



BENÉMERITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

Análisis de modelos acerca de electricidad y conductividad
eléctrica en estructuras cristalinas.

Tesis presentada para obtener el grado de:
Maestro en Ciencias en Física Aplicada

Presenta

Guillermo Andrés Valdeón Sauza.

Director de Tesis

Dr. Jorge Velázquez Castro

Asesores de Tesis

Dr. Jorge Velázquez Castro.
Dr. Benito Flores Desirena.

Puebla Pue.
Mayo 2022.

Agradecimientos

A mis papás, a mi familia y profesores.

Índice.

Resumen.....	4
1. Antecedentes.....	5
1.1 Introducción.....	5
1.2 Motivación.....	5
1.3 Modelo de Drude.....	6
1.4 Modelo de Drude-Sommerfeld.....	7
1.5 Estructura interna de los metales.....	8
1.5.1 Matriz de transferencia.....	9
1.5.2 Teorema de Bloch y método de supercelda.....	10
1.5.3 Función de trabajo.....	11
1.6 Emisión electrónica por efecto de campo.....	11
1.6.1 Emisión electrónica por efecto de campo en el modelo de Drude.....	12
1.6.2 Emisión por efecto de campo en el modelo de Sommerfeld.....	15
1.6.3 Modelo de Fowler-Nordheim para la emisión por efecto de campo.....	16
2. Investigación.....	19
2.1 Modelo de investigación.....	19
2.2 Análisis.....	22
3. Resultados y discusión.....	26
3.1 Resultados con método de supercelda.....	26
3.2 Análisis de la función de trabajo.....	34
3.3 Resultados con la matriz de transferencia.....	39
4. Conclusión.....	42
Anexo.....	43
Bibliografía.....	80

Resumen.

El modelo de Drude falla en explicar que el vacío sea un dieléctrico, por lo que se propone modificar el modelo de Drude considerando fenómenos cuánticos y los niveles de energía de conducción de un conductor cristalino para explicar la mayor afinidad de las distribuciones libres por un metal que por el vacío. Los resultados indican que la función de trabajo, o bien, la forma de la barrera es el único determinante observable en el fenómeno de emisión electrónica. En particular, se proponen y observan los resultados dados por modelos de la estructura de un metal que traten de recuperar el valor de la función de trabajo correspondiente.

Capítulo 1.

1. Antecedentes.

1.1 Introducción.

El descubrimiento del electrón por J. J. Thomson en 1897 motivó a la formación de modelos de la materia para explicar sus propiedades. El modelo de Drude fue propuesto por Paul Drude en 1900 con el objetivo de explicar la conductividad eléctrica de los metales. El modelo de Drude usa resultados de la teoría cinemática de la materia, así como la existencia de electrones libres en el interior de metales para explicar su conductividad eléctrica (Ashcroft, Mermin, 1976).

El modelo de Drude proporciona una forma de calcular teóricamente varias propiedades de los metales de manera muy aproximada a sus valores experimentales. Sin embargo, el modelo sobreestima algunas propiedades de los metales y en general no es capaz de explicar el comportamiento de las cargas y corrientes eléctricas en sistemas más complejos que un metal en equilibrio. Lo anterior motivó al diseño de nuevos modelos de la materia cuyos resultados se aproximen mejor a mediciones experimentales.

Entre los fenómenos que el modelo de Drude no explica de forma precisa se encuentra la baja conductividad eléctrica del vacío y la ruptura dieléctrica del vacío. En este trabajo de investigación se propondrá un modelo para la estructura de la materia en las interfaces entre un metal y espacio vacío. Se calculará el comportamiento de corrientes eléctricas en la interfaz de un metal y espacio vacío de acuerdo al modelo propuesto. Los resultados obtenidos se compararán con observaciones experimentales y con los resultados que se obtienen por otros modelos de la estructura de metales y conductores.

1.2 Motivación.

Los resultados y los métodos usados ofrecen nuevas formas para modelar relaciones J-E en el fenómeno de emisión por efecto de campo y similarmente

podrían ser utilizadas en fenómenos de conducción eléctrica en general. Esto podrá ser utilizado en nuevos análisis de semiconductores, composites metálicos policristalinos, litografía y microelectrónica del vacío.

1.3 Modelo de Drude.

El modelo de Drude es usado para explicar las corrientes eléctricas desde la estructura de la materia. Éste establece que las corrientes eléctricas son distribuciones de partículas cargadas en movimiento. Las partículas que forman las distribuciones pueden ser electrones o iones y a estas partículas se les denomina portadores de carga. A su vez, la materia está formada por partículas con las cuales los portadores de carga interactúan a través de colisiones o campos electromagnéticos.

En este modelo, el movimiento de los portadores de carga corresponde con las densidades de corrientes que se observan macroscópicamente y la disminución en energía cinética promedio de los portadores de carga debido a las interacciones de los portadores con las partículas que forman al material es asociada a la resistividad del material, (Ashcroft, Mermin, 1976).

Los dos resultados principales de este modelo están dados por las ecuaciones 1 y 2. En las ecuaciones, t es el tiempo, $\langle \vec{p}(t) \rangle$ es el momento promedio por portador de carga, q es la carga eléctrica de un portador de carga, n es el número promedio de portadores de carga por volumen, m es la masa de un portador de carga, τ es el tiempo libre promedio entre colisiones, \vec{E} y \vec{B} son campos eléctricos y magnéticos respectivamente y \vec{J} es la densidad de corriente.

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p}(t) \rangle = q \left(\vec{E} + \frac{\langle \vec{p}(t) \rangle \times \vec{B}}{m} \right) - \frac{\langle \vec{p}(t) \rangle}{\tau} \quad \text{Ec. 1.1.}$$

$$\vec{J} = \left(\frac{nq^2\tau}{m} \right) \vec{E} \quad \text{Ec. 1.2.}$$

La ecuación 1.1 es la ecuación que expone el movimiento de los portadores de carga. La ecuación 1.2 recupera la Ley de Ohm expresando la resistividad del material con propiedades de la materia, (Purcell, 1965).

El modelo considera que las corrientes eléctricas en la materia son consecuencia de pequeñas ganancias de momento en los portadores de carga por los campos electromagnéticos en la materia que ocurren entre las colisiones de los portadores con la materia. El modelo también supone que los metales están formados por iones cargados positivamente con masas muy grandes los cuales están rodeados por un gran número de electrones “libres” (sin energía potencial) los cuales actúan como portadores de carga. Debido a la suposición anterior, se explica la alta conductividad eléctrica de los metales de forma cualitativa como una consecuencia de pequeñas transferencias de momento sucesivas entre los portadores de carga a través del material, (Ashcroft, Mermin, 1976).

El modelo de Drude permite explicar cuantitativamente la Ley de Ohm, predice de manera acertada la conductividad eléctrica de metales y da una buena explicación para el comportamiento de corrientes directas, el efecto Hall y la magnetorresistencia de metales a temperatura ambiente. Sin embargo, el modelo solo explica parcialmente las frecuencias características de corrientes alternas en conductores, así como la Ley de Wiedemann—Franz. También, el modelo sobre estima las capacidades caloríficas de conductores a temperatura ambiente, (Dressel, Scheffler, 2006).

1.4 Modelo de Drude-Sommerfeld.

La primera modificación en el modelo de Drude-Sommerfeld con respecto al modelo de Drude es la consideración de efectos cuánticos como el principio de exclusión de Pauli. El principio de exclusión de Pauli queda expresado en el modelo de Drude-Sommerfeld debido a que la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann es reemplazada por la distribución de Fermi-Dirac. El modelo de Drude-Sommerfeld donde se mantiene la suposición de que los electrones en un metal son libres y que se comportan como un gas ideal a bajas temperaturas es también llamado modelo

de electrón libre. En la ecuación siguiente se da la distribución de velocidades de Fermi-Dirac (Ashcroft, Mermin, 1976).

$$f(\vec{v}) = \frac{m}{(2\sqrt{2}\pi\hbar)^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\frac{1}{2}mv^2 - \mu}{k_B T}\right) + 1} \quad \text{Ec. 1.3.}$$

La modificación del modelo corrige en gran medida la sobrestimación de las capacidades caloríficas de los metales. En el modelo de Drude, la expresión para la conductividad de un metal se obtiene a partir de pequeños incrementos en el momento de los portadores de carga debido al campo eléctrico externo. Estos incrementos se pierden o disipan en las colisiones entre electrones. Lo anterior implica que la conductividad de un metal no depende de los valores de las velocidades de los electrones, por lo que el cambio en la distribución de velocidades de los electrones no modifica la expresión para la conductividad obtenida en el modelo de Drude (Ashcroft, Mermin, 1976).

1.5 Estructura interna de los metales.

Los metales son sustancias puras caracterizadas por tener una superficie brillante, ser maleables, dúctiles y ser buenos conductores de calor y electricidad. Las propiedades químicas de los metales indican que su estructura electrónica es tal que permite fácilmente el desligamiento de los electrones más energéticos. En física de la materia, la mayoría de los modelos de metales, los representan como retículas tridimensionales, densamente empaquetadas, altamente ordenadas periódicamente de iones masivos cargados positivamente con una distribución electrónica global tal que minimice el campo eléctrico interno (Ashcroft, Mermin, 1976).

Las muestras de un metal que posea una estructura completamente ordenada periódicamente son por definición cristales. En general, la estructura interna de los metales es policristalina, siendo estos formados por varios bloques cristalinos fusionados. Al analizar las propiedades los metales es usual considerar su estructura como cristalina para simplificar cálculos. Esta suposición permite

obtener resultados bastante cercanos a mediciones experimentales. Modelos más precisos consideran defectos en el modelo cristalino de la estructura de los metales (Ashcroft, Mermin, 1976).

El considerar a los metales como redes cristalinas permite usar las herramientas correspondientes para su análisis. Así se puede considerar una red recíproca correspondiente a cada muestra metálica la cual interactúa con el potencial correspondiente a la red cristalina del metal. El potencial de la red cristalina junto con la ecuación de Schrödinger establece los niveles de energía permitidos en el interior del material. Estos a su vez determinan las propiedades electromagnéticas, ópticas y conductoras del material (Ashcroft, Mermin, 1976).

El potencial periódico en el interior de un metal está dado por la expresión mostrada en la ecuación 1.4, donde el dominio de la función f tiene longitud a y a es la longitud de una celda primitiva de la red cristalina. El potencial puede tener expresiones muy complejas, sin embargo, varios modelos que permiten la simplificación de los cálculos manteniendo valores cercanos a los experimentales. El modelo de Drude-Sommerfeld por sí solo considera a los electrones en un metal completamente libres, es decir, se considera que $f = 0$. Debido a esto el modelo de Drude-Sommerfeld también se le suele llamar modelo de electrón libre. Algunos otros modelos importantes son el modelo de Kronig-Penney o de celda vacía que considera $f(x) = \begin{cases} -V_0, & a - b < x < a \\ 0, & 0 \leq x < a - b \end{cases}$, el modelo de electrón casi libre, donde $f(x) = \frac{\tilde{Z}}{|x|} e^{-s|x|}$, $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ y el modelo de acoplamiento fuerte donde $f(x) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\tilde{Z}e^2}{|x|}$ y \tilde{Z} da la carga de los iones de la red cristalina en múltiplos de la carga del electrón (Ashcroft, Mermin, 1976).

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x + na) \quad \text{Ec. 1.4.}$$

1.5.1 Matriz de transferencia.

Cuando ondas planas se propagan en una región con potencial periódico, la evolución de las ondas queda determinada por condiciones periódicas de

continuidad. Las condiciones de continuidad se pueden expresar en forma matricial, por lo que la contribución de un periodo del potencial en la evolución de la onda puede expresarse como un operador lineal. Las potencias de este operador lineal representan las conexiones entre la incidencia, reflexión y transmisión de una onda a través de un medio con un determinado grosor, en términos de múltiplos del periodo del potencial. Este operador lineal es llamado matriz de transferencia (Yeh, 1988).

La matriz de transferencia se puede usar para identificar la contribución de funciones de onda que se extiendan al interior de un metal tanto como sea necesario.

1.5.2 Teorema de Bloch y método de supercelda.

Los potenciales anteriores pueden ser resueltos con relativa facilidad debido a que son potenciales periódicos y al Teorema de Bloch. El Teorema de Bloch establece que las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un potencial periódico toman la expresión de una onda plana modulada por una función periódica (Ashcroft, Mermin, 1976).

A pesar de la utilidad del Teorema de Bloch, éste no puede ser usado para situaciones donde la red cristalina tenga defectos, en regiones cercanas a interfaces en un material policristalino o en la superficie del material o inclusive para materiales finitos. En estas circunstancias se suele usar el método de la supercelda. En el método de la supercelda se consideran múltiplos de la celda primitiva tal que ésta contenga el defecto o interface en cuestión. Luego, se añaden regiones vacías en los extremos para separar los defectos y en consecuencia anular soluciones provenientes de la periodicidad del defecto. Posteriormente, se imponen condiciones periódicas sobre la nueva celda. La nueva celda con condiciones periódicas es llamada supercelda y da el nuevo perfil de potencial que correspondería a la función f en la ecuación 1.4. A continuación, se usa el teorema de Bloch con este nuevo potencial. Las condiciones periódicas internas en el potencial f agrega interacciones periódicas artificiales cuyo efecto se puede

disminuir con el número de repeticiones incluidas en f así como incluyendo espacios nulos en los extremos de la supercelda (Allen, Tildesley, 2017) (Payne, Teter, Allan, Arias, Joannopoulos, 1992) (Ramos Medieta) (Simon, 2013).

1.5.3 Función de trabajo.

Entre los modelos anteriores, el modelo de celda vacía y el modelo de acoplamiento fuerte dan una razón para que los portadores de carga no salgan en grandes densidades de un conductor. De acuerdo con las suposiciones del modelo, la probabilidad de que un portador de carga salga de un conductor no es nula, sin embargo, suele existir un incremento en el potencial en la transición entre el metal y el exterior vacío. Más aún, experimentalmente, se observa que para todo metal se requiere de una cierta cantidad de energía para pasar un electrón de conducción a una región externa del metal cerca de la superficie del mismo. Esta energía se denomina función de trabajo. El determinar la función de trabajo de un metal requiere de varios parámetros como la estructura interna del metal, la forma de la superficie, los campos eléctricos y magnéticos superficiales, los campos eléctricos y magnéticos externos, la distribución multipolar superficial y las condiciones termodinámicas del material (Modinos 1984).

Un estudio detallado de la función de trabajo de los metales queda fuera de este trabajo de investigación, pero se tratará un modelo basado únicamente en la estructura del material más un factor de corrección.

1.6 Emisión electrónica por efecto de campo.

Los primeros resultados cualitativos y cuantitativos de liberación de portadores de carga de sus materiales, así como de transiciones entre bandas de niveles de energía internos se obtuvieron durante finales del siglo XIX y principios del siglo XX. Algunos de los fenómenos observados son la emisión termiónica o efecto Richardson-Dushman, efecto Zener, y la ruptura dieléctrica del vacío y otros materiales dieléctricos, también llamada emisión electrónica fría. En general, a la salida de portadores de carga de sus materiales se le llama emisión electrónica. El

fenómeno de emisión electrónica fría representa lo más cercano a una conductividad eléctrica por el vacío, por lo que es de importancia para los objetivos de investigación analizar su comportamiento y algunos de los modelos teóricos que se han propuesto para explicar dicho comportamiento.

La primera relación experimental de la emisión electrónica por emisión de campo fue descubierta por Millikan y Lauritsen. La relación correspondiente se muestra en la ecuación siguiente.

$$\ln(|\vec{j}|) = -\alpha \frac{1}{|\vec{E}|} \quad \text{Ec. 1.5.}$$

1.6.1 Emisión electrónica por efecto de campo en el modelo de Drude.

Al considerar el modelo de Drude en el espacio vacío, se tiene que habrá una baja cantidad de portadores de carga y también habrá pocas partículas con las cuáles los portadores de carga pudieran colisionar. Con las consideraciones anteriores, en la ecuación 1.2 se tendría que $n \rightarrow 0$ y que $\tau \rightarrow \infty$. Luego, la ecuación 1.2 queda indeterminada.

Sin embargo, se puede utilizar la teoría cinemática de la materia para analizar a los portadores de carga en espacios vacíos con campos eléctricos y magnéticos. Por ejemplo, se propone analizar el comportamiento de los portadores de cargas entre las placas de un capacitor ideal de placas planas paralelas separadas por una región vacía.

Sea un circuito un alambre conductor conectado a una batería con una diferencia de potencial V . La batería alimenta al alambre conductor con portadores de carga pues $\nabla \cdot \vec{j} = 0$ y proporciona una diferencia de potencial. Si la resistividad del material conductor es ρ , largo l y un área de sección transversal a entonces en el alambre se producirá una corriente eléctrica $I = \frac{aV}{\rho l}$. Se puede cortar el alambre transversalmente y colocar un capacitor de placas paralelas del mismo material que el alambre con una separación pequeña d tal que el espacio entre las capas esté vacío. Entre las placas del capacitor se formará una diferencia de potencial y la mayoría de los portadores de carga que estén a menos de una distancia libre media del exterior del material entrarán en el espacio vacío entre las placas. Considerando

estas aportaciones de portadores de carga por las dos placas del capacitor, en la región vacía ingresarán $2\langle v \rangle_{atn}$ portadores de carga. La dirección del campo eléctrico en la región vacía es perpendicular a las placas y su sentido será de la placa positiva a la negativa. Así, los electrones provenientes de placas distintas del capacitor tendrán trayectorias diferentes. También, debido a la distribución de velocidades, solo la mitad de los electrones tendrán velocidades hacia afuera del metal. Los electrones que salgan de la placa positiva serán frenados constantemente y regresarán a la placa de la que surgieron. El movimiento uniformemente acelerado es simétrico con respecto a su valor crítico por lo que la densidad de corriente producida por estos electrones es cero. Así, los electrones que contribuyen a una densidad de corriente entre las placas son los provenientes de la placa negativa.

Sean $\langle v \rangle_M$ la rapidez media de los electrones en el metal, t el tiempo requerido por los electrones para cruzar el capacitor y V el potencial entre las placas del capacitor. El campo eléctrico entre las capas será uniforme con una magnitud de $|\vec{E}| = V/d$ y la magnitud de la aceleración de los electrones será $|\vec{a}| = \frac{q|\vec{E}|}{m}$. El tiempo que tardarán los electrones en cruzar el capacitor está dado por la ecuación 1.6.

$$t = \frac{-\langle v \rangle_M + \sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} d}}{\frac{q|\vec{E}|}{m}} \quad \text{Ec. 1.6.}$$

La máxima cantidad de electrones que habrá entre las placas será el número de electrones que han salido del material antes de que los electrones crucen el capacitor. En la ecuación 1.7 se da el número total máximo de electrones que habrá en la región vacía, N . Considerando lo anterior se obtiene una densidad del número de portadores de carga en la región vacía de acuerdo con la ecuación 1.6.

$$N = \frac{\langle v \rangle_M \tau n a t}{2} = \langle v \rangle_M n a \frac{-\langle v \rangle_M + \sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} d}}{2 \frac{q|\vec{E}|}{m}} \quad \text{Ec. 1.7.}$$

Sea $\langle v(x) \rangle$ la velocidad promedio de un electrón a una distancia x desde la placa negativa, en el interior del capacitor. A una distancia x en el interior del capacitor con respecto a la placa negativa, la velocidad de los electrones estará dada por la ecuación 1.8.

$$\langle v(x) \rangle = \sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} x} \quad \text{Ec. 1.8.}$$

La probabilidad de encontrar a un electrón a una distancia x de la placa de la que salieron es inversamente proporcional a la velocidad que tiene. Sea A una constante de proporcionalidad de la distribución anterior.

$$1 = A \int_0^d \frac{dx}{\sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} x}} \quad \text{Ec. 1.9.}$$

La constante A tiene que cumplir la ecuación 1.9 de donde se obtiene su valor el cual se presenta en la ecuación 1.10. Entre las placas del capacitor se puede suponer un campo eléctrico uniforme y constante.

$$A = \frac{\frac{q|\vec{E}|}{m}}{\sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} d} - \langle v \rangle_M} \quad \text{Ec. 1.10.}$$

Usando la distribución de probabilidad de $\frac{A}{\langle v(x) \rangle} dx$ se obtiene la distribución de carga, n_v , mostrada en la ecuación 1.11 así como la densidad de corriente en la ecuación 1.12.

$$n_v(x) = q\langle v \rangle_M n a \frac{-\langle v \rangle_M + \sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} d} \frac{q|\vec{E}|}{m} \sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} x}}{2 \frac{q|\vec{E}|}{m} \sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} x} \sqrt{(\langle v \rangle_M)^2 + 2 \frac{q|\vec{E}|}{m} d} - \langle v \rangle_M} dx \quad \text{Ec. 1.11}$$

$$|\vec{J}_v| = \frac{q\langle v \rangle_M n}{2} \quad \text{Ec. 1.12.}$$

El considerar una función de trabajo de magnitud W tendría como efecto el recorrer la distribución de velocidades en el exterior del material. La nueva velocidad estaría dada por $\overline{\langle v \rangle_M} = \sqrt{\langle v \rangle_M^2 - \frac{2W}{m_e}}$. Así la ecuación 1.13 da la corriente que se emitiría por una superficie metálica plana con función de trabajo W .

$$|\vec{J}_v| = \frac{qn \sqrt{\langle v \rangle_M^2 - \frac{2W}{m_e}}}{2} \quad \text{Ec. 1.13.}$$

Así, usando el modelo de Drude en una región vacía pequeña, con una diferencia de potencial y en las condiciones adecuadas debiese de ser conductora y su conductividad no dependería de su largo o de la diferencia de potencial entre sus extremos. Más aún esto indicaría que solo debiese de haber dos tipos de metales, unos los cuales siempre están emitiendo cargas bajo todas las condiciones y aquellos que nunca emiten descargas. A pesar de lo anterior, experimentalmente, no se observa este resultado, en cambio, el vacío se comporta como un dieléctrico en la mayoría de las situaciones. Además, para diferencias de potencial grandes y distancias pequeñas, el vacío sufre ruptura dieléctrica y admite descargas eléctricas de acuerdo con la ecuación 1.5. De manera similar, el modelo de Drude falla en explicar porque un metal cargado eléctricamente, aislado, o en el vacío, toma un tiempo grande para descargarse, (Purcell, 1965).

1.6.2 Emisión por efecto de campo en el modelo de Sommerfeld.

El modelo de Drude-Sommerfeld tras solo la modificación de las distribuciones de velocidades no da una razón que impidiera la salida de portadores de carga del

conductor. El modelo de electrón libre no da una explicación para la baja conductividad del vacío. Además, el modelo de electrón libre al estar basado en mecánica cuántica deja sin explicación el mecanismo por el cual los portadores de carga colisionarían con otras partículas en el interior del conductor. Así, si bien, la expresión para la conductividad de un metal no tendría que modificarse, sí habría que reinterpretar el concepto de tiempo libre medio, así como de camino libre medio (Ashcroft, Mermin, 1976).

Una hipótesis que explicaría el que los portadores de carga no puedan salir de su conductor es el considerar a un conductor como una región con un potencial menor a cero. Como consecuencia en un conductor estarían permitidos niveles de energía menores a cero, si se considera al vacío, sin cargas y sin campos, como una región de potencial cero. Esto implicaría que hubiese una baja probabilidad para que un electrón en un estado en el interior del conductor transite a un estado afuera del conductor. Así bien, modelos que consideran un potencial no nulo en la región de un conductor y de los cuales podría deducirse una función de trabajo son el modelo de electrón casi libre y el modelo de acoplamiento fuerte. (Simon, 2013).

1.6.3 Modelo de Fowler-Nordheim para la emisión por efecto de campo.

El primer modelo teórico que dio un resultado cercano al comportamiento de emisión por efecto de campo fue el propuesto por Fowler y Nordheim. El modelo de Fowler-Nordheim supone que la interfaz está representada por un potencial triangular cuadrado o bien como potencial suave se considera la barrera de potencial de Schottky-Nordheim. En las ecuaciones 1.14 y 1.15 se presentan la barrera de potencial cuadrado triangular y de Schottky-Nordheim respectivamente, donde \mathcal{F} es la magnitud del campo eléctrico y W es el valor de la barrera de potencial sin campo, es decir la función de trabajo. (Fowler, Nordheim, 2013).

$$V(x) = \begin{cases} W - e\mathcal{F}x, & 0 < x \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 1.14.}$$

$$V(x) = \begin{cases} W - e\mathcal{F}x - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x}, & 0 < x \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 1.15.}$$

La dependencia de la barrera de potencial con respecto a la posición permite analizar el escape de los portadores de carga por medio del efecto túnel. La barrera de potencial cuadrado-triangular da como resultado la ecuación 1.16, o bien, evaluando logaritmos a cada lado de la relación se obtiene la ecuación 1.17 que es muy cercana a la relación obtenida experimentalmente. La barrera de Schottky-Nordheim así como otras modificaciones de la barrera cuadrado-triangular presentan dificultades para obtener resultados analíticos aunque en general todos los modelos recuperan la forma general de la ecuación 1.16. Adicionalmente, de acuerdo con la barrera cuadrado-triangular las constantes C y k dependen funcionalmente de $\frac{1}{w}$ y $w^{\frac{3}{2}}$, respectivamente (Fowler, Nordheim, 1928) (Modinos, 1984).

$$|\vec{j}| = C\mathcal{F}^2 e^{-\frac{k}{|\mathcal{F}|}} \quad \text{Ec. 1.16.}$$

$$\ln\left(\frac{|\vec{j}|}{|\mathcal{F}|^2}\right) = -k\frac{1}{|\mathcal{F}|} + \ln(C) \quad \text{Ec. 1.17.}$$

Hay modelos más completos basados en el modelo de Fowler-Nordheim. En general, tienen la forma dada por la ecuación 1.18, donde W es la función de trabajo, λ_z y v_E son correcciones al flujo de electrones y a_F es la constante $a_F = \frac{e^3}{8\pi h}$ presente en el resultado obtenido por Fowler y Nordheim. Estos modelos son llamados Modelos de Fowler-Nordheim físicamente completos. Es importante resaltar que los parámetros de corrección todavía no tienen una evaluación teórica completamente aceptada además de incrementar demasiado la complejidad de la evaluación y verificación de los modelos (Murphy, Good, 1956) (Modinos, 1984) (Zhou, Zhang, 2020) (Zubair, Ang, Ang, 2018).

$$|\vec{j}| = \lambda_z a_F W^{-1} \mathcal{F}^2 e^{-\frac{v_E W^{\frac{3}{2}}}{|\mathcal{F}|}} \quad \text{Ec. 1.18.}$$

Los modelos anteriores no presentan una razón para la presencia de la barrera de potencial en la interfaz entre un metal y el vacío. Similarmente, el modelo original de Fowler-Nordheim no toma gran consideración de la estructura interna de

un metal. Se puede considerar la estructura de un metal al modificar la expresión del potencial en el interior del metal en las ecuaciones 1.14 y 1.15. Los nuevos potenciales considerados debiesen afectar los niveles de energía permitidos y estos a su vez dar correcciones al valor del flujo de electrones. Este trabajo propone nuevos potenciales que representen la estructura interna del metal y que puedan explicar al menos parcialmente la existencia de la función trabajo, así como nuevos métodos de evaluación que permitan conocer las relaciones densidad de corriente contra campo eléctrico externo debidos a estos potenciales.

Capítulo 2.

2. Investigación.

2.1 Modelo de investigación.

Para explicar la baja conductividad del vacío se propone considerar que debido a la estructura de los metales los portadores de carga requieren realizar un trabajo para salir del material. Para explicar eso se propone que en metales los electrones de conducción tienen que tener niveles de energía específicos cuantizados, debidos a su estructura cristalina, inferiores a los niveles de energía externos al material y superiores a los niveles de electrones ligados a los iones. Como consecuencia de esto, en el equilibrio mecánico los portadores de carga dejarán regiones vacías a cambio de regiones metálicas al ser favorecidas energéticamente.

Las ideas de los modelos anteriores motivan a analizar el comportamiento de las funciones de onda en la interface de un metal representado por un potencial periódico y el vacío representado por un potencial nulo. Esto se busca analizar para conocer los efectos de considerar la estructura del material en el fenómeno de emisión por efecto de campo, así como para conocer si los efectos pueden ayudar a explicar el fenómeno en condiciones de campos eléctricos externos poco intensos o incluso para explicar el origen a la barrera de potencial. En la ecuación 2.1 se recupera el potencial que se supone debiese haber en el interior de un metal de acuerdo con el modelo de acoplamiento fuerte.

$$-\sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\tilde{Z}e^2}{|x - x_i|} \quad \text{Ec. 2.1.}$$

Dado un campo eléctrico de magnitud \mathcal{F} en el exterior se tendrá un potencial lineal en el exterior del material. Más aún, debido a la conductividad de un metal, en el interior del metal habrá una desipación rápida del campo eléctrico externo. Esto es conocido como el efecto piel. La ecuación 2.2 da la expresión completa del potencial de acuerdo a estos efectos, donde ω es la frecuencia del campo eléctrico

externo. La ecuación 2.3 considera que la conductividad de un metal está dada de acuerdo a la ecuación 1.2. En el modelo propuesto se consideran campos eléctricos estáticos por lo que $\omega \rightarrow 0$ y la ecuación 2.3 se puede simplificar a la ecuación 2.4 (Marion, Heald, 1995).

$$V(x) = \begin{cases} -e\mathcal{F}x, & 0 \leq x \\ -\sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\tilde{Z}e^2}{|x-x_i|} + e\mathcal{F}x e^{\sqrt{\frac{\mu_0\sigma\omega}{c}}x}, & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 2.2.}$$

$$V(x) = \begin{cases} -e\mathcal{F}x, & 0 \leq x \\ -\sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\tilde{Z}e^2}{|x-x_i|} + e\mathcal{F}x e^{q_e \sqrt{\frac{\mu_0 n \tau \omega}{cm_e}}x}, & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 2.3.}$$

$$V(x) = \begin{cases} -e\mathcal{F}x, & 0 \leq x \\ -\sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\tilde{Z}e^2}{|x-x_i|}, & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 2.4.}$$

Si bien la ecuación 2.4 da una opción para el potencial en la interface entre metal y vacío no se esperaría que los electrones de conducción en un metal tuviesen que interactuar con un potencial tan fuerte, sino con un potencial similar al dado en el modelo de electrón casi libre. Sin embargo, potencial del modelo de electrón casi libre tiene una atenuación exponencial. Un potencial con esa atenuación no podría ser origen de la función de trabajo. En cambio, se propone un campo periódico dado por la expresión $A \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - B$, donde la B representa el hecho de que el potencial en la ecuación 2.4 nunca es positivo. La expresión completa de uno de los potenciales que se propone analizar está en la ecuación 2.5. Más adelante se espera poder relacionar la función de trabajo a partir del parámetro B .

$$V(x) = \begin{cases} -e\mathcal{F}x, & 0 \leq x \\ A \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - B, & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 2.5.}$$

Otro potencial que se analizará es el potencial de acoplamiento fuerte. Sin embargo, la expresión $-\sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\tilde{Z}e^2}{|x-x_i|}$ en el potencial correspondiente presenta algunos inconvenientes. La expresión no permite la suposición de una cantidad

infinita de términos en la suma, pues en tal caso la expresión diverge en todos los puntos. Considerar pocos términos en la suma da una separación muy pequeña del cero. Más aún considerar muchos términos resulta muy demandante de recursos computacionales. Una alternativa que se propone es utilizar las aproximaciones $\sum_i^n \frac{1}{|x-x_i|} \approx \sum_i^n \left| \frac{1}{x_i} - \frac{x}{x_i^2} \right| \approx \frac{1}{|x|} + \ln(n) + \gamma - |x| \frac{\pi^2}{6}$, donde $|x| \ll 1$ y γ es la constante Euler-Mascheroni. En el exterior del material se pierde la contribución de los primeros términos de la suma por lo que se obtiene un potencial dado por la ecuación 2.6.

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{\tilde{Z}e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|x|} + \ln(n) + \gamma - |x| \frac{\pi^2}{6} - \sum_i^n \frac{1}{|x+x_i|} \right) - e\mathcal{F}x, & 0 \leq x \\ -\frac{\tilde{Z}e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|x|} + \ln(n) + \gamma - |x| \frac{\pi^2}{6} \right), & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 2.6.}$$

El potencial propuesto en la ecuación 2.5 busca juntar las contribuciones del modelo de electrón casi libre y del modelo de Fowler-Nordheim. Se espera que el cambio en la densidad de niveles de energía por el cambio de potencial dé una relación entre densidad de corriente y campo eléctrico externo con correcciones a la obtenida por el potencial con barrera cuadrado-triangular. Se espera que las diferencias sean más pronunciadas para campos eléctricos poco intensos porque para campos eléctricos intensos las oscilaciones del término $A \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$ serían muy pequeñas a comparación de la pendiente del campo eléctrico externo. En tales condiciones el término $A \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$ se podría aproximar a la constante A con lo que se recuperaría un potencial constante en el interior del metal. Así la ecuación 2.7 muestra la relación entre la función de trabajo y $A - B$.

$$V(x) = \begin{cases} -e\mathcal{F}x, & 0 \leq x \\ A - B, & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 2.7.}$$

Para obtener los niveles de energía es necesario resolver la ecuación de Schrödinger presentada en la ecuación 2.8, donde el potencial $V(x)$ es correspondiente al modelo que se analice en cuestión. La ecuación 2.8 se resolverá

por métodos matemáticos junto con el Teorema de Bloch y el método de la supercelda.

$$\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E_n\Psi(x) \quad \text{Ec. 2.8.}$$

2.2 Análisis.

El modelo propuesto, así como todos los modelos semejantes o basados en el modelo de Fowler-Nordheim, tienen cinco partes. Las cinco partes son, correcciones en la barrera de potencial, la probabilidad de transmisión por tunelamiento cuántico, la densidad de portadores de carga por unidad de energía, la estructura interna del material y la geometría de la superficie. Estas partes se analizan bajo las suposiciones ya mencionadas en los modelos de Drude-Sommerfeld y Fowler-Nordheim. Así se toma por hecho que los portadores de carga son electrones con la distribución de Fermi-Dirac y que el potencial son modificaciones de una barrera cuadrado-triangular (Modinos, 1984).

El modelo propuesto está basado en el modelo de Fowler-Nordheim y cada una de las partes poseen las modificaciones siguientes: A la izquierda de la barrera cuadrado-triangular se tiene un pozo cosenoidal representando la estructura periódica de un cristal (preferiblemente un metal). La probabilidad de transmisión es calculada numéricamente por la aproximación *WKB*. La estructura de la materia también se considera al usar el potencial cosenoidal para evaluar las bandas de energía del sistema. Las bandas de energía dan los valores de energía permitidos que son las regiones de integración. Las bandas de energía se calculan numéricamente usando el Teorema de Bloch así como el método de la supercelda. En el modelo propuesto se considera que la superficie del material es plana, por lo que la densidad de portadores de carga por unidad de energía es la densidad normal a la superficie de portadores de carga. Esta densidad fue dada por Nordheim usando el modelo de Drude-Sommerfeld. La precisión de cada método numérico usado se analizó usando el método numérico para estimar algún otro resultado con valores conocidos. Para corroborar el método numérico correspondiente al Teorema de Bloch, se le usó para estimar las bandas del potencial pozo cuadrado. Para corroborar el método numérico de la densidad de corriente, se le usó para estimar

la relación obtenida por Fowler-Nordheim, en las ecuaciones 1.16 y 1.17 (Ramos Medieta).

La mayoría de los modelos de emisión eléctrica por campo eléctrico se enfocan en las regiones de altas temperaturas o fuertes campos eléctricos. Con el modelo propuesto se espera poder analizar las regiones con bajas temperaturas y campos eléctricos de menor intensidad.

El potencial usado en el modelo propuesto está dado por la ecuación 2.9. En la ecuación 2.9, los parámetros A , B , w , W , \mathcal{F} representan la amplitud, y nivel medio del potencial interno del metal, la separación media entre elementos de la red cristalina, es decir $w = \frac{2\pi}{a}$, la función trabajo en la interface entre metal y espacio vacío y la intensidad del campo eléctrico externo. Los parámetros principales de estudio en el proyecto son la intensidad del campo eléctrico externo y la función trabajo. Como condiciones generales, se consideran temperaturas cercanas o menores a 300 K . La mayoría de las investigaciones relacionadas con el tema, obtienen resultados experimentales a partir de metales nobles. En el modelo se requiere de la función trabajo W , la energía de Fermi o potencial químico de los electrones $E_F = \mu$ y la separación en la red cristalina como factores de escala a . Debido a los datos disponibles, se usarán los valores de las características particulares del oro para este fin. Así en el modelo se consideran los valores $W = 5.1\text{ eV}$, $E_F = \mu = 5.53\text{ eV}$ y $a = 0.407\text{ nm}$ (Zhou, Zhang, 2020).

$$V(x) = \begin{cases} W - e\mathcal{F}x, & 0 \leq x \\ A \cos(wx) - B, & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 2.9.}$$

Usando el Teorema de Bloch se obtiene la ecuación de valores propios que se presenta en la ecuación 2.10. La relación entre los valores propios de la ecuación 2.10 y los valores propios de la energía están dados por la ecuación 2.11. En las ecuaciones 2.10 y 2.11, los parámetros λ , q , G , G' son la longitud de una celda (supercelda en el modelo propuesto), submúltiplo de un vector recíproco y múltiplos de los vectores recíprocos. $G = \frac{2\pi}{\lambda}n$, $G' = \frac{2\pi}{\lambda}n'$ con n y n' números enteros. m_e es

la masa de un electrón y \hbar es la constante de Planck reducida. El término V_s está dado por $V_s = \frac{2m_e\lambda}{\hbar^2} \int_0^\lambda V(x)e^{-isx} dx$ (Ashcroft, Mermin, 1976).

$$\sum_{G'} (\lambda^2 (q + G)^2 \delta_{G-G'} + V_{G-G'}) \phi_{G'} = \xi_n \phi_G \quad \text{Ec. 2.10.}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_e\lambda^2} \xi_n \quad \text{Ec. 2.11.}$$

Para optimizar el cálculo de la región de integración solo se hace uso de los valores propios de la energía para vectores en los extremos de una celda de la red recíproca. La ecuación 2.14 define la función característica de las bandas de energía. Dada una energía permitida, es decir en alguna de las bandas, la probabilidad de transmisión se calculó usando la aproximación *WKB*. La ecuación 2.13 da la expresión de esta aproximación (Griffiths, Schroeter, 2018) (Sakurai, Napolitano, 1985).

$$\chi(E) = \begin{cases} 1, & E \text{ está en una banda} \\ 0, & E \text{ no está en una banda} \end{cases} \quad \text{Ec. 2.12.}$$

$$t(E) = e^{-2 \int_0^\infty \sqrt{\max\left\{\frac{2m_e}{\hbar^2}(V(x)-E), 0\right\}} dx} \quad \text{Ec. 2.13.}$$

La densidad normal de electrones con energía E está dada por la ecuación 2.14. En la ecuación 2.14, k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura (Fowler, Nordheim, 1928) (Zhou, Zhang, 2020).

$$N(E) = \frac{m_e k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{dy}{e^{\frac{W-\mu}{k_B T} + y} + 1} = \frac{m_e k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \ln \left(1 + \frac{1}{e^{\frac{W-\mu}{k_B T}}} \right) \quad \text{Ec. 2.14.}$$

La densidad de corriente se obtiene al integrar la cantidad de carga eléctrica que sale del material con respecto a la energía. Esto está dado por la ecuación 2.15, donde e es la carga eléctrica del electrón. En el proceso anterior se identifican las constantes siguientes: $\frac{\hbar^2}{2m_e}$, $k_B T$ y $\frac{m_e e k_B T}{2\pi^2 \hbar^3}$. Las constantes anteriores son expresadas en órdenes de magnitud muy grandes lo que puede producir errores en los métodos

numéricos, debido a esto las constantes, así como la escala de energía en el modelo está dada en electrón-volts.

$$|\vec{J}| = e \int_{-A-B}^{\infty} t(E)N(E)\chi(E)dE \quad \text{Ec. 2.15.}$$

Capítulo 3.

3. Resultados y discusión.

3.1 Resultados con método de supercelda.

Usando métodos numéricos de integración se evaluó la expresión analítica obtenida por Fowler-Nordheim para $W = 6eV$ y $\mu = 5.53eV$ en diferentes dominios de intensidad de campo eléctrico externo. En el método de supercelda se usaron 3 repeticiones de la interface y las separaciones entre interfaces representaron el 80% de la subcelda.

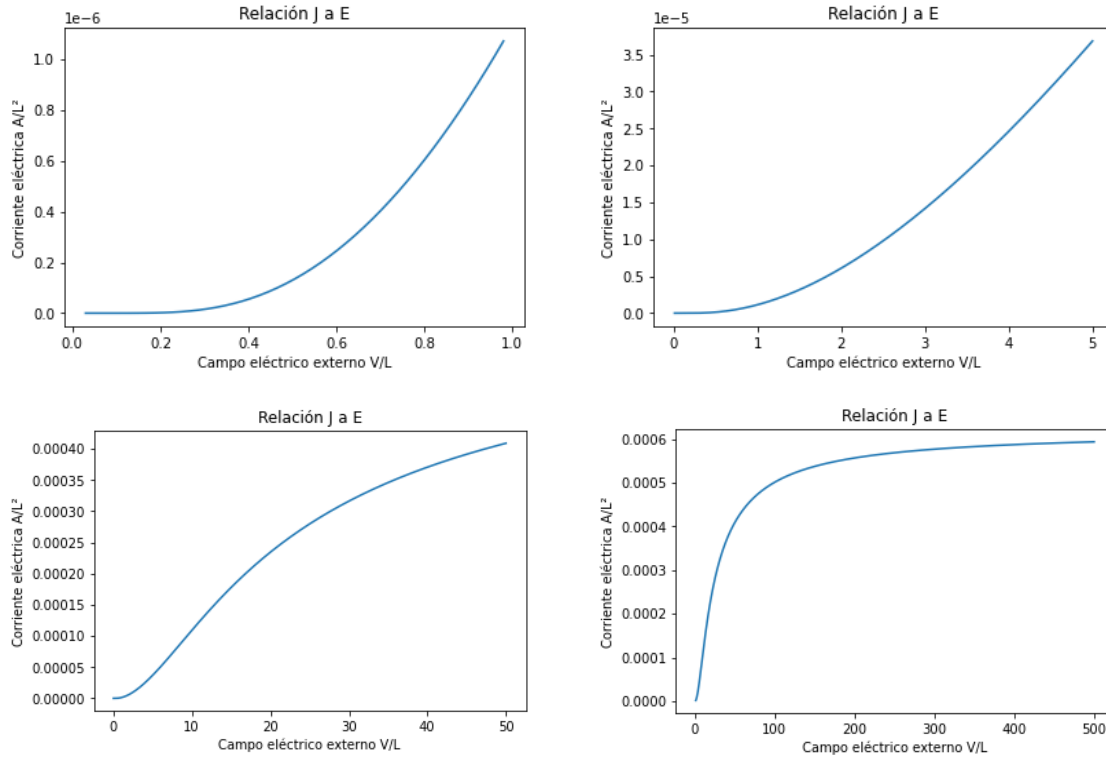
En los gráficos siguientes se presentan las relaciones de densidad de corriente en el exterior al material contra la intensidad de campo eléctrico externo de acuerdo a las ecuaciones 3.1, 3.2 y 3.3. La ecuación 3.3 fue obtenida por Fowler y Nordheim usando la barrera cuadrado-triangular. En los gráficos 3.1 y 3.2 se usó la expresión analítica (ecuación 3.1) obtenida por Fowler-Nordheim. De acuerdo con esta expresión y los parámetros utilizados la pendiente de la recta debe de tener un valor de $0.88101 \frac{V}{L}$ y el término constante debe de tener un valor de 3.52490×10^{-6} (Fowler, Nordheim, 1928).

En el análisis siguiente es importante considerar que la ecuación 3.1 se puede expresar como $\ln\left(\frac{|\vec{J}|}{|\mathcal{F}|^2}\right) = -k \frac{1}{|\mathcal{F}|} + \ln(C)$, donde C y k son constantes. La ecuación 3.2 es lineal en sus variables y permite recuperar los valores de las constantes de datos experimentales o evaluaciones numéricas.

$$|\vec{J}| = C \mathcal{F}^2 e^{-\frac{k}{|\mathcal{F}|}} \quad \text{Ec. 3.1.}$$

$$\ln\left(\frac{|\vec{J}|}{|\mathcal{F}|^2}\right) = -k \frac{1}{|\mathcal{F}|} + \ln(C) \quad \text{Ec. 3.2.}$$

$$|\vec{J}| = \frac{16\pi m_e e}{Wh^3} \int_0^\mu E^{\frac{1}{2}} (W - E)^{\frac{1}{2}} (\mu - E) e^{-8\sqrt{2}\frac{\pi}{h}\sqrt{m_e}\frac{(W-E)^{\frac{3}{2}}}{|\mathcal{F}|}} dE \quad \text{Ec. 3.3.}$$



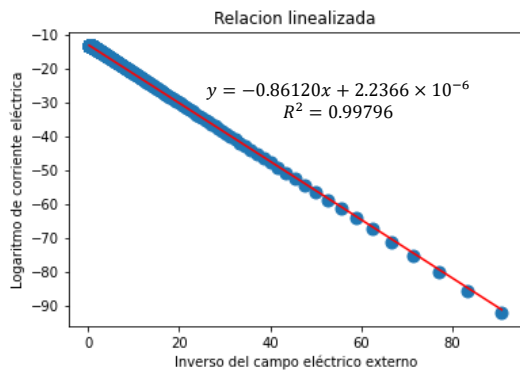
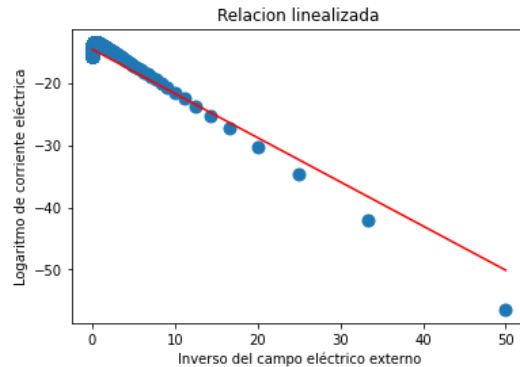
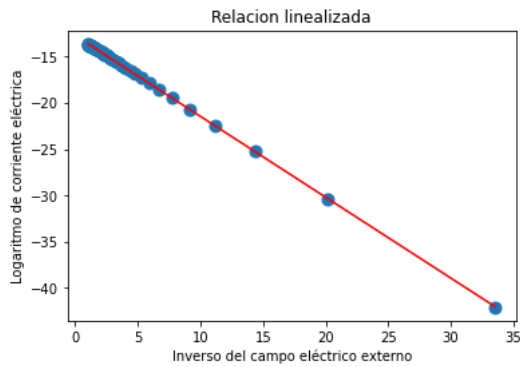
Relación densidad de corriente a intensidad de campo eléctrico externo de acuerdo a expresión analítica del modelo de Fowler-Nordheim (ecuación 3.1). (Arriba-izquierda) Campos eléctricos de intensidad baja. (Abajo-izquierda) Campos eléctricos de intensidad media. (Arriba-derecha) Campos eléctricos de intensidad alta. (Abajo-derecha) Campos eléctricos de intensidad muy alta.

Gráficos 3.1

$$|\vec{j}| = e \int_{-A-B}^{\infty} t(E)N(E)\chi(E)dE \quad \text{Ec. 3.4.}$$

$$V(x) = \begin{cases} W - eFx, & 0 < x \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 3.5.}$$

$$V(x) = \begin{cases} W - eFx, & 0 \leq x \\ A \cos(wx) - B, & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 3.6.}$$



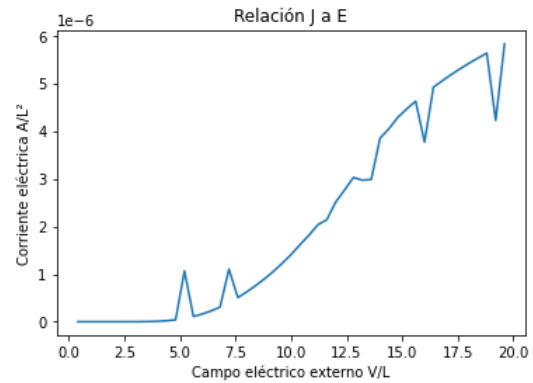
Relación J-E de acuerdo a ecuación 3.2 (puntos azules) con recta de mejor ajuste (rojo). (Arriba-izquierda) Campos eléctricos de intensidad baja. (Abajo) Campos eléctricos de intensidad media. (Arriba-derecha) Campos eléctricos de intensidad alta.

Gráficos 3.2

En los gráficos 3.1 se evalúa la expresión analítica obtenida por Fowler y Nordheim mostrada en la ecuación 3.1. Los gráficos 3.2 muestran el cambio de variables correspondiente a la ecuación 3.2. En estos gráficos se muestran relaciones de densidad de corriente contra intensidad de campo eléctrico. Estas unidades se expresan en unidades de Ampere por unidad de longitud cuadrada y Volt por unidad de longitud. La escala de longitud es independiente al modelo en los gráficos 3.2 y 3.4 y 3.5. De acuerdo a las conclusiones de Fowler y Nordheim, los gráficos 3.2 deben de mostrar relaciones lineales. La relación J-E tiene las características esperadas para campos eléctricos de baja intensidad y media intensidad, aunque no cumple la relación esperada para campos de alta o muy alta intensidad (Fowler, Nordheim, 1928).

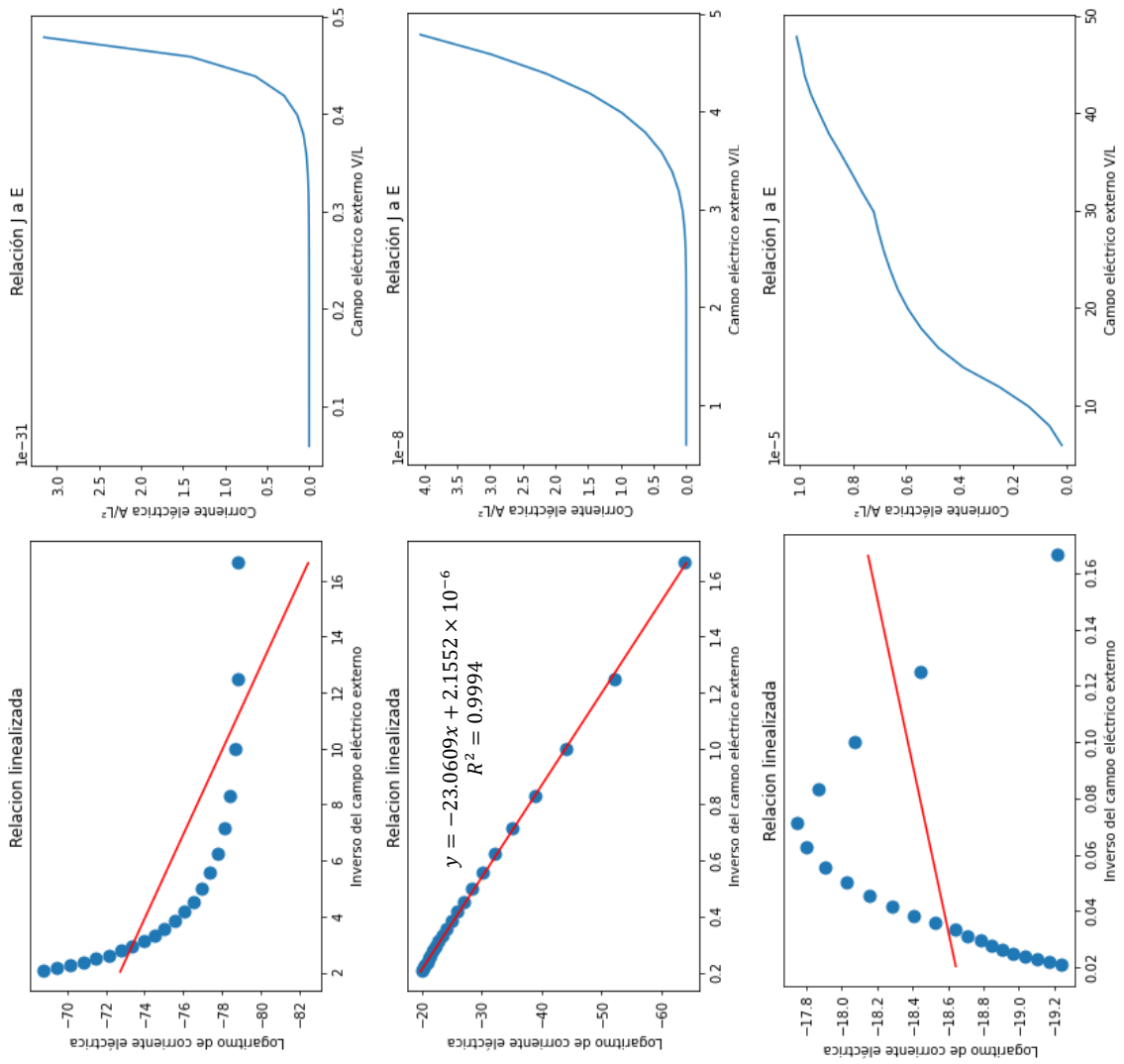
En los gráficos 3.3 y 3.4 se usa el método numérico propuesto con el potencial de barrera cuadrado-triangular. Cabe mencionar, como se notará en los gráficos siguientes, alguno de los métodos numéricos usados parece generar ruido por razones desconocidas en algunos puntos.

Una primera diferencia entre los resultados mostrados es que el método numérico propuesto (ecuación 3.4 con potencial 3.5) difiere de la expresión analítica (ecuación 3.1) cuando se dan campos eléctricos de intensidad baja. El método propuesto da una relación con un crecimiento más abrupto. En cambio, ambos métodos tienden a dar relaciones lineales para campos eléctricos externos intensos o muy intensos. Más aún, el método numérico propuesto parece mostrar una relación cuadrática entre $\ln\left(\frac{|j|}{|\mathcal{F}|^2}\right)$ y $\frac{1}{|\mathcal{F}|}$ para campos eléctricos intensos.



Ruido en la relación de densidad de corriente a intensidad de campo eléctrico externo usando el método numérico propuesto.

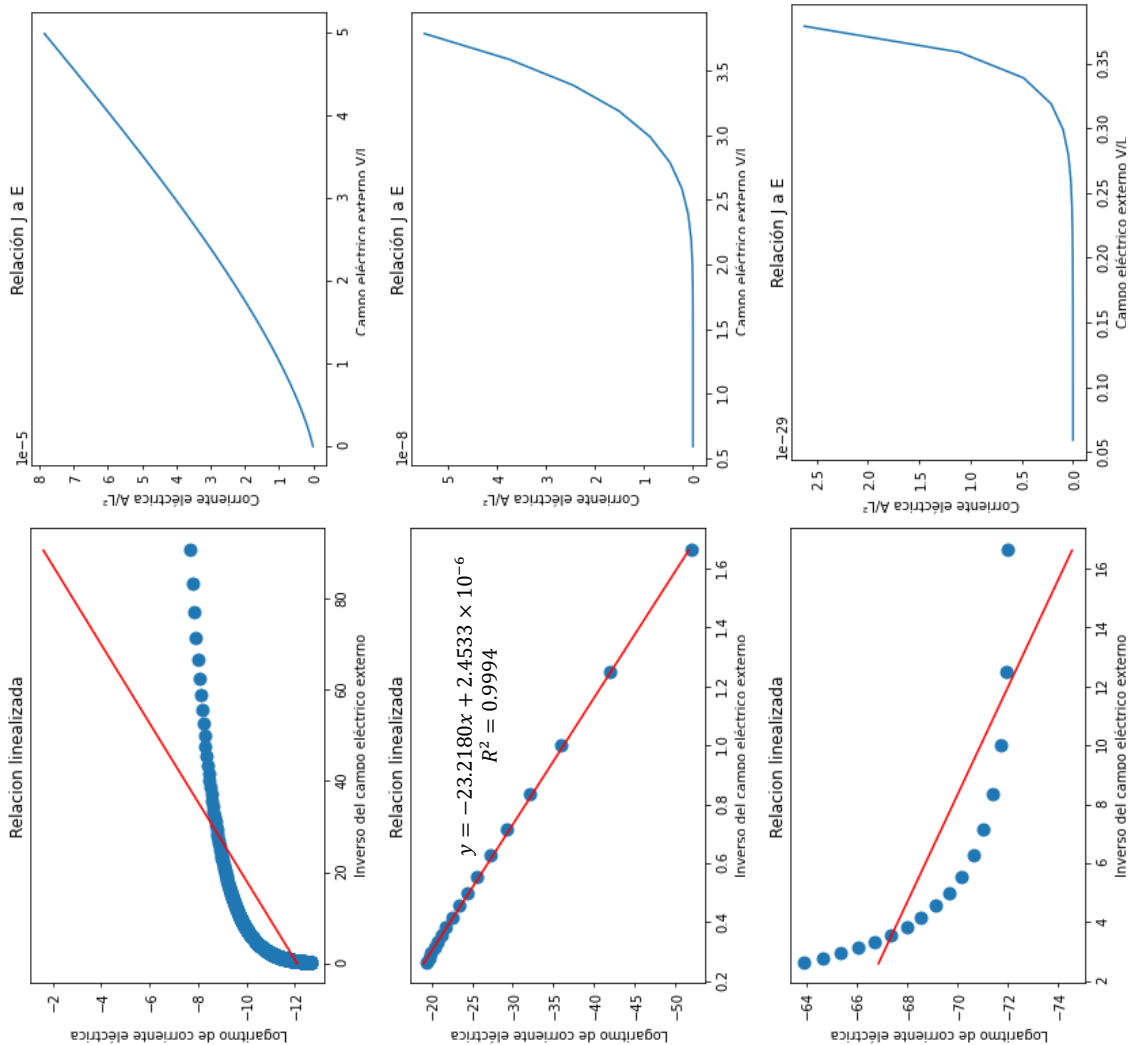
Gráfico 3.3



Relación de densidad de corriente contra intensidad de campo eléctrico evaluada usando método numérico. (Arriba) ecuación 3.4. (Abajo) ecuación 3.2 evaluada usando ecuación 3.4 con recta de mejor ajuste en rojo.

Gráficos 3.4

Después de usar tanto la expresión analítica de Fowler-Nordheim como el modelo numérico propuesto para evaluar el potencial con barrera cuadrado-triangular con las condiciones ya mencionadas, se usaron los mismos métodos, pero con las características del oro cuya función de trabajo sería $5.1eV$.



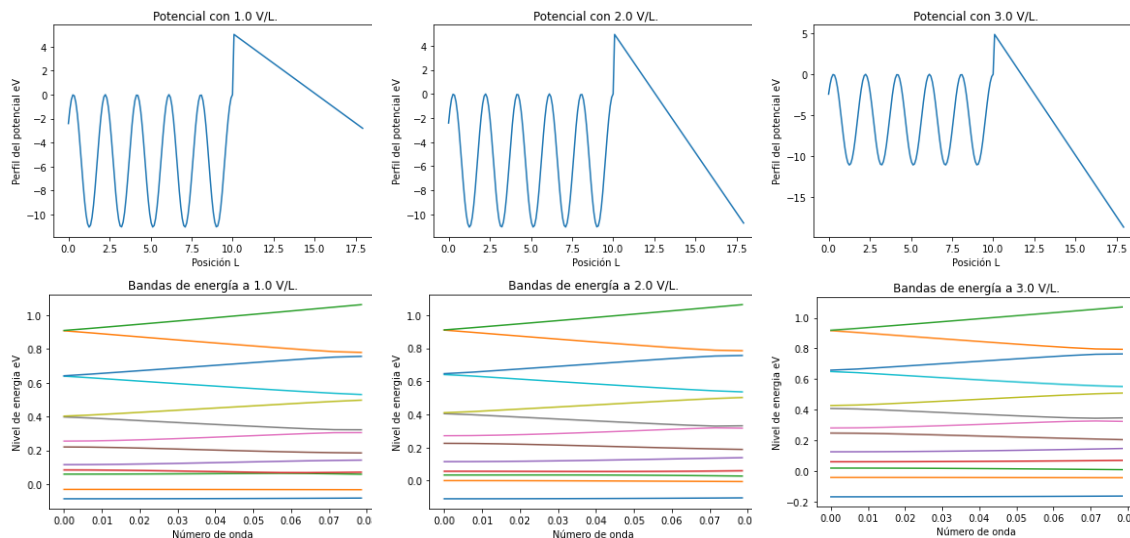
Relación de densidad de corriente contra intensidad de campo eléctrico evaluada usando modelo de Fowler-Nordheim y método numérico. (Arriba-izquierda) ecuación 3.1. (Arriba-centro y derecha) ecuación 3.4. (Abajo) ecuación 3.2 evaluada correspondientemente con recta de mejor ajuste en rojo.

Gráficos 3.5

Como se observa en los gráficos 3.5. La expresión analítica del modelo de Fowler-Nordheim no da la evaluación esperada. Esto se debe a que una de las suposiciones de la expresión es que la función de trabajo sea mayor que la energía de Fermi. En cambio, el método numérico mantiene resultados con perfiles muy similares a los anteriores.

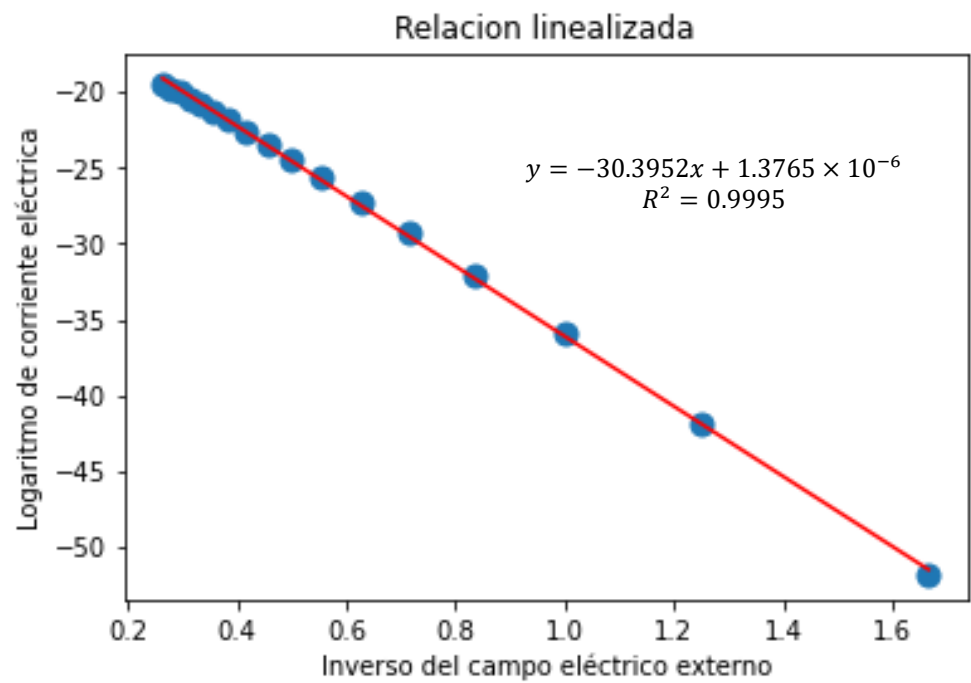
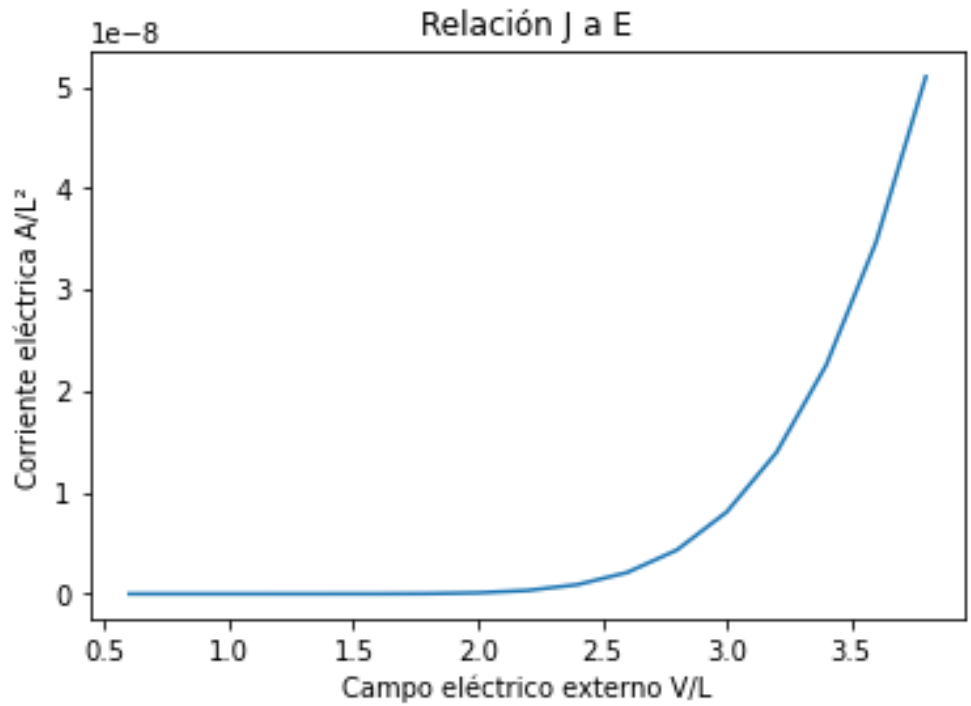
En los gráficos 3.6 se muestran los perfiles y los diagramas de bandas de ondas del potencial propuesto. Como ya se ha mencionado, los diagramas de

ondas fueron obtenidos usando el Teorema de Bloch junto con el método de la supercelda. El potencial propuesto incorpora en la parte cosenoidal la energía de Fermi del oro, así como la separación entre miembros de la red cristalina. Como se puede verificar en el anexo A, el periodo del coseno en unidades de longitud $[L]$ del programa está definida como $\frac{50a}{2\pi}$, donde a es el valor numérico de la distancia en la red cristalina del oro en nm . Debido a esto la distancia entre cresta y cresta en el potencial cosenoidal en unidades $[L]$ es $\frac{4\pi^2}{50(0.407)} = 1.93997 \dots [L]$. Luego, se tiene la relación de conversión de unidades tal que $1.93997 \dots [L] = 0.407nm$. Esto indica que $1[L] = 0.2098nm$. Cabe mencionar que a partir de este punto en el análisis las unidades de las gráficas y de los resultados obtenidos dependen de la estructura cristalina en la que se implementen. Las unidades de la constante k en la ecuación 3.1 son $\frac{V}{[L]}$ o bien $4.767 \times 10^9 \frac{V}{m}$ mientras que las unidades de la constante C son $\frac{1}{V\Omega}$. En los gráficos 3.7, se muestra la relación entre densidad de corriente e intensidad de campo eléctrico usando el potencial mostrado en los gráficos 3.6 y el método numérico propuesto.



Potencial (arriba) y bandas de energía (abajo) del potencial propuesto (ecuación 3.6).

Gráficos 3.6



(Arriba) Relación densidad de corriente a intensidad de campo eléctrico externo de acuerdo al método numérico propuesto del modelo de propuesto en el oro (ecuación 3.4 con potencial en ecuación 3.6). Campos eléctricos de intensidad media. (Abajo) Relación evaluada según ecuación 3.2 junto con recta de mejor ajuste en rojo.

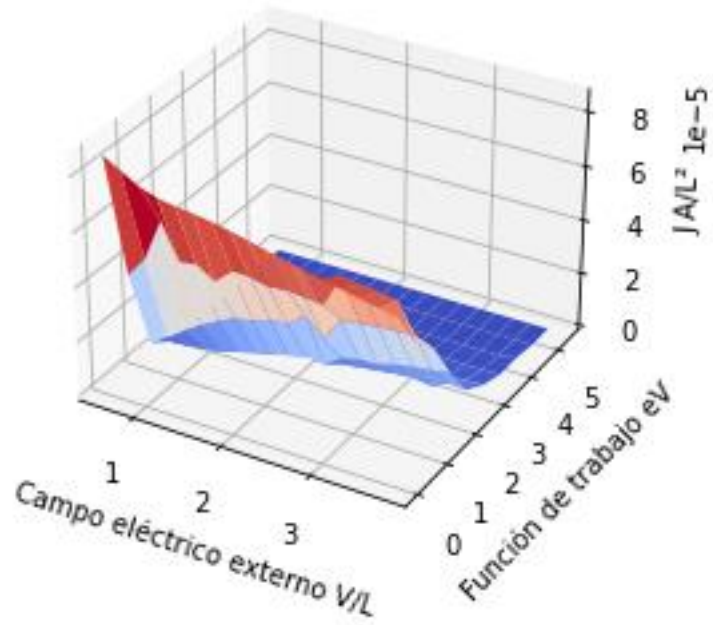
Los gráficos 3.7 muestran que el cambio del pozo rectangular por el pozo cosenoidal tiene pocos efectos en la relación J-E. Estos resultados inesperados se explican considerando que campos eléctricos de intensidad media son suficientes como para aproximar el potencial cosenoidal a un potencial rectangular y que para campos eléctricos poco intensos la probabilidad de tunelamiento es muy baja, por lo que la función de trabajo o bien la forma de la barrera es el único determinante observable en el fenómeno de emisión electrónica.

De acuerdo con resultados experimentales, en condiciones de alto vacío ($200\mu Pa$) o menos la tensión de ruptura del vacío puede llegar hasta $40 \frac{MV}{m}$ o bien $4.0 \times 10^7 \frac{V}{m}$. En general, los resultados obtenidos por el modelo y métodos propuestos mantienen resultados que sobreestiman la tensión de ruptura del vacío, así como el modelo de Fowler-Nordheim (Modinos, 1984).

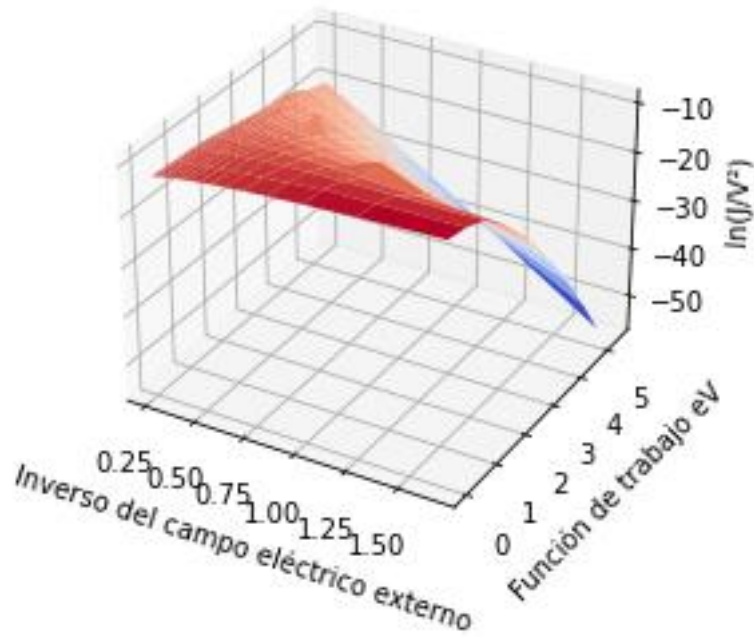
3.2 Análisis de la función de trabajo.

Para corroborar las observaciones anteriores, se usó el método numérico propuesto para mostrar la relación de la densidad de corriente contra el campo eléctrico externo dependiendo para diferentes valores de la función de trabajo. En los gráficos 3.8 se muestra esta relación. En particular, en los gráficos 3.8 se muestra que para funciones de trabajo muy pequeñas la relación entre densidad de corriente y campo eléctrico externo es decreciente.

Relación J a E



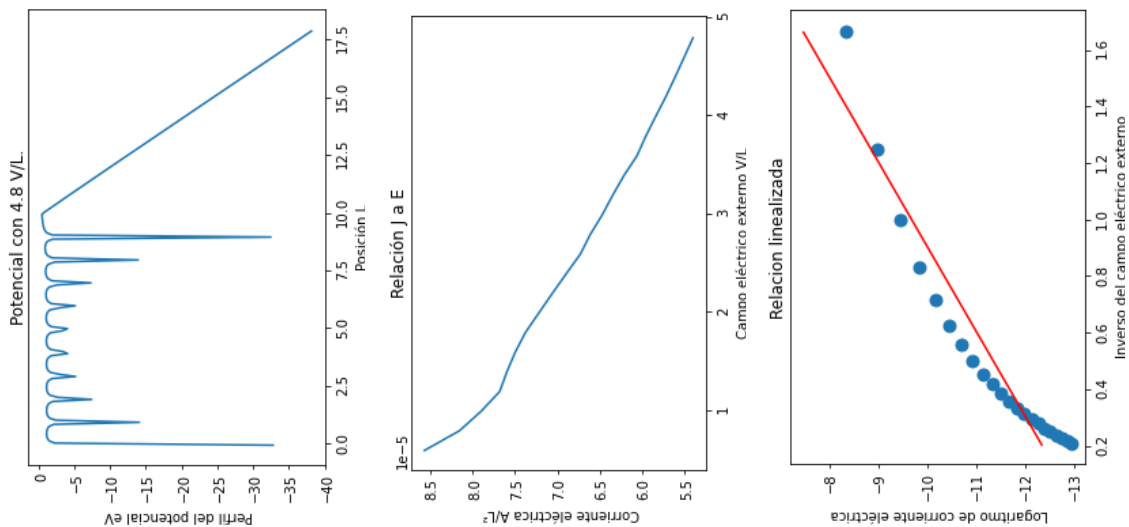
Relación linealizada



Relación densidad de corriente a intensidad de campo eléctrico externo y función de trabajo.
(Arriba) Según ecuación 26. (Abajo) Según ecuación 27.

Siendo que los resultados anteriores indican que considerar un potencial suave en el interior del material no tiene efectos notables sobre el fenómeno de emisión por efecto de campo, se considera usar el potencial expresado en la ecuación 3.7. En el potencial mostrado en la ecuación 3.7 es el que se obtuvo de analizar el modelo de acoplamiento fuerte.

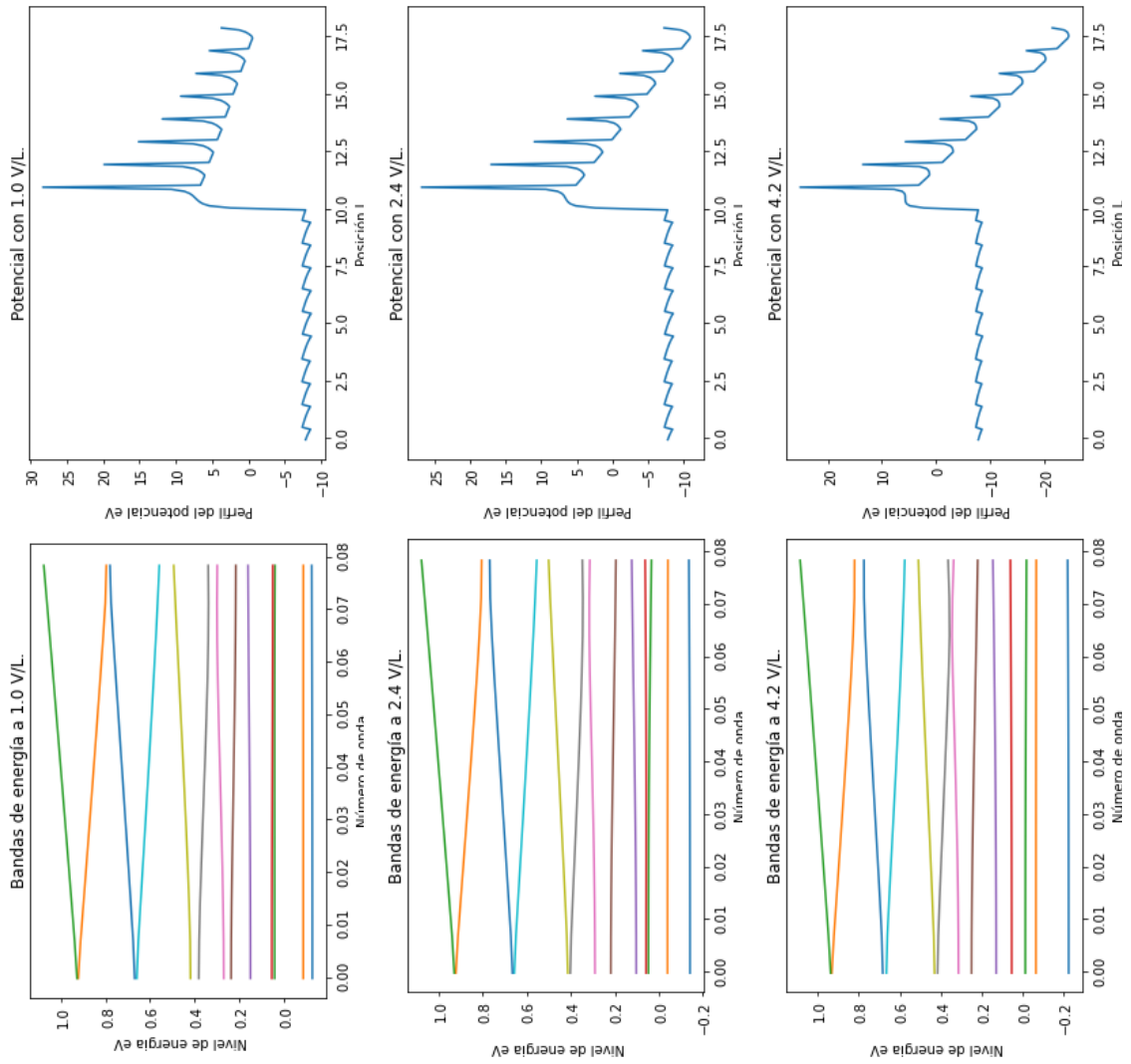
$$V(x) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|x|} + \ln(n) + \gamma - |x| \frac{\pi^2}{6} - \sum_i^n \frac{1}{|x+x_i|} \right) - eEx, & 0 \leq x \\ -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|x|} + \ln(n) + \gamma - |x| \frac{\pi^2}{6} \right), & x < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 3.7}$$



Potencial de Coulomb con pocos términos

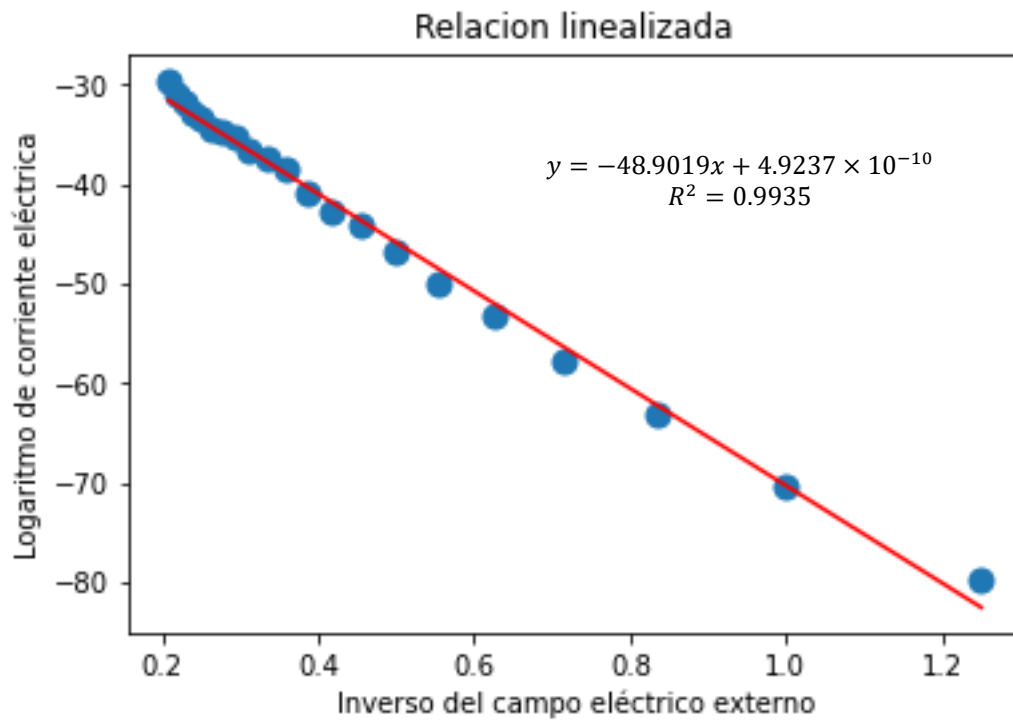
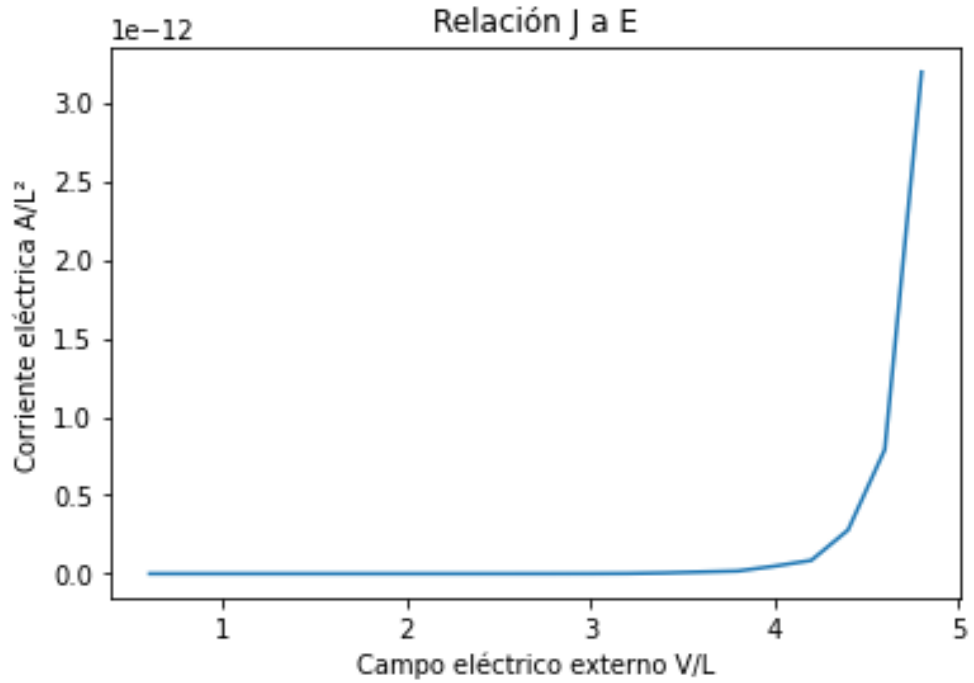
Gráficos 3.9

Los gráficos 3.9 muestran los resultados de la relación densidad de corriente contra campo eléctrico externo usando el potencial de Coulomb para 20 términos de la suma. En cambio, los gráficos 1.10 muestran el perfil y las bandas de energía correspondientes al del potencial en la ecuación 29. En los gráficos 1.11 se muestra la relación densidad de corriente a campo eléctrico externo usando el potencial de Coulomb.



Potencial (arriba) y bandas de energía (abajo) del potencial de Coulomb modificado.

Gráficos 3.10



Relación densidad de corriente a intensidad de campo eléctrico con potencial de Coulomb modificado.

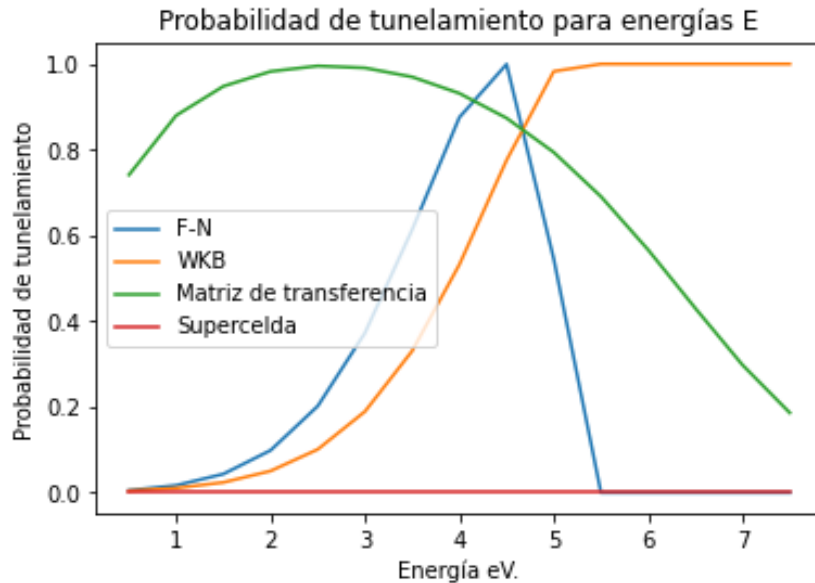
Los gráficos 3.10 y 3.11 muestran que se puede dar una función de trabajo semejante a la de un metal usando su estructura cristalina. El método no es preciso pues indica que la función de trabajo depende del tamaño de la muestra del material. Sin embargo, la barrera de potencial que se obtiene es útil para recuperar el comportamiento del fenómeno de emisión por efecto de campo. Queda necesario considerar más característica de la estructura de un metal para poder tener una representación más precisa de su estructura y una explicación más certera de sus comportamientos.

3.3 Resultados con la matriz de transferencia.

El método de supercelda reproduce la forma del fenómeno de emisión por efecto de campo para algunos campos eléctricos externos. Sin embargo, las magnitudes del fenómeno obtenidas por el método son completamente distantes del fenómeno, así como de los resultados obtenidos por cualquier otro método.

A continuación, se comparan los resultados obtenidos por la matriz de transferencia y las demás propuestas. En la utilización de la matriz de transferencia se cambió el potencial periódico cosenoidal por un potencial periódico rectangular. El periodo del potencial es correspondiente a la distancia de la red cristalina y la profundidad del potencial es correspondiente a la energía de Fermi del metal.

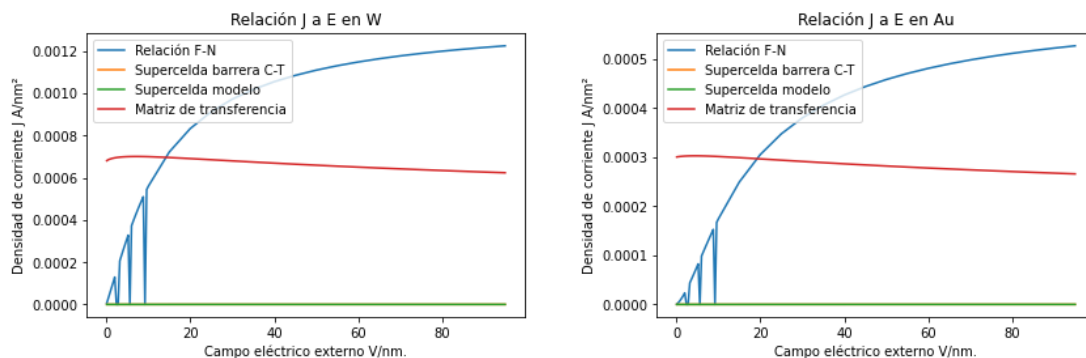
Una de las observaciones importantes se da al comparar las probabilidades de tunelamiento de cada método. En el método de supercelda se puede considerar la expresión $t(E)\chi(E)$ como una probabilidad de tunelamiento corregida. El gráfico 3.12 muestra la probabilidad de tunelamiento a diferentes energías para diferentes métodos. Las condiciones son correspondientes al oro con un campo externo de $5\frac{V}{nm}$.



Probabilidad de tunelamiento para diferentes energías en los diferentes métodos.

Gráficos 3.12

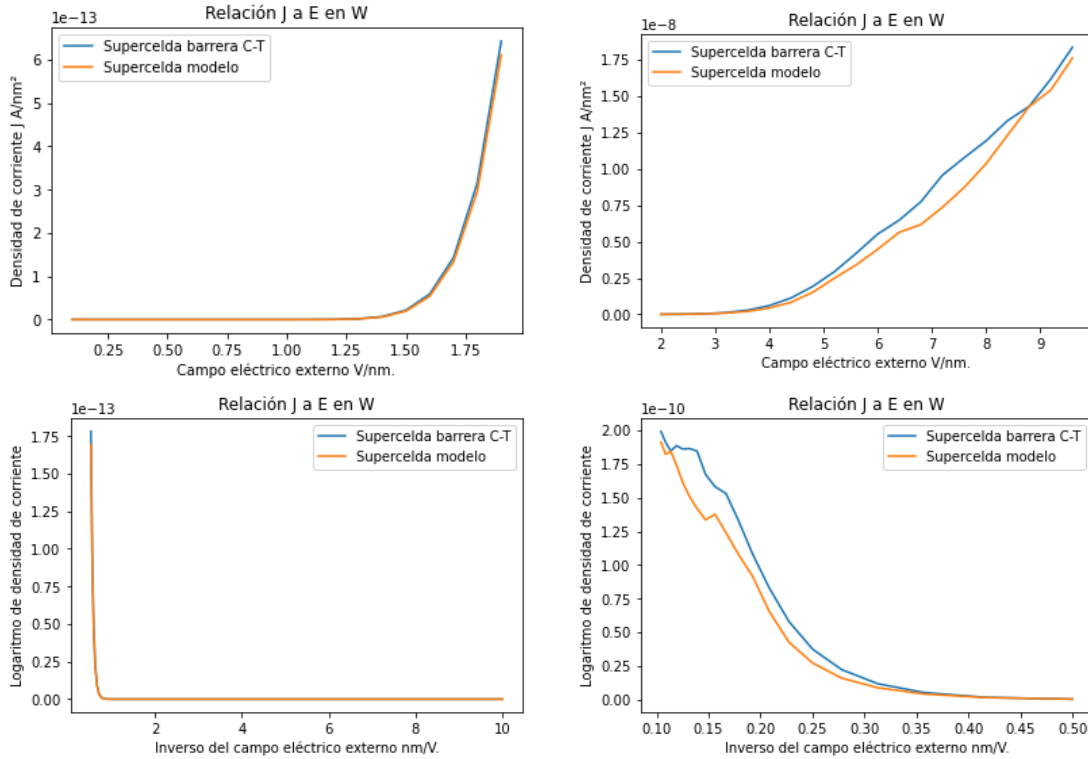
En el gráfico 3.13 se presentan comparaciones de las relaciones J – E de acuerdo a los diferentes métodos usados.



Relaciones J-E. (Derecha) se considera la estructura del tungsteno. (Izquierda) se considera la estructura del oro.

Gráficos 3.13

También en los gráficos 3.14 se presenta una ampliación de las gráficas para los modelos de supercelda en las condiciones del tungsteno. Las características del tungsteno usadas fueron una distancia de red cristalina de 0.316nm, una energía de Fermi de 9.75eV y una función de trabajo de 4.5eV.



(Arriba) Relación de densidad de corriente contra intensidad de campo eléctrico evaluada usando potencial propuesto y método numérico de supercelda. (Abajo) Relaciones $J - E$ rescritas de acuerdo con ecuación 3.2.

Gráficos 3.14

Si bien el método de supercelda indica relaciones con una gran subestimación de la densidad de corriente, posee los rangos más amplios donde se recupera un comportamiento de acuerdo a la ecuación 3.2.

Capítulo 4.

4. Conclusión.

El modelo de Fowler-Nordheim solo es válido para materiales con funciones de trabajo mayores que sus correspondientes energías de Fermi, en cambio gracias al modelo propuesto y los métodos de solución empleados se pudo encontrar la relación $J - E$ para cuando esta condición no se cumple.

Se encontró que la estructura cristalina al considerar campos eléctricos intensos juega un papel poco relevante en la emisión por efecto de campo. Además, para campos poco intensos la probabilidad de tunelamiento es baja y por lo tanto la función de trabajo es el factor más relevante en el fenómeno de emisión por efecto de campo. Tanto el modelo propuesto como el de Fowler-Nordheim sobreestiman la tensión de ruptura del vacío, indicando que otros factores juegan un papel relevante en este fenómeno. Más aún, el modelo da una explicación teórica para la independencia de la ruptura del vacío con respecto a la composición de su alrededor.

Se observó que la estructura del material y su potencial pueden generar un efecto de barrera de potencial que recuperó el fenómeno de emisión por efecto de campo. Este análisis también mostró que es necesario considerar más factores para obtener una representación más precisa del fenómeno.

Anexo.

Implementación del método numérico propuesto con los potenciales analizados en *Python 3.8*.

```
# -*- coding: utf-8 -*-
```

```
"""
```

```
Spyder Editor
```

```
This is a temporary script file.
```

```
"""
```

```
import math
```

```
import mpmath
```

```
import numpy
```

```
import numpy.linalg
```

```
import scipy
```

```
import scipy.constants
```

```
import scipy.integrate
```

```
import scipy.linalg
```

```
import scipy.stats
```

```
import matplotlib as matp
```

```
import matplotlib.pyplot as plot
```

```
import time
```

```
def glob_temp():
```

```
    return 300
```

```
def glob_beta():
```

```
    return glob_temp()*scipy.constants.k/scipy.constants.electron_volt
```

```

def Coulomb_pot_g():
    return 3*math.pow(scipy.constants.e,
2)/(4*math.pi*scipy.constants.epsilon_0*10*scipy.constants.nano*scipy.constant
s.electron_volt)

def glob_cons1():
    return math.pow(scipy.constants.hbar/scipy.constants.electron_volt,
2)/(2*scipy.constants.m_e)

def glob_cons2():
    return
scipy.constants.m_e*scipy.constants.e*glob_beta()/(2*math.pow(math.pi,
2)*math.pow(scipy.constants.hbar/scipy.constants.electron_volt, 3))

def glob_kappa():
    return 2*math.pi*math.pow(2*scipy.constants.m_e,
0.5)*scipy.constants.electron_volt/scipy.constants.h

def glob_cons2_F():
    return
4*math.pi*scipy.constants.m_e*scipy.constants.e/math.pow(scipy.constants.h/sc
ipy.constants.electron_volt, 3)

#Condiciones generales
# def glob_wf():
#     return 6

# def glob_fe():
#     return 9.75

```

```
# def glob_amp():  
#     return 0  
  
# def glob_iad():  
#     return 0.407  
  
# def glob_name():  
#     #return "Relaciones originales de Fowler-Nordheim"  
#     return "Relaciones numéricas-supercelda de Barrera cuadrado-triangular"
```

#Condiciones tungsteno

```
def glob_wf():  
    return 4.5
```

```
def glob_fe():  
    return 9.75
```

```
def glob_amp():  
    return glob_fe()/2
```

```
def glob_iad():  
    return 0.316
```

```
def glob_name():  
    return "Relaciones numéricas-matriz de modelo propuesto en W"
```

#Condiciones oro

```
# def glob_wf():  
#     return 5.1
```

```

# def glob_fe():
#     return 5.53

# def glob_amp():
#     return glob_fe()/2

# def glob_iad():
#     return 0.407

# def glob_name():
#     return "Relaciones numéricas-matriz de modelo propuesto en Au"

def glob_C_F_cons():
    return
    scipy.constants.e*scipy.constants.electron_volt/(2*math.pi*scipy.constants.h)

def glob_C_F():
    return glob_C_F_cons()*math.pow(glob_fe()/(abs(glob_wf() - glob_fe())),
0.5)/glob_wf()

def glob_k_F_cons():
    return 4*glob_kappa()/3

def glob_k_F():
    return glob_k_F_cons()*math.pow(abs(glob_wf() - glob_fe()), 1.5)

def program_t(Params_I, Params_I_val, flag_FN = False, EEn = 0):

```

definir un bloque de la funcion
parametros modelo $\text{Acos}(20\pi wx) - B$, $W - vx$... 5 parametros
construir funcion, por definicion o en una lista
construir repeticiones, se necesita parametro para repeticiones... 6
parametros
por definicion con recursividad o otro vector

agregar el espacio grande de aire en los extremos, se necesita parametro de
espacio de aire
7 parametros

medir tamaño de la supercelda

dar submúltiplos del número de onda

hacer uso de analisis de fourier
se necesita precision en numeros de pasos y en integracion... 9
parametros

se necesita diagonalizar la matriz

graficar los niveles de energia
hacer varios comparativos

para analisis de fourier en teorema de bloch

funcion periodica potencial completo

longitud de una celda o supercelda

```
# dar vectores reciprocos este parametro da la cantidad de bandas
```

```
# dar cantidad de numeros de onda
```

```
d = 0.8 # razon entre region externa e interna
```

```
d = 10*(d+1) # largo de una subcelda args(0)
```

```
a = glob_amp() # amplitud args(1) energia de fermi
```

```
w = glob_iad() # frecuencia
```

```
w = (2*math.pi)/w # args(2)
```

```
b = -a # semifondo args (3) energia de fermi
```

```
k = 0.1 # pendiente - campo electrico externo args (4)
```

```
wf = glob_wf() # trabajo, barrera args(5)
```

```
r = 3 # repeticiones de subcelda args(6)
```

```
l = 20 # bordes de supercelda args(7)
```

```
L = 0 # longitud supercelda args(8)
```

```
n = 6 # niveles de energía args(9)
```

```
Params_standard = [d, a, w, b, k, wf, r, l, L, n]
```

```
Params = []
```

```
flag_t = False
```

```
flag_preg = False
```

```
flag_preg_p = False
```

```
flag_preg_n = False
```

```
if flag_preg == True:
```

```
    flag_var = input("¿Quiere modificar algún parámetro? ")
```

```
else:
```

```
    flag_var = 'ninguno'
```

```
Params = Params_standard
```

```
list_params = ['largo de una subcelda', 'amplitud', 'frecuencia', 'semifondo',  
'pendiente', 'funcion de trabajo', 'repeticiones', 'borde de la supercelda', '', 'número  
de bandas']
```

```
t_params = ""
```

```
for p in range(len(list_params)-2):
```

```
    if list_params[p]!="":
```

```
        t_params = t_params + list_params[p] + ', '
```

```
t_params = t_params + list_params[len(list_params)-1]
```

```
if flag_var == 'todos':
```

```
    for p in range(len(list_params)-1):
```

```
        Params.append(input('De valor para '+ list_params[p]+'.' ))
```

```
else:
```

```
    while flag_var != 'ninguno':
```

```
        flag_ex = 0
```

```
        for p in range(len(list_params)-1):
```

```
            if list_params[p] == flag_var:
```

```
                flag_ex = 1
```

```
                Params[p] = input('De valor para '+ list_params[p]+'.' )
```

```
            else: Params[p] = Params_standard[p]
```

```
        if flag_ex == 1:
```

```
            flag_var = input('¿Quiere cambiar algún otro parámetro? ')
```

```
        else:
```

```
            flag_var = input('No se encontró el parámetro que indicó. Los  
parámetros que se pueden modificar son ' + t_params + '. ¿Quiere cambiar  
algún otro parámetro? ')
```

```

for p in range(len(Params_l)):
    Params[Params_l[p]] = Params_l_val[p]
# Params[4] = Params_l_val
Params[8] = Params[0]*Params[6] + 2*Params[7]
print(Params)

```

```

dic_fun = {'potencial cuadrado sin integrar':0, 'potencial cuadrado':1, 'potencial
cosenoidal':2, 'potencial propuesto':3, 'potencial Coulomb':4, 'potencial Coulomb
2':5}

```

```

# funcion sinc

```

```

def sinc(x):
    if x!=0:
        return math.sin(x)/x
    else:
        return 1

```

```

# exponencial compleja

```

```

def comp_exp(z):
    return math.exp(complex(z).real)*(math.cos(complex(z).imag) +
1j*math.sin(complex(z).imag))

```

```

#perfil del potencial cuadrado

```

```

def perfil_potencial_cuadrado(x, args):

```

```

# el radio de la region interna es siempre 5
if abs(x-args[0]/2) < 5:
    return -args[1]
else:
    return 0

#perfil del potencial cosenoidal
def perfil_potencial_cosenoidal(x, args):
    if abs(x-args[0]/2) < 5:
        return -args[1]*math.cos(args[2]*(x-args[0]/2))
    else:
        return 0

#perfil del potencial modelo
def perfil_potencial_modelo(x, args):
    if x < 10:
        return args[1]*math.cos(args[2]*(x-10)) + args[3]
    else:
        return args[5] - args[4]*(x-10)

#potencial de Coulomb
def perfil_potencial_Coulomb(x, args):

    pot = 0

    for a in range(-10, 10):
        if args[2]*(x - a) != 0:
            pot = pot - Coulomb_pot_g()/abs(args[2]*(x-a))
        else:
            pot = pot - math.pow(2, 5)

```

```

if x < 10:
    return pot
else:
    return pot -args[4]*(x - 10)

#potencial de Coulomb material amplio
def perfil_potencial_Coulomb_2(x, args):

    y = abs( args[2]*(x - 10 - 0.5) - int(args[2]*(x - 10 - 0.5)) -0.5)

    if y == 0:
        pot = 64 + math.log(math.pow(scipy.constants.Avogadro, 1/3)) +
mpmath.euler - y*math.pow(math.pi, 2)/6

    else:
        pot = 1/y + math.log(math.pow(scipy.constants.Avogadro, 1/3)) +
mpmath.euler - y*math.pow(math.pi, 2)/6

    if x < 10:
        return -Coulomb_pot_g()*pot

    else:

        for a in range(int(x - 10) + 1):
            if args[2]*(x - 10 - a) != 0:
                pot = pot - 1/abs(args[2]*(x - 10 - a))

        return Coulomb_pot_g()*pot -args[4]*(x - 10)

```

```

#repeticiones del potencial
def potencial_repetido(x, args):

    for s in range(args[6]):
        if 0 <= x-args[0]*s < args[0]:
            return list_fun_g(args[10])(x-args[0]*s, args)

#construccion de supercelda
def supercelda(x, args):
    if x<args[7]:
        return 0
    if args[7] <= x < args[0]*args[6] + args[7]:
        return potencial_repetido(x-args[7], args)
    if args[0]*args[6] + args[7] < x:
        return 0

def list_fun_g(x):

    x = int(x)
    list_fun = [perfil_potencial_cuadrado, perfil_potencial_cuadrado,
perfil_potencial_cosenoidal, perfil_potencial_modelo, perfil_potencial_Coulomb,
perfil_potencial_Coulomb_2, supercelda]

    return list_fun[x]

#Parametros adicionales
#elegir tipo de modelo 4 modelos: cuadrado explicito, cuadrado, cosenoidal y
tesis
#numero de pasos analisis de fourier
#opcion graficar potencial

```

```
# analisis de niveles o solo evaluacion de puntos extremos
# opcion de graficar niveles de energia - cantidad de puntos usados
```

```
dic_flag = {'supercelda':0, 'solo extremos':0, 'graficar potencial':0, 'graficar
bandas':0}
```

```
if flag_preg == False:
    flag_fun = 'ninguno'
    flag_es = 'ninguno'
```

```
if flag_fun == 'ninguno':
    model_f = dic_fun['potencial propuesto']
else:
    t_fun_key = ""
    for key in dic_fun.keys():
        t_fun_key = t_fun_key + key + ', '
    t_fun_key = t_fun_key[:-2]
    model_f_key = input('Escoja un perfil de potencial. Los perfiles son ' +
t_fun_key + '. ')
    if model_f_key in dic_fun:
        model_f = dic_fun[model_f_key]
    else:
        key_flag = False
        while key_flag == False:
            model_f_key = input('Ese potencial no se ha encontrado. Escoja un
perfil de potencial. Los perfiles son ' + t_fun_key + '. ')
            if model_f_key in dic_fun:
                model_f = dic_fun[model_f_key]
                key_flag = True
```

```

if flag_es == 'ninguno':
    dic_flag['supercelda'] = 6
    dic_flag['solo extremos'] = 1
elif model_f == 0:
    dic_flag['supercelda'] = 0
    dic_flag['solo extremos'] = input('¿Desea solo evaluar los extremos de las
bandas de energía? ')
else:
    dic_flag['supercelda'] = input('¿Desea usar la supercelda? ')
    dic_flag['solo extremos'] = input('¿Desea solo evaluar los extremos de las
bandas de energía? ')

```

```

Params.append(model_f)

```

```

Params.append(dic_flag['supercelda'])

```

```

def integrando_r(x, Params):

```

```

    return list_fun_g(Params[11])(x,
Params)*complex(comp_exp(Params[len(Params)-1]*x*1j)).real

```

```

def integrando_i(x, Params):

```

```

    return list_fun_g(Params[11])(x,
Params)*complex(comp_exp(Params[len(Params)-1]*x*1j)).imag

```

```

def fourier_expansion(Params, q):

```

```

inv = 2*math.pi/Params[8] #vector de la red reciproca
n = int(Params[9])

def coef_a(Params, s):
    return -36*10/Params[8]*sinc(s*10/2)

def coef(Params, s):

    Params.append(s)

    re = scipy.integrate.quad(integrando_r, 0, Params[8], args =
(list(Params)))[0]
    im = scipy.integrate.quad(integrando_i, 0, Params[8], args =
(list(Params)))[0]
    return re + im*1j

coef_l = [coef_a, coef, coef, coef, coef, coef]
Coefs = numpy.zeros((2*n+1,2*n+1),dtype=numpy.complex_)

for i_1 in range(-n, n+1):

    Coefs[i_1][i_1] = math.pow(Params[8]*(q + inv*i_1),2) +
coef_l[Params[10]](list(Params), inv*i_1)

    for i_2 in range(-n, n+1):
        if i_1 < i_2:
            Coefs[i_1][i_2] = coef_l[Params[10]](list(Params), (i_2-i_1)*inv)

for i_1 in range(-n, n+1):

```

```

    for i_2 in range(-n, n+1):
        if i_1 > i_2:
            Coefs[i_1][i_2] = Coefs[i_2][i_1].conjugate()

    return scipy.linalg.eigh(Coefs)

if flag_preg_p == True:
    dic_flag['graficar potencial'] = input('¿Desea graficar el perfil del potencial? ')
    if dic_flag['graficar potencial'] != 0:
        p_p = int(input('Dé los puntos de precisión: '))
    else:
        dic_flag['graficar potencial'] = 0

if flag_preg_n == True:
    dic_flag['graficar bandas'] = input('¿Desea graficar las bandas de energía? ')
    if dic_flag['graficar bandas'] != 0:
        p = int(input('Dé los puntos de precisión: '))
        step = math.pi/(Params[8]*(p + 1)) #desplazamiento en el eje x - numero
de onda
    else:
        dic_flag['graficar bandas'] = 0
        p = 4
        step = math.pi/(Params[8]*(p + 1)) #desplazamiento en el eje x - numero de
onda

if flag_FN == False:

```

```

Num_ond = []
Bands = []

for j in range(p + 2):

    Num_ond.append(step*j)
    en = []
    ev, eg = fourier_expansion(Params, step*j)

    for i_3 in range(len(ev)):
        en.append(ev[i_3]/math.pow(Params[8], 2))

    Bands.append(en)

Band = numpy.array(Bands).transpose()

#print(Band)

fig_b, ax_b = plot.subplots()

ax_b.plot(Num_ond, Bands)
ax_b.set_title('Bandas de energía a ' + str(Params[4]) + ' V/nm.')
ax_b.set_xlabel('Número de onda')
ax_b.set_ylabel('Nivel de energia eV')
plot.show()

del ax_b
del fig_b

lim_int = []
for i in range(len(Band)-1):

```

```

lim_int.append([min(Band[i]), max(Band[i])])

# p_p = 200
# step_p = Params[0]/(p_p)

# X = []
# Pot = []

# for l in range(p_p):
#     X.append(step_p*l)
#     Pot.append(list_fun_g(Params[10])(step_p*l, Params))

# fig_p, ax_p = plot.subplots()

# ax_p.plot(X, Pot)
# ax_p.set_title('Potencial con '+ str(Params[4]) + ' V/nm.')
# ax_p.set_xlabel('Posición nm')
# ax_p.set_ylabel('Perfil del potencial eV')
# plot.show()

# del ax_p
# del fig_p

# XX = []
# Pot_2 = []
# step_pp = Params[8]/(p_p)

# for l in range(p_p):

```

```

# XX.append(step_pp*I)
# Pot_2.append(list_fun_g(Params[11])(step_pp*I, Params))

# fig_pp, ax_pp = plot.subplots()

# ax_pp.plot(XX, Pot_2)
# ax_pp.set_title('Potencial con '+ str(Params[4]) + ' V/nm.')
# ax_pp.set_xlabel('Posición nm')
# ax_pp.set_ylabel('Perfil del potencial eV')
# plot.show()

# del ax_pp
# del fig_pp

def integrando_t(x, Params):

    E = Params[len(Params)-1]

    return math.pow(max(list_fun_g(Params[10])(x, list(Params)) - E, 0), 0.5)

def transm(E, Params):

    Params.append(E)
    return math.exp(-2*scipy.integrate.quad(integrando_t, 10, Params[0],
list(Params))[0]/math.pow(glob_cons1(), 0.5))

```

```

def transm_F(E, Params):

    return 4*math.pow(max(E*(Params[5]-E), 0), 0.5)*math.exp(-
4*glob_kappa()*math.pow(max(Params[5]-E, 0), 1.5)/(3*Params[4]))/Params[5]

def transm_S(E, Params, Intvs, Cons = [glob_beta(), glob_fe()]):

    flag_car = False

    for i in range(len(Intvs)):
        if Intvs[i][0] <= E <= Intvs[i][1]:
            flag_car = True
            break

    if flag_car == True:
        return transm(E, list(Params))
    else:
        return 0

def transm_Z(E, Params):

    def cap_contr(n, Params):

        def trans_cons(x):
            return math.pow(x/glob_cons1(), 1/3)

        def eta_1(x, Params):

            E = Params[-5]

```

```

F_2 = Params[4]/Params[-3]
aff_1 = Params[-2]
aff_2 = Params[-1]

return trans_cons(F_2)*(x + (E - Params[5] + aff_1)/F_2)

def eta_2(x, Params):

    E = Params[-5]
    F_2 = Params[4]/Params[-3]
    aff_1 = Params[-2]
    aff_2 = Params[-1]
    dis = Params[-4]

    return trans_cons(Params[4])*(x + (E - Params[5] + (Params[4] -
F_2)*dis)/Params[4])

#print(Params)
E = Params[12]
#print(E)
l = glob_iad()/2
k_1 = math.pow(max(E/glob_cons1(), 0), 0.5)
k_2 = math.pow(max((E + glob_fe())/glob_cons1(), 0), 0.5)

dis = 0
eps_d = 1
aff_1 = 0
aff_2 = 0

eps = math.pow(eps_d, 1/3)
F_2 = Params[4]/eps_d

```

```
dzeta = trans_cons(F_2)*1j/k_1
```

```
Ext = [dis, eps_d, aff_1, aff_2]
```

```
Params.extend(Ext)
```

```
r_2 = k_2 / k_1
```

```
r_1 = k_1 / k_2
```

```
u_1 = comp_exp(k_1*1*1j)
```

```
u_2 = comp_exp(k_2*1*1j)
```

```
M = numpy.dot([[0.5, 0.5*r_2], [0.5, -0.5*r_2]], numpy.dot([[u_2, 1/u_2],  
[u_2, -1/u_2]], numpy.dot([[0.5, 0.5*r_1], [0.5, -0.5*r_1]], [[u_1, 1/u_1], [u_1, -  
1/u_1]])))
```

```
#M = [[u_1*u_2*(1+r_2)*(1+r_1) + u_1*(1-r_2)*(1-r_1)/u_2,  
u_2*(1+r_2)*(1-r_1) + (1-r_2)*(1+r_1)/(u_1*u_2)], [u_1*u_2*(1-r_2)*(1+r_1) +  
u_1*(1+r_2)*(1-r_1)/u_2, (1+r_2)*(1+r_1)/(u_1*u_2) + u_2*(1-r_2)*(1-r_1)/u_2]]
```

```
N = numpy.linalg.matrix_power(M, n)
```

```
a_1, a__1, b_1, b__1 = scipy.special.airy(eta_1(0, list(Params)))
```

```
a_2, a__2, b_2, b__2 = scipy.special.airy(eta_1(dis, list(Params)))
```

```
a_3, a__3, b_3, b__3 = scipy.special.airy(eta_2(dis, list(Params)))
```

```
Ec = [[a_1, b_1, -N[0][1] - N[1][1], 0], [dzeta*a__1, dzeta*b__1, -N[0][1] +  
N[1][1], 0], [-a_2, -b_2, 0, a_3 - b_3*1j], [-a__2, -b__2, 0, eps*(a__3 - b__3*1j)]]
```

```
Ec_T = [[a_1, b_1, -N[0][1] - N[1][1], N[0][0]], [dzeta*a__1, dzeta*b__1, -  
N[0][1] + N[1][1], N[0][0] - N[1][0]], [-a_2, -b_2, 0, 0], [-a__2, -b__2, 0, 0]]
```

```
T_3 = numpy.linalg.det(Ec_T)/numpy.linalg.det(Ec)
```

$$T_3 = \frac{2}{\pi((a_3 - b_3 \cdot 1j)(a_1 \cdot b_2 - b_1 \cdot a_2 + dzeta(a_1 \cdot b_2 - b_1 \cdot a_2)) - eps(a_3 - b_3 \cdot 1j)(a_1 \cdot b_2 - b_1 \cdot a_2 + dzeta(a_1 \cdot b_2 - b_1 \cdot a_2)))}$$

```
return trans_cons(Params[4])*math.pow(abs(T_3), 2)/(math.pi*k_1)
```

```
Params.append(E)
```

```
total = 0
```

```
for i in range(20):
```

```
    #print(Params)
```

```
    total = total + cap_contr(i, list(Params))
```

```
return total/20
```

```
def log_esp(x):
```

```
    return math.log(1 + math.exp(x))
```

```
def corriente(Params, Intvs, Cons = [glob_beta(), glob_fe()]):
```

```
    def curr_d(E, Params):
```

```
        Cons = Params[-2:]
```

```
        Params = Params[:-2]
```

```
        return transm(E, list(Params))*Cons[0]*log_esp((Cons[1]-E)/Cons[0])
```

```
    Params.extend(Cons)
```

```

curr = 0
for i in range(len(Intvs)-1):
    if Intvs[i][0] < Cons[1]:
        curr = curr + scipy.integrate.quad(curr_d, Intvs[i][0], min(Intvs[i][1],
Cons[1]), list(Params))[0]

```

```

return glob_cons2()*curr

```

```

def corriente_F(Params, Cons = [glob_beta(), glob_fe()]):

```

```

    def curr_d_F(E, Params):

```

```

        Cons = Params[-2:]

```

```

        Params = Params[:-2]

```

```

        return transm_F(E, list(Params))*(Cons[1]-E)

```

```

    Params.extend(Cons)

```

```

    return glob_cons2_F()*scipy.integrate.quad(curr_d_F, 0, min(Cons[1],
Params[5]), list(Params))[0]

```

```

def corriente_F_2(Params, Cons = [glob_beta(), glob_fe()]):

```

```

    def curr_d_F(E, Params):

```

```

        Cons = Params[-2:]

```

```

        Params = Params[:-2]

```

```

        return transm_F(E, list(Params))*Cons[0]*log_esp((Cons[1]-E)/Cons[0])

Params.extend(Cons)

    return glob_cons2_F()*scipy.integrate.quad(curr_d_F, 0, Params[5],
list(Params))[0]

def corriente_Z(Params, Cons = [glob_beta(), glob_fe()]):

    def curr_Z(E, Params):

        Cons = Params[-2:]
        Params = Params[:-2]

        return transm_Z(E, list(Params))*Cons[0]*log_esp((Cons[1]-E)/Cons[0])

Params.extend(Cons)

    return glob_cons2_F()*scipy.integrate.quad(curr_Z, 0.1, Params[5],
list(Params))[0]

if flag_FN == True:

    #return transm_Z(EEn, Params)
    #return corriente_F(Params), corriente_F_2(Params), corriente_Z(Params)
    return corriente_Z(Params)
else:
    return transm_F(EEn, Params), transm(EEn, Params), transm_Z(EEn,
Params), transm_S(EEn, Params, lim_int)

```

```
#return corriente(Params, lim_int)

# Indep = [4]

Indep = [4, 5]

#expresión analítica de F-N
# p_vol = 50
# min_vol = 0.01
# max_vol = 1
# step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol

#expresión analítica F-N prueba larga
# p_vol = 4999
# min_vol = 0.0001
# max_vol = 0.05
# step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol

#método numérico prueba corta
# p_vol = 17
# min_vol = 3
# max_vol = 7
# step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol

#método numérico prueba larga
# p_vol = 50
# min_vol = 0.01
# max_vol = 20
# step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol
```

#método numérico prueba media - regiones 2

p_vol = 23

min_vol = 0.4

max_vol = 5

step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol

#método numérico prueba oro 1

p_vol = 18

min_vol = 0.4

max_vol = 4

step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol

#método numérico prueba oro 1 campos bajos

p_vol = 18

min_vol = 0.04

max_vol = 0.4

step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol

#método numérico bidimensional prueba FN

p_vol = 1000

min_vol = 0

max_vol = 100

step_vol = (max_vol - min_vol)/p_vol

p_wf = 99

min_wf = 0.1

max_wf = 10

step_wf = (max_wf - min_wf)/p_wf

Vol = []

Wf = []

```
# for i in range(p_vol):
#     Vol.append(min_vol + i*step_vol)

# for i in range(p_wf):
#     Wf.append(min_wf + i*step_wf)

#método numérico bidimensional prueba
Vol = []
Vol_low = [0.1*i for i in range(20)]
Vol_med = [2.0 + 0.4*i for i in range(20)]
Vol_high = [10.0 + 5*i for i in range(18)]

# print(type(Vol_low))

Vol.extend(Vol_low)
Vol.extend(Vol_med)
Vol.extend(Vol_high)

Wf = []
Wf_low = [0.1*i for i in range(10)]
Wf_med = [4.0 + 0.1*i for i in range(20)]

Wf.extend(Wf_low)
Wf.extend(Wf_med)

# probabilidades de tunelamiento
vol = 5
EEEn = [0.5*(i+1) for i in range(15)]
```

```

if len(Indep) == 0:

    #FN

    # Curr_FN_1 = numpy.zeros((len(Vol), len(Vol[0])))
    # Curr_FN_2 = numpy.zeros((len(Vol), len(Vol[0])))

    # #print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)

    # for i in range(len(Curr_FN_1)):
    #     for j in range(len(Curr_FN_1[i])):
    #         Curr_FN_1[i][j], Curr_FN_2[i][j] = program_t(Indep, [Vol[i][j], Wf[i][j]],
True)

    # #print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)

    # for i in range(len(Curr_FN_1)):
    #     for j in range(len(Curr_FN_1[i])):

    #         #print(str(Vol[i][j]) + " " + str(Wf[i][j]) + " " + str(Curr_FN_1[i][j]) + " " +
str(Curr_FN_2[i][j]) + "\n")
    #         f.write(str(Vol[i][j]) + " " + str(Wf[i][j]) + " " + str(Curr_FN_1[i][j]) + " " +
str(Curr_FN_2[i][j]) + "\n")

    #SC

    den_f = []
    den_w = []

```

```

den_m = []
den_s = []

#print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)

for i in range(len(EEn)):
    den_f_1, den_w_1, den_m_1, den_s_1 = program_t([4], [vol], False, EEn[i])
    den_f.append(den_f_1)
    den_w.append(den_w_1)
    den_m.append(den_m_1)
    den_s.append(den_s_1)
    #den_m.append(program_t([4], [vol], True, EEn[i]))

print(EEn, den_m)
#print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)

#pasar datos a archivo

f = open("probabilidad de tunelamiento.txt", "w+")

for i in range(len(EEn)):

    #print(str(Vol[i][j]) + " " + str(Wf[i][j]) + " " + str(Curr_FN_1[i][j]) + " " +
str(Curr_FN_2[i][j]) + "\n")
    #f.write(str(EEn[i]) + " " + str(den_m[i]) + "\n")
    f.write(str(EEn[i]) + " " + str(den_f[i]) + " " + str(den_w[i]) + " " + str(den_m[i])
+ " " + str(den_s[i]) + "\n")

f.close()

```

```
#método numérico función de trabajo
# p_wf = 10
# min_wf = 0
# max_wf = glob_wf()
# step_wf = (max_wf - min_wf)/p_wf
```

```
elif len(Indep) == 1:
```

```
    Vol = []
```

```
    inv_Vol = []
```

```
    Curr = []
```

```
    log_Curr = []
```

```
    for l in range(p_vol):
```

```
        Vol.append(step_vol*l + min_vol)
```

```
        Curr.append(program_t(Indep, [step_vol*l + min_vol], False))
```

```
        if Curr[l]*math.pow(step_vol*l + min_vol, -2) > 0:
```

```
            inv_Vol.append(1/(step_vol*l + min_vol))
```

```
            log_Curr.append(math.log(Curr[l]*math.pow(step_vol*l + min_vol, -2)))
```

```
Vol = Vol[1:]
```

```
Curr = Curr[1:]
```

```
fig, ax = plot.subplots()
```

```
ax.plot(Vol, Curr)
```

```
ax.set_title('Relación J a E')
```

```
ax.set_xlabel('Campo eléctrico externo V/L')
```

```
ax.set_ylabel('Corriente eléctrica A/L\u00b2')
```

```
plot.show()
```

```
print(Curr)
```

```
if len(inv_Vol) > 2:
```

```
    inv_Vol = inv_Vol[1:]
```

```
    log_Curr = log_Curr[1:]
```

```
    Inv_Vol = numpy.vstack([inv_Vol, numpy.ones(len(inv_Vol))]).T
```

```
    l_m, l_b = numpy.linalg.lstsq(numpy.vstack([inv_Vol,
numpy.ones(len(inv_Vol))]).T, log_Curr)[0]
```

```
    r_l = scipy.stats.pearsonr(inv_Vol, log_Curr)
```

```
fig_1, ax_1 = plot.subplots()
```

```

ax_1.plot(inv_Vol, log_Curr, 'o', markersize=9)
ax_1.plot(inv_Vol, list(numpy.asarray(inv_Vol)*I_m + I_b), 'r')

ax_1.set_title('Relacion linealizada')
ax_1.set_xlabel('Inverso del campo eléctrico externo')
ax_1.set_ylabel('Logaritmo de corriente eléctrica')
plot.show()

print(numpy.linalg.lstsq(numpy.vstack([inv_Vol,
numpy.ones(len(inv_Vol))]).T, log_Curr))

print(glob_C_F(), glob_k_F())
print(math.exp(I_b), -I_m)
print(r_I, 'R\u00b2 = ' + str(math.pow(r_I[0], 2)))

inv_Vol = inv_Vol[1:]
log_Curr = log_Curr[1:]

Inv_Vol = numpy.vstack([inv_Vol, numpy.ones(len(inv_Vol))]).T

I_m, I_b = numpy.linalg.lstsq(numpy.vstack([inv_Vol,
numpy.ones(len(inv_Vol))]).T, log_Curr)[0]

r_I = scipy.stats.pearsonr(inv_Vol, log_Curr)

fig_1, ax_1 = plot.subplots()

```

```

ax_1.plot(inv_Vol, log_Curr, 'o', markersize=9)
ax_1.plot(inv_Vol, list(numpy.asarray(inv_Vol)*I_m + I_b), 'r')

ax_1.set_title('Relacion linealizada')
ax_1.set_xlabel('Inverso del campo eléctrico externo')
ax_1.set_ylabel('Logaritmo de corriente eléctrica')
plot.show()

print(numpy.linalg.lstsq(numpy.vstack([inv_Vol,
numpy.ones(len(inv_Vol))]).T, log_Curr))

print(glob_C_F(), glob_k_F())
print(math.exp(I_b), -I_m)
print(r_I, 'R\u00b2 = ' + str(math.pow(r_I[0], 2)))

elif len(Indep) == 2:

#pasar datos a archivo

f = open(glob_name() + "2.txt", "w+")

Vol, Wf = numpy.meshgrid(Vol, Wf)

#FN

# Curr_FN_1 = numpy.zeros((len(Vol), len(Vol[0])))
# Curr_FN_2 = numpy.zeros((len(Vol), len(Vol[0])))

# #print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)

```

```
# for i in range(len(Curr_FN_1)):
#     for j in range(len(Curr_FN_1[i])):
#         Curr_FN_1[i][j], Curr_FN_2[i][j] = program_t(Indep, [Vol[i][j], Wf[i][j]],
True)
```

```
# #print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)
```

```
# for i in range(len(Curr_FN_1)):
#     for j in range(len(Curr_FN_1[i])):

#         #print(str(Vol[i][j]) + " " + str(Wf[i][j]) + " " + str(Curr_FN_1[i][j]) + " " +
str(Curr_FN_2[i][j]) + "\n")
#         f.write(str(Vol[i][j]) + " " + str(Wf[i][j]) + " " + str(Curr_FN_1[i][j]) + " " +
str(Curr_FN_2[i][j]) + "\n")
```

```
#SC
```

```
Curr_FN_1 = numpy.zeros((len(Vol), len(Vol[0])))
```

```
#print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)
```

```
for i in range(len(Curr_FN_1)):
    for j in range(len(Curr_FN_1[i])):
        Curr_FN_1[i][j] = program_t(Indep, [Vol[i][j], Wf[i][j]], True)
```

```
#print(Vol, "\n", Wf, "\n", Curr_FN_1, "\n", Curr_FN_2)
```

```
for i in range(len(Curr_FN_1)):
```

```

for j in range(len(Curr_FN_1[i])):

    #print(str(Vol[i][j]) + " " + str(Wf[i][j]) + " " + str(Curr_FN_1[i][j]) + " " +
str(Curr_FN_2[i][j]) + "\n")
    f.write(str(Vol[i][j]) + " " + str(Wf[i][j]) + " " + str(Curr_FN_1[i][j]) + "\n")

f.close()

#graficar datos pero de forma muy fea

# Vol = numpy.arange(min_vol, max_vol, step_vol)[1:]
# inv_Vol = []
# for l in Vol:
#     inv_Vol.append(1/l)
# Wf = numpy.arange(min_wf, max_wf, step_wf)
# Vol, Wf_1 = numpy.meshgrid(Vol, Wf)
# inv_Vol, Wf_2 = numpy.meshgrid(inv_Vol, Wf)
# Curr = numpy.zeros((len(Vol), len(Vol[0])))
# log_Curr = numpy.zeros((len(Vol), len(Vol[0])))

# for l in range(len(Vol)):
#     for ll in range(len(Vol[0])):

#         Curr[l][ll] = program_t(Indep, [Vol[l][ll], Wf_1[l][ll], False)

#         if Curr[l][ll] > 0:

```

```

#         log_Curr[I][II] = math.log(Curr[I][II]*math.pow(Vol[I][II], -2))

# print(Vol, Wf_1, Curr, log_Curr)

# fig_1 = plot.figure(figsize = plot.figaspect(1))

# # =====
# # First subplot
# # =====
# # set up the axes for the first plot
# ax_1 = fig_1.add_subplot(1, 1, 1, projection='3d')

# # plot a 3D surface like in the example mplot3d/surface3d_demo

# surf_1 = ax_1.plot_surface(Vol, Wf_1, Curr, rstride=1, cstride=1,
cmap=matp.cm.coolwarm, linewidth=0, antialiased = True)

# ax_1.set_title('Relación J a E')
# ax_1.set_xlabel('Campo eléctrico externo V/L')
# ax_1.set_ylabel('Función de trabajo eV')
# ax_1.set_zlabel('J A/L\u00b2')

# plot.show()

# fig_2 = plot.figure(figsize = plot.figaspect(1))

```

```
# # =====  
# # First subplot  
# # =====  
# # set up the axes for the first plot  
# ax_2 = fig_2.add_subplot(1, 1, 1, projection='3d')  
  
# # plot a 3D surface like in the example mplot3d/surface3d_demo  
  
# surf_2 = ax_2.plot_surface(inv_Vol, Wf_2, log_Curr, rstride=1, cstride=1,  
cmap=matp.cm.coolwarm, linewidth=0, antialiased = True)  
  
# ax_2.set_title('Relación linealizada')  
# ax_2.set_xlabel('Inverso del campo eléctrico externo')  
# ax_2.set_ylabel('Función de trabajo eV')  
# ax_2.set_zlabel('ln(J/V\u00b2)')  
  
# plot.show()  
  
# print(Curr)
```

Bibliografía.

1. Allen, M. & Tildesley, D. (2017). *Computer Simulation of Liquids*. (2° ed.) New York: Oxford University Press.
2. Ashcroft, N. Mermin, N. (1976). *Solid state physics*. Holt, Finehart and Winston, Inc.
3. Ashcroft, N. Mermin, N. (1976). The Drude Theory of Metals. In D. G. Crane (Ed.) *Solid state physics*. (pp. 1-28). Holt, Finehart and Winston, Inc.
4. Ashcroft, N. Mermin, N. (1976). The Sommerfeld Theory of Metals. In D. G. Crane (Ed.) *Solid state physics*. (pp. 29-56). Holt, Finehart and Winston, Inc.
5. Dressel, M. and Scheffler, M. (2006), Verifying the Drude response. *Ann. Phys.*, 15: 535-544. doi:[10.1002/andp.200510198](https://doi.org/10.1002/andp.200510198)
6. Fowler, R., Nordheim, L. (1928, mayo). Electron Emission in Intense Electric Fields. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, 119(781), 173-181. doi: 10.1098/rspa.1928.0091
7. Griffiths, D. Schroeter, D. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics*. (3° ed.) United Kingdom: Cambridge University Press.
8. Marion, J. & Heald, M. (1995). *Classical Electromagnetic Radiation*. (3° ed.) United States: Harcourt College Pub.
9. Millikan, R., & Lauritsen, C. (1928). Relations of Field-Currents to Thermionic-Currents. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 14(1), 45-49. Recuperado 11 de noviembre, 2020, from <http://www.jstor.org/stable/85519>
10. Modinos, A. (1984). *Field, Thermionic and Secondary Electron Emission Spectroscopy*. Plenum, New York.
11. Murphy, E. Good, R. (1956), Thermionic Emission, Field emission, and the Transition Region. *Phys. Rev.* 102, 1464-1473. doi: [10.1103/PhysRev.102.1464](https://doi.org/10.1103/PhysRev.102.1464)
12. Payne, M., Teter, M., Allan, D., Arias, T. and Joannopoulos, J. (1992, octubre). Iterative minimization techniques for ab initio total-energy

- calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Rev. Mod. Phys.* 64(4), 1045. doi: 10.1103/RevModPhys.64.1045
13. Purcell, E. (1965). A Model for Electrical Conduction. In *Electricity and Magnetism*. (pp. 117-122). McGraw-Hill.
 14. Purcell, E. (1965). Electrical Conductivity of Metals. In *Electricity and Magnetism*. (pp. 125-127). McGraw-Hill.
 15. Purcell, E. (1965). Variable Currents in Capacitors and Resistors. In *Electricity and Magnetism*. (pp. 138-140). McGraw-Hill.
 16. Purcell, E. (1965). Where Ohm's Law Fails. In *Electricity and Magnetism*. (pp. 123-124). McGraw-Hill.
 17. Ramos Mendieta, F. (s. f.) *Modos Electromagnéticos de Superficie en Cristales Fotónicos Uni – y Bi – Dimensionales*. [Tesis de doctorado no publicada]. INAOE.
 18. Sakurai, J. & Napolitano J. (1985). *Modern Quantum Mechanics*. (3° ed.) Portland: Book News, Inc.
 19. Simon, S. (2013). Electrons in Solids. In *The Oxford Solid State Basics*. (pp. 161-172). OXFORD University Press.
 20. Simon, S. (2013). Insulator, Semiconductor, or Metal. In *The Oxford Solid State Basics*. (pp. 173-182). OXFORD University Press.
 21. Yeh, P. (noviembre, 1988). *Optical Waves in Layered Media*. Hoboken: Wiley.
 22. Zhou, Y., Zhang, P. (December 30, 2020). Theory of field emission from dielectric coated surfaces. *Physical Review Research*, 2(043439), 1-10. 10.1103/PhysRevResearch.2.043439
 23. Zubair, M. Ang, Y. and Ang, L. (2018, mayo). Fractional Fowler-Nordheim Law for Emission from Rough Surface with Nonparabolic Energy Dispersion. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 65(6) 2089-2095. doi 10.1109/TED.2017.2786020