uma comparação entre as equações (3.59) e (3.92) com a eq. (1.57), a qual é a equação do tipo Fowler-Nordheim padrão encontrada na literatura. Vemos inicialmente que as nossas expressões são analíticas e mais fáceis de serem tratadas do ponto de vista qualitativo, observando diretamente nas expressões uma relação intrínseca entre a variação do campo elétrico e da função trabalho com a variação da densidade de corrente.

Além do fato das nossas expressões terem um parâmetro ajustável do sistema Z, que pode ser utilizado para inserir outros efeitos não explorados neste trabalho como rugosidade, adsorção, entre outros.

Verifica-se, na tabela 4.2, que é a mesma tabela 3.1, e que foi também inserida nesta seção para facilitar a análise dos resultados, os valores calculados pelas nossas expressões para a densidade de corrente eletrônica (J_1 e J_2) bem como os valores da literatura (J_D). É notória uma

boa concordância entre nossos valores e outros encontrados na literatura [19].

Tabela 4.2 Valores numéricos para a densidade de corrente eletrônica

$F \times 10^7 \left[\frac{V}{cm} \right]$	$\Phi [eV]$		
	3.0	4.5	5.0
1	$J_1 = 0,6 \times 10^{-5}$	$J_1 = 3,8 \times 10^{-20}$	$J_1 = 4,5 \times 10^{-25}$
	$J_2 = 1,7 \times 10^{-5}$	$J_2 = 7,9 \times 10^{-19}$	$J_2 = 8,6 \times 10^{-24}$
	$J_D = 3,5 \times 10^{-5}$	$J_D = *$	$J_D = *$
5	$J_1 = 1,1 \times 10^7$	$J_1 = 2,0 \times 10^4$	$J_1 = 2,2 \times 10^3$
	$J_2 = 2,0 \times 10^8$	$J_2 = 2,4 \times 10^5$	$J_2 = 2,1 \times 10^4$
	$J_D = 3,9 \times 10^8$	$J_D = 4,4 \times 10^5$	$J_D = 3,8 \times 10^4$
10	$J_1 = 8,8 \times 10^8$	$J_1 = 3,7 \times 10^7$	$J_1 = 1,1 \times 10^7$
	$J_2 = 1,7 \times 10^{10}$	$J_2 = 3,9 \times 10^8$	$J_2 = 1,1 \times 10^8$
	$J_D = *$	$J_D = 6,8 \times 10^8$	$J_D = 1,8 \times 10^8$

Note também que os valores calculados pela expressão padrão, eq. (1.57), e dado por J_D na tabela 4.2 é aproximadamente duas vezes o nosso resultado. Adicionalmente podemos também acrescentar outra vantagem com relação as nossas expressões que é o fato de não termos limitações de campo elétrico ou função trabalho, diferentemente da expressão padrão, pois os valores que encontram-se com * na tabela 4.2 não são dados pela expressão padrão justamente devido ao fato dela ser uma função especial, i.e., uma integral elíptica completa e que não é resolvida para estes, entre outros valores de campo elétrico e função trabalho.

4.4 Perspectivas

Utilizando modelos unidimensionais para a energia potencial de elétrons em um sólido metálico, na presença de um campo elétrico externo, calculamos, via aproximação JWKB, à probabilidade dos elétrons escaparem do metal. Apesar de sua grande relevância teórica, a probabilidade de penetração de barreira não é uma quantidade física determinada experimentalmente. Uma grandeza física de grande interesse é a densidade de corrente eletrônica. Desse modo, dedicamos esforços para calcular essa grandeza pelos dois modelos propostos nesse trabalho. Conseguimos expressões analíticas tipo Fowler-Nordheim, relativamente gerais. Constatamos uma boa concordância entre nossos resultados e outros disponíveis na literatura [19].

Assim, dando continuidade ao trabalho, a nossa perspectiva é a obtenção de expressões analíticas para o fenômeno agora com a inserção dos efeitos térmicos no problema. Isso irá nos

propiciar uma descrição mais real do sistema bem como uma dificuldade adicional no cálculo da integral da eq. (3.9), devido ao fato de que a distribuição Fermi-Dirac deixará de ser uma função degrau para se tornar uma função exponencial [13]. Além do entendimento de como algumas grandezas termodinâmicas como potencial químico, energia interna de Gibbs, entre outras influenciam no nosso problema.

Referências Bibliográficas

- [1] N. S. Andrade, A. V. Andrade-Neto, T. Lemaire e J. A. Cruz, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **35**, n.1 1308 (2013).
- [2] N. L. Silva Júnior e A. V. Andrade-Neto, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **35**, n.3 3306 (2013).
- [3] A. A. Abreu Silva e A. V. Andrade-Neto, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **32**, n.2 2306 (2010).
- [4] R. H. Fowler and L. Nordheim, *Proc. Roy. Soc. London* **A119**, 173 (1928).
- [5] K. L. Jensen and Marc Cahay, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 154-105 (2006).
- [6] 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, J.M. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3129 (1999).
- [7] A. Mayer, *J. Phys.: Condens Matter* **22** 175007 (2010).
- [8] M. Planck, *Ann. d. Physik.* **4**, 719 (1900).
- [9] R. Eisberg, *Física Quântica* - Rio de Janeiro: Elsevier, 8. ed, (1979).
- [10] A. Einstein. On a heuristic view point about the criation and conversion of light. The old quantum theory. Oxford: Pergamon Press, Haar, (1967).
- [11] David Bohm, *Quantum Theory* . Prentice-Hall, New Jersey (1960).
- [12] 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. London: Pergamon Press., (1961).
- [13] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin *Solid state physics*. Fort worth: Saunders College, (c1976).
- [14] D. Griffiths, *Mecânica Quântica*, 2ed. Pearson Education, São Paulo, (2011).
- [15] R. W. Wood, *Phys. Rev. (Series I)* **5**(1), 1 (1897).
- [16] H.M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica*. Vol.4. São Paulo: Edgard Blucher, (1998).
- [17] E. L. Murphy and R. H. Good, *Phys. Rev.*, **102**, 1464 (1956).

- [18] A. Haug, *Theoretical Solid State Physics*. volume 1. Pergamon Press, Oxford, (1975).
- [19] W. W. Dolan, Phys. Rev. **91**, 510 (1953).
- [20] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products*. Academic, New York, (1965).
- [21] S. C. Miller and R. H. Good, Phys. Rev. **91**, 174 (1953).