

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA
DEPARTAMENTO DE SEMICONDUTORES, INSTRUMENTOS E FOTÔNICA

SOBRE O TRATAMENTO WENTZEL-KRAMERS-BRILLOUIN (WKB)
APLICADO ÀS ASSIMETRIAS GEOMÉTRICAS
DA MICROSCOPIA DE TUNELAMENTO DE ELÉTRONS (MTE)

Autor: **Américo Carnevali Filho**
Engenheiro Eletricista - Modalidade Eletrônica
UNICAMP 1988

Orientador: **Vitor Baranauskas**

Dissertação apresentada à Faculdade de
Engenharia Elétrica da UNICAMP como
requisito parcial para a obtenção do
título de MESTRE EM ENGENHARIA
ELÉTRICA.

Fevereiro de 1992

Este exemplar corresponde à redação final da tese
defendida por AMÉRICO CARNEVALI FILHO
e aprovada pela Comissão
Ju'gadora em 25/02/92.

"Quando a ponta superior de um fio de cabelo é dividida em cem partes e novamente cada uma de tais partes é ainda uma vez dividida em cem partes, cada uma de tais partes é a medida da dimensão da alma espiritual."

Śvetāsvatara Upaniṣad (5.9). *

* Citado à p. 58 de:

A.C.B. Swami Prabhupāda, *Bhagavad-Gītā As It Is*, The Bhaktivedanta Book Trust, Los Angeles: 1976 (trad. port., São Paulo).

AGRADECIMENTOS

À Prof.^a Anne Corinna Gottberg, pelas sugestões bibliográficas e por vir prestigiar o nosso trabalho.

Ao Prof. Furio Damiani, pelas sugestões de bancada e bibliográficas, e por todo o apoio em todos os sentidos.

Ao Prof. Vitor Baranauskas, principalmente por tudo que fez muito além de sua mera obrigação profissional.

E muitas outras pessoas, que de um modo ou de outro tornaram possível ou apoiaram este trabalho.

Dedico este trabalho à minha família, claro, por muitos motivos. Em particular, à

Kasmin

CONTEÚDO:

CAPÍTULO I:

O MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO DE ELÉTRONS (MTE): TÓPICOS

I.1. INTRODUÇÃO.	1
I.2. O INSTRUMENTO.	6
I.2.1 O protótipo de MTE construído.	9
I.2.2 Esforços teóricos.	19

APÊNDICE AO CAPÍTULO I:

I.A) TABELAS DE DADOS EXPERIMENTAIS	26
-------------------------------------	----

CAPÍTULO II:

MODELO DE POTENCIAL E CAMPO ENTRE PONTA E AMOSTRA IDEAIS

II.1. INTRODUÇÃO.	29
II.2. CÁLCULO DO POTENCIAL.	30
II.2.1 Potencial no espaçamento túnel ($r = 0, -\eta < z < \eta$).	30
II.2.2 Potencial no espaço restante ($r \neq 0$).	32
II.3. CÁLCULO DO CAMPO ELÉTRICO.	38
II.3.1 Campo elétrico no espaçamento túnel ($r = 0, -\eta < z < \eta$).	39
II.3.2 Campo elétrico no espaço restante ($r \neq 0$).	40
II.4. COMENTÁRIOS.	41

APÊNDICES AO CAPÍTULO II:

II.A) CÁLCULO DA INTEGRAL DO TIPO EM (12):	45
II.B) PROVA DE QUE AS EQUAÇÕES DEDUZIDAS EM 2.2 E 2.1 SÃO COMPATÍVEIS	48
II.C) OBTENÇÃO DE UMA EXPRESSÃO ANALÍTICA PARA O TRAÇADO DAS EQUÍPOTENCIAIS	49

CAPÍTULO III:
APLICAÇÃO DO MODELO: CORRENTE WKB. CONCLUSÃO

III.1. INTRODUÇÃO.	57
III.2. O POÇO QUÂNTICO: ASSIMETRIAS NAS AUTOFUNÇÕES.	60
III.3. O ELÉTRON EM TUNELAMENTO.	64
III.3.1 Cálculo da expressão de corrente.	66
III.3.2 Expressão simplificada para a corrente WKB.	72

APÊNDICES AO CAPÍTULO III:

III.A) CÁLCULO DA INTEGRAL DE FASE (10) PELA FÓRMULA DE SIMMONS:	75
III.B) EQUAÇÕES DE CONEXÃO PARA O POÇO QUÂNTICO: DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES ARBITRÁRIAS.	77
III.C) SOLUÇÃO DAS INTEGRAIS PARA O CÁLCULO DA CORRENTE WKB	82
III.D) SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER PARA O POÇO QUÂNTICO	85

BIBLIOGRAFIA	88
--------------	----

RESUMO

Apresenta-se aqui a microscopia de tunelamento de elétrons (MTE) como resultado direto da mecânica ondulatória de Schrödinger. Discutem-se alguns resultados experimentais, seguidos de exemplos de esforços teóricos na área de MTE. Desenvolve-se então um modelo unidimensional simples para a energia potencial entre eletrodos ideais (ponta e amostra) de tunelamento. Tratando-se, de início, o problema como um poço de potencial infinito, mostra-se pelo método Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) que as assimetrias geométricas dos eletrodos de tunelamento se refletem na forma das autofunções. Calcula-se a corrente em função da distância intereletródica e uma maior simplificação da fórmula fornece uma expressão de corrente mais adequada.

ABSTRACT

Scanning tunneling microscopy (STM) is presented here as a direct result of the Schrödinger wave mechanics. A few experimental results are discussed, followed by examples of some theoretical efforts in the area of STM. A simple unidimensional model for the potential energy between ideal tunnel electrodes (tip and sample) is then developed. Treating the problem first as an infinite potential well, geometrical asymmetries of the tunnel electrodes is shown by the Wentzel-Kramers-Brillouin method (WKB) to reflect in the shape of the eigenfunctions. The WKB current is calculated as a function of the distance between the electrodes and further simplification of the formula renders a current expression in a more suitable form.

CAPÍTULO I

O MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO DE ELÉTRONS (MTE): TÓPICOS

Sinopse. Apresenta-se aqui a *microscopia de tunelamento de elétrons* (MTE*) de modo conciso, como aplicação direta dos princípios mais básicos da mecânica ondulatória. Seguem-se comentários sobre a história do desenvolvimento do MTE e seu enfoque instrumental (incluindo tópicos de projeto e aplicações). Esta descrição do instrumento motiva uma breve revisão de parte da literatura disponível, com ênfase nos esforços teóricos.

1. INTRODUÇÃO.

Uma peculiaridade da teoria quântica é seu posicionamento frente às concepções clássicas. Conforme Landau & Lifshitz (1985: 12, 13), costuma-se esperar de uma teoria mais abrangente, uma independência formal que, num caso limite, conduza a uma teoria mais restrita; contudo, a teoria quântica encontra, na clássica, também suas entidades fundamentais, além de seu caso limite.

Pode-se dizer que a teoria quântica não possui *objetos* próprios — desde que se entenda, por *objeto*, uma daquelas entidades (ou modelos) fundamentais que visam, em última análise, o direcionamento aplicativo da intuição; em particular, os exemplos típicos são os conceitos de *partícula* e de *onda*. Neste sentido, longe de criar seus próprios *objetos*, o esquema quântico adota-os do enfoque clássico, determinando-lhes contudo os limites e condições de validade, conforme a situação experimental.

Discussões importantes como a do *microscópio de Bohr* realçaram o significado fundamental do conceito de medição em física quântica, cf. Eisberg & Resnick (1986:97-112, esp. 99 e 110). Define-se *medição*, em Landau & Lifshitz (1985:13) como a *interação* entre um *objeto quântico* e um *objeto clássico* (i. e., um *objeto* que satisfaça a física clássica com suficiente precisão); chama-se *instrumento* a este objeto clássico.

* Doravante a sigla MTE designará, conforme o contexto, quer "microscópio de tunelamento de elétrons", quer "microscopia de tunelamento de elétrons", cf. Baranauskas (1989:57-58, 92 e 127); tratamento análogo ao da literatura internacional com respeito à sigla equivalente (em inglês) STM ("scanning tunneling microscope" ou "scanning tunneling microscopy"), cf. Binnig & Rohrer (1986:355).

Admite-se didaticamente a equivalência de dois formalismos quânticos (ou *imagens*)^{*}:

- (i) A formulação *matricial* ou *imagem* de Heisenberg, proposta em 1925 por Werner Karl Heisenberg (1901-1976), e desenvolvida posteriormente por Max Born (1882-1970) e Ernst Pascual Jordan (1902-) além do próprio Heisenberg; cf. Landau & Lifshitz (1985:46).
- (ii) E a *mecânica ondulatória*, ou *imagem* de Schrödinger, proposta por Erwin Schrödinger (1887-1961) em 1926. No mesmo ano, apresenta-se um esboço de demonstração da equivalência entre ambos os formalismos, em Schrödinger (1926b).

Além da complexidade do método de Heisenberg, adota-se aqui o enfoque ondulatório — como em Tipler (1981:173), Eisberg & Resnick (1986:335), Eisberg (1979:147), Landau & Lifshitz (1985: 54), etc. —, principalmente porque a imagem de Schrödinger permite, de modo simples e imediato, a apresentação e o desenvolvimento de todos os conceitos e discussões de interesse doravante.

Em 1923, Louis-Victor-Pierre-Raymond, (7.^o) duc de Broglie (1892-), propôs uma concepção complementar à da *natureza dual* da radiação eletromagnética, a saber: Do mesmo modo que as ondas eletromagnéticas apresentam um comportamento *corpúscular*, as *partículas materiais* apresentariam um comportamento *ondulatório*. Baseado nesta concepção, Schrödinger (1926a), com o fim de resolver o problema da *quantização de energia* do *átomo de hidrogênio* "não-relativístico e não-perturbado", cf. Schrödinger (1926a:361), postulou a equação que leva seu nome, sob a forma hoje conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo, que aqui se escreve como:

$$\nabla^2 \psi = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \psi, \quad (1)$$

onde *nabla ao quadrado* ou *nabla dois* (∇^2) representa o *operador de Laplace* ou *laplaciano*, que em coordenadas cartesianas é dado por:

* Discute-se a relação entre ambas as imagens em Cohen-Tannoudji et al. (1977:312-4), Landau & Lifshitz (1985:46), Dirac (1966:1-8), etc. Apresentando o argumento usualmente aplicado para estabelecer a referida equivalência, Dirac (1966:3-4) porém questiona a validade deste argumento, baseado em que nem sempre se poderiam aplicar ambos os formalismos ao mesmo caso; i. e., as duas imagens não teriam exatamente o mesmo domínio de aplicação ou validade.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (1a)$$

m é a massa da partícula, dotada de energia total E , sujeita à influência de um campo estacionário, descrito pela energia potencial $V = V(x, y, z)$, $\hbar = h/(2\pi)$ é a constante de Planck normalizada (h é a constante de Planck), e $\psi = \psi(x, y, z)$ é a chamada autofunção, que descreve o comportamento espacial da onda estacionária associada à partícula, como se discute adiante.

Por comodidade, pode-se representar o conjunto de coordenadas de um vetor em uma base ortonormal simplesmente por τ . No caso mais geral, pois, a energia potencial varia no tempo, $V(\tau, t)$, e a chamada equação de Schrödinger (dependente do tempo)* assume a forma:

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

onde $\Psi = \Psi(\tau, t)$ é a chamada função de onda (que descreve o comportamento espaço-temporal da onda associada à partícula). Se a energia potencial for independente do tempo, $V = V(\tau)$, pode-se mostrar que a função de onda Ψ é separável em um fator funcional estacionário $\psi = \psi(\tau)$, a autofunção de (1), e um fator funcional temporal (dependente do tempo t) $\chi = \chi(t)$:

$$\Psi = \Psi(\tau, t) = \psi(\tau) \chi(t) = \psi \chi, \quad (3)$$

onde ψ satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo (1) e χ apresenta um comportamento exponencial complexo do tipo:

$$\chi = \chi(t) = e^{-iEt/\hbar}, \quad (4)$$

e a equação (2) se reduz à equação (1), que é o caso de interesse daqui por diante. O tratamento mais detalhado de ambas é comum à maioria dos manuais: Cohen-Tannoudji *et al.* (1977:32-3), Tipler (1981:174-6), Landau & Lifshitz (1985:69), etc.

De forma alternativa exprimem-se (1) e (2), respectivamente, por:

* Curioso notar que a equação de Schrödinger dependente do tempo só surgiu do tratamento de perturbações dependentes do tempo em Schroedinger (1926C:112), o quarto artigo da série iniciada por Schroedinger (1926a). Cf. Scott (1967:60).

$$\mathcal{H} \psi = E \psi, \tag{5a}$$

$$\mathcal{H} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi, \tag{5b}$$

onde \mathcal{H} é o *operador de Hamilton* ou *hamiltoniano* — antropônimo de Sir William Rowan Hamilton (1805-1865) — que, expresso em termos do operador momento $\mathcal{P} = -i\hbar\partial/\partial\tau$ e da energia potencial V (em função da posição τ), é dado por:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + V(\tau) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\tau), \tag{6}$$

cf. Landau & Lifshitz (1985:42-5), por exemplo.

A autofunção ψ , se for real, normalizada por:

$$\int \psi^2 d\tau = 1, \tag{7}$$

cf. Schrödinger (1926a:376), insere-se hoje em uma interpretação estatística mais geral, devida a Max Born. Sendo ψ , em geral, uma função complexa, fazendo-se $\psi^* \psi = |\psi|^2$ (onde ψ^* é a função complexa conjugada de ψ) em (7) acima — para o tratamento de funções complexas, v. Churchill (1981), por exemplo —, interpreta-se $\psi^* \psi d\tau$ como a *densidade de probabilidade* de se encontrar a partícula em $d\tau$, donde a integração desta quantidade, em todo o espaço em que for possível encontrar a partícula, resulta na unidade. Ou seja, a partícula deve encontrar-se em algum lugar do espaço (e no caso dependente do tempo, em algum instante).

Note-se que a equação (1) possui solução quer numa região (dita *classicamente permitida*) onde $E > V$, quer numa região (dita *classicamente proibida* ou *de barreira*) onde $E < V$. Esta "visão embaçada" da realidade a nível atômico resultou numa previsão, a que Duke (1969:1) se referiu como "um dos primeiros triunfos da mecânica ondulatória de Schrödinger", a definição do conceito de *tunelamento* ou *efeito túnel*: Há uma *probabilidade não-nula* de uma partícula ser transmitida ou *tunelar*, através de uma região de barreira situada entre duas regiões classicamente permitidas.

O comportamento da partícula na região de barreira só pode, pois, ser interpretado sob um ponto de vista ondulatório, cf. Baranauskas (1989:57), Zuffo (1976:208). O efeito túnel é *mensurável* quer devido à suficiente próxi-

midade entre dois eletrodos (regiões classicamente permitidas), quer devido à aplicação de um campo elétrico externo suficientemente intenso. Neste último caso, uma das regiões classicamente permitidas pode ser o vácuo, e o fenômeno é mais apropriadamente chamado *emissão de campo*, cf. Charbonnier *et al.* (1967:39-40).

Duke (1969:1) informa que, historicamente, a primeira aplicação do efeito túnel foi o tratamento da *autoionização* do átomo de hidrogênio em estados excitados por um intenso campo elétrico homogêneo (constante), por Oppenheimer (1928:74-81). Subseqüentemente, seguiram-se aplicações notáveis do efeito, dentre as quais se destacam abaixo algumas das mais relacionadas ao presente tema:

- O tunelamento de partículas α , tratado em 1928 por George Gamow (1904-1968) e, independentemente (1929), por Edward Uhler Condon (1902-1974) e Ronald W. Gurney. Cf. Duke (1969:1), Mukhin (1987: 188), Eisberg & Resnick (1986:267), Tipler (1981:196).
- Em 1937, Erwin Wilhelm Müller (1911-1977) desenvolve o microscópio de emissão de campo (MEC), cf. Müller (1938), em que os elétrons de uma ponta ou agulha, extremamente fina, de tungstênio (a amostra, região classicamente permitida) tunelam através da barreira de superfície em direção ao "vácuo" — nessa época, nem tanto, cf. Becker (1951) — (uma segunda região classicamente permitida) de um tubo de raios catódicos (TRC), devido ao rebaixamento da energia potencial provocado por um intenso campo elétrico. Esta deformação do nível de vácuo fora previamente modelada por uma *barreira triangular*, por Fowler & Nordheim (1928). Uma variante deste instrumento, o microscópio de campo iônico (MCI) de Müller (1951), utiliza um TRC contendo hélio em baixa pressão — originalmente hidrogênio, cf. Müller (1951:138) —, de modo que a aplicação de um campo elétrico intenso, com polarização positiva na ponta, induz o tunelamento de elétrons dos átomos de hélio (em baixa pressão no TRC) situados em certas posições atômicas da ponta; os íons de hélio, devido ao campo, são acelerados em direção à tela. O MCI forneceu as primeiras imagens atômicas, cf. Golovchenko (1986). Sua principal desvantagem é que as altas correntes de campo restringem sua aplicação a amostras de metais refratários, como platina ou molibdênio, além de tungstênio.

- O conhecido *diódo túnel*, ou *dispositivo de Esaki* — antropônimo de seu inventor, Leo Esaki (1925-) —, em que o tunelamento ocorre entre os estados permitidos de uma *junção semicondutora degenerada*. Bons tratamentos, a nível didático, deste tópico encontram-se em Eisberg & Resnick (1986:596-9), Zuffo (1976:207-11), Sze (1981:516-36).

2. O INSTRUMENTO.

De certo modo invertendo o conceito do MCI, no sentido de que a ponta não coincidia com a amostra, Young *et al.* (1971, 1972) desenvolveram um instrumento, o *topografiner*, destinado a aplicações topográficas (medições tridimensionais de superfícies) de amostras condutoras em geral, tendo sido utilizado no primeiro experimento de efeito túnel no vácuo, cf. Young *et al.* (1971).

Dotado de um parafuso micrométrico diferencial, destinado ao ajuste grosso da distância z entre uma ponta de MCI e a amostra, até que esta se situasse ao alcance da faixa de expansão/contração de um cursor piezelétrico — constituído de uma pilha de cinco discos de cerâmica piezelétrica eletricamente conectados em seqüência —, o *topografiner* podia varrer a amostra em duas outras direções (x e y) ortogonais a z , por meio de dois outros piezocursors, cilíndricos.

Em condições normais de operação — emissão de campo, compatível com a teoria de Fowler & Nordheim (1928) tratando-se a ponta pelo modelo de ponta hiperbólica de Russel (1962), cf. Young *et al.* (1972:1006-8) —, sua resolução vertical foi estimada como da ordem de $\sim 30 \text{ \AA}$ e, a horizontal, $\sim 4000 \text{ \AA}$, cf. Young *et al.* (1972:1003-5). Em ambiente de alto vácuo, aproximando-se ponta e amostra até uma distância estimada em cerca de $\sim 30 \text{ \AA}$, o desempenho no modo de operação de tunelamento metal-vácuo-metal (MVM) atingia uma resolução vertical de $\sim 3 \text{ \AA}$. Surpreendentemente, no modo MVM de operação, os autores não efetuaram varredura, limitando-se o movimento piezelétrico à direção z , cf. Young *et al.* (1971; 1972:1008-11).

Binnig & Rohrer (1987:615-6) mais tarde ponderaram que bastava combinar (ainda que apenas mentalmente) a *varredura* com o *tunelamento* no vácuo, para que os projetistas do *topografiner* chegassem ao conceito de *microscopia de tunelamento de elétrons*, como o fizeram, cerca de uma década depois, Gerd Binnig, Heinrich Rohrer e colaboradores.

Do ponto de vista experimental, Binnig & Rohrer (1987:616-7) destacam, como uma das diferenças entre o *topografiner* e o MTE, a distância z entre ponta e amostra, muito maior no primeiro; além disso, acrescentam depois, pontas longas e finas — note-se que é este o caso da ponta do MCI e, pois, do *topografiner* — são extremamente sensíveis a vibrações e suscetíveis de excitação térmica. Para explicar por que o *topografiner* não atingira resolução atômica como o MTE, Kuk & Silverman (1989:165-6) aventam duas hipóteses: isolamento insuficiente de vibrações e a grande distância entre ponta e amostra (da ordem de $\sim 100\text{-}1000 \text{ \AA}$ no *topografiner*, contra $\sim 10 \text{ \AA}$ no MTE). Além disso, pode ser que tenha alguma importância o fato de que se obtinha (no *topografiner*) maior sensibilidade de deflexão nos piezocursosores de varredura x e y , em relação a z , às custas de um sensível aumento na histerese, cf. Young *et al.* (1972:1000).

Em contraste com os experimentos pioneiros de Young *et al.* (1971), que estudaram a característica corrente \times voltagem na região de emissão de campo (chamada de Fowler-Nordheim), na região de tunelamento MVM e na região intermediária, Binnig *et al.* (1982 *a,b*) efetuaram medições diretas da dependência exponencial da corrente de tunelamento em relação à distância intereletródica s (entre uma ponta de tungstênio e uma amostra de platina), com resolução de cerca de $\sim 0,2 \text{ \AA}$, obtida graças a um sistema de isolamento de vibrações eficaz, ainda que muito complicado, pois utilizava inclusive *levitação magnética* da unidade de tunelamento — ainda não se falava em "microscópio" em Binnig *et al.* (1982a). Para tanto, a unidade era montada sobre um conjunto de ímãs permanentes, o conjunto levitando acima de uma calota supercondutora de chumbo, resfriada por hélio líquido, cf. Binnig *et al.* (1982a:2075; *b*:178). Um aspecto importante deste trabalho é, sem dúvida, a especificação de critérios para assegurar que o experimento se tratava de efeito túnel e que outras contribuições mais prováveis poderiam ser excluídas, na interpretação das curvas da resistência de tunelamento $R(s)$ em função da distância intereletródica (ou espaçamento) s , cf. Binnig *et al.* (1982a:2076-7):

- (i) A baixa tensão U_T de polarização intereletródica ($q_e U_T \ll \phi$, onde q_e é a unidade de carga eletrônica e ϕ é a função de trabalho da amostra) excluía a possibilidade de emissão de campo.
- (ii) Sendo as energias de ionização consideravelmente maiores que ϕ (portanto, os estados eletrônicos dos átomos situam-se abaixo do nível de Fermi dos eletrodos E_F), podia-se excluir a possibilidade de corrente iônica.

- (iii) O comportamento exponencial das curvas $R(s) \times s$ apresentava desvios espúrios, para grandes valores de s no caso de eletrodos insuficientemente limpos, que os autores atribuíam a contribuições de elétrons termicamente excitados.
- (iv) A reprodutibilidade e ausência de histerese nas curvas $R(s) \times s$, permitiam excluir a possibilidade de um (mau) contacto (rebarbas ou camadas de contaminantes) entre os eletrodos; quando estes acidentalmente se tocavam, $R(s)$ apresentava descontinuidades não reprodutíveis, etc.

Com isto, Binnig *et al.* (1982a:2077) concluíram afirmando a exeqüibilidade técnica do tunelamento no vácuo à temperatura ambiente e sem necessidade de *ultravácuo*.

A expressão "scanning tunneling microscopy" registra-se já em Binnig *et al.* (1982b:179) — artigo que é uma espécie de extensão de Binnig *et al.* (1982a) —, e as primeiras imagens em *escala atômica* de monodegraus da superfície (110) de CaIrSn_4 e Au foram publicadas em Binnig *et al.* (1982c). Em Binnig & Rohrer (1982) inclui-se a primeira revisão dos aspectos técnicos do MTE, com o equipamento já em sua segunda geração — em que se substituíam o sistema de levitação a supercondutor, cf. Binnig & Rohrer (1982:728), utilizado apenas por três meses porém citado durante anos, como revelam Binnig & Rohrer (1987:619) —, as famosas imagens do Si (111)(7×7), uma breve discussão do tunelamento ressonante e uma estimativa da resolução do MTE comparada à de outros microscópios.

Desde então, abriu-se todo um leque de desenvolvimentos instrumentais, quer em direção a instrumentos para ambientes diversos — como o dispositivo para inserção em um frasco de Dewar, para operação em temperaturas do hélio líquido, desenvolvido por Smith & Binnig (1986) —, quer em direção a unidades de MTE cada vez mais simples e menores, cf. Binnig & Rohrer (1987:623). Relatos da seqüência de gerações de unidades de MTE desenvolvidas por Binnig, Rohrer e colaboradores no laboratório da IBM de Zürich, encontram-se em Binnig & Rohrer (1986:358-60) e em Gerber *et al.* (1986:221-2).

Importa acrescentar que, segundo informam Binnig & Rohrer (1987:624), desde 1984 se verificou a perfeita exeqüibilidade de resolução atômica em MTE no ar. A teoria cinética clássica da matéria sugere intuitivamente que eventuais interações entre o ar e os eletrodos do MTE (se estes não forem passíveis à adsorção das moléculas de ar, bem entendido) seriam desprezíveis, já

que a distância intermolecular de um gás ideal ($\sim 30 \text{ \AA}$) é bem menor que o caminho livre médio ($\sim 700 \text{ \AA}$), cf. Tipler (1981:66, 73). E ambos, muito maiores que o espaçamento intereletródico $s \sim 10 \text{ \AA}$ em um experimento típico de resolução atômica em MTE.

Dentre as revisões mais amplas, com escopos distintos, destacam-se: Kuk & Silverman (1989), de escopo instrumental, incluindo uma fascinante seção sobre o isolamento de vibrações (1989:167-9); Hansma & Tersoff (1987), de enfoque mais propriamente físico e escopo em aplicações à ciência de superfícies; Walmsley (1987) fornece uma interessante antologia dos trabalhos anteriores ao surgimento do MTE; além de Binnig & Rohrer (1982, 1986, 1987), etc.

Ao invés de uma ambiciosa revisão geral de todo o esforço mundial na área da MTE, parece mais adequado, aqui, uma despretensiosa descrição unicamente do protótipo que construímos no DSIF (o que permite uma discussão em bases mais concretas), seguido de um levantamento qualitativo, panorâmico e sumário de alguns dos tratamentos teóricos. Não é objetivo do presente texto a discussão das aplicações do instrumento às diversas superfícies.

2.1 O protótipo de MTE construído

A Fig. 1 ilustra a unidade de tunelamento que projetamos, de operação extremamente simples: Posicionando-se a amostra pelos parafusos micrométricos x e y (ajuste grosso), de movimento paralelo à superfície da amostra, procura-se cuidadosamente a corrente de tunelamento em algum ponto entre o circuito aberto e o curto-circuito, por meio do parafuso micrométrico z , de movimento ortogonal à superfície da amostra. Para evitar danos à amostra, um microscópio de observação (Fig. 2) auxilia o operador. Tocar levemente a ponta na amostra é considerado um método de preparo da ponta, por Binnig & Rohrer (1982:730, 1987:617).

O sistema de isolamento de vibrações consiste de granito (para o amortecimento de vibrações), uma camada de plástico macio (amortecimento de altas frequências) e, na prática, uma simples folha de papel à guisa de isolamento acústico rudimentar; ocasionalmente, um pedaço de papel alumínio se prestava ao isolamento eletromagnético. Este sistema simples foi estimulado pelo artigo de Stupian & Leung (1989), em que se descreve um sistema de isolamento de vibrações constituído de uma pilha de placas de bronze, intercaladas por espaçadores de Viton, inserindo-se o conjunto em uma caixa de papelão para o isolamento acústico.

Croqui de um microscópio de tunelamento

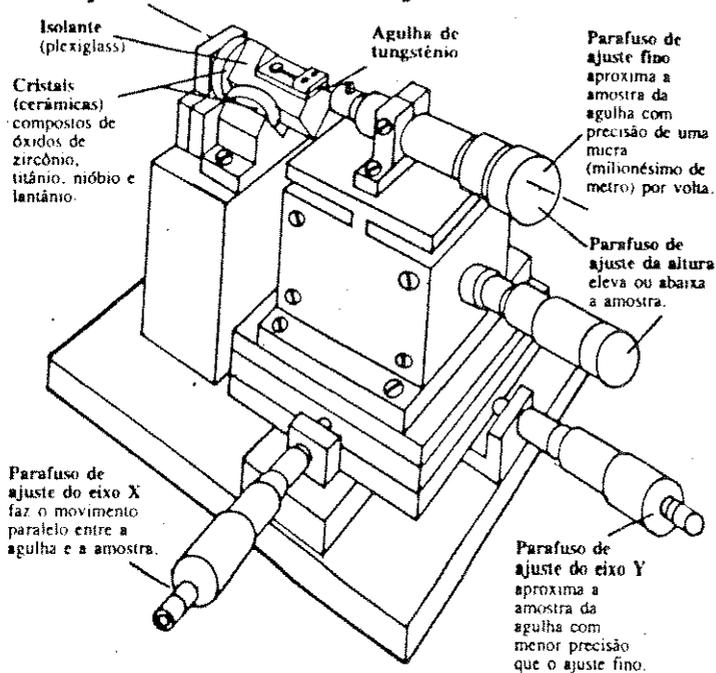


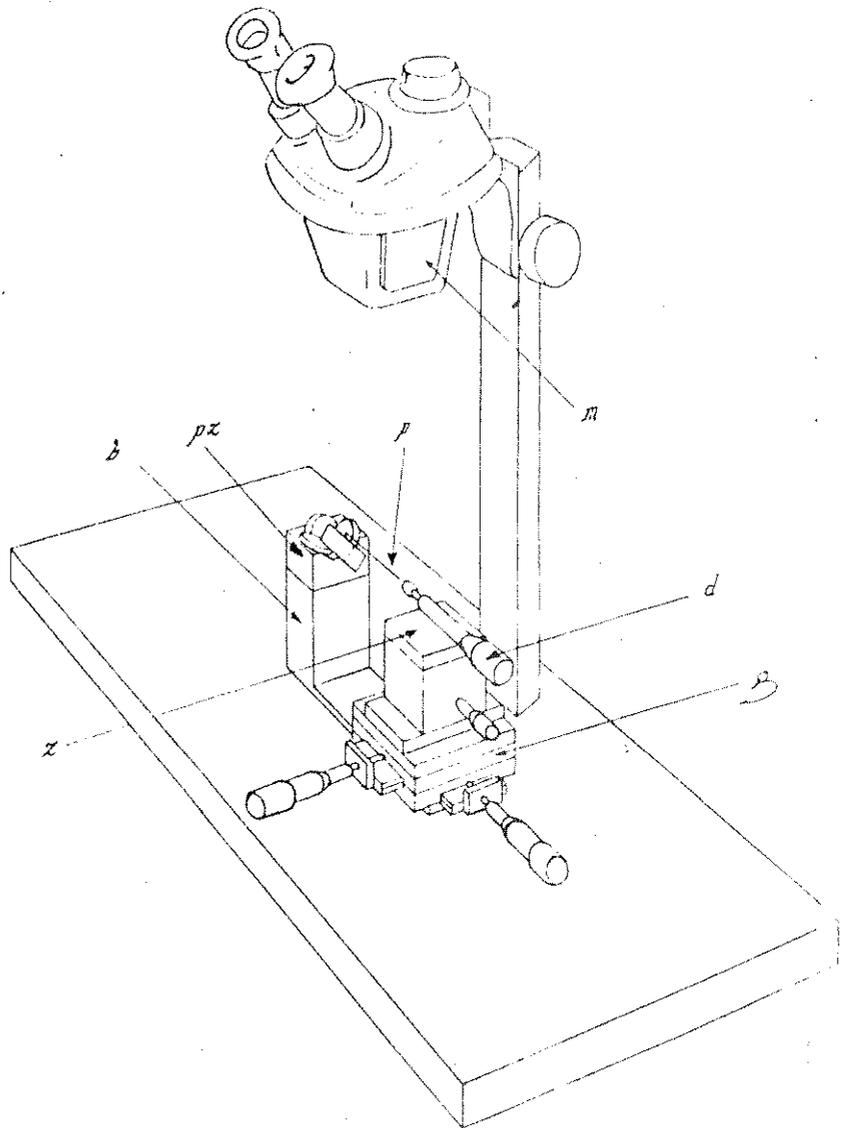
Fig. 1. Vista do MTE que projetamos no DSIF. Os três parafusos micrométricos permitem o posicionamento da amostra em relação à ponta. O conjunto posicionador x-y-z foi feito pela Optron - Micromecânica Óptica Ltda. As cerâmicas piezelétricas foram doadas pela Thornton Inpec. As cerâmicas formam ângulos mútuos de 90° para o deslocamento da ponta.

Por outro lado, a obtenção de imagens no MTE do DSIF só era possível à noite, como (apesar do sistema de isolamento de vibrações bem mais sofisticado) nos experimentos iniciais de Binnig, Rohrer e colaboradores, cf. Binnig & Rohrer (1987:618).

Após uma série de experimentos preliminares, destinados à verificação da ocorrência e condições de tunelamento, seguiu-se uma série de experimentos sobre uma amostra de grafite, efetuados na chamada *polarização reversa* (ponta positiva em relação à amostra) — o modo mais comum e conveniente de operação do MTE em topografia, como se discute no Capítulo II; cf. Lucas, Cutler *et al.* (1988:462) —, e um único experimento em polarização direta (que demonstrou a inaplicabilidade do MTE do DSIF nesta modalidade, como se discute adiante).

A escolha da amostra, cuja estrutura eletrônica deveria ser bem conhecida, foi óbvia: Embora haja quem questione o papel do grafite na calibração do MTE, como Morita *et al.* (1988), e Colton *et al.* (1988), este material de superfície inerte parece o de obtenção mais fácil de imagens com resolução atômica, cf. Bando *et al.* (1988), Batra *et al.* (1987), Batra & Ciraci (1988), Selloni *et al.* (1985), Mizes & Harrison (1988), etc.

Fig. 2. Vista da unidade da Fig. 1 em sua mesa de granito, dotada de um microscópio (*m*) de observação. O suporte das cerâmicas piezelétricas (*pz*) é soldado em sua base (*b*), que é rigidamente acoplada à mesa de ajuste grosso (*g*). O parafuso diferencial (*d*) não pôde ser utilizado, pois sua posição provocava instabilidades. Utilizamos uma camada de espuma intercalada entre a mesa de granito e o conjunto para minimização de vibrações.



É bem sabido que o grafite apresenta uma estrutura cristalina hexagonal disposta em camadas, tal que a interação entre estas é do tipo de van der Waals, cerca de uma ordem de grandeza mais fraca que as forças covalentes entre os átomos da mesma camada (ligados entre si por orbitais híbridos em configuração sp^2), cf. Mahan (1972:72), Mizes & Harrison (1988:300), Tipler (1981:251-2), Van Vlack (1988:60-1, 150), Milovsky & Kononov (1985:26, 102, 107-8).

Estas características tornam relativamente simples a obtenção de superfícies atômicamente planas com extensão suficiente para estudos de MTE, cf. Mizes & Harrison (1988:300). Cada átomo de grafite apresenta três orbitais híbridos sp^2 no plano xy (bandas σ , acoplamento ~ 10 eV) e um orbital p_z puro (bandas π) ortogonal à superfície; este orbital p_z interage com os outros da mesma espécie com um acoplamento (~ 3 eV) consideravelmente maior que as atrações de van der Waals ($\sim 0,3$ eV) entre as camadas, cf. Mizes & Harrison (1988:300).

A anisotropia das forças interatômicas no grafite também facilita a comparação entre os cálculos teóricos e resultados experimentais, pois valem aproximações em que se despreza o efeito das forças de van der Waals (ou seu efeito é tratado como uma perturbação) nas funções de onda da superfície, cf. Mizes & Harrison (1988:300). Visto que as camadas hexagonais no grafite monocristalino orientado ideal não se sobrepõem (i. e., o centro de cada hexágono de uma camada situa-se idealmente acima de um átomo de carbono da camada seguinte), alguns átomos situam-se acima do centro de um hexágono da camada imediatamente inferior (local β), enquanto outros átomos se situam acima de um átomo da camada inferior (local α). As camadas sucessivas se acoplam pelas posições α e, como seus estados não se encontram no nível de Fermi E_F , Mizes & Harrison (1988:300) afirmam que não ocorre tunelamento pelos locais α ; i. e., a imagem no MTE corresponderia apenas às autofunções médias dos átomos β , donde a simetria trigonal rotativa das camadas.

Dada a relação linear entre voltagem estática e força de compressão das cerâmicas piezelétricas, cf. Randeraat & Settrington (1974:7, 17) — em particular da cerâmica PZT (solução sólida de titano-zircanato de chumbo), utilizada no MTE-DSIF —, estimou-se a resolução do gráfico da Fig. 3 (que ilustra a primeira imagem de grafite com resolução atômica obtida com o MTE-DSIF, cujos dados constam da Tabela III do Apêndice A deste capítulo) supondo-se linear também a relação deslocamento piezelétrico \times voltagem aplicada às cerâmicas. Em outras palavras, as coordenadas da Fig. 3 são leituras diretas das tensões aplicadas às respectivas cerâmicas, mantendo-se constante a corrente em um valor da ordem de ~ 1 nA.

Por especificação do fabricante (Thornton Inpec), a 1000 V o deslocamento piezelétrico seria de menos de $1 \mu\text{m}$. Logo, para uma estimativa "pessimista", a 0,1 V corresponderia um deslocamento de menos de $\sim 1 \text{ \AA}$. Comparando-se com os dados da literatura, o valor $\sim 5 \text{ \AA}$ da Fig. 3 equivaleriam a cerca de $\sim 2,5 \text{ \AA}$, cf. Morita *et al.* (1988:355-6) ou Batra *et al.* (1987:128), por exemplo.

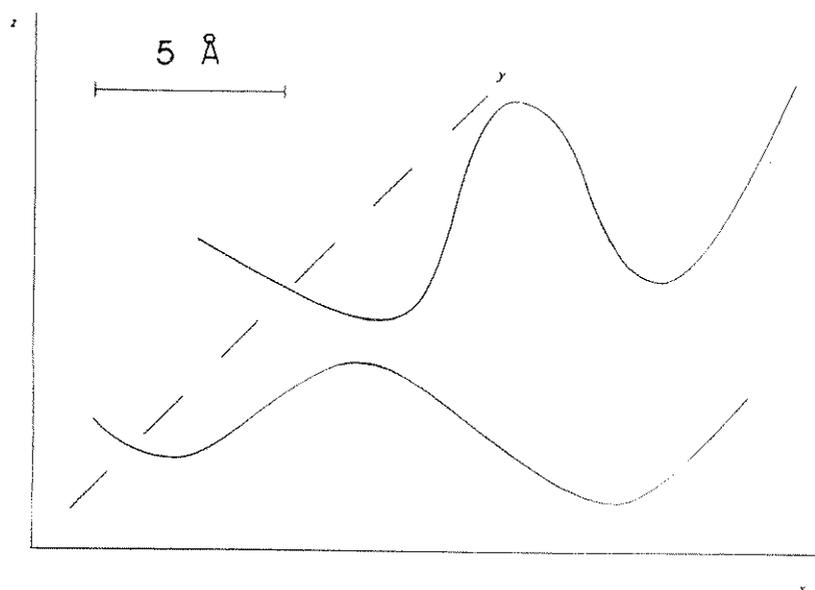


Fig. 3. Imagem da superfície de grafite, obtida a 27/3/1990, com o MTE-DSIF. Dados na Tabela III do Apêndice A.

No Apêndice A, seguem tabelas com os dados de alguns experimentos, discutidos a seguir. O objetivo é a exposição do método e suas dificuldades.

A Fig. 4 (a) ilustra uma tentativa mal-sucedida de levantamento topográfico, onde se nota que provavelmente o acúmulo de impurezas eletrostáticas entre a ponta e a amostra induzia um aumento (aparentemente exponencial) da corrente, independentemente da posição da ponta, em termos de deslocamento piezelétrico. Os dados constam da Tabela I do Apêndice, exceto o último ponto desta tabela, que apenas confirma o aumento da corrente (em outra posição da ponta), tal que foi necessário retrair a ponta.

A Fig. 4 (b) ilustra um trecho de varredura, aparentemente da imagem de uma estrutura topográfica (dados na Tabela III do Apêndice). Note-se uma circunstância curiosa, que talvez explique a relativa facilidade de obtenção de imagens topográficas com resolução atômica em amostras de grafite: As rugosi-

dades Δz são extremamente altas. Aplicando-se os mesmos cálculos das cerâmicas x e y , conclui-se que $\Delta z \sim 200 \text{ \AA}$ na Fig. 4 (b), valor excedido pelo da Fig. 3. Estas anomalias do grafite, previstas por Selloni *et al.* (1985), confirmadas posteriormente, e discutidas em Soler *et al.* (1986) e em Morita *et al.* (1985), chegam a quase $\Delta z \sim 100 \text{ \AA}$ para grafite monocristalino ("Kish"), cf. Morita *et al.* (1985:355). Colton *et al.* (1988:349) falam em $\Delta z \sim 2,4 \text{ nm}$. Há que se considerar dois aspectos da questão, sem entrar nos detalhes dos diferentes modelos que procuram explicar o fenômeno, como os trabalhos de Selloni *et al.* (1985) e Soler *et al.* (1986). Em primeiro lugar, nossa estimativa grosseira do deslocamento piezométrico só vale para a ordem de grandeza. Em segundo lugar, há motivos para crer que as rugosidades de uma amostra de grafite policristalino sejam maiores que as do grafite monocristalino, do mesmo modo que as rugosidades deste são bem maiores (cerca do triplo) que no caso do grafite altamente orientado, obtido por pirólise ("highly oriented pyrolytic graphite", HOPG), conforme Morita *et al.* (1985:354-5).

Aproveitando as boas condições (pouca vibração, estabilidade da corrente e o evento estocástico raríssimo de encontrar o que parecia um "terraço" bem plano na amostra) da mesma ocasião do traçado da Fig. 3, investigou-se a histerese — fenômeno típico das cerâmicas piezométricas, cf. Randeraat & Settingington (1974:17) — do conjunto piezoposicionador, por meio de uma varredura de "ida e volta", cujos dados estão na Tabela III (b) do Apêndice A; i. e., partindo-se de um dado valor de tensão U_y aplicada à cerâmica de varredura desta linha (mantendo U_x constante), efetuou-se uma varredura até o extremo de tensão U_y da outra linha (i. e., a linha varrida com outro valor U_x , cujos dados constam da Tabela III (a)) retrocedendo pelos mesmos valores de U_y . O resultado, Fig. 4 (c), deve ser uma convolução (em geral complicada) das histereses das cerâmicas y e z , além de efeitos secundários, como deriva da cerâmica x (que talvez se possa considerar desprezível, neste caso), a despolarização térmica e elétrica das três cerâmicas, cf. Randeraat & Settingington (1974:15-6); sem falar de outros efeitos, relacionados ou não às cerâmicas, como a deriva térmica da própria amostra, etc.

O principal problema nos experimentos, contudo, era encontrar um valor estável para a corrente, como ilustram as Figs. 5 a 7, correspondentes a três linhas (três valores de tensão U_x). Na Fig. 5 (dados na Tabela IV) ilustra-se uma situação curiosa, em que a despeito dos valores distintos de corrente, sugere-se a continuidade em certas estruturas. Na Fig. 5 (a) ilustra-se o valor de corrente na faixa de tensão U_y em que esta se manteve estável.

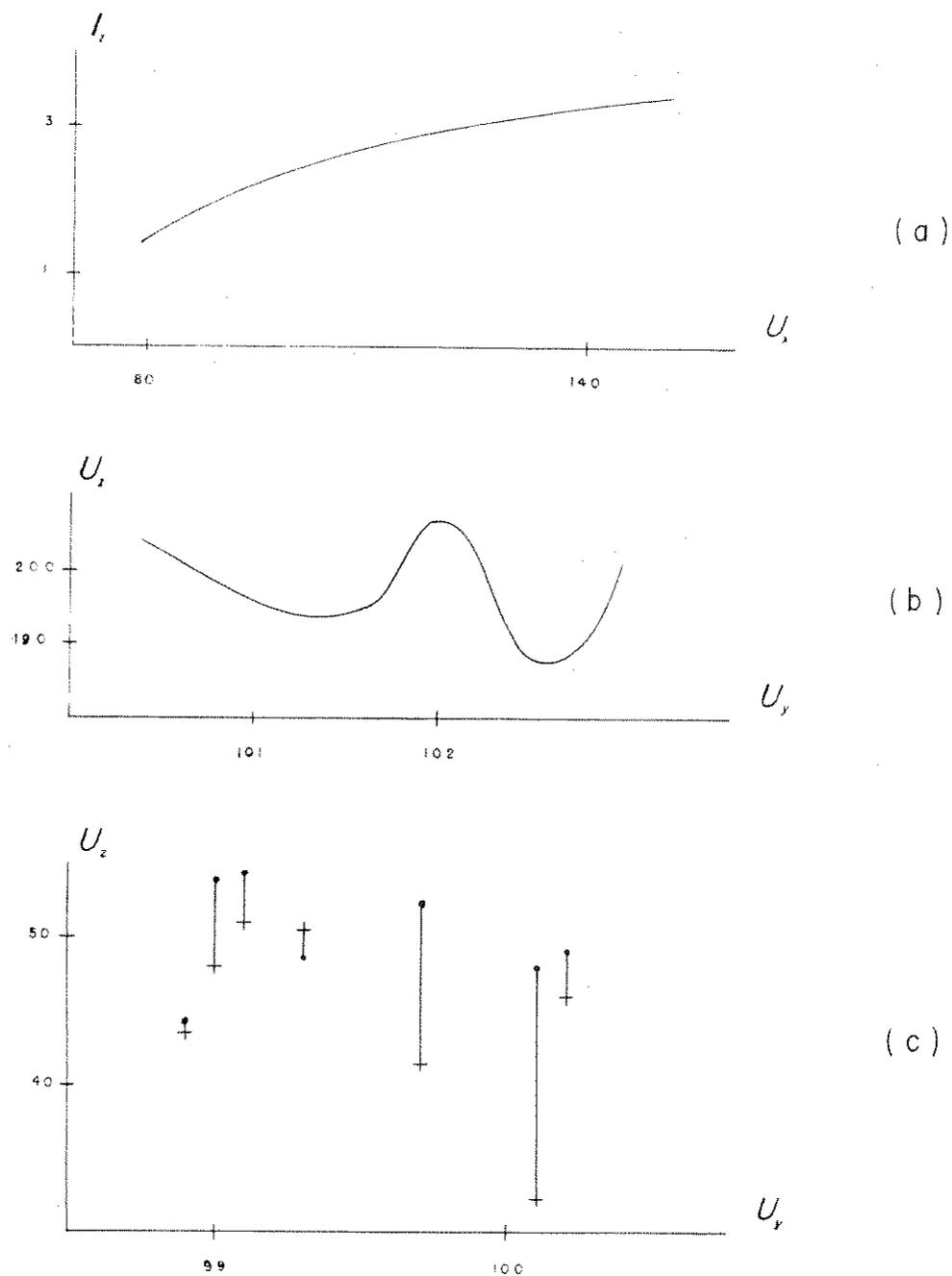


Fig. 4. (a) Dificuldade típica do MTE do DSIF: A corrente cresce, tendendo ao curto-circuito. (b) Rugosidades anômalas da superfície são típicas de amostras de grafite. (c) Histerese do conjunto piezoposicionador. Dados nas Tabelas I-III do Apêndice.

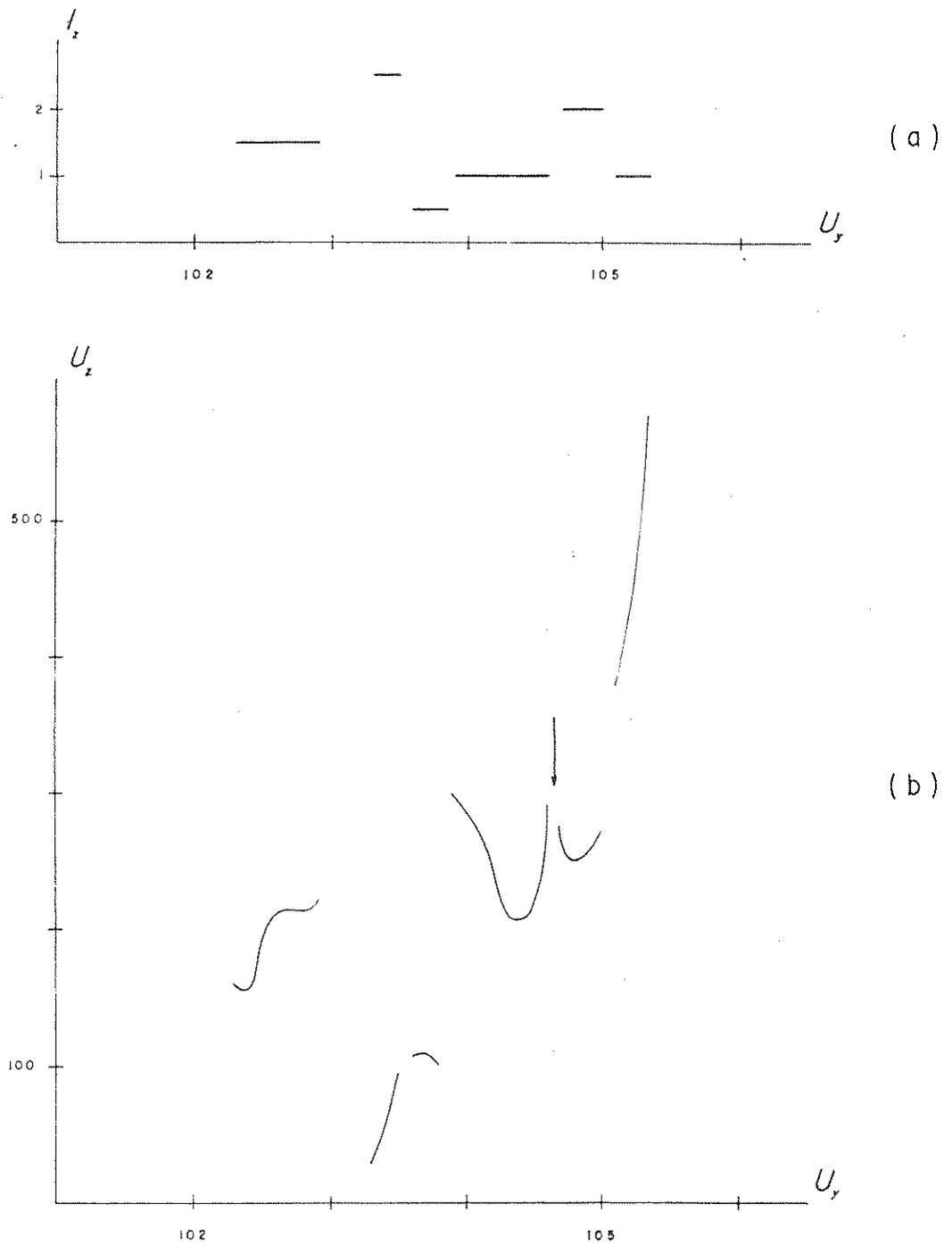


Fig. 5. Ilustração do problema de estabilidade de corrente: (a) Valores de corrente \times faixa de varredura, e (b) respectivas feições topográficas. Dados da Tabela IV do Apêndice.

Na Fig. 5 (b), os trechos contínuos estão exatamente sob o segmento correspondente ao seu valor de corrente na Fig. 5 (a). Assinala-se na Fig. 5 (b) o único trecho em que houve uma provável interrupção (salto ou repetição na concavidade à esquerda e à direita da seta); o resto parece deveras uma continuidade estrutural, tanto mais que os dois trechos em que o valor da corrente era de 1 nA foram varridos em sentidos opostos (ver Tabela IV). Note-se que um maior valor de corrente significa maior proximidade entre ponta e amostra, o que acentua as rugosidades aparentes da amostra, cf. Stoll *et al.* (1984). Assim, um *software* pode facilmente "remendar" trechos como estes, acentuando as rugosidades e elevando as curvas onde o valor de corrente for baixo, e vice-versa.

Na Fig. 6, mostra-se uma situação similar à da Fig. 5, exceto que as curvas foram traçadas separadamente, por ser difícil interpretar o que ocorreu, visto que esta linha foi varrida sem qualquer instabilidade, exceto a mudança do valor de estabilização de corrente.

Na Fig. 6 (a), a topografia parece indicar um plano inclinado da superfície do grafite, ao passo que, na Fig. 6 (b) parece ter havido uma súbita mudança ou chaveamento do poder de resolução, o que já é bem conhecido na literatura, como por exemplo, em Chen (1990a:8841; 1991a:45). Outra possibilidade é que, na Fig. 6 (b), devido aos passos relativamente grandes de varredura (0,2 V), por coincidência, a leitura tenha sido uma média das rugosidades a nível atômico. De qualquer forma, o menor valor de corrente indica maior distância entre ponta e amostra.

Na Fig. 7, nova comutação de corrente, entre 1,5 e 1 nA. Houve instabilidade da corrente por volta de $U_y \sim 104$ V em (b), mas o trecho à extrema esquerda em (a), onde $U_y \cong 102,6$ V, em princípio é continuado pelo trecho à esquerda ($U_y \leq 102,4$ V) em (b), pois exceto pela comutação de corrente, o trecho $101,2$ V $\leq U_y \leq 104,8$ V parecia estável.

Todos os experimentos bem sucedidos foram em amostra de grafite. Infelizmente, um experimento mostrou que o MTE-DSIF, na configuração em que se encontrava, não permitiria estudos no modo chamado de *polarização direta*, i. e., com a ponta negativa em relação à amostra, impossibilitando a complementação experimental do escopo teórico dos Capítulos II e III do presente trabalho: As assimetrias geométricas da junção MVM em MTE.

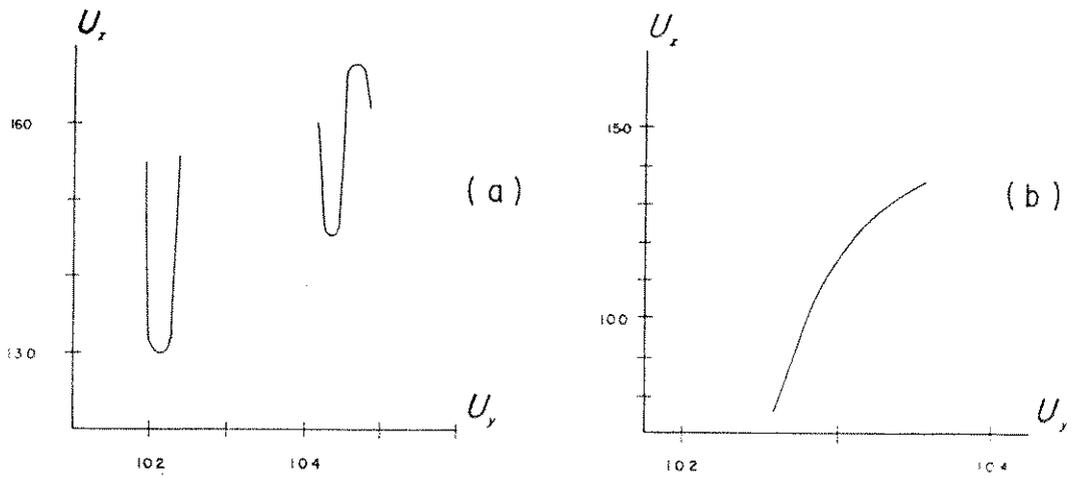


Fig. 6. Varredura de uma linha em que a corrente comutou, subitamente, entre os valores (a) 1 nA e (b) 0,5 nA. Dados da Tabela V.

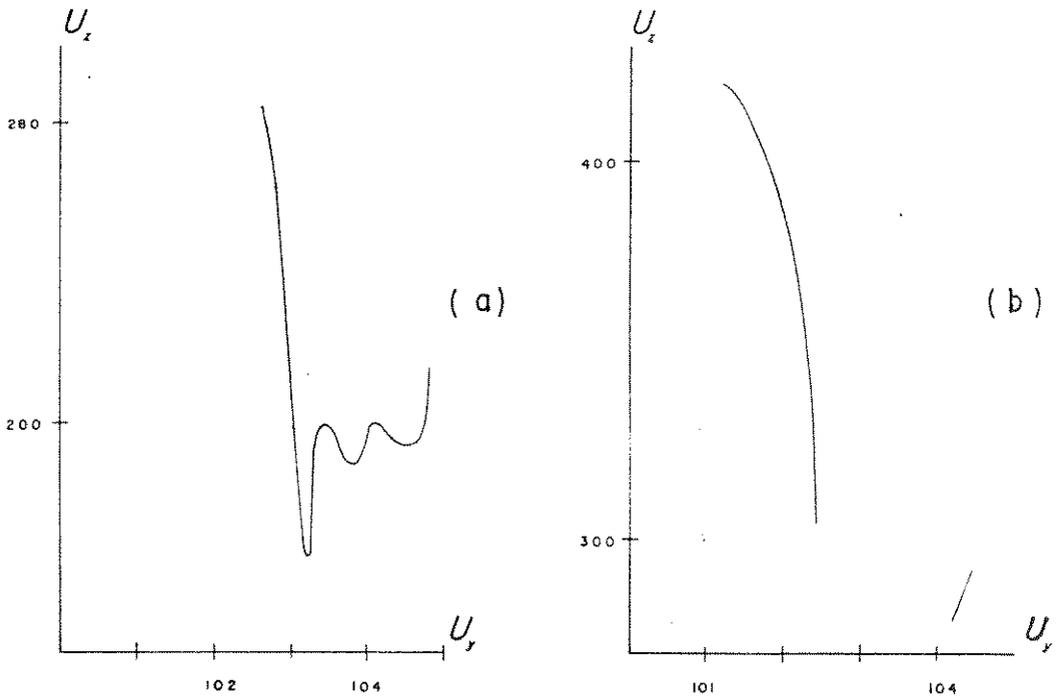


Fig. 7. Nova comutação de corrente, entre os valores (a) 1,5 nA e (b) 1 nA. Dados da Tabela VI.

O experimento em questão (realizado em meados de abril de 1990) verificou a existência, no circuito, de uma junção retificadora, ou fonte de corrente constante (da ordem de $I \sim 0,05$ nA), no modo de polarização direta, provavelmente devido aos diferentes materiais de cada lado do circuito (i. e., do lado da ponta e do lado da amostra). Por exemplo, a amostra era colada com tinta de prata, material que não estava presente (nem o poderia, por uma questão de sensatez) do lado da ponta. A distribuição dos diferentes materiais (fios, soldas, agulha, amostra, tinta de prata, o suporte que servia de terra à amostra etc.) parecia impossibilitar, ou melhor, dificultar uma junção homogênea, que fornecesse um outro diodo (ou fonte) com polaridade reversa em relação ao primeiro. A própria assimetria geométrica entre ponta e amostra, de fato, era previsível que favorecesse a passagem dos elétrons à amostra, mas o experimento foi feito com a ponta suficientemente distante da amostra (macroscopicamente) para garantir que a leitura do eletrômetro não era tunelamento — ainda que a forma da ponta pudesse desempenhar algum papel, por exemplo, em emissão de campo dos elétrons da ponta para o ar, este efeito deveria ser desprezível.

Não obstante a falta de uma complementação experimental, o trabalho dos próximos capítulos não é vão, pois além do significado teórico, a verificação experimental das assimetrias é de conhecimento universal na literatura do MTE — cf. por exemplo, Colton *et al.* (1988:352); Lucas, Cutler *et al.* (1988:462-4) etc. —, e mesmo no tratamento teórico do comportamento retificador do diodo de contacto de ponta, cf. Lucas & Cutler (1973). Os tratamentos teóricos não se têm mostrado geralmente bem sucedidos na descrição simples das assimetrias geométricas, como se verá a seguir.

2.2 Esforços teóricos.

A fórmula de Fowler & Nordheim (1928), para o tratamento unificado da emissão termiônica, emissão de campo e tunelamento unidimensional, de certo modo adaptada pelos cálculos de Simmons (1963) para junções de tunelamento entre eletrodos planos paralelos, tem-se aplicado ao tratamento do MTE nos mais diferentes contextos: discussões experimentais, como em Binnig & Rohrer (1982:727), Binnig *et al.* (1982b:179; 1982c:58), Stroscio *et al.* (1988:501); textos introdutórios e/ou de revisão, como em Baratoff (1984), Baratoff *et al.* (1986:735), Binnig & Rohrer (1986:356), Baranauskas (1989:58), Kuk & Silverman (1989:165); e tratamentos teóricos, como em Stoll *et al.* (1984:3079), Huang *et al.* (1989:34). Além de outras aplicações: ao diodo de contacto de ponta, em

Lucas & Cutler (1973); ao *topografiner*, em Young *et al.* (1971:923; 1972:1009). Esta fórmula exprime a densidade de corrente de tunelamento J (no caso unidimensional, a própria corrente) em termos exponenciais do espaçamento s entre ponta e amostra, como:

$$J \propto (U_T/s) \exp(-A \varphi^{1/2} s), \quad (8)$$

onde U_T é a tensão aplicada entre os eletrodos, φ é a altura média da barreira e A é uma constante, expressa em termos de constantes fundamentais por Binnig *et al.* (1982b:179; 1982c:58) como:

$$A = 4 \pi \frac{\sqrt{2m}}{h} = \frac{4\pi}{hc} \sqrt{2mc^2} = 2 \frac{\sqrt{2mc^2}}{hc} \cong 1,025 \text{ (eV)}^{-1/2} (\text{\AA})^{-1}, \quad (9)$$

onde m é a massa do elétron, c a velocidade da luz, $\hbar = h/(2\pi)$ e h a constante de Planck. Para os valores usuais das constantes em (9), cf. Tipler (1981:409-10), resulta o valor acima, apresentado por Binnig *et al.* (1982b:179; 1982c:58) e Binnig & Rohrer (1982:727). Supondo-se $U_T/s = \text{cte.}$, ou desprezível sua variação, o que equivale à *espectroscopia de tunelamento de elétrons* (ETE), reescreve-se (8) como em Binnig *et al.* (1982b:179; 1982c:58):

$$J \propto \exp(-A \varphi^{1/2} s), \quad (10)$$

de que resulta, para φ aproximadamente igual à função de trabalho típica de ~ 4 eV, uma razão entre as correntes calculadas para $s = 9$ e 11 \AA (respectivamente, representadas aqui por J_9 e J_{11}), um valor da ordem de $J_9/J_{11} \sim 60$. Ou ainda, para $U_T = \text{cte.}$, a variação para $s = 9$ e 10 \AA (respectivamente J_9 e J_{10}) em (8) forneceria a razão $J_9/J_{10} \sim 70$. Esta forte sensibilidade da corrente de tunelamento J em relação ao espaçamento s , explicaria, segundo as referências acima, a resolução vertical do MTE.

Tais cálculos parecem valer apenas no caso de eletrodos (ponta e amostra) idealmente limpos, pois Binnig *et al.* (1982a:2076), no caso de contaminação apreciável dos eletrodos, determinaram $\varphi \sim 0,6$ a $0,7$ eV e, no máximo (eletrodos razoavelmente limpos, pela modulação de U_T por uma senóide de 10 KHz e baixa amplitude), $\varphi \sim 3,5$ eV.

Para $U_T = \text{cte.}$, dividindo-se U_T por (10), tem-se a expressão da resistência de tunelamento $R(s)$ em função da distância s , que é a relação apresentada

em Binnig *et al.* (1982b:175):

$$R(s) \propto \exp(A \varphi^{1/2} s), \quad (11)$$

que se pode reescrever em termos do logaritmo de $R(s)$, derivando em relação a s , e considerando-se $A \sim 1$, chegar a uma expressão instrumental simples, que permitiria a caracterização da amostra em termos de sua função de trabalho (suposta igual à altura média da barreira, φ):

$$\ln R(s) \propto A \varphi^{1/2} s \therefore \varphi^{1/2} \propto \frac{d}{ds} \ln R(s). \quad (12)$$

É óbvio que, na prática, o MTE não se pode modelar de modo tão simples, o que motivou intensa pesquisa teórica. Discutem-se a seguir, apenas qualitativamente, alguns rumos.

Uma revisão das primeiras tentativas encontra-se em Baratoff (1984), enquanto considerações mais atuais e sistemáticas encontram-se em Feuchtwang & Cutler (1987). Discussões sucintas e críticas constam das introduções dos trabalhos de Chen (1988:319; 1990b:8841-2).

De início, Baratoff (1984:143-4) distingue duas linhas principais, que ele afirma equivalentes: o formalismo por espalhamento e transmissão e por transições entre eletrodos fracamente acoplados. Ver Fig. 8 (a-b).

No primeiro caso, García *et al.* (1983) e García & Flores (1984) efetuam o tratamento numérico do espalhamento de ondas por eletrodos periódicos (rugosos): Uma ponta de grande amplitude de rugosidade e período de repetição no limite $L \rightarrow \infty$ e uma amostra de amplitude e período de rugosidade pequenos, como se mostra na Fig. 8 (b). Sempre supondo eletrodos metálicos, este modelo, que Baratoff (1984) observa tratar-se de uma continuação do tratamento dos manuais — como em Cohen-Tannoudji *et al.* (1977:912-8) — foi independentemente adotado por pelo menos um outro grupo, Stoll *et al.* (1984); estes, desenvolveram um método sistemático igualmente bidimensional e facilmente extensível às três dimensões, para o cálculo da distribuição de corrente. O principal mérito do tratamento de Stoll *et al.* (1984) parece a compreensão intuitiva do fenômeno de resolução atômica do MTE, esclarecendo que a corrente de tunelamento total I se distribui de fato por uma área considerável da ponta equivalente, cujo "raio" deve ser *muito maior* que a distância intereletródica d na Fig. 8, cf. Stoll *et al.* (1984:3077-8, 3085). Isto significa que uma ponta pouco aguçada

(grosseira ou "cega") admite resolução atômica, dentro de certos limites, desde que ponta e amostra estejam suficientemente próximas. Assim, por exemplo, a melhor resolução (condições mais estáveis) seria obtida por uma ponta monoatômica, sem dúvida; mas esta não é uma condição necessária à resolução atômica em MTE. A ponta monoatômica permitiria maior estabilidade, simplesmente por permitir um maior espaçamento entre ponta e amostra, pelo menos em princípio.

Tersoff & Hamann (1983, 1985) partem de uma ponta, em princípio de formato arbitrário, dotada porém de uma *esfericidade local* e uma amostra *plana*, como ilustra a Fig. 8 (a). O tratamento matemático baseia-se na *teoria da perturbação*, em aproximação de primeira ordem pelo formalismo de Bardeen (1961).

A teoria das perturbações estacionárias ou independentes do tempo consiste em se superpor ao hamiltoniano \mathcal{H}_0 , de solução conhecida (i. e., autovalores e auto-estados conhecidos), um *hamiltoniano de perturbação* \mathcal{H}_p , onde $\mathcal{H}_p \ll \mathcal{H}_0$, atribuindo-se ao sistema total o *hamiltoniano* \mathcal{H} , dado por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p + \mathcal{H}_0, \quad (13)$$

cf. Cohen-Tannoudji *et al.* (1977:1093, *passim* 1208), Eisberg (1979:243, *passim* 265), etc.

De acordo com a teoria de Bardeen (1961:58), o *elemento de matriz* de transição entre um estado permitido p da ponta e um estado permitido a da amostra é dado por:

$$M_{pa} = \int (\psi_p^* \mathcal{H} \psi_a - \psi_a \mathcal{H} \psi_p^*) d\tau = - \frac{\hbar^2}{2m} \int (\psi_p^* \nabla \psi_a - \psi_a \nabla \psi_p^*) \cdot d\vec{S}, \quad (14)$$

onde \mathcal{H} é o hamiltoniano de perturbação (cuja energia potencial considera interações intereletrônicas), a integral em (14) é efetuada sobre qualquer superfície contida na região de barreira, ψ_p e ψ_a são as autofunções, respectivamente da ponta e da amostra, e ∇ é o operador gradiente:

$$\nabla = \sum_i \frac{\partial}{\partial \tau_i} \vec{a}_{\tau_i}, \quad (14a)$$

cf. Tersoff & Hamann (1983:1998; 1985:806), Duke (1969:15, 207-11). O integrando do último membro direito de (14), é chamado *operador de corrente*, cuja expressão análoga para uma única partícula (sem *spin*) costuma ser apresentada nos manuais, como em Cohen-Tannoudji *et al.* (1977:238-40).

Modelando a ponta (para simplificação dos cálculos) como um poço de potencial esférico acima de uma amostra plana, Tersoff & Hamann (1983:1998; 1985:806) utilizaram o elemento de matriz de Bardeen, dado por (14) acima, no cálculo da corrente, que se mostra proporcional à densidade local de estados ao nível de Fermi E_F na superfície da amostra, a temperatura ambiente ou menor e em baixa voltagem de polarização intereletródica. O resultado, também citado em Hansma & Tersoff (1987:R4), é:

$$I = \frac{2\pi q_e}{\hbar} \sum_{p,a} f(E_p) [1 - f(E_a + q_e U)] |M_{pa}|^2 \delta(E_p - E_a) \cong$$

$$\cong \frac{2\pi q_e^2 U}{\hbar} \sum_{p,a} |M_{pa}|^2 \delta(E_a - E_F) \delta(E_p - E_F), \quad (15)$$

onde q_e é a carga do elétron, $\hbar = h/(2\pi)$ sendo h a constante de Planck, f é a função de distribuição de Fermi e δ , cujo significado não consta de nenhum dos artigos supramencionados, deve ser a "função" δ de Dirac — equivalente quântico, no *continuum* (i. e., nas regiões onde o espectro de valores de energia é contínuo), da "função" δ de Oliver Heaviside (1850-1925), da teoria de comunicações. Cabe notar que, no caso de espectro discreto (regiões de potencial de ligação, onde o espectro de energia é discreto), $\delta(0) = 1$ (e não infinito), cf. Landau & Lifshitz (1985:21, 30).

Também com base no formalismo de Bardeen (1961), mas com objetivos mais propriamente espectroscópicos (enfatizando as "assinaturas" características de elementos quimicamente distintos em uma superfície), Lang (1985, 1986, 1987) tratou os eletrodos como simplesmente planos, num dos quais há um único átomo adsorvido (adátomo), como na Fig. 8 (c).

A Fig. 8 (d) ilustra um tratamento numérico tridimensional de eletrodos planos perturbados por uma ponta esférica, proposto por Lucas, Morawitz *et al.* (1988:297). A conclusão de que a assimetria do potencial, de acordo com este modelo, não seria desprezível para um raio da ponta até 100 Å é interessante, mas levou os autores à conclusão errônea de que o efeito de tunelamento assimétrico só seria obtível por um modelo tridimensional. No Capítulo II, mostramos que não é bem assim, desde que se atribua a assimetria geométrica não a uma perturbação local, mas ao hamiltoniano não perturbado, que descreve o comportamento assintótico da energia potencial devido à forma da ponta.

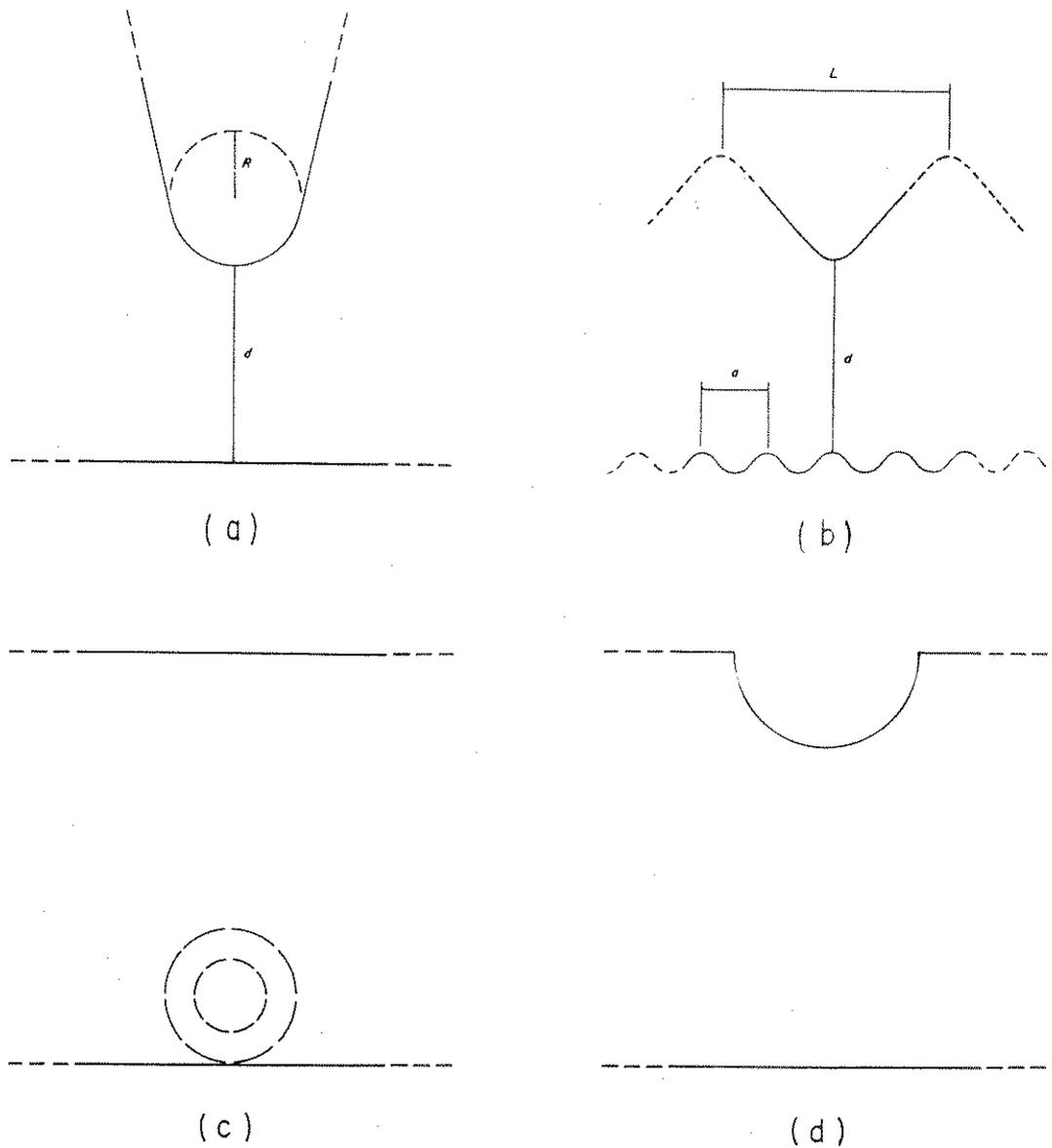


Fig. 8. Alguns modelos dos eletrodos de tunelamento no MTE: (a) Tersoff & Hamann; (b) García *et al.*, também adotado por Stoll *et al.*; (c) Lang, com objetivos espectroscópicos; (d) Lucas, Morawitz *et al.*

Dignos de nota são dois outros esboços teóricos mais gerais. No primeiro caso, Huang *et al.* (1989, 1990) procuram generalizar ao caso multidimensional o chamado *método WKB* (a ser tratado no Capítulo III) pelo espalhamento de ondas planas segundo uma construção do tipo de Huygens, cuja validade se restringe ao caso de ondas incidentes normais à chamada *superfície de retorno*

(generalização multidimensional do conceito de ponto de retorno em física clássica), procurando discriminar as diferenças de tratamento nos casos de potencial separável ou não, com vistas não apenas ao MTE, como também a dispositivos de contacto de ponta, teoria de campo e cinética de reações moleculares, cf. Huang *et al.* (1990:177).

O desenvolvimento nos Capítulos II e III, aqui, é compatível com a teoria de Huang *et al.* (1989, 1990), como será fácil se depreender pelo exposto especialmente no Capítulo III.

No segundo caso, Chen (1988, 1990a, 1990b, 1991a, 1991b), desenvolveu uma teoria de perturbação, semelhante ao tratamento de Oppenheimer (1928), que adapta o hamiltoniano de Bardeen para ampliar sua validade, bem como a do método WKB. Esta teoria explica por que o modelo de Tersoff & Hamann, embora forneça resultados interessantes, falha no ponto crucial do MTE, a saber, sua resolução atômica (exaustivamente, demonstrada na literatura experimental). O problema é que o hamiltoniano de Bardeen pressupõe o desacoplamento entre as funções de onda dos eletrodos de tunelamento, cf. Duke (1969:15-22), o que não vale no caso do MTE, dada a proximidade intereletródica, cf. Lucas, Morawitz *et al.* (1988:296).

No Capítulo II desenvolve-se um modelo tridimensional separável para o potencial e o campo entre ponta e amostra, cuja parte unidimensional de interesse (o potencial na direção ortogonal à superfície da amostra) incorpora o efeito das assimetrias geométricas no MTE.

No Capítulo III, à guisa de exemplo, aplica-se uma expressão da energia potencial (unidimensional) obtida no Capítulo II, ao caso quase-clássico conhecido como *método WKB*, lá discutido, com vistas ao cálculo da corrente no MTE. Note-se que todo o presente texto é compatível com a teoria de Huang *et al.* (1989, 1990), e a expressão do Capítulo II é, ademais compatível também com a teoria de Chen (1988, 1990a, 1990b, 1991a, 1991b).

APÊNDICE I.A

TABELAS DE DADOS EXPERIMENTAIS

Em todas as tabelas a seguir, U_x , U_y , e U_z representam as tensões aplicadas às respectivas cerâmicas piezelétricas, e I representa a corrente de tunelamento.

Tabela I ($U_y = 125$ V)

U_x [V]	U_z [V]	I [nA]
100	285	1,5
100	285	2,5
125	285	3,0
150	285	3,4
175	150	4,0

Tabela II ($U_x = 150$ V)

U_y [V]	U_z [V]	I [nA]
103,0	200,0	1,5
102,5	188,4	1,5
102,0	207,0	1,5
101,5	190,4	1,5
101,0	190,6	1,5
100,5	202/3	1,5

Tabela III

(a) ($U_x = 80 \text{ V}$)			(b) ($U_x = 80,3 \text{ V}$)		
U_y [V]	U_z [V]	I [nA]	U_y [V]	U_z [V]	I [nA]
100,2	82,1	0,5	98,6	43,5	0,5
100,1	74,4	0,5	98,9	43,5	0,5
100,0	55,8	0,5	99,0	47,8	0,5
99,9	54,1	0,5	99,1	50,8	0,5
99,8	51,3	0,5	99,3	50,5	0,5
99,6	63,1	0,5	99,7	41,5	0,5
99,5	72,3	0,5	100,1	32,3	0,5
99,4	72,4	0,5	100,2	46,1	0,5
99,3	70,1	0,5	98,9	44,1	0,5
99,2	44,8	0,5	99,0	53,9	0,5
99,1	45,4	0,5	99,1	54,4	0,5
99,0	45,4	0,5	99,3	48,6	0,5
98,9	49,0	0,5	99,7	52,4	0,5
98,8	18,6	0,5	100,1	48,0	0,5
98,6	50,3	0,5	100,2	46,9	0,5

Tabela IV ($U_x = 106,8 \text{ V}$)

U_y [V]	U_z [V]	I [nA]	U_y [V]	U_z [V]	I [nA]
105,1	380	1,0	103,9	295	1,0
105,25	460	1,0	103,8	100	0,5
105,3	470	1,0	103,7	110	0,5
105,35	570	1,0	103,6	105	0,5
105,0	270	2,0	103,5	85	2,5
104,9	260	2,0	103,4	55	2,5
104,8	250	2,0	103,3	30	2,5
104,7	270	2,0	102,9	222	1,5
104,6	275	1,0	102,8	214	1,5
104,5	214	1,0	102,7	215	1,5
104,4	208	1,0	102,6	208	1,5
104,3	215	1,0	102,5	205	1,5
104,2	257	1,0	102,4	155	1,5
104,1	270	1,0	102,3	160	1,5
104,0	287	1,0			

Tabela V ($U_x = 106,5 \text{ V}$)

U_y [V]	U_z [V]	I [nA]	U_y [V]	U_z [V]	I [nA]
102,0	155	1,0	103,6	135	0,5
102,2	130	1,0	103,8	163	2,5
102,4	156	1,0	104,0	175	1,0
102,6	75	0,5	104,2	160	1,0
102,8	98	0,5	104,4	145	1,0
103,0	110	0,5	104,65	168	1,0
103,2	125	0,5	104,8	160/3	1,0
103,4	130	0,5			

Tabela VI ($U_x = 106,3 \text{ V}$)

U_y [V]	U_z [V]	I [nA]	U_y [V]	U_z [V]	I [nA]
104,8	208	1,5	102,4	310	1,0
104,6	195	1,5	102,2	370	1,0
104,4	290	1,0	102,0	390	1,0
104,2	280	1,0	101,8	402	1,0
104,0	198	1,5	101,6	410	1,0
103,8	187	1,5	101,4	418	1,0
103,2	165	1,5	101,2	420	1,0
103,0	213	1,5			

CAPÍTULO II

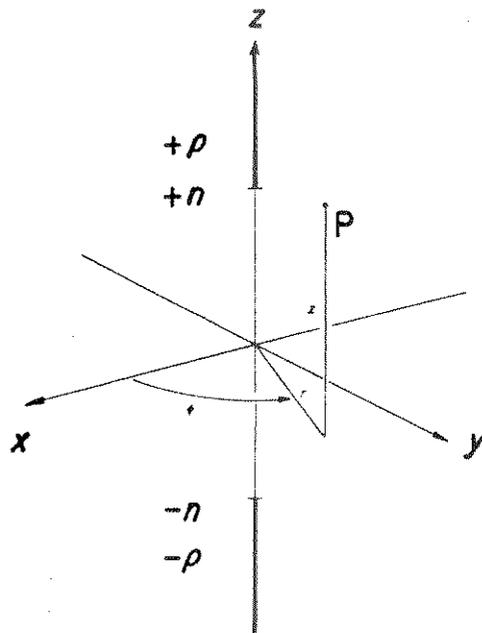
MODELO DE POTENCIAL E CAMPO ENTRE PONTA E AMOSTRA IDEAIS

Sinopse. A partir da equação de Poisson, aplicada a uma densidade linear de carga a uma distância η de um plano de referência (potencial nulo), obtêm-se expressões em coordenadas cilíndricas para o potencial e o campo elétrico. Os resultados podem-se aplicar a modelos simplificados, como do diodo de contato, do espaçamento ponta-amostra num microscópio de tunelamento de elétrons (MTE) — mesmo admitindo ponta de espessura não nula —, ou de um pára-raios e uma nuvem.

1. INTRODUÇÃO.

Considere-se (Fig. 1) uma densidade linear uniforme de carga positiva $+\rho_L$ ao longo do eixo z , num sistema de coordenadas cilíndricas, a partir de $z \geq \eta$, i. e., a *linha de cargas* tem comprimento $l \rightarrow \infty$, situando-se no intervalo $0 < \eta \leq z < \infty$.

Fig. 1. Distribuição de cargas simétrica em relação ao plano $z = 0$. Incluem-se os sistemas de coordenadas cartesianas e cilíndricas, para melhor visualização. O ponto $P(r, \phi, z)$ é um ponto qualquer do espaço tridimensional.



Admitindo-se no plano $z = 0$ um potencial nulo ($U = 0$), pela *teoria das imagens* — ver, por exemplo, Kraus e Carver (1953:275-6) —, as formas do potencial e do campo acima do plano $z = 0$ não se alteram frente à presença de uma densidade linear de carga negativa, $-\rho_L$, também ao longo do eixo z , mas no intervalo $-\infty < z \leq -\eta$.

Calcula-se adiante o potencial e, a partir deste, o campo elétrico em um ponto arbitrário do espaço $P(r, \phi, z)$. A fim de distinguir as coordenadas do ponto (r, ϕ, z) das variáveis de integração, estas apresentam-se *plicadas* (r', ϕ', z') .

2. CÁLCULO DO POTENCIAL.

Os cálculos a seguir, valendo-se da simetria cilíndrica do problema, tratam separadamente o caso unidimensional em que o ponto P se encontra sobre o eixo z ($r = 0$), no intervalo $(-\eta, +\eta)$ — aqui, referido como *espaçamento túnel* —, e o caso mais geral, em que o ponto P é qualquer ponto do espaço, não pertencente ao eixo z , i.e., $r \neq 0$.

2.1 Potencial no espaçamento túnel ($r = 0$, $-\eta < z < +\eta$).

Neste caso, $r = 0$, e as distâncias entre o ponto $P(0, \phi, z)$ e os elementos de carga positiva, r_+ , e negativa, r_- , são dadas por

$$\begin{cases} r_+ = |z'_+ - z|, & z'_+ \geq \eta, \\ r_- = |z - z'_-|, & z'_- \leq -\eta, \end{cases} \quad (1a)$$

$$\begin{cases} r_+ = |z'_+ - z|, & z'_+ \geq \eta, \\ r_- = |z - z'_-|, & z'_- \leq -\eta, \end{cases} \quad (1b)$$

podendo-se calcular o potencial por substituição das relações acima na expressão abaixo:

$$dU = \frac{\rho_L}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{dz'_+}{r_+} - \frac{dz'_-}{r_-} \right); \quad (2a)$$

ou

$$dU = U_0 \left(\frac{dz'_+}{r_+} - \frac{dz'_-}{r_-} \right), \quad (2b)$$

onde: $U_0 = \rho_L / (4\pi\epsilon_0)$.

Embora as equações (1a) e (1b) possam ser ambas expressas pela mesma relação, p. ex., $|z'-z|$, note-se que substituindo esta em (2b) e integrando dU' de 0 a U , os limites de integração para o termo em r_+ e r_- são obviamente distintos entre si:

$$U = U_0 \left[\int_{\eta}^1 \frac{dz'}{|z'-z|} - \int_{-\eta}^{-1} \frac{dz'}{|z-z'|} \right], \quad (3)$$

equação esta em que, adiante, aplicaremos o limite $l \rightarrow \infty$.

Integrando o membro direito em (3):

$$U = U_0 \left(\ln|z'-z|_{\eta}^1 - \ln|z-z'|_{-\eta}^{-1} \right) = U_0 \left(\ln \left| \frac{l-z}{l+z} \right| + \ln \left| \frac{\eta+z}{\eta-z} \right| \right). \quad (4)$$

Aplicando-se, à parte, o limite $l \rightarrow \infty$ ao termo adequado em (4):

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{l-z}{l+z} \right| = \lim_{l \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{1-z/l}{1+z/l} \right| = \lim_{l \rightarrow \infty} \ln 1 = 0. \quad (5)$$

Substituindo (5) em (4), resulta na expressão para o potencial no espaço-túnel, quando $l \gg r$:

$$\boxed{U = U_0 \ln \left| \frac{\eta+z}{\eta-z} \right|}, \quad (6a)$$

ou equivalentemente:

$$\boxed{U = 2 U_0 \operatorname{arc} \operatorname{tgh} (z/\eta)}. \quad (6b)$$

A expressão da *energia potencial* $V = -q_e U$, onde $q_e > 0$ é a unidade de carga elementar, obtem-se de (6a):

$$\boxed{V = V_0 \ln \left| \frac{\eta-z}{\eta+z} \right|}, \quad (7a)$$

ou equivalentemente:

$$\boxed{V = -2 V_0 \operatorname{arc} \operatorname{tgh} (z/\eta)}, \quad (7b)$$

onde V_0 é uma constante, definida por: $V_0 = q_e \rho_L / (4\pi\epsilon_0)$. Ver Fig. 2 (a).

2.2 Potencial no espaço restante ($r \neq 0$).

Agora, o cálculo do potencial ainda pode ser efetuado por meio da Eq. (2b), mas as distâncias entre o ponto $P(r, \phi, z)$ e os elementos de carga positiva, r_+ , e negativa, r_- , são dadas pelo teorema de Pitágoras:

$$\left\{ \begin{array}{l} r_+^2 = (z'_+ - z)^2 + r^2, \quad z'_+ \geq \eta, \\ r_-^2 = (z - z'_-)^2 + r^2, \quad z'_- \leq \eta. \end{array} \right. \quad (8a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} r_+^2 = (z'_+ - z)^2 + r^2, \quad z'_+ \geq \eta, \\ r_-^2 = (z - z'_-)^2 + r^2, \quad z'_- \leq \eta. \end{array} \right. \quad (8b)$$

Substituindo as relações acima em (2b), integrando dU' de 0 a U para os respectivos limites de integração em r_+ e r_- :

$$U = U_0 \left[\int_{\eta}^1 \frac{dz'_+}{[(z'_+ - z)^2 + r^2]^{1/2}} - \int_{-\eta}^{-1} \frac{dz'_-}{[(z - z'_-)^2 + r^2]^{1/2}} \right]. \quad (9)$$

Ambos os integrandos, em (9), apresentam um denominador similar, que se pode encarar como uma equação de segundo grau da variável z' :

$$(z')^2 - 2 z z' + (z^2 + r^2) = 0, \quad (10)$$

cujas raízes complexas são, nos dois casos:

$$\boxed{z'_1 = z + ir}, \quad \text{e:} \quad \boxed{z'_2 = z - ir}. \quad (11)$$

(Para o tratamento por variáveis complexas que segue ver, p. ex., Churchill 1975, *passim*).

Assim, pode-se reescrever (9) como:

$$U = U_0 \left(\int_{\eta}^1 [(z'_+ - z'_1)(z'_+ - z'_2)]^{-1/2} dz'_+ - \int_{-\eta}^{-1} [(z'_- - z'_1)(z'_- - z'_2)]^{-1/2} dz'_- \right). \quad (12)$$

O cálculo para integrais do tipo das duas em (12) consta do Apêndice A (q. v.). No caso, (12) torna-se:

$$U = U_0 \left[\ln \left| \frac{(z'_- - z'_2)^{1/2} + (z'_- - z'_1)^{1/2}}{(z'_- - z'_2)^{1/2} - (z'_- - z'_1)^{1/2}} \right|_{\eta}^1 + \right. \\ \left. - \ln \left| \frac{(z'_+ - z'_2)^{1/2} + (z'_+ - z'_1)^{1/2}}{(z'_+ - z'_2)^{1/2} - (z'_+ - z'_1)^{1/2}} \right|_{-\eta}^{-1} \right], \quad (13)$$

Aplicando-se o limite $l \rightarrow \infty$ aos termos de (13) que dependem de l :

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{(l - z'_2)^{1/2} + (l - z'_1)^{1/2}}{(l - z'_2)^{1/2} - (l - z'_1)^{1/2}} \frac{(l + z'_2)^{1/2} - (l + z'_1)^{1/2}}{(l + z'_2)^{1/2} + (l + z'_1)^{1/2}} \right| = \\ = \lim_{l \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{[(l - z'_2)^{1/2} + (l - z'_1)^{1/2}]^2}{(l - z'_2) - (l - z'_1)} \frac{(l + z'_2) - (l + z'_1)}{[(l + z'_2)^{1/2} + (l + z'_1)^{1/2}]^2} \right| = \\ = \lim_{l \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{(l - z'_2)^{1/2} + (l - z'_1)^{1/2}}{(l + z'_2)^{1/2} + (l + z'_1)^{1/2}} \right|^2 = \\ = \lim_{l \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{(1 - z'_2/l)^{1/2} + (1 - z'_1/l)^{1/2}}{(1 + z'_2/l)^{1/2} + (1 + z'_1/l)^{1/2}} \right| = \ln 1 = 0. \quad (14)$$

A partir do resultado de (14), reescreve-se (13) como:

$$\begin{aligned}
 U &= U_0 \ln \left| \frac{(\eta+z'_2)^{1/2} + (\eta+z'_1)^{1/2}}{(\eta+z'_2)^{1/2} - (\eta+z'_1)^{1/2}} \frac{(\eta-z'_2)^{1/2} - (\eta-z'_1)^{1/2}}{(\eta-z'_2)^{1/2} + (\eta-z'_1)^{1/2}} \right| = \\
 &= U_0 \ln \left| \frac{1+(\eta+z'_1)^{1/2}/(\eta+z'_2)^{1/2}}{1-(\eta+z'_1)^{1/2}/(\eta+z'_2)^{1/2}} \frac{1-(\eta-z'_1)^{1/2}/(\eta-z'_2)^{1/2}}{1+(\eta-z'_1)^{1/2}/(\eta-z'_2)^{1/2}} \right|. \quad (15)
 \end{aligned}$$

E substituindo os valores das raízes (11) em (15):

$$U = U_0 \ln \left| \frac{1+\sqrt{(\eta+z+ir)/(\eta+z-ir)}}{1-\sqrt{(\eta+z+ir)/(\eta+z-ir)}} \frac{1-\sqrt{(\eta-z-ir)/(\eta-z+ir)}}{1+\sqrt{(\eta-z-ir)/(\eta-z+ir)}} \right|. \quad (16)$$

Os cálculos em (16) são bastante simplificados, adotando-se a seguinte forma polar, cf. Churchill (1975:9), para as variáveis complexas:

$$\begin{cases} r_1 = [(\eta + z)^2 + r^2]^{1/2}; \phi_1 = \text{arc tg } [r/(\eta + z)], & (17a) \\ r_2 = [(\eta - z)^2 + r^2]^{1/2}; \phi_2 = \text{arc tg } [r/(\eta - z)]. & (17b) \end{cases}$$

Assim, (16) torna-se:

$$\begin{aligned}
 U &= U_0 \ln \left| \frac{1+\sqrt{(r_1 e^{i\phi_1})/(r_1 e^{-i\phi_1})}}{1-\sqrt{(r_1 e^{i\phi_1})/(r_1 e^{-i\phi_1})}} \frac{1-\sqrt{(r_2 e^{-i\phi_2})/(r_2 e^{i\phi_2})}}{1+\sqrt{(r_2 e^{-i\phi_2})/(r_2 e^{i\phi_2})}} \right| = \\
 U &= \ln \left| \frac{1 (e^{i2\phi_1})^{1/2} 1 - (e^{-i2\phi_2})^{1/2}}{1 (e^{i2\phi_1})^{1/2} 1 + (e^{-i2\phi_2})^{1/2}} \right| = \\
 U &= \ln \left| \frac{1 e^{i\phi_1} 1 - e^{-i\phi_2}}{1 e^{i\phi_1} 1 + e^{-i\phi_2}} \right| = \\
 U &= \ln \left| \frac{(1 \cos \phi_1) + i(\text{sen } \phi_1) (1 + \cos \phi_1) + i(\text{sen } \phi_2)}{(1 \cos \phi_1) - i(\text{sen } \phi_1) (1 + \cos \phi_2) - i(\text{sen } \phi_2)} \right|. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Definindo novamente em forma polar as variáveis complexas resultantes em (18):

$$\begin{cases} r_3 = [(1+\cos \phi_1)^2 + (\text{sen } \phi_1)^2]^{1/2} = (2+2 \cos \phi_1)^{1/2}, & (19a) \\ r_4 = [(1-\cos \phi_2)^2 + (\text{sen } \phi_2)^2]^{1/2} = (2-2 \cos \phi_2)^{1/2}, & (19b) \\ r_5 = [(1-\cos \phi_1)^2 + (\text{sen } \phi_1)^2]^{1/2} = (2-2 \cos \phi_1)^{1/2}, & (19c) \\ r_6 = [(1+\cos \phi_2)^2 + (\text{sen } \phi_2)^2]^{1/2} = (2+2 \cos \phi_2)^{1/2}; & (19d) \end{cases}$$

mas, desta vez sem nos preocuparmos com os argumentos das variáveis r_3 a r_6 , visto que em (18) temos agora o módulo de produtos e quocientes (é conhecida a propriedade, dos módulos de valores complexos, pela qual $|\exp i(\phi_3+\phi_4-\phi_5-\phi_6)| = |\exp i\alpha| = 1, \forall \alpha$). Logo, (18) resume-se a:

$$U = U_0 \ln \left| \frac{r_3 r_4}{r_5 r_6} \right|. \quad (20)$$

A partir das definições em (17a) e (17b), é fácil ver que:

$$\cos \phi_1 = (\eta + z) / [(\eta + z)^2 + r^2]^{1/2}, \quad (21a)$$

$$\cos \phi_2 = (\eta - z) / [(\eta - z)^2 + r^2]^{1/2}, \quad (21b)$$

de forma que se pode calcular:

$$r_3^2 = 2 \{ [(\eta+z)^2+r^2]^{1/2} + (\eta+z) \} / [(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}, \quad (22a)$$

$$r_4^2 = 2 \{ [(\eta-z)^2+r^2]^{1/2} - (\eta-z) \} / [(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}, \quad (22b)$$

$$r_5^2 = 2 \{ [(\eta+z)^2+r^2]^{1/2} - (\eta+z) \} / [(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}, \quad (22c)$$

$$r_6^2 = 2 \{ [(\eta-z)^2+r^2]^{1/2} + (\eta-z) \} / [(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}. \quad (22d)$$

Notando que o fator 2 é comum às expressões acima, e que os denominadores de (22a) e de (22b) são, respectivamente, iguais aos de (22c) e de (22d), podemos escrever:

$$\begin{pmatrix} r_3 & r_4 \\ r_5 & r_6 \end{pmatrix} = \frac{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}+\eta+z}{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}-\eta-z} \frac{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}-\eta+z}{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}+\eta-z}. \quad (23)$$

Multiplicando e dividindo cada uma das frações, explicitadas em (23), pelos respectivos conjugados dos denominadores, e simplificando:

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_3}{r_5} \frac{r_4}{r_6} \right)^2 &= \frac{\{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}+(\eta+z)\}^2}{(\eta+z)^2+r^2-(\eta+z)^2} \frac{\{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}-(\eta-z)\}^2}{(\eta-z)^2+r^2-(\eta-z)^2} = \\ &= r^{-4} \{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}+(\eta+z)\}^2 \{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}-(\eta-z)\}^2. \end{aligned} \quad (24)$$

Finalmente, pode-se substituir a raiz quadrada de (24) em (20), para chegar à expressão do potencial em coordenadas cilíndricas, em função de r e z :

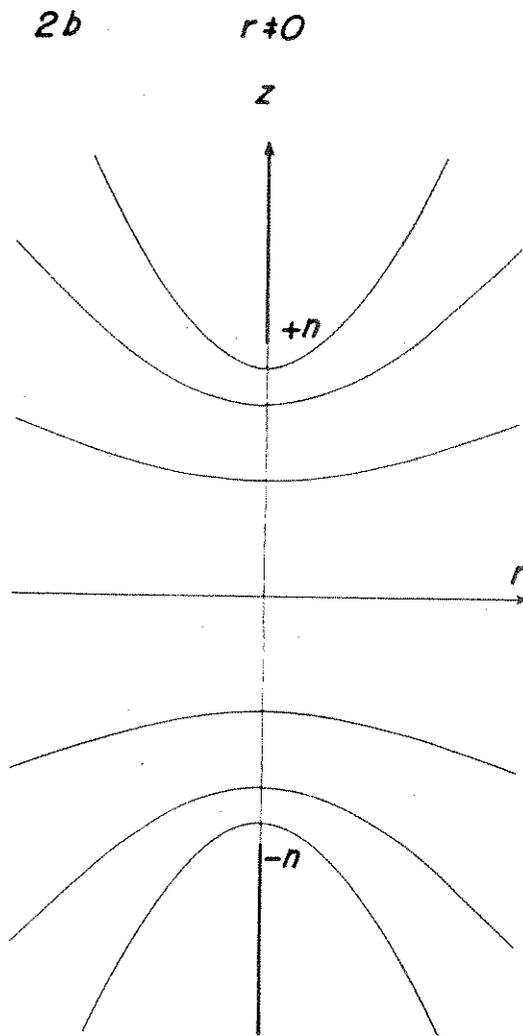
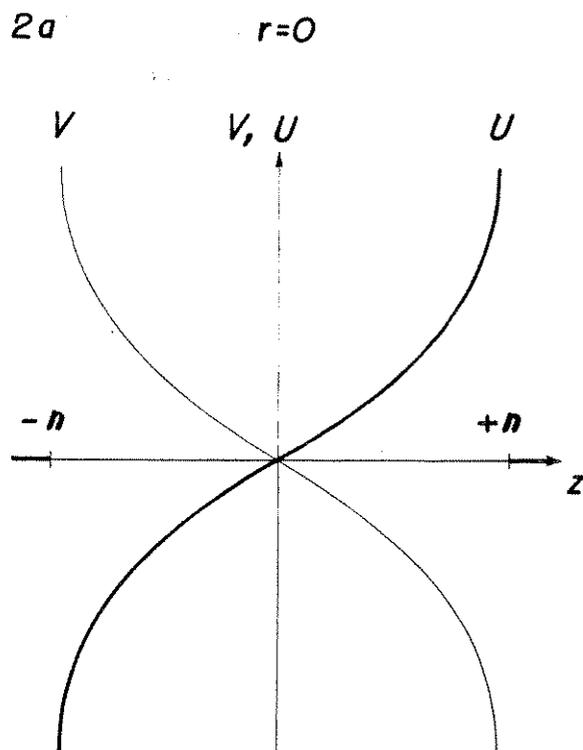
$$U = U_0 \ln \left| r^{-2} \{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}+\eta+z\} \{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}-\eta+z\} \right|, \quad (25)$$

c. q. d.

Pode-se mostrar, com algum trabalho, que o resultado (25) equivale, no limite $r \rightarrow 0$, ao resultado (6), válido para o caso do *espaçamento túnel*. Esta prova consta no Apêndice B (q. v.), onde, contudo, parte-se da expressão na forma (16), por conveniência computacional.

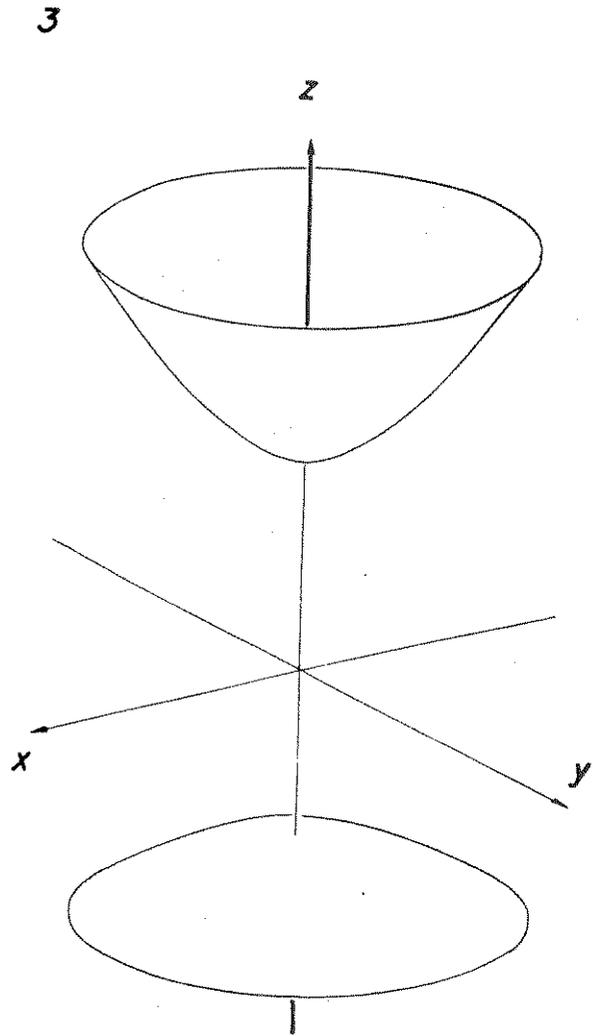
Na Fig. 2 (a), mostra-se o potencial eletrostático U e a energia potencial V no espaçamento túnel. A Fig. 2 (b) apresenta o esboço de algumas das equipotenciais, em corte, obtido a partir dos resultados fornecidos pela expressão deduzida no Apêndice C.

Fig. 2. (a) Forma do potencial U e da energia potencial V no espaçamento túnel ($-\eta < z < \eta$), em função da distância z , dadas pelas equações (6) e (7), respectivamente. (b) Seção transversal de algumas das eqüipotenciais, dadas pela equação (25), para o espaço tridimensional, excluindo o eixo z .



Um exemplo aplicativo do presente modelo (Fig. 3) é o estudo topográfico direto, pela microscopia de tunelamento de elétrons, de uma outra ponta de MTE: tal trabalho parece ter sido efetuado pioneiramente por R. García Cantú e M. A. Huerta-Garnica, que caracterizaram uma ponta de MTE (obtida por corrosão eletroquímica) por meio de outro MTE, cf. García Cantú & Huerta-Garnica (1989). As pontas de sondagem e de amostra, no presente modelo, podem-se escolher de conformidade com resultados de experimentos, dispondo-se da flexibilidade de que as duas pontas apresentem dimensões bem diferentes; dificilmente outro modelo permitiria um tratamento tão simples do problema.

Fig. 3. Vista tridimensional de duas folhas arbitrárias (de dois hiperbolóides distintos), que podem modelar dois eletrodos em forma de ponta (no caso em que a amostra é também uma ponta), como ao se estudar a topografia de uma ponta de MTE. Tomam-se equipotenciais de diferentes concavidades, para ilustrar o processo adequado ao tratamento das investigações de García Cantú & Huerta-Garnica (1989).



3. CÁLCULO DO CAMPO ELÉTRICO.

Calcula-se aqui o campo elétrico \mathcal{E} no *espaçamento túnel* (caso $r = 0$, $-\eta < z < \eta$) a partir do resultado (6), e no espaço restante (caso $r \neq 0$) a partir do resultado (25). Em ambos os casos, parte-se da conhecida expressão que fornece o vetor campo elétrico $\vec{\mathcal{E}}$ como o simétrico do gradiente do potencial, ou seja, em coordenadas cilíndricas:

$$\vec{\mathcal{E}}(r, \phi, z) = -\frac{\partial U}{\partial r} \vec{a}_r - \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \phi} \vec{a}_\phi - \frac{\partial U}{\partial z} \vec{a}_z, \quad (26)$$

onde, em virtude da hipótese de simetria cilíndrica, i. e., $\partial V/\partial \phi = 0$, pode-se

reescrever (26) como:

$$\vec{\mathcal{E}}(r, z) = -\nabla U = -\frac{\partial U}{\partial r} \vec{a}_r - \frac{\partial U}{\partial z} \vec{a}_z \quad (27)$$

O objetivo é motivar a discussão subsequente das diferentes probabilidades de tunelamento *direto* — i. e., da ponta à amostra, cf. Lucas, Cutler *et al.* (1988:462) — e *reverso* (da amostra à ponta, *ibidem*).

Trata-se, como se verá adiante, de uma característica importante do presente modelo, principalmente por fornecer, por meio de cálculos exatamente simples, os resultados discutidos qualitativamente por Lucas, Cutler *et al.* (1988:461-5).

3.1 Campo elétrico no espaçamento túnel ($r = 0$, $-\eta < z < +\eta$).

Neste caso, visto que a expressão (6) independe de r , i. e., $\partial U/\partial r = 0$, (27) torna-se simplesmente:

$$\vec{\mathcal{E}}(z) = -\nabla U(z) = -\frac{\partial U}{\partial z} \vec{a}_z = -\frac{dU(z)}{dz} \vec{a}_z \quad (28)$$

expressão esta que, a partir de (6a), pode fornecer a *intensidade* do campo elétrico \mathcal{E} no *espaçamento túnel* (neste caso, basta lembrar que o sinal negativo, em (28), indica meramente que o sentido do campo é oposto à orientação do eixo z):

$$\mathcal{E} = -U_0 \frac{d}{dz} \ln \left| \frac{\eta+z}{\eta-z} \right| = -U_0 \left| \frac{\eta-z}{\eta+z} \right| \left| \frac{2\eta}{(\eta-z)^2} \right| \quad (29a)$$

$$\therefore \boxed{\mathcal{E} = \mathcal{E}(z) = \frac{-2U_0\eta}{\eta^2 - z^2}} \quad (29b)$$

onde (29b) vale para o *espaçamento túnel*, i. e., a região do espaço restrita, como vimos (Seção 2), por $r = 0$ e $-\eta < z < \eta$.

3.2 Campo elétrico no espaço restante ($r \neq 0$).

Aplicando (25) a (27), podem-se definir os fatores radial, \mathcal{E}_r , e zenital, \mathcal{E}_z , do campo, respectivamente definidos aqui por:

$$\vec{\mathcal{E}} = -U_0 (\mathcal{E}_r \vec{a}_r + \mathcal{E}_z \vec{a}_z), \quad (30)$$

onde:

$$\mathcal{E}_r = \partial U / \partial r, \quad (30a)$$

$$\mathcal{E}_z = \partial U / \partial z. \quad (30b)$$

Note-se que \mathcal{E}_r e \mathcal{E}_z , tal como se definem acima, não correspondem às grandezas dos vetores componentes do campo, pois estas seriam dadas, a rigor, por $-U_0 \mathcal{E}_r$ (radial) e $-U_0 \mathcal{E}_z$ (tangencial).

Calculando \mathcal{E}_r , a partir de (25) e (30a):

$$\mathcal{E}_r = \frac{\partial}{\partial r} \ln \left| r^{-2} \left[\sqrt{(\eta+z)^2 + r^2} + \eta+z \right] \left[\sqrt{(\eta-z)^2 + r^2} - \eta+z \right] \right| \quad \therefore \quad (31a)$$

$$\therefore \mathcal{E}_r = \frac{r [(\eta+z)^2 + r^2]^{-1/2}}{[(\eta+z)^2 + r^2]^{1/2} + \eta+z} + \frac{r [(\eta-z)^2 + r^2]^{-1/2}}{[(\eta-z)^2 + r^2]^{1/2} - \eta+z} - \frac{2}{r}, \quad (31b)$$

e calculando \mathcal{E}_z , a partir de (25) e (30b):

$$\mathcal{E}_z = \frac{\partial}{\partial z} \ln \left| r^{-2} \left[\sqrt{(\eta+z)^2 + r^2} + \eta+z \right] \left[\sqrt{(\eta-z)^2 + r^2} - \eta+z \right] \right| \quad \therefore \quad (32a)$$

$$\therefore \mathcal{E}_z = \frac{(\eta+z) [(\eta+z)^2 + r^2]^{-1/2} + 1}{[(\eta+z)^2 + r^2]^{1/2} + \eta+z} + \frac{(\eta-z) [(\eta-z)^2 + r^2]^{-1/2} + 1}{[(\eta-z)^2 + r^2]^{1/2} - \eta+z}, \quad (32b)$$

obtem-se, finalmente, a expressão do campo elétrico pela substituição de (31b) e (32b) em (30):

$$\therefore \vec{\epsilon} = -U_0 \left\{ \frac{r[(\eta+z)^2+r^2]^{-1/2}}{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}+\eta+z} + \frac{r[(\eta-z)^2+r^2]^{-1/2}}{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}-\eta+z} - \frac{2}{r} \right\} \vec{a}_r +$$

$$-U_0 \left\{ \frac{(\eta+z)[(\eta+z)^2+r^2]^{-1/2}+1}{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}+\eta+z} + \frac{(\eta-z)[(\eta-z)^2+r^2]^{-1/2}+1}{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}-\eta+z} \right\} \vec{a}_z \quad (33)$$

4. COMENTÁRIOS.

Os cálculos acima, dada a geometria peculiar do problema, mostram a necessidade de duas expressões, tanto para o potencial, quanto para o campo elétrico. As equações (6) ou (7), e (29b) valem para o *espaçamento túnel*, i. e., o segmento do eixo z em que não há cargas ($r = 0$, $-\eta < z < +\eta$), ao passo que as equações (25) e (33) valem para o espaço restante, i. e., qualquer ponto do espaço tridimensional não pertencente ao eixo z. Mostra-se no Apêndice B a compatibilidade entre as expressões para ambos os casos, pela simples demonstração de que, no limite $r \rightarrow 0$, a equação (16) tende à equação (6). Resolveu-se, para efeito sistemático, o problema tridimensional completo, mas o alvo básico é o caso unidimensional, expresso pelos resultados (6) ou (7) e (29b), que modela o tunelamento no MTE na região de máxima probabilidade de transmissão, que é ao longo do eixo z, onde há maior proximidade entre a equipotencial escolhida e o plano $z = 0$.

Tratar o potencial na região classicamente proibida como constante — como Huang *et al.* (1989:C8-32) — pode facilitar as contas, mas parece pouco útil. Os tratamentos mais comuns pela *teoria das perturbações* — por exemplo, Feuchtwang *et al.* (1983), Lucas, Morawitz *et al.* (1988), entre muitos outros — aproveitam freqüentemente resultados do excelente artigo de Simmons (1963), que resolve o problema do tunelamento em junções MIM (metal-isolante-metal), cujos eletrodos são planos. O modelo de Russell para o microscópio de emissão de campo (MEC), por meio de uma espécie de carta de Smith, em coordenadas esféricas 'alongadas' — "prolate", cf. Russell (1962:971), também citado em Feenstra *et al.* (1987:304) — apresenta um resultado semelhante à equação (6).

A dependência exponencial da corrente túnel com a distância ponta-amostra, conhecida pelo menos desde que Fowler & Nordheim (1928) trataram o tema de maneira unificada à emissão termiônica, permite o tratamento unidimensional, aplicando-se a Equação (7) à equação de Schrödinger independente do

tempo, fornecendo-se assim sua solução estacionária (adaptando-se o modelo aos resultados experimentais, no ajuste dos parâmetros e das condições de contorno às medições). Os métodos de solução numérica e o WKB podem ser cotejados, este (a ser comentado e utilizado no próximo capítulo) podendo-se encarar como o mais simples, já que se restringe praticamente ao cálculo de uma integral, no caso de uma dimensão; cf. Bender e Orszag (1978:484-543), onde se encontra todo um capítulo que trata da *teoria WKB*, incluindo sua aplicação ao tunelamento.

Cabe um esclarecimento quanto à forma da ponta, porque esta deve satisfazer os requisitos da aplicação que se tiver em vista. Uma primeira aproximação seria a própria densidade linear de carga, o que subentende uma ponta não-metálica. Caso tal aproximação não seja válida (e este é, em geral, o caso no MTE), deve-se recorrer a qualquer das equipotenciais (v. Apêndice C) para modelar uma ponta metálica (com potencial constante finito). O resultado mais imediato deste último caso é que a resolução atômica se mostra possível, dentro de certos limites (que não incluam, por exemplo, a possibilidade da ponta destruir estruturas de uma amostra excessivamente rugosa), mesmo no caso de uma ponta *grossa* ou *cega* — desde que esta seja posicionada mais proximamente à superfície, v. Fig. 2 (b). Binnig e Rohrer (1987:617) ressaltam a instabilidade e a extrema sensibilidade a vibrações, que inviabilizam a aplicação, no MTE, da ponta comprida e fina do MEC. Quanto à ponta física, espera-se intuitivamente que, *qualquer que seja a forma desta*, haverá uma *ponta eletrônica equivalente*, adaptável à situação experimental.

As Figs. 4 e 5 ilustram as duas possibilidades, no caso de amostra plana, de polarização do MTE, adotando a terminologia utilizada por Lucas, Cutler *et al.* (1988:462). No caso de *ponta negativa* (Fig. 4), tem-se a chamada *polarização direta* ("*forward bias*", que se denota FB) e, no caso de *ponta positiva* (Fig. 5), a chamada *polarização reversa* ("*backward bias*", BB). Comparando-se as barreiras unidimensionais (ao longo do eixo z) nos dois casos, nota-se que o modelo confirma a imagem discutida qualitativamente em Lucas, Cutler *et al.* (1988:463): a barreira, de fato, é maior no caso de polarização reversa (a mais adequada, aliás, na sondagem topográfica de amostras neutras pelo MTE; justamente pela menor probabilidade de tunelamento, acentuam-se as feições topográficas nesta configuração, em relação à polarização direta).

Lucas, Cutler *et al.* (1988) mencionam três fatores básicos que influenciam a *assimetria*, e portanto, o *comportamento retificador de corrente* de uma *junção túnel*:

- *Assimetria de material*: As diferenças de função de trabalho e nível de Fermi nos eletrodos de tunelamento causam a assimetria da probabilidade de transmissão, mesmo na total ausência de polarização externa aplicada entre estes eletrodos.
- *Assimetria térmica*: Lucas & Cutler (1973) trataram a questão da diferença de temperatura entre os dois eletrodos do diodo de contacto de ponta, para explicar a característica de retificação deste dispositivo, utilizando argumentos geométricos e a teoria de emissão térmica de campo. O efeito se deve à elevação do nível de Fermi no eletrodo que estiver a uma temperatura mais elevada. A grandes diferenças de temperatura, atinge-se o limiar de emissão termiônica, quando um número significativo de elétrons tem energia suficiente para ultrapassar a barreira.
- *Assimetria Geométrica*: Eletrodos de mesmo material, à mesma temperatura e sem aplicação de campo externo, em virtude da maior concentração das linhas de campo nas proximidades da ponta — ver equação (29b) — apresentam caráter retificador. Observações experimentais deste comportamento no MTE apresentam-se, por exemplo, em Lucas, Cutler *et al.* (1988) e em Feenstra *et al.* (1987).

Cumprе ressaltar que, na análise unidimensional, o modelo arca com todo o efeito de assimetria geométrica, cuja origem é, não obstante, tridimensional. Simplificam-se assim todos os cálculos, sem perda das características essenciais do problema; em particular, a questão da dependência da probabilidade de tunelamento com a polaridade relativa entre ponta e amostra.

Fig. 4. (a) O MTE em polarização direta (ponta negativa em relação à amostra).
 (b) O elétron tem grande probabilidade de tunelar da ponta (esquerda) à amostra (direita).

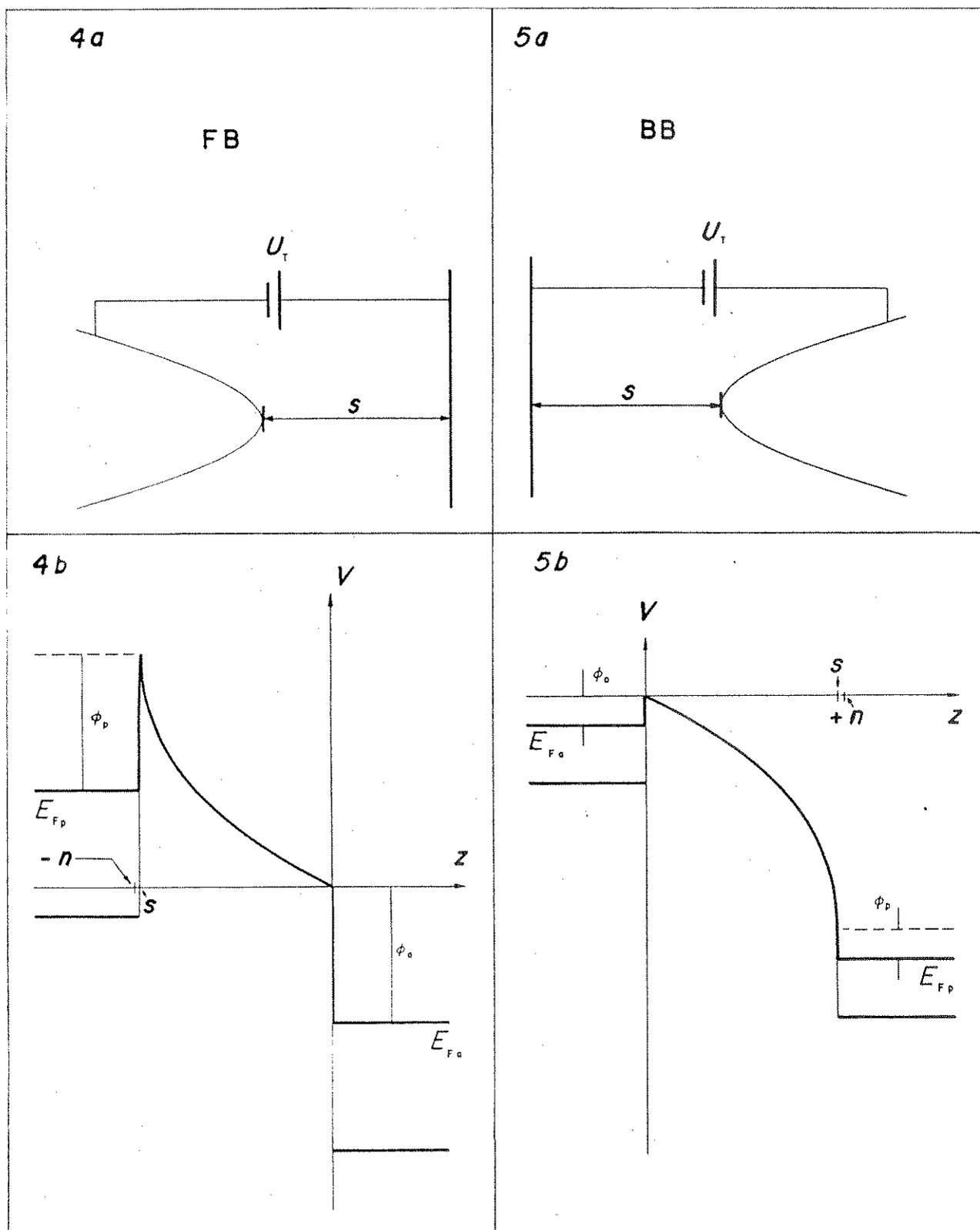


Fig. 5. (a) O MTE em polarização reversa (ponta positiva em relação à amostra).
 (b) O elétron tem probabilidade bem menor de tunelar da amostra (esquerda) à ponta (direita).

APÊNDICE II.A

CÁLCULO DA INTEGRAL DO TIPO EM (12):

$$\int [(z' - z'_1)(z' - z'_2)]^{-1/2} dz' \quad \text{A-0}$$

Reescrevendo-se o integrando acima como:

$$[(z' - z'_1)(z' - z'_2)]^{1/2} = \left[\frac{(z' - z'_1)}{(z' - z'_2)} (z' - z'_2)^2 \right]^{1/2}, \quad \text{A-1}$$

efetuando-se, na expressão **A-1**, a *terceira substituição de Euler*:

$$t = \left[\frac{z' - z'_1}{z' - z'_2} \right]^{1/2}, \quad \text{A-2}$$

substituindo-se **A-2** em **A-1**:

$$[(z' - z'_1)(z' - z'_2)]^{1/2} = t |z' - z'_2|, \quad \text{A-3}$$

e escrevendo-se **A-2** com a separação de z :

$$z' = \frac{z'_2 t^2 - z'_1}{t^2 - 1}, \quad \text{A-4}$$

onde:

$$z'_2 t^2 - z'_1 = u \quad \text{A-5}$$

e

$$\frac{1}{t^2 - 1} = v = \frac{1}{y} = y^{-1}; \quad \text{A-6}$$

logo:

$$z' = u v \therefore \quad \text{A-7}$$

$$\therefore dz' = u dv + v du, \quad \text{A-8}$$

$$du = 2 z'_2 t dt, \quad \text{A-9}$$

$$dv = -y^{-2} dy = \frac{-1}{(t^2 - 1)^2} 2 t dt. \quad \text{A-10}$$

Efetutando-se as devidas substituições em A-8:

$$dz' = - (z'_2 t^2 - z'_1) \frac{2 t}{(t^2 - 1)^2} dt + \frac{1}{t^2 - 1} 2 z'_2 t dt \therefore \quad \text{A-11}$$

$$\therefore dz' = \frac{2 t (-z'_2 t^2 + z'_1 + z'_2 t^2 - z'_2)}{(t^2 - 1)^2} dt \therefore \quad \text{A-12}$$

$$\therefore dz' = \frac{2 t (z'_1 - z'_2)}{(t^2 - 1)^2} dt. \quad \text{A-13}$$

Aplicando-se as equações A-3, A-4 e A-13 na equação A-0:

$$\begin{aligned} & \int [(z'_1 - z'_2)(z'_1 - z'_2)]^{-1/2} dz' = \\ & = \int \frac{2 t (z'_1 - z'_2)}{(t^2 - 1)^2 t} \left| \frac{z'_2 t^2 - z'_1}{t^2 - 1} - z'_2 \right|^{-1} dt = \\ & = \int \frac{2 (z'_1 - z'_2)}{|t^2 - 1| \cdot |z'_2 t^2 - z'_1 - z'_2 t^2 + z'_2|} dt = \int \frac{2 dt}{|t^2 - 1|}. \end{aligned} \quad \text{A-14}$$

A última integral em A-14 pode ser obtida a partir de:

$$\int_0^t \frac{dt'}{|t'^2 - 1|} = \frac{1}{2} \ln \left| \frac{1+t}{1-t} \right| + c = \text{arc tgh } t + c. \quad \text{A-15}$$

Portanto, a solução de **A-14** é:

$$\int [(z' - z'_1)(z' - z'_2)]^{-1/2} dz' = \ln \left| \frac{1+t}{1-t} \right| + C, \quad \text{A-16}$$

onde podemos desprezar a constante C , visto que as integrais em (12) são definidas.

Substituindo-se t por **A-2**, em **A-16**:

$$\begin{aligned} \int [(z' - z'_1)(z' - z'_2)]^{-1/2} dz' &= \ln \left| \frac{1 + (z' - z'_1)^{1/2} / (z' - z'_2)^{1/2}}{1 - (z' - z'_1)^{1/2} / (z' - z'_2)^{1/2}} \right| = \\ &= \ln \left| \frac{(z' - z'_2)^{1/2} + (z' - z'_1)^{1/2}}{(z' - z'_2)^{1/2} - (z' - z'_1)^{1/2}} \right|. \end{aligned} \quad \text{A-17}$$

APÊNDICE II.B

PROVA DE QUE AS EQUAÇÕES DEDUZIDAS EM 2.2 E 2.1 SÃO COMPATÍVEIS

Partindo da equação (16), que se pode reescrever como:

$$U = U_0 \ln \left| \frac{\sqrt{\eta+z-ir} + \sqrt{\eta+z+ir}}{\sqrt{\eta+z-ir} - \sqrt{\eta+z+ir}} \frac{\sqrt{\eta-z+ir} - \sqrt{\eta-z-ir}}{\sqrt{\eta-z+ir} + \sqrt{\eta-z-ir}} \right|. \quad \text{B-1}$$

Note-se que a substituição direta de $r = 0$, tanto na equação (16) quanto em B-1 acima, resultaria numa indeterminação do tipo $0/0$, para o termo dentro do módulo. Para levantar a referida indeterminação, o artifício consiste em multiplicar cada fração, numerador e denominador, pelo respectivo conjugado do termo que se anula quando $r = 0$, i. e.:

- (i) Multiplica-se o numerador e o denominador da primeira fração, em B-1 acima, pelo seu próprio numerador:

$$\sqrt{\eta+z-ir} + \sqrt{\eta+z+ir}; \quad \text{B-2}$$

- (ii) Multiplica-se o numerador e o denominador da segunda fração, em B-1, pelo seu próprio denominador:

$$\sqrt{\eta-z+ir} + \sqrt{\eta-z-ir}. \quad \text{B-3}$$

Assim, B-1 torna-se:

$$\begin{aligned} U &= U_0 \ln \left| \frac{(\sqrt{\eta+z-ir} + \sqrt{\eta+z+ir})^2}{\eta+z-ir-\eta-z-ir} \frac{\eta-z+ir-\eta+z-ir}{(\sqrt{\eta-z+ir} + \sqrt{\eta-z-ir})^2} \right| = \\ &= U_0 \ln \left| \frac{i2r (\sqrt{\eta+z-ir} + \sqrt{\eta+z+ir})^2}{-i2r (\sqrt{\eta+z-ir} + \sqrt{\eta+z+ir})^2} \right|. \quad \text{B-4} \end{aligned}$$

Após a simplificação do fator $i2r$, comum ao numerador e denominador, podemos aplicar o limite $r \rightarrow 0$ em B-4:

$$\lim_{r \rightarrow 0} U = \lim_{r \rightarrow 0} U_0 \ln \left| \frac{(\sqrt{\eta+z-ir} + \sqrt{\eta+z+ir})^2}{(\sqrt{\eta-z+ir} + \sqrt{\eta-z-ir})^2} \right| = U_0 \ln \left| \frac{(2\sqrt{\eta+z})^2}{(2\sqrt{\eta-z})^2} \right| \therefore$$

$$\therefore \boxed{\lim_{r \rightarrow 0} U(r, z) = U_0 \ln \left| \frac{\eta+z}{\eta-z} \right|}, \quad \text{B-5}$$

onde B-5 é a equação (6), válida para $r = 0$, $-\eta < z < +\eta$, c. q. d.

APÊNDICE II.C

OBTENÇÃO DE UMA EXPRESSÃO ANALÍTICA PARA O TRAÇADO DAS EQUÍPOTENCIAIS

A partir da expressão do potencial $U(r, z)$, Eq. (25), retirando-se o módulo e multiplicando ambos os membros do resultado por r^2 (podemos fazê-lo, já que $r \neq 0$ por hipótese):

$$\{[(\eta+z)^2+r^2]^{1/2}+\eta+z\} \{[(\eta-z)^2+r^2]^{1/2}-\eta+z\} = \pm r^2 \exp U/U_0 \quad \text{C-1}$$

que, a partir das seguintes substituições:

$$\left. \begin{array}{l} \boxed{\alpha = (\eta+z)^2+r^2} \quad a, \quad \boxed{\beta = z+\eta} \quad b, \quad \boxed{\gamma = (\eta-z)^2+r^2} \quad c, \\ \boxed{\delta = z-\eta} \quad d, \quad e \quad \boxed{\zeta = \exp U/U_0} \quad e, \end{array} \right\} \quad \text{C-2}$$

resulta numa expressão mais econômica para C-1:

$$(\sqrt{\alpha} + \beta)(\sqrt{\gamma} + \delta) = \pm r^2 \zeta. \quad \text{C-3}$$

Elevando-se ao quadrado a expressão acima, elimina-se a indefinição de sinal:

$$\begin{aligned} (\sqrt{\alpha} + \beta)^2(\sqrt{\gamma} + \delta)^2 &= (\alpha + \beta^2 + 2\beta\sqrt{\alpha})(\gamma + \delta^2 + 2\delta\sqrt{\gamma}) = \\ &= (\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2) + 2\beta(\gamma + \delta^2)\sqrt{\alpha} + 2\delta(\alpha + \beta^2)\sqrt{\gamma} + 4\beta\delta\sqrt{\alpha\gamma} = r^4\zeta^2. \end{aligned} \quad \text{C-4}$$

Isolando os termos de C-4 que apresentam raízes:

$$2\beta(\gamma + \delta^2)\sqrt{\alpha} + 2\delta(\alpha + \beta^2)\sqrt{\gamma} + 4\beta\delta\sqrt{\alpha\gamma} = r^4\zeta^2 - (\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2), \quad \text{C-5}$$

e, a seguir, multiplicando ambos os membros de C-5 por $\sqrt{\alpha\gamma}$, obtém-se uma expressão com apenas duas raízes no primeiro membro:

$$2\alpha\beta(\gamma + \delta^2)\sqrt{\gamma} + 2\gamma\delta(\alpha + \beta^2)\sqrt{\alpha} + 4\alpha\beta\gamma\delta = [r^4\zeta^2 - (\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2)] \sqrt{\alpha\gamma}. \quad \text{C-6}$$

Passando $4\alpha\beta\gamma\delta$ para o membro direito em C-6, elevando ao quadrado e simplificando o fator comum $\alpha\gamma$, chega-se à seguinte expressão, em que a única raiz é $\sqrt{\alpha\gamma}$:

$$[2\alpha\beta(\gamma+\delta^2)\sqrt{\gamma} + 2\gamma\delta(\alpha+\beta^2)\sqrt{\alpha}]^2 =$$

$$= \{[r^4\zeta^2 - (\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)]\sqrt{\alpha\gamma} - 4\alpha\beta\gamma\delta\}^2 \therefore \quad \text{C-7a}$$

$$\therefore 4\alpha\beta^2(\gamma+\delta^2)^2 + 4\gamma\delta^2(\alpha+\beta^2)^2 + 8\beta\delta(\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)\sqrt{\alpha\gamma} =$$

$$= [r^4\zeta^2 - (\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)]^2 + 16\alpha\gamma(\beta\delta)^2 - 8[r^4\zeta^2 - (\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)]\beta\delta\sqrt{\alpha\gamma}. \quad \text{C-7b}$$

Isolando os termos de C-7b que apresentam o fator raiz de $\alpha\gamma$:

$$8\beta\delta [(\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2) + r^4\zeta^2 - (\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)]\sqrt{\alpha\gamma} =$$

$$= [r^4\zeta^2 - (\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)]^2 + 16\alpha\beta^2\gamma\delta^2 - 4\alpha\beta^2(\gamma+\delta^2)^2 - 4\gamma\delta^2(\alpha+\beta^2)^2 \therefore \quad \text{C-8a}$$

$$\therefore 8\beta\delta\rho^4\zeta^2\sqrt{\alpha\gamma} =$$

$$= [r^4\zeta^2 - (\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)]^2 - 4[\alpha\beta^2(\gamma+\delta^2)^2 + \gamma\delta^2(\alpha+\beta^2)^2 - 4\alpha\beta^2\gamma\delta^2]. \quad \text{C-8b}$$

Antes de se elevar a expressão ao quadrado, eliminando-se assim a última raiz quadrada que resta, cabe observar que o último termo entre colchetes no membro direito de C-8b pode ser simplificado, a partir de:

$$\alpha\beta^2(\gamma+\delta^2)^2 + \gamma\delta^2(\alpha+\beta^2)^2 - 4\alpha\beta^2\gamma\delta^2 =$$

$$= \alpha\beta^2(\gamma^2+\delta^4) + 2\alpha\beta^2\gamma\delta^2 + \gamma\delta^2(\alpha^2+\beta^4) + 2\alpha\beta^2\gamma\delta^2 - 4\alpha\beta^2\gamma\delta^2 =$$

$$= \alpha\gamma(\beta^2\gamma+\alpha\delta^2) + \beta^2\gamma^2(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma) = (\alpha\gamma+\beta^2\delta^2)(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma). \quad \text{C-9}$$

Substituindo C-9 em C-8b e desenvolvendo o membro direito:

$$\begin{aligned}
8\beta\delta r^4 \zeta^2 \sqrt{\alpha\gamma} &= [r^4 \zeta^2 - (\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2)]^2 - 4(\alpha\gamma + \beta^2 \delta^2)(\alpha\delta^2 + \beta^2 \gamma) = \\
&= r^8 \zeta^4 - 2r^4 \zeta^2 (\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2) + [(\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2)]^2 - 4(\alpha\gamma + \beta^2 \delta^2)(\alpha\delta^2 + \beta^2 \gamma). \quad \text{C-10}
\end{aligned}$$

Pode-se simplificar C-10, notando que:

$$\begin{aligned}
& [(\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2)]^2 - 4(\alpha\gamma + \beta^2 \delta^2)(\alpha\delta^2 + \beta^2 \gamma) = \\
&= [(\alpha\gamma + \beta^2 \delta^2) + (\alpha\delta^2 + \beta^2 \gamma)]^2 - 4(\alpha\gamma + \beta^2 \delta^2)(\alpha\delta^2 + \beta^2 \gamma) = \\
&= [(\alpha\gamma + \beta^2 \delta^2) - (\alpha\delta^2 + \beta^2 \gamma)]^2 = [\alpha(\gamma - \delta^2) - \beta^2(\gamma - \delta^2)]^2 = \\
&= [(\alpha - \beta^2)(\gamma - \delta^2)]^2. \quad \text{C-11}
\end{aligned}$$

Substituindo o resultado de C-11 em C-10 e elevando ao quadrado, elimina-se a raiz:

$$8\beta\delta r^4 \zeta^2 \sqrt{\alpha\gamma} = r^8 \zeta^4 - 2r^4 \zeta^2 (\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2) + [(\alpha - \beta^2)(\gamma - \delta^2)]^2 \quad \text{C-12a}$$

$$\therefore 64\alpha\beta^2\gamma\delta^2 r^8 \zeta^4 = \{r^8 \zeta^4 - 2r^4 \zeta^2 (\alpha + \beta^2)(\gamma + \delta^2) + [(\alpha - \beta^2)(\gamma - \delta^2)]^2\}^2. \quad \text{C-12b}$$

Antes de efetuarmos o quadrado no membro direito de C-12b, é conveniente desenvolvermos algumas relações, a partir das definições C-2. De C-2a e C-2b:

$$\alpha - \beta^2 = (z + \eta)^2 + r^2 - (z + \eta)^2 \quad \therefore \quad \boxed{\alpha - \beta^2 = r^2}, \quad \text{C-13a}$$

e de C-2c e C-2d:

$$\gamma - \delta^2 = (z - \eta)^2 + r^2 - (z - \eta)^2 \quad \therefore \quad \boxed{\gamma - \delta^2 = r^2}. \quad \text{C-13b}$$

Logo:

$$[(\alpha - \beta^2)(\gamma - \delta^2)]^2 = (r^4)^2 \quad \therefore \quad \boxed{[(\alpha - \beta^2)(\gamma - \delta^2)]^2 = r^8}. \quad \text{C-13c}$$

Substituindo C-13c em C-12b, pode-se fatorar e simplificar o fator comum r^8 :

$$64\alpha\beta^2\gamma\delta^2r^8\zeta^4 = [r^8\zeta^4 - 2r^4\zeta^2(\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2) + r^8]^2 \quad \text{C-14a}$$

$$\therefore 64\alpha\beta^2\gamma\delta^2\zeta^4 = [r^4(\zeta^4+1) - 2\zeta^2(\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2)]^2 \quad \text{C-14b}$$

Novamente a partir de duas relações de C-2 podem-se separar, no membro direito de C-14b, os termos exclusivamente em r dos que dependem de z . De C-2a e C-2b, e de C-2c e C-2d, respectivamente:

$$\boxed{\alpha = \beta^2 + r^2} \quad \text{a,} \quad \text{e:} \quad \boxed{\gamma = \delta^2 + r^2} \quad \text{b.} \quad \text{C-15}$$

Logo:

$$\begin{aligned} (\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2) &= (2\beta^2+r^2)(2\delta^2+r^2) = 4\beta^2\delta^2 + 2r^2(\beta^2+r^2) + r^4 = \\ &= 2\beta^2(\delta^2+r^2) + 2\delta^2(\beta^2+r^2) + r^2. \end{aligned} \quad \text{C-15c}$$

Substituindo C-15a e C-15b de volta em C-15c:

$$\boxed{(\alpha+\beta^2)(\gamma+\delta^2) = 2\beta^2\gamma + 2\alpha\delta^2 + r^4}, \quad \text{C-15d}$$

que, por sua vez, substituído em C-14b:

$$\begin{aligned} 64\alpha\beta^2\gamma\delta^2\zeta^4 &= [r^4(\zeta^4+1) - 2\zeta^2(2\alpha\delta^2+2\beta^2\gamma+r^4)]^2 = \\ &= [r^4(\zeta^4-2\zeta^2+1) - 4\zeta^2(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)]^2 = \\ &= [r^4(\zeta^2-1)^2 - 4\zeta^2(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)]^2. \end{aligned} \quad \text{C-16}$$

Desenvolvendo-se o membro quadrático, reunindo todos os termos no mesmo membro e rearranjando:

$$\begin{aligned}
& 8r^4\zeta^2(\zeta^2-1)^2(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)-16\zeta^4(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)^2+64\alpha\beta^2\gamma\delta^2\zeta^4-r^8(\zeta^2-1)^4 = \\
& = 8r^4\zeta^2(\zeta^2-1)^2(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)-16\zeta^4[(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)^2-4\alpha\beta^2\gamma\delta^2]-r^8(\zeta^2-1)^4 = \\
& = 0.
\end{aligned}
\tag{C-17}$$

A partir de:

$$\boxed{(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)^2 - 4\alpha\beta^2\gamma\delta^2 = (\alpha\delta^2-\beta^2\gamma)^2},
\tag{C-18}$$

pode-se substituir C-18 em C-17, simplificando:

$$8r^4\zeta^2(\zeta^2-1)^2(\alpha\delta^2+\beta^2\gamma)-16\zeta^4(\alpha\delta^2-\beta^2\gamma)^2-r^8(\zeta^2-1)^4 = 0.
\tag{C-19}$$

Desfazendo as relações C-2 para α , β , γ e δ , observe-se que:

$$\begin{aligned}
\alpha\delta^2+\beta^2\gamma &= [(\eta+z)^2+r^2](z-\eta)^2+[(\eta-z)^2+r^2](z+\eta)^2 = \\
&= 2(z^2-\eta^2)^2+r^2[(z-\eta)^2+(z+\eta)^2] = 2(z^4-2z^2\eta^2+\eta^4)+2r^2(z^2+\eta^2) = \\
&= 2z^4+2(r^2-2\eta^2)z^2+2\eta^2(r^2+\eta^2) \therefore
\end{aligned}
\tag{C-20a}$$

$$\therefore \boxed{\alpha\delta^2+\beta^2\gamma = 2[z^4+(r^2-2\eta^2)z^2+\eta^2(r^2+\eta^2)]},
\tag{C-20b}$$

e:

$$\begin{aligned}
\alpha\delta^2-\beta^2\gamma &= [(\eta+z)^2+r^2](z-\eta)^2-[(\eta-z)^2+r^2](z+\eta)^2 = \\
&= r^2[(z-\eta)^2+(z+\eta)^2] = r^2(-4\eta z) \therefore
\end{aligned}
\tag{C-20c}$$

$$\therefore \boxed{(\alpha\delta^2-\beta^2\gamma)^2 = 16\eta^2r^4z^2},
\tag{C-20d}$$

de forma que a substituição de C-20b e C-20d em C-19, com a subsequente simplificação do fator comum r^4 , resulta em:

$$16\zeta^2(\zeta^2-1)^2[z^4+(r^2-2\eta^2)z^2+\eta^2(r^2+\eta^2)] - 16\zeta^4(16\eta^2z^2) + \\ - r^4(\zeta^2-1)^4 = 0,$$

C-21

que se pode reescrever como uma equação biquadrática em z:

$$16\zeta^2(\zeta^2-1)^2z^4 - 16\zeta^2[(\zeta^2-1)^2(2\eta^2-r^2)+16\eta^2\zeta^2]z^2 + \\ + (\zeta^2-1)^2[16\eta^2(r^2+\eta^2)\zeta^2-r^4(\zeta^2-1)^2] = 0,$$

C-22

cuja solução para z pode ser obtida facilmente:

$$z = \pm \left\{ \eta^2 - \frac{r^2}{2} + 8 \left(\frac{\eta\zeta}{\zeta^2-1} \right)^2 \pm \sqrt{\left[\eta^2 - \frac{r^2}{2} + 8 \left(\frac{\eta\zeta}{\zeta^2-1} \right)^2 \right]^2 - (r^2+\eta^2)\eta^2 + r^4 \left(\frac{\zeta^2-1}{4\zeta} \right)^2} \right\}^{1/2},$$

C-22a

onde a primeira indefinição de sinal (\pm) meramente responde pelo par de famílias eqüipotenciais (trata-se de uma família de hiperbolóides de revolução, de duas folhas), destinadas a aplicações modeláveis pelo comportamento de potencial e campo gerados por duas linhas de cargas opostas; este é o caso, p. ex., do trabalho de R. García Cantú e M. A. Huerta-Garnica, que estudaram a topografia de uma ponta de MTE (obtida por corrosão eletroquímica) por meio da própria microscopia de tunelamento de elétrons, cf. García Cantú & Huerta-Garnica (1989); outra aplicação é o traçado das curvas características de um transistor, constituído de linhas metalizadas e operado por efeito túnel.

Quanto à segunda indefinição de sinal (\pm) em C-22a, sua interpretação é um pouco menos trivial. Devido à falta de espaço, segue-se apenas uma discussão resumida sobre a origem e a interpretação da referida indefinição.

Visto que partimos de uma expressão entre módulos, Eq. (25), o artifício de se elevar C-3 ao quadrado somente eliminou "graficamente" uma indefinição inerente, que se origina, em última instância, do fato de que todos os cálcu-

los se baseiam nas *distâncias* entre um ponto arbitrário (mas não situado sobre as linhas de cargas) do espaço tridimensional e cada um dos pontos das linhas de cargas. Obviamente, o conceito matemático de "distância" depende inevitavelmente do conceito de módulo, pelo menos na forma como aqui se desenvolveu o equacionamento. Por outro lado, a simples inspeção de C-2b e d mostra qual dos dois termos resultaria num valor negativo, bem como em que condições: o primeiro, se $z < -\eta$; e o segundo, se $z < \eta$.

Com base puramente nos argumentos físicos da *teoria das imagens*, não demonstraremos matematicamente o que se expõe a seguir, se bem que concluiremos a exposição com uma expressão matemática rigorosa para as condições impostas sobre r , tal que se possa decidir qual dos sinais, (+) ou (-), vale para um determinado ponto do espaço, do qual conhecemos o valor do potencial, mas cuja coordenada z nos é (ainda) desconhecida. Aí então, pode-se calcular z pela expressão C-22a, com a segunda indefinição de sinal resolvida para *este ponto específico*; obviamente, supõem-se conhecidos não só o potencial $U(r, z)$ do ponto, como também sua coordenada r .

Restringimo-nos ao caso em que $z > 0$, já que a *teoria das imagens* nos garante que o plano $z = 0$ é um plano de simetria. Supondo então $z < \eta$, como já vimos, a expressão C-2b tem um valor negativo. É justamente este sinal negativo que devemos escolher na segunda indefinição de sinal em C-22a, caso $z < \eta$. Assim, conclui-se que o ponto z pode ser calculado por C-22a com sinal negativo se $z < \eta$, e com sinal positivo se $z > \eta$. Mas se estamos justamente interessados em calcular z , precisamos "traduzir" tais limitações à variável z , com suas respectivas opções de sinais, numa expressão que se não valha explicitamente de z . Em outras palavras, como saber se z é ou não maior que η ? É esta questão que será respondida a seguir, por meio de uma expressão que relacione r e U , sem necessidade de se conhecer o valor de z previamente.

Nas condições $0 < z < \eta$, é portanto óbvio que o valor do potencial U em qualquer ponto é positivo e, além disso, para o mesmo valor de r , o potencial U no ponto em que $z < \eta$ seria menor que o potencial no ponto cuja coordenada z fosse exatamente $z = \eta$. Seja ζ_0 o resultado de C-2e para o caso $z > \eta$. Pode-se então usar este resultado e a equação C-1 (calculada em $z = \eta$) para estabelecermos a desigualdade:

$$\zeta_0 > \frac{\sqrt{4\eta^2 + r^2} + 2\eta}{r}, \quad \text{C-22b}$$

que, resolvida para r fornece:

$$r_0 = 4 \frac{\eta\zeta}{\zeta^2 - 1}$$

C-22c

Conforme o raciocínio exposto acima, r_0 , dado por C-22c, representa o valor mínimo de r , tal que se deve escolher o sinal *negativo* na segunda indeefinição de sinal em C-22a. Ou, o que dá no mesmo, o valor máximo para que se escolha o sinal positivo. Isto porque r_0 é o valor de r , que anula a expressão dentro da raiz quadrada mais interna em C-22a (o que é fácil verificar). De fato, igualar tal resultante para r , não é senão um meio alternativo de se chegar a C-22c. Parece-nos, contudo, preferível a ponderação física acima a uma argumentação puramente aritmética, fisicamente inópia.

Resta acrescentar que a expressão C-22a possui a vantagem de valer *também* para o *espaçamento túnel* (i. e., a região $r = 0$, $-\eta < z < \eta$). Isto porque, ao simplificarmos o fator comum r^4 , entre C-20d e C-21, desapareceu a indeterminação tipo $0 \div 0$ (como ocorria com a expressão inicial, Eq. (25)). Note-se a ausência, em C-22a, mesmo de qualquer denominador em r . Portanto, ao contrário do ocorrido nos cálculos de potencial e campo (quando duas expressões se faziam necessárias, para dar conta de todo o espaço tridimensional onde o potencial fosse finito), C-22a responde por toda a região de interesse. A única dificuldade surgiria no caso $U = 0$ (pois isto tornaria $\zeta = 1$, anulando os denominadores em $\zeta^2 - 1$, de C-22a), não fosse o fato de sabermos que, neste caso, a equipotencial é simplesmente o plano $z = 0$.

CAPÍTULO III

APLICAÇÃO DO MODELO: CORRENTE WKB. CONCLUSÃO.

Sinopse. O método WKB, aplicado ao modelo unidimensional e simples do microscópio de tunelamento de elétrons (MTE), permite a compreensão das assimetrias geométricas inerentes ao instrumento e o cálculo da corrente.

1. INTRODUÇÃO.

As propostas de modelamento do MTE, apesar da simplicidade de sua construção e princípio de funcionamento, têm-se mostrado complicadas. Para uma revisão sucinta, v. Binnig & Rohrer (1987); Kuk & Silverman (1989) discutem brevemente a equação de corrente. Ademais, tais modelos freqüentemente tratam o tunelamento como se fosse independente do sentido de polarização entre ponta e amostra, como no modelo de Stoll *et al.* (1984). Em geral, contudo, a ponta negativa em relação à amostra apresenta probabilidade de tunelamento *muito maior* que a recíproca, no caso de amostra neutra, conforme discutem qualitativamente Lucas, Cutler, *et al.* (1988). Visto que nos casos usuais de levantamentos topográficos por MTE, deseja-se acentuar a leitura das rugosidades da superfície (i.e., os contrastes ou a nitidez da imagem) a nível atômico, é preferível trabalhar com ponta positiva em relação à amostra, como se verá adiante.

A expressão para a *probabilidade* (ou *coeficiente*) de transmissão WKB é bem conhecida, cf. Simmons (1963:1794), Duke (1969:34), Mukhin (1987:190):

$$T_{\text{WKB}} \cong \exp \left\{ - (2/\hbar) \int_{z_1}^{z_2} [2m(V-E_z)]^{1/2} dz \right\} \quad (1)$$

onde $\Delta z = z_2 - z_1$ representa a espessura da *barreira de potencial*, \hbar é a constante de Planck normalizada, m é a massa de repouso do elétron, V é a energia potencial e E_z é a componente de energia do elétron na direção z . Note-se a diferença entre o *espaçamento túnel* (definido no Capítulo II como a região do eixo z limitada por $-\eta < z < \eta$) e a *espessura da barreira de potencial* ou *espessura da barreira túnel*, Δz : Esta se define como a região, contida no espa-

çamento túnel, em que a energia total do elétron E é menor do que a energia potencial V atribuída ao ponto em que se encontra a partícula, i.e., onde $E < V$.

Cumpre lembrar que, para uma mesma energia E do elétron, a espessura da barreira, Δz , é menor no caso de polarização direta (FB), do que no caso de polarização reversa (BB). Assim, por inspeção de (1), a probabilidade de transmissão T_{WKB} é menor para o caso de polarização reversa (BB), daí a conveniência desta modalidade de polarização no estudo topográfico por MTE (caso de amostra neutra).

Vejamos agora, em que consiste a aproximação WKB (também chamada *abordagem semiclássica* ou *aproximação da óptica física*), cujo nome se deve aos pesquisadores que, independentemente e mais ou menos à mesma época (~ 1926), primeiramente contribuíram para o seu surgimento: Gregor Wentzel (1898-1978), Hendrik Anthony Kramers (1894-1952), Léon-Nicolas Brillouin (1889-1969). Não obstante, o *status* atual do método é o de uma teoria, para desenvolvimento da qual muitos nomes ilustres contribuíram, inclusive Rayleigh, Jeffreys, Langer, etc. Em contraste aos métodos ditos *locais* — cuja validade se restringe a um dado ponto —, o método WKB pertence à categoria dos métodos ditos *globais* — cuja validade se estende a regiões finitas, cf. Bender & Orszag (1978:6).

No modo mais simples de tratar o método, este é visto como uma "tentativa" WKB (dita "de primeira ordem", por se tratar de uma série, da qual ficamos com apenas o primeiro termo), cf. Bender & Orszag (1978:486). Definindo-se o número de onda $k = k(z)$:

$$k = \sqrt{2m(E-V)/\hbar^2}, \quad (2)$$

que se relaciona à expressão do momento clássico p :

$$p = \sqrt{2m(E-V)}, \quad (2a)$$

cf. Landau & Lifshitz (1985:198), por:

$$p = \hbar k, \quad (2b)$$

pode-se reescrever a equação de Schrödinger independente do tempo como:

$$\psi'' = -k^2 \psi = -(p/\hbar)^2 \psi, \quad (3)$$

para a região classicamente permitida ($V < E$). Neste caso, a tentativa WKB nesta região consiste de:

$$\psi_{\text{WKB}}^c = A e^{iF}, \quad (4)$$

onde $A = A(z)$ é a amplitude, e $F = F(z)$ é a fase da autofunção. A substituição de (4) em (3) leva à expressão:

$$\psi'' = \{[A'' - A(F')^2] + i(2A'F' + AF'')\} e^{iF} = -k^2 A e^{iF}, \quad (5)$$

de que resulta, admitindo-se solução real, o sistema:

$$\begin{cases} [A'' - A(F')^2 + k^2 A] e^{iF} = 0, & (6a) \\ (2A'F' + AF'') e^{iF} = 0. & (6b) \end{cases}$$

onde (6a) é uma equação mais difícil que a própria equação (3) de Schrödinger independente do tempo, ao passo que (6b) é prontamente solúvel para $A \neq 0$:

$$(A^2 F')' = 0 \therefore \boxed{A = C (F')^{-1/2}} \quad (6c)$$

Aqui começam as aproximações. Supondo-se lenta a variação da amplitude em relação à variação de fase, i. e., $A'' \sim 0$, resolve-se (6a) pela chamada *integral de fase*, que representa o fator exponencial (fase da autofunção) em (4):

$$F = \pm \int k \, dz = \pm \hbar^{-1} \int p \, dz = \pm \int \sqrt{(2m/\hbar^2)(E-V)} \, dz, \quad (7)$$

onde a constante de integração pode-se supor absorvida por C em (6c), daí a integral indefinida em (7). O significado físico, ou interpretação, do presente procedimento consiste em admitir a validade da relação abaixo, segundo Park (1964:91):

$$\left| \frac{V'}{(E-V)^{3/2}} \right| \ll \sqrt{m/\hbar^2} \sim 10^{19}, \quad (8)$$

equivalente ao limite $\hbar \rightarrow 0$, o que explica por que este método é também chamado *abordagem semiclássica*. A validade das expressões WKB, em termos da variável independente z , pode-se exprimir como:

$$|z - z_1| \gg (\hbar/\sqrt{2m_e})^{2/3}, \quad (9)$$

onde z_1 é a coordenada do *ponto de retorno* (como se discute adiante), sendo as expressões WKB, nas regiões especificadas por (9), conhecidas como *aproximação da óptica física*, ou *caso quase-clássico*, cf. Landau & Lifshitz (1985:197-204).

Finalmente, Simmons (1963:1803) propôs uma solução analítica aproximada para (7), visto que a integral da raiz quadrada de uma função é, em geral, difícil — inclusive no caso presente, cuja expressão de energia potencial, dada pela equação (7a) do Capítulo II, é uma função logarítmica de uma função racional. Equivalente ao termo de primeira ordem em um desenvolvimento em série, para uma barreira de espessura Δz , admite-se a solução linear aproximada para (7), correspondente ao *valor médio* da integral de fase, do tipo:

$$F = \pm \int_{z_1}^{z_2} k \, dz - \pm \left(\Delta z \int_{z_1}^{z_2} k^2 \, dz \right)^{1/2} = \pm \left[\Delta z \frac{2m}{\hbar^2} \int_{z_1}^{z_2} (E-V) \, dz \right]^{1/2}. \quad (10)$$

Note-se que a expressão da probabilidade de transmissão WKB, dada por (1), possui um expoente que, em módulo, é o dobro do módulo da integral de fase na região de barreira, que é dada pela expressão A-4 do Apêndice A, cf. Landau & Lifshitz (1985:99), Sze (1981:520), Mukhin (1987:190), Duke (1969:36), etc.

2. O POÇO QUÂNTICO: ASSIMETRIAS NAS AUTOFUNÇÕES.

Dada a forma da energia potencial (v. Capítulo II, especialmente Fig. 2 (a)), já que a energia de uma partícula não pode ter módulo infinitamente grande (desconsiderando-se, por agora, a escolha das equipotenciais que devem representar ponta e amostra), pode-se tratar todo o espaçamento túnel *como um poço potencial*, qualquer que seja a energia da partícula, com as condições de contorno $\psi(-\eta) = \psi(\eta) = 0$, no sentido de que a partícula está confinada entre dois pontos onde a energia potencial se torna infinita, em módulo.

A interpretação da imagem do poço é, qualitativamente, simples e autoconsistente. O elétron terá probabilidade nula, de se precipitar sobre a linha de cargas positivas, do mesmo modo como os orbitais que "mergulham" no núcleo atômico não têm usualmente probabilidade de causar o colapso da estrutura atômica. Quanto à linha de cargas negativas, além da repulsão coulombiana, há o

princípio de exclusão de Pauli: o elétron terá probabilidade nula de se precipitar sobre a linha de cargas negativas, também porque no caso unidimensional não se admite a degenerescência de energia (cf. Landau & Lifshitz, 1985:81, por exemplo) e, portanto, qualquer ponto da linha de carga ocupa todos os estados disponíveis, por hipótese da linha de cargas fixas.

A solução WKB, até aqui desenvolvida, vale para regiões distantes do *ponto de retorno* ou *cáustica* (região próxima de $V = E$, isto é, a interface entre as regiões classicamente permitida e proibida). A expressão *ponto de retorno*, cf. Park (1964), Bender & Orszag (1978:497), etc., de conotação mecânica, é aqui empregada na mesma acepção que o termo *cáustica*, cf. Huang *et al.* (1989: C8-32), de significado matemático (correspondente ao *envelope* das *trajetórias clássicas*). A rigor, cf. Huang *et al.* (1990:179), os conceitos de *cáustica* e de *superfície de retorno* (no caso de tunelamento *multidimensional* e, em particular, tridimensional) são equivalentes apenas no caso de *incidência normal* à cáustica, como é o caso aqui e, naturalmente, em qualquer tratamento unidimensional, quando então a cáustica se reduz ao *ponto de retorno*.

As expressões analíticas das soluções WKB nas regiões classicamente proibida (região da barreira, que se denota abaixo pelo superíndice B) e permitida (denotada abaixo pelo superíndice C), respectivamente, são dadas por:

$$\psi_{\text{WKB}}^{\text{B}} \sim \sum_{i=1}^2 \frac{B_i \exp \pm \left[\Delta z (2m/\hbar^2) \int_{z_1}^{z_2} (V-E) dz \right]^{1/2}}{\sqrt{(2m/\hbar^2)(V-E)}}, \quad (11a)$$

$$\psi_{\text{WKB}}^{\text{C}} \sim \sum_{i=1}^2 \frac{C_i \exp \pm i \left[\Delta z (2m/\hbar^2) \int_{z_1}^{z_2} (E-V) dz \right]^{1/2}}{\sqrt{(2m/\hbar^2)(E-V)}}. \quad (11b)$$

A superposição das soluções numéricas e WKB para o *estado fundamental* ($E = E_1$) e os dois primeiros estados excitados ($E = E_2, E_3$) constam da Fig. 1 (a-c), mostrando-se o resultado (11) para todo o espaçamento túnel, ajustando-se as condições de contorno de forma que $\psi(-\eta) = \psi(\eta) = 0$. Para efeito de comparação, mostra-se também a solução exata da equação de Schrödinger independente do tempo para este caso, obtida numericamente de acordo com o método em Eisberg & Resnick (1986:871-7). A referência de energia é a mesma do Capítulo II, i. e., zero no plano $z = 0$. Os cálculos numéricos constam do Apêndice D.

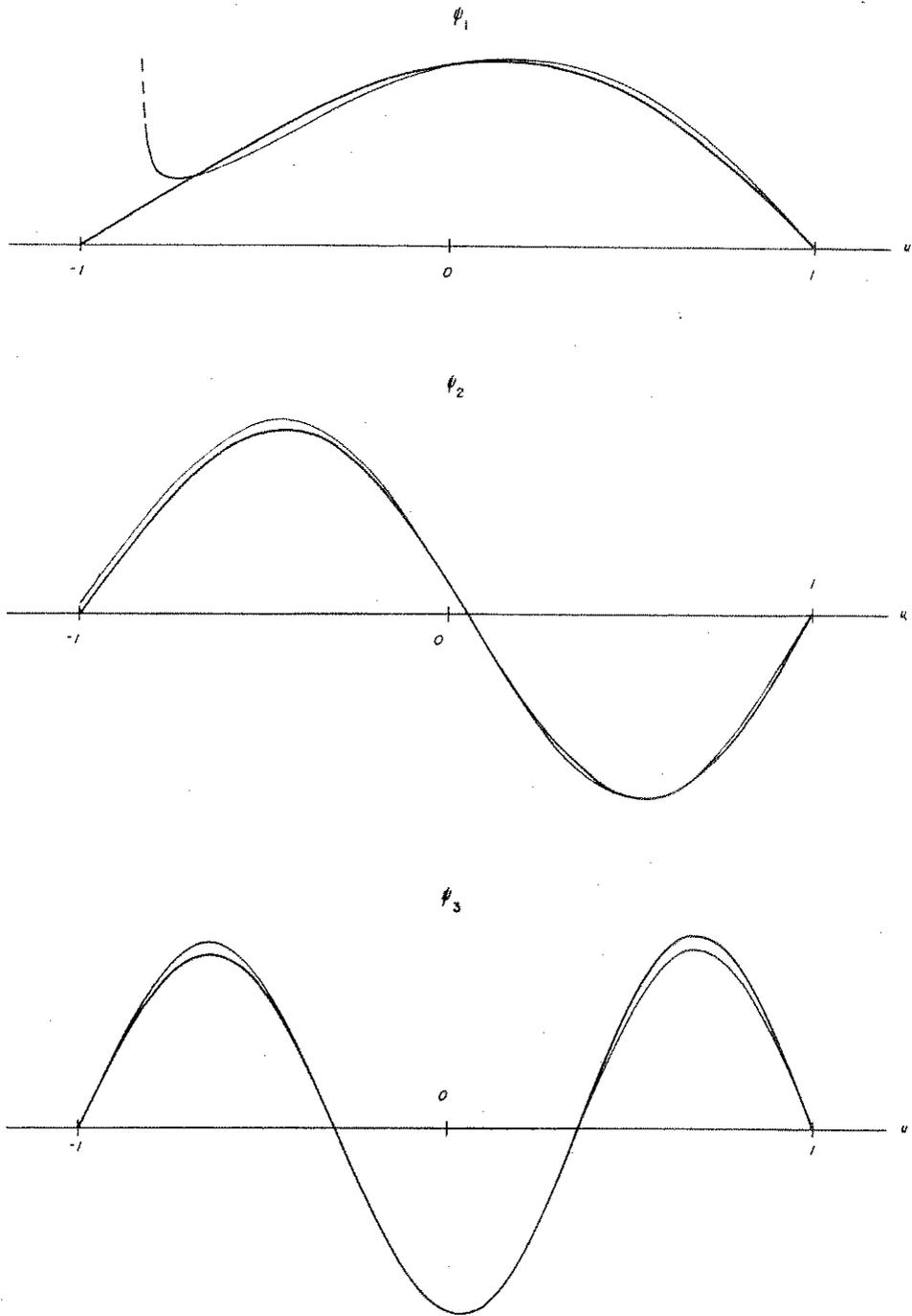


Fig. 1. (a) Estado fundamental, e (b) os dois primeiros estados excitados, para o poço quântico discutido no texto. Vale notar a precisão do método WKB (linhas finas) para a região classicamente permitida, em comparação às soluções numéricas (linhas grossas). Não se mostram acima as soluções das equações de conexão.

O fato de que as autofunções (11) *divergem* (tendem a infinito) na cáustica invalida (11) nas proximidades desta, cf. Park (1964:92, 98-100). Para lidar com esta descontinuidade, resolve-se a chamada *equação de conexão*, i. e., uma equação cuja solução seja possível, equivalente a uma aproximação (geralmente linear) da energia potencial, no entorno da cáustica. Felizmente, a solução para a presente energia potencial é simples, e consiste na solução da equação de Schrödinger independente do tempo, quando se adota V dada pela derivada da energia potencial no ponto de retorno, em $z = z_1$, correspondente ao autovalor de energia $E = E_1$, ou seja:

$$V - E \sim -\mathcal{F}z - E, \quad (12)$$

onde $V(z_1) = E_1 = E$, e \mathcal{F} é a força que age sobre a partícula, no ponto $z = z_1$:

$$\mathcal{F} \sim - \left. \frac{dV}{dz} \right|_{z=z_1} = -V_0 \left. \frac{d}{dz} \ln \frac{\eta-z}{\eta+z} \right|_{z=z_1} \quad (12a)$$

$$\therefore \mathcal{F} = -V_0 \frac{\eta+z}{\eta-z} \frac{-\eta-z-\eta+z}{(\eta+z)^2} \therefore \mathcal{F} = \frac{2\eta V_0}{\eta^2 - z_1^2}, \quad (12b)$$

cf. Landau & Lifshitz (1985:96-7, 201-4).

As equações de conexão devem aplicar-se da região classicamente proibida (caso $z < z_1$) à região classicamente permitida, cf. Landau & Lifshitz (1985:203), Bender & Orszag (1978:511-3). Este é o caráter dito *direcional* das equações de conexão. A região de validade das equações de conexão sobrepõe-se parcialmente às das expressões WKB (11).

Substituindo-se (12) em (2) e (3), tem-se a equação da autofunção WKB nas proximidades do ponto de retorno, $\psi_{\text{WKB}}^{\text{R}}$:

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi_{\text{WKB}}^{\text{R}} - \frac{2m}{\hbar^2} (V-E) \psi_{\text{WKB}}^{\text{R}} \Rightarrow \frac{d^2}{d\xi^2} \psi_{\text{WKB}}^{\text{R}} + \xi \psi_{\text{WKB}}^{\text{R}} = 0, \quad (13)$$

onde ξ é a variável adimensional definida por:

$$\xi = (2m\mathcal{F}/\hbar^2)^{1/3} (z+E/\mathcal{F}) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{2\eta V_0}{\eta^2 - z_1^2} \right)^{1/3} \left[z + \frac{E(\eta^2 - z_1^2)}{2\eta V_0} \right] \quad (13a)$$

$$\therefore \xi = \left(\frac{4m\eta V_0}{\hbar^2(\eta^2 - z_1^2)} \right)^{1/3} \left[z + \frac{E(\eta^2 - z_1^2)}{2\eta V_0} \right], \quad (13b)$$

cuja solução de (13) é conhecida, sendo dada por uma combinação linear das assim chamadas *funções de Airy*, Φ_1 e Φ_2 . Cumpre notar que (13) foi resolvida por Fowler & Nordheim (1928:175-6), exceto que estes autores exprimiram a solução em termos de funções de Bessel, as quais se relacionam às funções de Airy por expressões analíticas como as dadas em Bender & Orszag (1978:569). O método WKB ignora a quantização de energia e, no presente caso, as variações da energia total E , do elétron confinado, meramente deslocariam a cáustica sobre o eixo z , no intervalo do espaçamento túnel, além de afetarem as constantes arbitrárias em (11).

Tampouco se restringem os resultados acima ao poço quântico. Este é o caso limite do problema de autovalores, mas as equações se aplicam ao caso do MTE, em que o elétron vem de uma região permitida (o primeiro eletrodo túnel) à esquerda na Fig. 1, passa à região proibida e, desta, ao segundo eletrodo túnel. A diferença fundamental entre os dois casos, i. e., o tratamento da partícula confinada (poço quântico), que se reflete no ponto $z = \eta$, e o da partícula que tunela do primeiro ao segundo eletrodo (atravessando dois pontos de retorno, como no caso do MTE), com probabilidade desprezível de ser refletida no segundo ponto de retorno (bem como, em quaisquer outras descontinuidades de potencial à direita deste), afeta unicamente as constantes arbitrárias (pois as condições de contorno se alteram). As equações de conexão da partícula confinada resolvem-se no Apêndice B. A seguir, discute-se o caso em que a partícula tunela entre os eletrodos. Já que a partícula não se reflete após o segundo ponto de retorno (localizado na região de conexão), uma das constantes das equações de Airy se anula, o que simplifica o tratamento, em relação ao que se faz com o poço quântico, no Apêndice B.

3. O ELÉTRON EM TUNELAMENTO.

Um problema similar (para o caso de função energia potencial linear, do tipo $V = az$, onde $a > 0$, sem reflexão após o segundo ponto de retorno) é resolvido em Bender & Orszag (1978:504-19); a solução exata de (13), onde é *negativa* a *inclinação* da função energia potencial, é resolvida em Landau & Lifshitz (1985:96-8):

$$\psi_{\text{WKB}}^R(\xi) = R_1 \Phi_1(-\xi) + R_2 \Phi_2(-\xi) = \frac{R_1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) du, \quad (14)$$

onde R_1 é uma constante que se deve ajustar entre as constantes arbitrárias em (11), $R_2 = 0$ (no caso de ausência de reflexão à direita), e ξ se define por (13b). A conexão vale para $1 \ll \xi \ll (2m/\hbar^2)^{2/15}$, sendo que $[\hbar^2/(2m)] \rightarrow 0^+$, à medida em que $|\xi| \rightarrow \infty$. Na região de interesse (entorno da cáustica), valem as expansões assintóticas da função de Airy (14), respectivamente, para valores negativos e positivos da variável ξ :

$$\psi_{\text{WKB}}^R(\xi) = \begin{cases} \frac{R_1}{2\sqrt{\pi}} |\xi|^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} |\xi|^{3/2}\right) \leftarrow \xi \rightarrow -\infty, & (14a) \\ \frac{R_1}{\sqrt{\pi}} \xi^{-1/4} \text{sen}\left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \leftarrow \xi \rightarrow +\infty, & (14b) \end{cases}$$

cf. Bender & Orszag (1978:108, 509), Landau & Lifshitz (1985:97).

É possível abarcar as três regiões consideradas — as regiões classicamente permitida e proibida (ambas distantes da cáustica) e a região próxima à cáustica — por meio de uma única expressão analítica. Trata-se da *fórmula de Langer*, descoberta em 1935, cf. Langer (1937), Bender & Orszag (1978:511), que permite reunir (11) e (14) sob a forma:

$$\psi_{\text{WKB}}^L \sim C \frac{(3\sqrt{m/2})^{1/6}}{\hbar^{1/6} (V-E)^{1/4}} \Phi\left\{\left[3 \frac{\sqrt{m/2}}{\hbar} \int (V-E)^{1/2} dz\right]^{2/3}\right\} [\int (V-E)^{1/2} dz]^{1/6}, \quad (15)$$

onde Φ é dada por (14) — quer a expressão exata quer suas aproximações. No caso presente, onde se pode considerar a validade de (10), a expressão de (15) procurada torna-se:

$$\psi_{\text{WKB}}^L \sim \frac{C \left(\frac{3\Delta z}{\hbar} \sqrt{m/2} \int (V-E)^{1/2} dz\right)^{1/6}}{4 \sqrt{V-E}} \Phi\left(\frac{3\Delta z \sqrt{m/2}}{\hbar} \int (V-E)^{1/2} dz\right). \quad (16)$$

3.1 Cálculo da Expressão de Corrente.

Retomando-se a expressão (1) do coeficiente de tunelamento, cabe notar que esta permite o cálculo da corrente unidimensional pela integração em energia (até o valor máximo de energia E_m da partícula) do coeficiente de transmissão WKB, T_{WKB} :

$$J = \int_0^{E_m} T_{\text{WKB}}(E_z) \zeta dE_z, \quad (17)$$

onde o fator ζ se define em termos de constantes fundamentais (q_e é a unidade elementar de carga, m a massa da partícula e h a constante de Planck), da função de Fermi f , e do potencial eletrostático U_T aplicado entre os eletrodos de tunelamento:

$$\zeta = \frac{4\pi}{h^3} m^2 q_e \int_0^{\infty} [f(E) - f(E + q_e U_T)] dE, \quad (17a)$$

cf. Simmons (1963:1794), Walmsley (1987:7).

Em baixas temperaturas ($T \sim 0$ K), e mesmo a temperaturas ambientes — desde que a emissão termiônica seja desprezível em relação ao tunelamento —, pode-se exprimir ζ pelas seguintes formas aproximadas, cf. Simmons (1963:1795):

$$\zeta \cong \frac{4\pi}{h^3} m q_e \times \begin{cases} q_e U_T \ll 0 < E_z < E_F - q_e U_T, \\ (E_F - E_z) \ll E_F - q_e U_T < E_z < E_F, \\ 0 \ll E_z > E_F, \end{cases} \quad (17b)$$

onde U_T é a voltagem aplicada entre os eletrodos (sempre positiva para o eletrodo da direita, em relação ao eletrodo da esquerda nas Figs. 4 e 5 do Capítulo II).

Substituindo-se (17b) na expressão de corrente (17), esta se exprime por duas integrais (a terceira se anula), cada uma com os limites de integração definidos pelas respectivas regiões especificadas por (17b):

$$J = \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left[q_e U_T \int_0^{E_F - q_e U_T} T_{\text{WKB}}(E_z) dE_z + \int_{E_F - q_e U_T}^{E_F} (E_F - E_z) T_{\text{WKB}}(E_z) dE_z \right], \quad (17c)$$

onde $T_{\text{WKB}}(E_z)$ — sendo exatamente o dobro (em módulo) da integral de fase na região de barreira F^B , calculada no Apêndice A —, pode-se obter adaptando a expressão A-4 do Apêndice A:

$$T_{\text{WKB}} = \exp -2 \left\{ \Delta z \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \left[\ln \frac{(\eta - z_1)^{\eta - z_1} (\eta + z_1)^{\eta + z_1}}{(\eta - z_2)^{\eta - z_2} (\eta + z_2)^{\eta + z_2}} - E \frac{\Delta z}{V_0} \right] \right\}^{1/2}. \quad (17d)$$

As referências de energia para E_z em (17b) e para E em (17d) são diferentes. E_z é interpretada implicitamente como a *energia cinética clássica* em Simmons (1963:1794), e explicitamente, por Walmsley (1987:7). Os cálculos da energia potencial, no Capítulo II, envolveram um referencial "zero" arbitrário, coincidente com o plano $z = 0$. Deve-se, pois, "nivelar" a referência, então obtida, com a referência útil para o cálculo de corrente em (17c). Esta diferença de referenciais trata-se de mera constante aditiva, que se deve incorporar a E , em (17d), no cálculo da integral no expoente de T_{WKB} , em (17c). Isto é possível, pois nenhuma hipótese sobre uma referência para a energia total E foi feita no Capítulo II.

A referência $E_z = 0$ corresponde ao fundo da *banda de condução*. Como nos cálculos de Simmons (1963:1795), admite-se a referência no eletrodo à esquerda, i. e., o eletrodo polarizado negativamente. Os exemplos da Fig. 2 devem esclarecer a questão do referencial para todas as situações possíveis, bem como o significado das aproximações (17b) para ζ . Para todos os efeitos, os cálculos a seguir adotam a seguinte expressão que relaciona E e E_z :

$$E = E_z - V_1 \therefore dE = dE_z, \quad (18)$$

onde V_1 é uma constante capaz de nivelar as respectivas referências (v. Fig. 2).

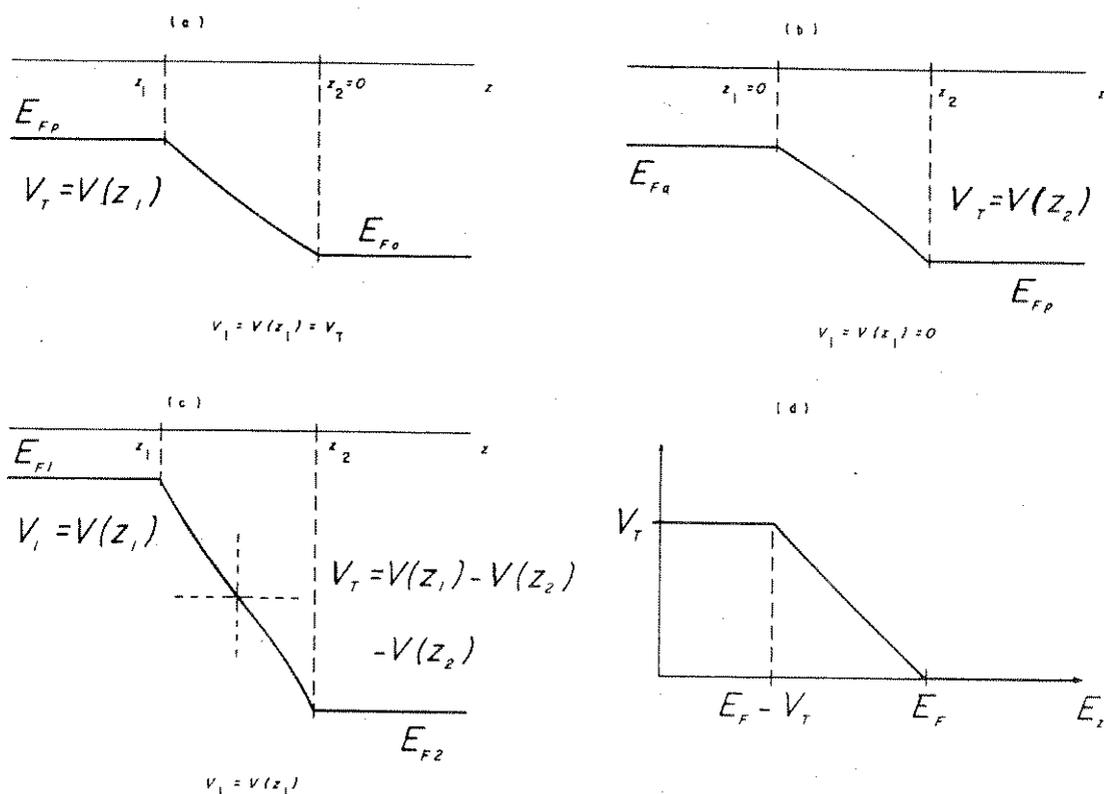


Fig. 2. Ilustração do significado da constante V_1 de nivelção entre as referências de energia, para os casos: (a) Polarização direta (ponta negativa), (b) polarização reversa (ponta positiva) e (c) caso em que a amostra é também uma ponta. (d) Diagrama esquemático da aproximação de ζ (em unidades de $4\pi m q_e / h^3$) $\times E_z$, representada pela equação (17b).

Por questões de espaço, inteligibilidade, e apreciação mais compacta e sinóptica das expressões que seguem, é conveniente proceder às seguintes substituições em (17d):

$$\Lambda = V_1 \Delta z + V_0 \ln \frac{(\eta - z_1)^{\eta - z_1} (\eta + z_1)^{\eta + z_1}}{(\eta - z_2)^{\eta - z_2} (\eta + z_2)^{\eta + z_2}}, \quad (19a)$$

$$\Theta = 2 \sqrt{2m \Delta z} / \hbar, \quad (19b)$$

$$V_T = q U_T; \quad (19c)$$

de modo que substituindo (19a-c) em (17d) e o resultado em (17c), esta última expressão assume a forma:

$$J = \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left[V_T \int_0^{E_F - V_T} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z + \int_{E_F - V_T}^{E_F} (E_F - E_z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z \right]. \quad (20)$$

A resolução das integrais em (20) consta do Apêndice C. Substituindo, na primeira das integrais de (20), a fórmula C-3 do Apêndice C:

$$\begin{aligned} & V_T \int_0^{E_F - V_T} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z = \\ & = \frac{2V_T}{\Theta^2 \Delta z} \left\{ [1 + \Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}] \exp[-\Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}] + \right. \\ & \left. - (1 + \Theta \sqrt{\Lambda}) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda}) \right\}, \end{aligned} \quad (21a)$$

e, na segunda das integrais de (20), a fórmula C-5 do Apêndice C:

$$\begin{aligned} & \int_{E_F - V_T}^{E_F} (E_F - E_z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z = \\ & = \left(\frac{2}{\Theta^2 \Delta z} \right)^2 \left\{ [1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}]^2 + 2 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_F \Delta z} \right\} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}) + \\ & - \frac{2V_T}{\Theta^2 \Delta z} (1 + \Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}) + \\ & - \left(\frac{2}{\Theta^2 \Delta z} \right)^2 \left\{ [1 + \Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}]^2 + 2 + \Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z} \right\} \times \\ & \times \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}), \end{aligned} \quad (21b)$$

a expressão completa para a corrente de tunelamento WKB resulta da substituição de (21a-b) em 20, observando-se que o segundo termo direito em (21b) cancela o primeiro termo direito entre chaves em (21a):

$$\begin{aligned}
 J = & -\frac{4\pi}{h^3} m q_e \frac{2V_T}{\Theta^2 \Delta z} (1+\Theta\sqrt{\Lambda}) \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda}) + \\
 & + \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta^2 \Delta z} \right)^2 \left[(1+\Theta\sqrt{\Lambda-E_F \Delta z})^2 + 2+\Theta\sqrt{\Lambda-E_F \Delta z} \right] \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda-E_F \Delta z}) + \\
 & - \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta^2 \Delta z} \right)^2 \left[(1+\Theta\sqrt{\Lambda-(E_F-V_T) \Delta z})^2 + 2+\Theta\sqrt{\Lambda-(E_F-V_T) \Delta z} \right] \times \\
 & \times \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda-(E_F-V_T) \Delta z}), \tag{22}
 \end{aligned}$$

cujo gráfico consta da Fig. 3, para eletrodos ideais: Desprezando-se o efeito da *força imagem* — que, segundo Simmons (1963: 1795), tem deveras influência sobre a corrente de tunelamento —, tomaram-se arbitrariamente os valores de *função de trabalho* e *nível de Fermi*, supondo que ambos os eletrodos fossem de prata ($\phi_{Ag} \cong 4,7$ eV, $E_F \cong 5,5$ eV). Estes valores adotados são arbitrários e não permitem qualquer conclusão prática, pois o modelo que aqui se apresenta *não está calibrado*. Para tanto, seriam necessários experimentos específicos, com este objetivo, o que ainda não foi possível, até o momento.

As duas curvas da Fig. 3 ilustram duas situações extremas: Em (a), trata-se de um eletrodo intacto, i. e., valem os parâmetros especificados acima. Em (b), a corrente é do limiar do colapso do nível de Fermi, i. e., os elétrons do nível de Fermi estão prestes a ter energia suficiente para ultrapassar a barreira, sem tunelar, pois houve degradação da função de trabalho, como Chen (1991a:45, b:107, 113) menciona. É provável que, neste caso, a abordagem quase-clássica não represente uma boa aproximação, sendo necessário incluir os efeitos secundários pela teoria da perturbação, possivelmente a de Chen. A situação ilustrada na Fig. 3 é típica do MTE, com polarização reversa (ponta positiva), como é usual nos experimentos.

Pode-se encarar o rebaixamento de barreira supramencionado, segundo Chen (1991b:113), quer como devido ao efeito da *força imagem* (ponto de vista

macroscópico), quer como devido à sobreposição entre os potenciais atômicos da amostra e da ponta.

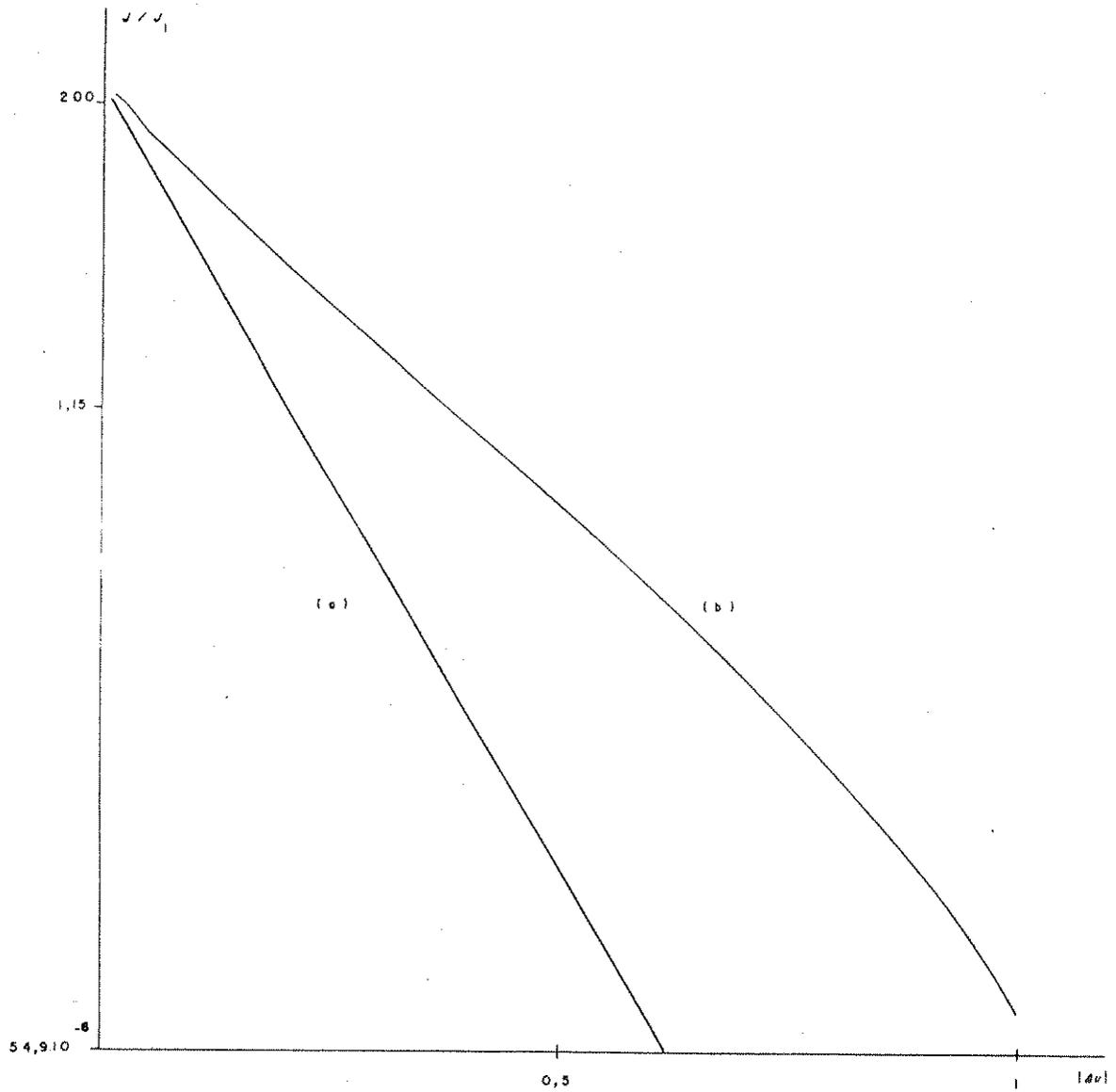


Fig. 3. A corrente de tunelamento WKB normalizada J/J_1 , onde $J_1 = q_e/(4\pi h)$, calculada em função da espessura da barreira túnel normalizada $\Delta u = \Delta z/\eta$, para eletrodos ideais de MTE (ponta hiperbolóide e amostra plana), em duas situações extremas: (a) A função de trabalho permanece intacta, e (b) houve colapso do nível de Fermi, situação em que o comportamento de J/J_1 se afasta notavelmente do predominantemente exponencial.

3.2 EXPRESSÃO SIMPLIFICADA PARA A CORRENTE WKB.

Na expressão (22), a espessura da barreira Δz é aqui tratada como uma variável numa faixa de valores muito menor, em geral, que em Simmons (1963), onde Δz era um *parâmetro* constante (i. e., a característica de uma junção em um dado dispositivo). Não obstante, *algumas* das aproximações a seguir são comuns a ambos os casos. Foi aqui, porém, conveniente proceder primeiramente ao cálculo completo de (22), para que este pudesse ser comparado ao resultado aproximado que segue, tornando-se mais convincente a adoção das aproximações.

Se por um lado, a espessura da barreira no caso do MTE costuma ser significativamente menor que a do diodo túnel, por outro lado, justamente este aspecto *reforça a validade* da seguinte aproximação de Simmons (1963:1795):

$$\Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T)\Delta z} \gg 1, \quad (23a)$$

$$\Theta \sqrt{\Lambda - E_F \Delta z} \gg 1. \quad (23b)$$

O corolário das expressões (23) acima é:

$$[\Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T)\Delta z}]^2 \gg \Theta \sqrt{\Lambda - (E_F - V_T)\Delta z}, \quad (24a)$$

$$[\Theta \sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}]^2 \gg \Theta \sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}. \quad (24b)$$

Com base nas desigualdades (23) e (24) acima, pode-se reescrever (22) de modo mais simples:

$$\begin{aligned} J \cong & -\frac{4\pi}{h^3} m q_e \frac{2V_T}{\Theta \Delta z} \sqrt{\Lambda} \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda}) + \\ & + \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta \Delta z}\right)^2 (\Lambda - E_F \Delta z) \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}) + \\ & - \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta \Delta z}\right)^2 [\Lambda - (E_F - V_T)\Delta z] \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - (E_F - V_T)\Delta z}). \end{aligned} \quad (25)$$

Acresce que, na faixa de interesse em MTE — e o mesmo vale, neste caso, para os eletrodos planos tratados por Simmons (1963:1795) —, o primeiro termo de (25) pode ser prontamente descartado, pois o amortecimento exponencial supera o fator linear, i.e.:

$$\sqrt{\Lambda} \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda}) \ll \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda-(E_F-V_T)\Delta z}) < \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda-E_F\Delta z}), \quad (26)$$

admitindo-se, na última desigualdade de (26a), $0 < V_T < E_F$. Finalmente, uma versão mais simples da equação de corrente é:

$$\begin{aligned} J &\cong \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta \Delta z} \right)^2 (\Lambda - E_F \Delta z) \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}) + \\ &- \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta \Delta z} \right)^2 [\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z] \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}) = \\ &= \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta \Delta z} \right)^2 \left\{ (\Lambda - E_F \Delta z) \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}) + \right. \\ &\left. - [\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z] \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}) \right\}, \quad (27) \end{aligned}$$

interpretando-se (27) como a diferença entre um fluxo de elétrons do eletrodo da esquerda ao eletrodo da direita, associado à densidade de corrente:

$$J_+ \cong \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta \Delta z} \right)^2 (\Lambda - E_F \Delta z) \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - E_F \Delta z}), \quad (27a)$$

e um fluxo de elétrons do eletrodo da direita ao eletrodo da esquerda, associado à densidade de corrente:

$$J_- \cong - \frac{4\pi}{h^3} m q_e \left(\frac{2}{\Theta \Delta z} \right)^2 [\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z] \exp(-\Theta\sqrt{\Lambda - (E_F - V_T) \Delta z}), \quad (27b)$$

de que resulta a densidade de corrente eletrônica líquida, dada por (27), cf. Simmons (1963:1796).

De modo geral, todo o tratamento aqui desenvolvido se insere no contexto da extensão multidimensional do método WKB por construção de Huygens, proposto por Huang *et al.* (1989, 1990), visto que o tratamento da corrente de tunelamento, aqui, satisfaz aos requisitos de incidência normal à cáustica, de que resulta o comportamento da integral de fase na região de barreira exatamente como se trata neste capítulo — a inversão do sinal de V e E em A-4 do Apêndice III.A, i. e., F^B em (11a-b) relacionam-se por $F^B = F$, cf. Huang *et al.* (1990:179).

Resta acrescentar que o presente modelo de potencial, desenvolvido no Capítulo II, é prontamente compatível com a abordagem por perturbações em Chen (1991a,b). O tratamento dado, na Fig. 2, para o *rebaixamento da barreira* é precisamente o mesmo que o de Chen (1991b:113), ou seja, a adição (ou subtração) de um valor constante. Seria interessante comparar a abordagem quase-clássica aqui desenvolvida e a teoria de perturbação de Chen (1991a,b), mas isto foge ao escopo deste texto, que objetiva unicamente ao exame do modelo sob a óptica quase-clássica.

APÊNDICE III.A

CÁLCULO DA INTEGRAL DE FASE (10) PELA FÓRMULA DE SIMMONS:

Na região classicamente permitida, a integral de fase é dada pela equação (10):

$$F = \pm \int_{z_1}^{z_2} k \, dz \sim \pm \left(\Delta z \int_{z_1}^{z_2} k^2 \, dz \right)^{1/2} = \pm \left[\Delta z \frac{2m}{\hbar^2} \int_{z_1}^{z_2} (E-V) \, dz \right]^{1/2}, \quad \text{A-0a}$$

em que se pode substituir a expressão para energia potencial, dada pela equação (7a) do Capítulo II:

$$V = V_0 \ln \left| \frac{\eta-z}{\eta+z} \right|, \quad \text{A-0b}$$

e rearranjando:

$$\begin{aligned} F &\sim \pm \left[\Delta z \frac{2m}{\hbar^2} \int_{z_1}^{z_2} (E-V) \, dz \right]^{1/2} = \\ &= \pm \left[\Delta z \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \int_{z_1}^{z_2} \left(E/V_0 - \ln \frac{\eta-z}{\eta+z} \right) dz \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad \text{A-1}$$

A integral do termo logarítmico acima é feita por partes (sem a constante de integração) a seguir:

$$\begin{aligned} \int \ln \frac{\eta-z}{\eta+z} \, dz &= z \ln \frac{\eta-z}{\eta+z} - \eta \int \frac{-2z}{\eta^2 - z^2} \, dz = \\ &= z \ln \frac{\eta-z}{\eta+z} - \eta \ln (\eta^2 - z^2) = - \ln [(\eta-z)^{\eta-z} (\eta+z)^{\eta+z}]. \end{aligned} \quad \text{A-2}$$

Substituindo A-2 em A-1 e integrando a função linear em E:

$$F(z) \sim \pm \left(\Delta z \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \right)^{1/2} \left[E \frac{\Delta z}{V_0} - \ln \frac{(\eta-z_1)^{\eta-z_1} (\eta+z_1)^{\eta+z_1}}{(\eta-z_2)^{\eta-z_2} (\eta+z_2)^{\eta+z_2}} \right]^{1/2} \quad \text{A-3}$$

Na região de barreira, por sua vez, o expoente iF da tentativa WKB, (4), é real, como se A-1 fosse multiplicada por um fator imaginário (i), de que resulta uma nova *integral de fase*, $F^B(z)$, para a região de barreira:

$$iF^B(z) \sim \pm \left(\Delta z \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \right)^{1/2} \left[\ln \frac{(\eta-z_1)^{\eta-z_1} (\eta+z_1)^{\eta+z_1}}{(\eta-z_2)^{\eta-z_2} (\eta+z_2)^{\eta+z_2}} - E \frac{\Delta z}{V_0} \right]^{1/2} \quad \text{A-4}$$

Note-se que a integral da energia potencial em A-2 é simétrica em relação ao sinal de V . Ou seja, em A-3 e em A-4, a integral de V apresenta o mesmo sinal apesar de que os integrandos fossem, respectivamente, $(E-V)$ e $(V-E)$ nas regiões classicamente permitida e proibida.

Esta simetria com o sinal não vale para a energia total E da partícula, porque na região de barreira à maior energia deve corresponder uma menor atenuação da autofunção, no caso do elétron em tunelamento. Na região classicamente permitida, por sua vez, a maior energia da partícula corresponde a uma oscilação mais rápida da autofunção. Note-se que a indefinição de sinal em A-3 e A-4 indicam onda estacionária, i. e., a superposição de uma onda *progressiva* (correspondente ao sinal positivo no expoente) e uma onda *regressiva* (sinal negativo). Esta onda estacionária ocorre somente no poço quântico, pois o elétron em tunelamento é um processo dinâmico, em que as amplitudes da onda incidente (*progressiva*) e refletida (*regressiva*) são diferentes entre si. No Apêndice B, calculam-se os coeficientes das autofunções nas três regiões de interesse, para o poço quântico: regiões classicamente permitida e proibida, e região de conexão. O caso do elétron em tunelamento é um pouco mais simples por não ocorrer quantização de energia, e por não haver reflexão à direita (região do segundo eletrodo).

Cabe acrescentar um detalhe sobre os limites de integração, em ambos os casos acima, pois são iguais entre si, dentro e fora da barreira, já que se trata de um problema de autovalores, no caso do poço quântico e do elétron em tunelamento. Ou seja, estes limites determinam a região de barreira, mas esta é função da energia da partícula: Quanto maior esta, menor a espessura da barreira.

APÊNDICE III.B

EQUAÇÕES DE CONEXÃO PARA O POÇO QUÂNTICO: DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES ARBITRÁRIAS.

Tendo em vista o caráter direcional das equações de conexão, cf. Bender & Orszag (1978:511-3) e Landau & Lifshitz (1985:201), o ajuste das constantes arbitrárias, nas equações (11a-b) e (14), deve-se efetuar na seguinte ordem: da região da barreira ($z < z_1$, onde z_1 é o *ponto de retorno clássico*) à região classicamente permitida ($z > z_1$). Na seqüência, efetuam-se as conexões da barreira ($z < z_1$) às proximidades da cáustica ($z \sim z_1$) e a seguir, desta à região classicamente permitida ($z > z_1$):

III.B.1 - Conexão da barreira ao ponto de retorno:

Na região em que se sobrepõem as soluções (11a) e (14) vale:

$$\psi_{\text{WKB}}^{\text{B}} = \sum_{i=1}^2 \frac{B_i \exp \pm \left[\Delta z (2m/\hbar^2) \int_{z_1}^{z_2} (V-E) dz \right]^{1/2}}{\sqrt[4]{(2m/\hbar^2)(V-E)}} \sim$$

$$\sim \psi_{\text{WKB}}^{\text{R}}(\xi) = R_1 \phi_1(-\xi) + R_2 \phi_2(-\xi). \quad \text{B-1}$$

No entorno da cáustica, supôs-se válida a expansão linear (12), que agora se aplica à região de barreira, onde $V > E$. No expoente de (11a) consta a expressão de Simmons, que por ora se descarta para retornar à expressão original (7) — exceto que se deve inverter o sinal do integrando, visto que (7) vale para a região classicamente permitida —, facilmente integrável neste caso; substituindo (12) em (7):

$$\int \sqrt{(2m/\hbar^2)(V-E)} dz - \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \int \sqrt{-z-E/\mathcal{F}} dz = \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \frac{2}{3} (-z-E/\mathcal{F})^{3/2}, \quad \text{B-2a}$$

e analogamente, o denominador de (11a) torna-se:

$$\sqrt[4]{(2m/\hbar^2)(V-E)} \sim \sqrt[4]{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \sqrt{-z-E/\mathcal{F}}. \quad \text{B-2b}$$

As expressões acima devem-se igualar às equações de Airy, cujas expansões assintóticas para "grandes" valores negativos de ξ são:

$$\Phi_1(-\xi) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}} |\xi|^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} |\xi|^{3/2}\right) \leftarrow \xi \rightarrow -\infty, \quad \text{B-3a}$$

$$\Phi_2(-\xi) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \xi^{-1/4} \exp\left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2}\right) \leftarrow \xi \rightarrow -\infty, \quad \text{B-3b}$$

cf. Bender & Orszag (1978:508). Antes de prosseguir, cabe um esclarecimento sobre a validade da expressão " $\xi \rightarrow -\infty$ " ("grandes" valores negativos de ξ). Adotando-se as seguintes ordens de grandeza para os parâmetros: $m \sim 10^{-30}$ kg, $\eta \sim 10^{-8}$ m, $E \sim V_0 \sim 10^{-19}$ J, $\hbar^2 \sim 10^{-68}$ J²s², pode-se avaliar a ordem de grandeza de $|\xi|$ em duas situações extremas, por meio da expressão (13), que define ξ . Note-se o comportamento de ξ dependente de $(\eta^2 - z_1^2)$, que para pequenos valores de $|z_1|$ (i. e., $|\eta| \gg |z_1|$) é da ordem de $(\eta^2 - z_1^2) \sim (10^{-8} \text{ m})^2$, e para grandes valores de $|z_1|$ (i. e., $|\eta| \sim |z_1|$) é da ordem de $(\eta^2 - z_1^2) \sim 0$ — no limite $|E| \rightarrow \infty$, $(\eta^2 - z_1^2) \rightarrow 0$. Substituindo-se os valores acima na expressão (13) que define ξ , as duas situações extremas fornecem, respectivamente, os valores $|\xi| \sim 10$ e $|\xi| \rightarrow \infty$. O segundo resultado é obviamente satisfatório, mas o primeiro precisa ser devidamente interpretado. De fato, para uma barreira de espessura da ordem de, no máximo, $\Delta z \sim 100 \text{ \AA} = 10^{-8}$ m, vale a relação $|\xi| \sim 10 \gg \Delta z$, donde a interpretação relativa do limite $\xi \rightarrow -\infty$ nas relações assintóticas acima, ou seja, este limite apenas indica "grande" distância da cáustica, região de validade das equações de conexão. A qualidade das aproximações WKB, em comparação com os cálculos numéricos que dão a solução exata do problema, como se pode apreciar nos gráficos deste capítulo, de resto, fecham a questão.

Sustituindo-se, enfim, as expressões B-2 e B-3 em B-1, tem-se a seguinte equação de conexão:

$$\begin{aligned}
& \frac{B_1 \exp \left[-\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(-z - \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} \right]}{\sqrt[4]{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \sqrt[4]{-z-E/\mathcal{F}}} + \\
& + \frac{B_2 \exp \left[\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(-z - \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} \right]}{\sqrt[4]{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \sqrt[4]{-z-E/\mathcal{F}}} - \\
& - \frac{R_1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/12} \left(-z - \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{-1/4} \exp \left[-\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(-z - \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} \right] + \\
& + \frac{R_2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/12} \left(-z - \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{-1/4} \exp \left[\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(-z - \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} \right], \quad \text{B-4}
\end{aligned}$$

que, simplificando e igualando as exponenciais semelhantes, resulta nos seguintes valores das constantes arbitrárias na barreira, em função das constantes arbitrárias na região de conexão:

$$B_1 \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/4} - \frac{R_1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/12} \therefore B_1 = \frac{R_1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{1/6}, \quad \text{B-5a}$$

$$B_2 \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/4} - \frac{R_2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/12} \therefore B_2 = \frac{R_2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{1/6}, \quad \text{B-5b}$$

ou substituindo-se, nas expressões acima, a equação (12b) que define \mathcal{F} em termos de parâmetros conhecidos:

$$B_1 = \frac{R_1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{2\eta V_0}{\eta^2 - z_1^2} \right)^{1/6} \therefore B_1 = \frac{R_1}{2\sqrt{\pi}} \left[\frac{4m\eta V_0}{\hbar^2(\eta^2 - z_1^2)} \right]^{1/6}, \quad \text{B-5c}$$

$$B_2 = \frac{R_2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{2\eta V_0}{\eta^2 - z_1^2} \right)^{1/6} \therefore B_2 = \frac{R_2}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{4m\eta V_0}{\hbar^2(\eta^2 - z_1^2)} \right]^{1/6}. \quad \text{B-5d}$$

III.B.2 - Conexão do ponto de retorno à região classicamente permitida.

Neste caso, as autofunções são oscilatórias, e as expansões assintóticas das equações de Airy, cf. Bender & Orszag (1978:108), Duke (1969:31), são dadas por:

$$\Phi_1(-\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \xi^{-1/4} \operatorname{sen} \left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right), \quad \text{B-6a}$$

$$\Phi_2(-\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \xi^{-1/4} \operatorname{cos} \left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right). \quad \text{B-6b}$$

Reescrevendo-se (11b) em forma de uma soma de seno e cosseno (equivalente às exponenciais imaginárias, cujas constantes arbitrárias sempre podem ser escolhidas de modo a que as autofunções sejam reais) e aplicando-se a condição $\psi_{\text{WKB}}^{\text{R}} = \psi_{\text{WKB}}^{\text{C}}$ às expressões acima, onde $\psi_{\text{WKB}}^{\text{R}}$ é dada por (14), exceto que, em se tratando de um poço quântico, não se anula a constante arbitrária R_2 :

$$\begin{aligned} & C_1 \left[\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right) \right]^{-1/4} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} \right] + \\ & + C_2 \left[\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right) \right]^{-1/4} \operatorname{cos} \left[\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} \right] - \\ & - \frac{R_1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/12} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{-1/4} \operatorname{sen} \left[\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] + \\ & + \frac{R_2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{-1/12} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{-1/4} \operatorname{cos} \left[\frac{2}{3} \sqrt{2m\mathcal{F}/\hbar^2} \left(z + \frac{E}{\mathcal{F}} \right)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right], \quad \text{B-7} \end{aligned}$$

obtêm-se as seguintes expressões para as constantes arbitrárias na região classicamente permitida, em função das constantes arbitrárias da região de conexão, e vice-versa:

$$C_1 = \frac{R_1 + R_2}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{1/6}, \quad \text{B-8a}$$

$$C_2 = \frac{R_1 - R_2}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{1/6}; \quad \text{B-8b}$$

$$R_1 = 2 B_1 \sqrt{\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m\mathcal{F}} \right)^{1/6}, \quad \text{B-8c}$$

$$R_2 = B_2 \sqrt{\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m\mathcal{F}} \right)^{1/6}. \quad \text{B-8d}$$

Finalmente, reunindo B-8 e B-5, podem-se exprimir as constantes arbitrárias na região classicamente permitida em função das constantes arbitrárias na região de barreira:

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2m\mathcal{F}}{\hbar^2} \right)^{1/6} \left[2 B_1 \sqrt{\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m\mathcal{F}} \right)^{1/6} + B_2 \sqrt{\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m\mathcal{F}} \right)^{1/6} \right] \therefore \quad \text{B-9a}$$

$$\therefore \boxed{C_1 = \sqrt{2} B_1 + \frac{B_2}{\sqrt{2}}}, \quad \text{B-9b}$$

e analogamente:

$$\therefore \boxed{C_2 = \sqrt{2} B_1 - \frac{B_2}{\sqrt{2}}}. \quad \text{B-9c}$$

APÊNDICE III.C

SOLUÇÃO DAS INTEGRAIS PARA O CÁLCULO DA CORRENTE WKB:

Em todos os cálculos a seguir, ignoram-se as constantes de integração, supostas implícitas, por simplicidade. A partir das expressões:

$$\frac{d}{dE_z} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z) = \frac{\Theta \Delta Z}{2 \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z) \quad \therefore \quad \text{C-1a}$$

$$\therefore \int \frac{\exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z)}{\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z} dE_z = \frac{2}{\Theta^2 \Delta Z} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z), \quad \text{C-1b}$$

e de:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dE_z} \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z) &= \\ &= \left(\frac{\Theta^2 \Delta Z}{2} - \frac{\Theta \Delta Z}{2 \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z} \right) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z), \end{aligned} \quad \text{C-2a}$$

a substituição de C-1a em C-2a permite escrever:

$$\begin{aligned} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z) &= \\ &= \frac{2}{\Theta^2 \Delta Z} \frac{d}{dE_z} (1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z), \end{aligned} \quad \text{C-2b}$$

que resulta na fórmula:

$$\begin{aligned} \int \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z) dE_z &= \\ &= \frac{2}{\Theta^2 \Delta Z} (1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta Z). \end{aligned} \quad \text{C-3}$$

Integrando-se por partes a expressão:

$$\begin{aligned}
 & \int (E_F - E_z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z = \\
 & = (E_F - E_z) \frac{2}{\Theta^2 \Delta z} (1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) + \\
 & + \frac{2}{\Theta^2 \Delta z} \int (1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z, \tag{C-4a}
 \end{aligned}$$

e novamente, integrando por partes a última integral do membro direito de C-4a, com a ajuda de C-3:

$$\begin{aligned}
 & \int (1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z = \\
 & = \frac{2}{\Theta^2 \Delta z} (1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z)^2 \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) + \\
 & + \int \frac{(1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z)}{\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z, \tag{C-4b}
 \end{aligned}$$

onde a última integral do membro direito de C-4b, por sua vez, de acordo com C-1b e C-3, resulta em:

$$\begin{aligned}
 & \int \frac{(1 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z)}{\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z} \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z = \\
 & = \int \frac{\exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z)}{\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z} dE_z + \int \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) dE_z = \\
 & = \frac{2}{\Theta^2 \Delta z} (2 + \Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z) \exp(-\Theta \sqrt{\Lambda - E_z} \Delta z), \tag{C-4c}
 \end{aligned}$$

tal que a substituição de C-4c em C-4b fornece:

$$\begin{aligned}
& \int (1 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) dE_z = \\
& = \frac{2}{\theta^2 \Delta Z} \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) \times \\
& \times [(1 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z})^2 + 2 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}],
\end{aligned} \tag{C-4d}$$

e, finalmente, substituindo C-4d em C-4a, resulta na fórmula:

$$\begin{aligned}
& \int (E_F - E_z) \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) dE_z = \\
& = (E_F - E_z) \frac{2}{\theta^2 \Delta Z} (1 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) + \\
& + \left(\frac{2}{\theta^2 \Delta Z} \right)^2 \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) \times \\
& \times [(1 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z})^2 + 2 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}].
\end{aligned} \tag{C-5}$$

Em resumo, repetem-se abaixo as fórmulas C-3 e C-5, úteis ao cálculo da corrente WKB, desenvolvida no presente capítulo:

$$\begin{aligned}
& \int \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) dE_z = \\
& = \frac{2}{\theta^2 \Delta Z} (1 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}),
\end{aligned} \tag{C-3}$$

$$\begin{aligned}
& \int (E_F - E_z) \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) dE_z = \\
& = (E_F - E_z) \frac{2}{\theta^2 \Delta Z} (1 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) + \\
& + \left(\frac{2}{\theta^2 \Delta Z} \right)^2 \exp(-\theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}) \times \\
& \times [(1 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z})^2 + 2 + \theta \sqrt{\Lambda - E_z \Delta Z}].
\end{aligned} \tag{C-5}$$

APÊNDICE III.D

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER PARA O POÇO QUÂNTICO:

A solução efetua-se pelo sistema de equações a seguir, implementado em uma simples calculadora portátil, em algoritmo ponto a ponto:

$$\psi(u_1) - \psi(u_0) + (u_1 - u_0) \left. \frac{d}{du} \psi(u) \right|_{u = u_0} \quad \therefore \quad \text{D-1a}$$

$$\therefore \psi_1 \sim \psi_0 + \Delta u \psi'_0, \quad \text{D-1b}$$

$$\left. \frac{d}{du} \psi(u) \right|_{u = u_1} \sim \left. \frac{d}{du} \psi(u) \right|_{u = u_0} + C(u) \psi(u_0) (u_1 - u_0) \quad \therefore \quad \text{D-2a}$$

$$\therefore \psi'_1 \sim \psi'_0 + C(u) \Delta u \psi_0, \quad \text{D-2b}$$

onde:

$$u = z/\eta, \quad \text{D-3a}$$

$$C(u) = 4 \frac{2m}{\hbar^2} \eta^2 V_0 \left(\ln \frac{1 - u_0}{1 + u_0} - E/V_0 \right). \quad \text{D-3b}$$

A origem do fator "4" em D-3b acima deve-se à normalização adotada. Sendo a largura total do espaçamento túnel de 2η , a relação D-3a fornece:

$$\frac{du}{dz} = \eta^{-1} \quad \therefore \quad \frac{d^2 u}{dz^2} = 0, \quad \text{D-4}$$

donde:

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} = \frac{d}{dz} \frac{d\psi}{dz} = \frac{du}{dz} \frac{d}{du} \frac{d\psi}{dz} = \frac{du}{dz} \frac{d}{du} \left(\frac{du}{dz} \frac{d\psi}{du} \right) = \frac{1}{\eta} \frac{d}{du} \left(\frac{1}{\eta} \frac{d\psi}{du} \right) =$$

$$= \eta^{-2} \frac{d^2 \psi}{du^2} \therefore \frac{d^2 \psi}{du^2} = \eta^2 \frac{d^2 \psi}{dz^2}.$$

D-5

Assim, a relação quadrática em η em D-5 origina o fator "4" como o equivalente à largura total do espaçamento túnel elevada ao quadrado, $(2\eta)^2$.

A obtenção dos autovalores de energia permitidos também foi feita numericamente (método de Newton), resultando autovalores próximos dos de um poço quadrado, com a precisão do intervalo Δu utilizado. Ou seja, para $\Delta u = 0,1$, obteve-se $E_1^* \cong 2,303$, ao passo que para $\Delta u = 0,01$, resultou $E_1^* \cong 2,364$, por exemplo.

A notação E_1^* aqui adotada visa distinguir entre a energia propriamente dita e o valor numérico utilizado nos algoritmos. De fato, tais valores numéricos de E_1^* correspondem, de acordo com D-3b, a um produto de constantes arbitrariamente definido por:

$$E_1^* = 4 \frac{2mV_0}{\hbar^2} \eta^2,$$

D-6

onde novamente surge o fator "4", pelo mesmo motivo já comentado.

Para maior precisão e ao mesmo tempo mantendo um tempo razoável de processamento para a calculadora, adotou-se um intervalo de $\Delta u = 0,01$. O algoritmo para o programa da calculadora foi o conhecido *método de Newton* para a raiz de uma função, já que o problema de autovalores com as condições de contorno $\psi(-\eta) = \psi(\eta) = 0$, do poço quântico, consiste simplesmente em procurar o valor de E_1^* que satisfaça, dentro de algum intervalo de z , a condição de contorno em um extremo do poço, partindo do outro extremo.

Quanto à condição de normalização, foi efetuada para cada autovalor de energia por uma simples soma de Riemann. Ou seja, calculou-se a amplitude A da onda no poço adaptando a condição de normalização, de uma integral a uma soma de Riemann para cada valor da autofunção ψ_i em cada um dos i intervalos em que se dividiu o poço. Por exemplo, para $\Delta u = 0,01$, havia um total de 200 intervalos no poço. A condição de normalização em soma de Riemann permitia calcular a amplitude A da onda por:

$$A^2 \Delta u \sum_i \psi_i^2 - 1 \therefore A = \left(\Delta u \sum_i \psi_i^2 \right)^{-1/2}.$$

D-6

Os resultados dos autovalores de energia E_i^* para $i = 1$ a 22 seguem abaixo:

i	E_i^*										
1	2,36	5	61,9	9	203	13	429	17	748	21	1172
2	9,87	6	89,3	10	251	14	500	18	844	22	1296
3	22,2	7	122	11	305	15	576	19	946		
4	39,6	8	160	12	363	16	659	20	105		

e os valores das amplitudes A_i das três primeiras autofunções associadas aos três primeiros autovalores de energia, para o esboço da Fig. 1, foram: $A_1 \cong 1,20$; $A_2 \cong 2,76$; e $A_3 \cong 4,06$.

BIBLIOGRAFIA

- BANDO, H., MORITA, N., TOKUMOTO, H., MIZUTANI, W., WATANABE, K., HOMMA, A., WAKIYAMA, S., SHIGENO, M., ENDO, K. & KAJIMURA, K.
1988 "Scanning tunneling spectroscopy on graphite and $2H-NbSe_2$ ", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No. 2 (March/April), pp. 344-8.
- BARANAUSKAS, Vitor
1989 *Técnicas Instrumentais de Caracterização de Semicondutores*, Campinas: Unicamp.
- BARATOFF, A.
1984 "Theory of scanning tunneling microscopy — methods and approximations", *Physica* 127B, pp. 143-50.
- BARATOFF, A., BINNIG, Gerd, FUCHS, H., SALVAN, Frank & STOLL, Erich
1986 "Tunneling microscopy and spectroscopy of semiconductor surfaces and interfaces", *Surface Science* 168, pp. 734-43.
- BARDEEN, John (1908-)
1961 "Tunneling from a many-particle point of view", *Physical Review Letters* 6, No. 2 (January 15), pp. 57-9.
- BATRA, Inder P. & CIRACI, S.
1988 "Theoretical scanning tunneling microscopy and atomic force microscopy study of graphite including tip-surface interaction", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No. 2 (March/April), pp. 313-8.
- BATRA, Inder P., GARCÍA, Nicolás, ROHRER, Heinrich, SALEMINK, H., STOLL, E. & CIRACI, S.
1987 "A study of graphite surface with stm and electronic structure calculations", *Surface Science* 181, pp. 126-38.
- BECKER, J. A.
1951 "The use of the field emission electron microscope in adsorption studies of W on W and Ba on W", *The Bell System Technical Journal* (October), pp. 907-32.
- BENDER, Carl M. & ORSZAG, Steven A.
1978 *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*, New York: McGraw-Hill.
- BINNIG, Gerd & ROHRER, Heinrich
1982 "Scanning tunneling microscopy", *Helvetica Physica Acta* 55, No. 6, pp. 726-35.
1986 "Scanning tunneling microscopy", *IBM Journal of Research and Development* 30, No. 4 (July) pp. 355-69.
1987 "Scanning tunneling microscopy — from birth to adolescence", *Reviews of Modern Physics*, 59, No. 3, Part I, July, pp. 615-25.
- BINNIG, Gerd, ROHRER, Heinrich, GERBER, Christoph & WEIBEL, Eduard
1982a "Vacuum tunneling", *Physica* 109&110B, pp. 2075-7.
1982b "Tunneling through a controllable vacuum gap", *Applied Physics Letters* 40, No. 2 (15 January), pp. 178-80.
1982c "Surface studies by scanning tunneling microscopy", *Physical Review Letters* 49, No. 1 (5 July), pp. 57-61.

- CHARBONNIER, F. M., SWANSON, L. W. & DYKE, W. P.**
 1967 "Field emission", in L. Marton (Editor-in-chef), *Methods of Experimental Physics*, Vol. 4: Vernon W. Hughes & Howard Schutz (eds.), *Atomic and Electron Physics — Part A: Atomic Sources and Detectors*, New York: Academic Press, pp. 38-53.
- CHEN, C. Julian**
 1988 "Theory of scanning tunneling spectroscopy", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No. 2 (March/April), pp. 319-22.
 1990a "Origin of atomic resolution on metal surfaces in scanning tunneling microscopy", *Physical Review Letters* 65, No. 4 (23 July), pp. 448-51.
 1990b "Tunneling matrix elements in three-dimensional space: The derivative rule and the sum rule", *Physical Review B* 42, No. 14 (15 November), pp. 8841-57.
 1991a "Microscopic view of scanning tunneling microscopy", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 9, No. 1 (January/February), pp. 44-50.
 1991b "Perturbation approach for quantum transmission", *Modern Physics Letters B* 5, No. 2, pp. 107-105.
- CHICON, R., ORTUNO, M. & ABELLAN, J.**
 1987 "An algorithm for surface reconstruction in scanning tunneling microscopy", *Surface Science* 181, pp. 107-11.
- CHURCHILL, Ruel V.**
 1981 *Variáveis Complexas e suas Aplicações*, Editora McGraw-Hill do Brasil. Traduzido por Tadao Yoshioka, da 2.^a ed., (1975).
- COHEN-TANNOUJJI, Claude, DIU, Bernard & LALOË, Franck**
 1977 *Quantum Mechanics*, 2 Vols., New York: John Wiley & Sons. Translated by Susan Reid Hemley et al., of the original in French: *Mécanique Quantique*, Paris: Hermann (1973, 2nd. ed.: 1977).
- COLTON, R. J., BAKER, S. M., DRISCOLL, R. J., YOUNGQUIST, M. G. & BALDESCHWIELER, J. D.**
 1988 "Imaging graphite in air by scanning tunneling microscopy: Role of the tip", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No. 2, (March/April), pp. 349-53.
- DIRAC, Paul Adrien Maurice (1902-)**
 1966 *Lectures on Quantum Field Theory*, New York: Academic Press, (2nd. Printing, 1967).
- DUKE, C. B.**
 1969 *Tunneling in Solids*, in "Solid State Physics: Advances in Research and Applications", New York: Academic Press.
- EISBERG, Robert Martin**
 1979 *Fundamentos da Física Moderna*, Rio de Janeiro: Guanabara Dois. Traduzido por Francisco Antonio Bezerra Coutinho et al., do original: *Fundamentals of Modern Physics*, John Wiley & Sons (1961).
- EISBERG, Robert & RESNICK, Robert**
 1986 *Física Quântica - Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*, 4a. ed. (1a. reimpressão, 1988), Rio de Janeiro: Campus. Traduzido por Carlos Maurício Chaves (coordenador) et al., do original em inglês: *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Nuclei and Particles*, John Wiley & Sons (1974).

- FEENSTRA**, Randall M., **STROSCIO**, Joseph A. & **FEIN**, A. P.
1987 "Tunneling spectroscopy of the Si(111)2x1 surface", *Surface Science* **181**, pp. 295-306.
- FEUCHTWANG**, T. E. & **CUTLER**, P. H.
1987 *Physica Scripta* **35**, No. 2, p. 132. Citado por Chen (1988). Não se encontra exemplar na UNICAMP.
- FOWLER**, Ralph Howard (1889-1944) & **NORDHEIM**, Lothar
1928 "Electron Emission in intense electric fields", *Proceedings of the Royal Society of London*, **A119**, pp. 173-81.
- GARCÍA CANTÚ**, Rigoberto, & **HUERTA-GARNICA**, Miguel A.
1989 "Direct tip structures determination by scanning tunnelling microscopy", *Journal de Physique, Colloque* **50**, supplément au no. 11, novembre, pp. C8-31-36.
- GARCÍA**, Nicolás & **FLORES**, F.
1984 "Theoretical studies for scanning tunneling microscopy", *Physica* **127B**, pp. 137-42.
- GARCÍA**, Nicolás, **OCAL**, C. & **FLORES**, F.
1983 "Model theory for scanning tunneling microscopy: application to Au (110) (1x2)", *Physical Review Letters* **50**, No. 25 (20 June), pp. 2002-5.
- GERBER**, Christoph, **BINNIG**, Gerd, **FUCHS**, H., **MARTI**, O. & **ROHRER**, Heinrich
1986 "Scanning tunneling microscope combined with a scanning electron microscope", *Review of Scientific Instruments* **57**, No. 2 (February), pp. 221-4.
- GOLOVCHENKO**, Jene A.
1986 "The tunneling microscope: A new look at the atomic world", *Science* **232** (April), pp. 48-53.
- HANSMA**, Paul K. & **TERSOFF**, Jerry
1987 "Scanning tunneling microscopy", *Journal of Applied Physics* **61**, No. 2 (15 January), pp. R1-23.
- HUANG**, Zhi Hong, **CUTLER**, Paul H., **FEUCHTWANG**, T. E. & **KAZES**, E.
1989 "A multi-dimensional tunneling theory with application to scanning tunneling microscope", *Journal de Physique, Colloque* **50**, supplément au no. 11, novembre, pp. C8-31-6.
- HUANG**, Zhi Hong, **FEUCHTWANG**, T. E., **CUTLER**, Paul H. & **KAZES**, E.
1990 "The Wentzel-Kramers-Brillouin method in multidimensional tunneling: Application to scanning tunneling microscopy", *Journal of Vacuum Science and Technology A* **8**, No. 1 (January/February) pp. 177-81.
- KRAUS**, John D. & **CARVER**, Keith R.
1953 *Electromagnetics*, New York: McGraw-Hill.
- KUK**, Young & **SILVERMAN**, P. J.
1989 "Scanning tunneling microscope instrumentation", *Review of Scientific Instruments* **60**, No. 2, (February), pp. 165-80.

- LANDAU**, Lev Davidovich (1908-1968) & **LIFSHITZ**, Evguêni Mikhailovich
 1985 *Mecânica Quântica — Teoria Não Relativista*, in "Física Teórica", Vol. 3, Tomo 1, Moscou: Mir. Traduzido da 3a. edição russa (1974) por José Nicodemos T. Rabelo.
- LANG**, Norton D.
 1985 "Vacuum tunneling current from an adsorbed atom", *Physical Review Letters* 55, No. 2 (8 July), pp. 230-3. Erratum: *Physical Review Letters* 55, No. 26 (23 December), p. 2925.
 1986 "Theory of single-atom imaging in the scanning tunneling microscope", *Physical Review Letters* 56, No. 11 (17 March), pp. 1164-7.
 1987 "Apparent size of an atom in the scanning tunneling microscope as a function of bias", *Physical Review Letters* 58, No. 1 (5 January), pp. 45-8.
- LANGER**, Rudolf E.
 1937 "On the connection formulas and the solutions of the wave equation", *Physical Review* 51, (April 15), pp. 669-76.
- LUCAS**, A. A., **CUTLER**, P. H.
 1973 "Thermal field emission as a mechanism for infrared laser light detection in metal whisker diode", *Solid State Communications*, 13, pp. 361-5.
- LUCAS**, A. A., **CUTLER**, Paul H., **FEUCHTWANG**, T. E., **TSONG**, Tien T., **SULLIVAN**, T. E., **YUK**, Y., **NGUYEN**, H. & **SILVERMAN**, P. J.:
 1988 "Use of a scanning tunneling microscope to rectify optical frequencies and measure an operational tunneling time", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No. 2, (March/April), pp. 461-5.
- LUCAS**, A. A., **MORAWITZ**, H., **HENRY**, G. R., **VIGNERON**, J.-P., **LAMBIN**, Ph., **CUTLER**, P. H. and **FEUCHTWANG**, T. E.
 1988 "Tunneling through localized barriers with application to scanning tunneling microscope: new scattering theoretic approach and results", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No.2 (March/April), pp. 296-9.
- MAHAN**, Bruce H.
 1972 *Química — Um Curso Universitário*, 2a. ed. rev., 4a. reimpressão (1978), São Paulo: Edgard Blücher. Traduzido por Ernesto Giesbrecht (coordenador) et al., do original em inglês: *University Chemistry*, (s. l.): Addison-Wesley.
- MILOVSKY**, A. V., **KONONOV**, O. V.
 1985 *Mineralogy*, Moscow: Mir. Translated from the Russian by G. G. Egorov. (Revised from the 1982 Russian edition).
- MIZES**, H. A. & **HARRISON**, Walter A.
 1988 "The signature of point defects in layered materials", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No.2 (March/April), pp. 300-4.
- MORITA**, S., **TSUKADA**, S. & **MIKOSHIBA**, N.
 1988 "Scanning tunneling microscopy of Kish graphite and highly oriented pyrolytic graphite in air", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No. 2 (March/April), pp. 354-7.

- MUKHIN, Konstantin N. (1918-)**
 1987 *Physics of Atomic Nucleus*, in "Experimental Nuclear Physics", Vol. I, Moscow: Mir. Translated from Russian (1st ed. 1974) by Ram S. Wadhwa.
- MÜLLER, Erwin Wilhelm (1911-1977)**
 1938 "Weitere Beobachtungen mit dem Feldelektronenmikroskop", *Zeitschrift für Physik* **108**, S. 668-80.
 1951 "Das Feldionenmikroskop", *Zeitschrift für Physik* **131**, S. 136-42.
- OPPENHEIMER, J. Robert (1904-1967)**
 1928 "Three notes on the quantum theory of aperiodic effects", *Physical Review* **13** (January), pp. 66-81.
- PARK, David**
 1964 *Introduction to Quantum Theory*, New York: McGraw-Hill.
- QUATE, Calvin F.**
 1986 "Vacuum tunneling: A new technique for microscopy", *Physics Today* **39**, No. 8 (August) pp. 26-33.
- RANDERAAT, J. van & SETTERINGTON, R. E. (eds.)**
 1974 *Piezoelectric Ceramics*, London: Mullard, 2nd. ed. (1st. ed. 1968).
- RUSSELL, Allan M.**
 1962 "Electron trajectories in a field emission microscope", *Journal of Applied Physics* **33**, No. 3, March, pp. 970-5.
- SCHROEDINGER, Erwin (1887-1961)**
 1926a "Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung)", *Annalen der Physik*, Vierte Folge, Band **79**, Viertes Heft (No. 4), S. 361-76.
 1926b "Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen", *Annalen der Physik*, Vierte Folge, Band **79**, Achtes Heft (No. 8), S. 734-56.
 1926c "Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung)", *Annalen der Physik*, Vierte Folge, Band **81**, No. 18, S. 109-39.
- SCOTT, William T.**
 1967 *Erwin Schroedinger: An Introduction to His Writings*, Amherst (Massachusetts): University of Massachusetts Press.
- SELLONI, A., CARNEVALI, P., TOSATTI, E. & CHEN, C. D.**
 1985 "Voltage-dependent scanning tunneling microscopy of a crystal surface: Graphite", *Physical Review B* **31**, No. 4 (15 February), pp. 2602-5. Erratum: *Physical Review B* **34**, No. 10, (15 November), p. 7406.
- SIMMONS, John G.**
 1963 "Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film", *Journal of Applied Physics* **34**, No. 6, June, pp. 1793-803.
- SMITH, Douglas P. E. & BINNIG, Gerd**
 1991 "Ultrasmall scanning tunneling microscope for use in a liquid-helium storage Dewar", *Review of Scientific Instruments* **57**, No. 10 (October), pp. 2630-1.

- SOLLER, J. M., BARO, A. M. & GARCÍA, Nicolás**
 1986 "Interatomic forces in scanning tunneling microscopy: giant corrugations of the graphite surface", *Physical Review Letters* 57, No. 4 (28 July), pp. 444-7.
- STOLL, Erich, BARATOFF, A., SELONI, A. & CARNEVALI, P.**
 1984 "Current distribution in the scanning vacuum tunnel microscope: a free-electron model", *Journal of Physics C: Solid State Physics* 17, pp. 3073-86.
- STROSCIO, Joseph A., FEENSTRA, Randall M., NEWNS, D. M. & FEIN, Aaron P.**
 1988 "Voltage-dependent scanning tunneling microscopy imaging of semi-conductor surfaces", *Journal of Vacuum Science and Technology A* 6, No.2 (March/April), pp. 499-507.
- STUPIAN, Gary W. & LEUNG, Martin S.**
 1989 "A scanning tunneling microscope based on a motorized micrometer", *Review of Scientific Instruments* 60, No. 2 (February), pp. 181-5.
- SZE, S. M.**
 1981 *Physics of Semiconductor Devices*, New York: Wiley.
- TERSOFF, Jerry & HAMANN, D. R.**
 1983 "Theory and application for the scanning tunneling microscope", *Physical Review Letters* 50, No. 25 (20 June), pp. 1998-2001.
 1985 "Theory of the scanning tunneling microscope", *Physical Review B* 31, No. 2 (15 January), pp. 805-13.
- TIPLER, Paul A.**
 1981 *Física Moderna*, Rio de Janeiro: Guanabara Dois. Traduzido por Yashiro Yamamoto (coordenador) et al., do original em inglês: *Modern Physics*, New York: Worth Publishers (1978).
- VAN VLACK, Lawrence Hall (1920-)**
 1988 *Princípios de Ciência e Tecnologia dos Materiais*, 2a. ed., Rio de Janeiro: Campus. Traduzido por Edson Monteiro, da 4a. ed. atualizada e ampliada de: *Elements of Materials Science and Engineering*, Reading (Massachusetts): Addison-Wesley (s. d.).
- WALMSLEY, D. G.**
 1987 "Pre-microscope tunnelling: inspiration or constraint?", *Surface Science*, 181, pp. 1-26.
- YOUNG, Russel D., WARD, John & SCIRE, Fredric**
 1971 "Observation of metal-vacuum-metal tunneling, field emission, and the transition region", *Physical Review Letters* 27, No. 14 (4 October), pp. 922-4.
 1972 "The Topografiner: An instrument for measuring surface microtopography", *Review of Scientific Instruments* 43, No. 7, pp. 999-1011.
- ZUFFO, João Antônio (1939-)**
 1976 *Dispositivos Eletrônicos: Física e Modelamento*, São Paulo: McGraw-Hill do Brasil.