

Solución teórica y simulación del potencial de Fowler-Nordheim con corrección gaussiana debido a un dopaje homogéneo de nitrógeno en grafeno piridínico

Content

Palabras clave: emisión de campo, grafeno dopado, simulación cuántica.

Introducción

La emisión de campo (field emission, FE) es un fenómeno cuántico mediante el cual electrones son extraídos desde un sólido al vacío aplicando un campo eléctrico intenso, sin necesidad de aportar calor [1]. Este proceso, descrito inicialmente por Fowler y Nordheim en 1928, se basa en la tunelización cuántica de electrones a través de una barrera de potencial [2]. Su eficiencia energética, junto con su aplicabilidad en tecnologías emergentes como pantallas planas, microscopía electrónica y sensores de alta precisión, ha motivado una intensa búsqueda de materiales emisores optimizados. Las nanoestructuras de carbono como los nanotubos (CNTs) y el grafeno han mostrado un desempeño sobresaliente como emisores debido a su alta relación de aspecto, excelente conductividad eléctrica, baja función de trabajo y gran estabilidad estructural.

Materiales y métodos

La base teórica es la ecuación de Schrödinger unidimensional dependiente del tiempo, aplicada a un sistema cuántico sometido a un campo eléctrico externo y modificado localmente por el dopaje.

Usamos la forma estacionaria: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$.

El potencial total $V(x)$ modela grafeno dopado de manera uniforme (representativo de superficies laminares de carbono dopadas, p. ej., con nitrógeno) bajo campo externo. Consta de tres componentes: - Pendiente lineal por el campo aplicado: $-\beta e F x$ - Función de trabajo del material: ϕ - Corrección gaussiana localizada que simula la perturbación del dopaje: $V(x) = \phi - \beta e F x + A \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\gamma^2}\right)$.

La ecuación se resolvió por diferencias finitas centradas, discretizando el dominio espacial en malla uniforme. El sistema resultante (tridiagonal) se resolvió con rutinas optimizadas. El código calcula la probabilidad de túnel $T(E) = |t|^2$ (siendo t el coeficiente de transmisión) y la densidad de corriente mediante la ley de Fowler-Nordheim: $J(F) = \frac{A_{FN} F^2}{\phi} \exp\left(-\frac{B_{FN} \phi^{3/2}}{F}\right)$.

Resultados

Se compararon los resultados numéricos con la aproximación WKB y con la ley de Fowler-Nordheim, observándose buena correspondencia cualitativa en el rango de parámetros estudiado, lo que respalda la pertinencia del modelo. La corriente efectiva de emisión (producto de J_{FN} y $T(E)$) en función de la energía del electrón incidente se evaluó para tres valores de β . Para β bajos (p. ej., $\beta=0.5$ y $\beta=1.0$) la corriente efectiva es despreciable en el rango considerado; para $\beta=2.0$ se observa un incremento progresivo con la energía, lo que indica que una mayor pendiente del potencial reduce la barrera efectiva, favoreciendo la tunelación cuántica e incrementando la eficiencia emisora.

Discusión

El modelo es simple (bajo costo computacional) y versátil (extensible a múltiples regiones de dopaje, barreras superpuestas o potenciales asimétricos). Ofrece una herramienta útil para analizar cómo la geometría y el dopaje afectan la emisión de campo desde nanoestructuras de carbono.

Agradecimientos

Trabajo realizado con el apoyo del Centro de Investigaciones Químicas de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Se agradece a la Dra. María Luisa García Betancourt y al comité tutorial por su orientación y valiosas observaciones.

Referencias

- [1] M. L. García Betancourt, Producción de nanoestructuras de carbono con morfología controlada y sus aplicaciones, Tesis de Doctorado, IPICYT, San Luis Potosí, México (2013).
- [2] R. H. Fowler, L. Nordheim, Electron emission in intense electric fields, Proc. Royal Society A 119 (781), 173–181 (1928).

Tipo de presentación

Primary author(s) : RENDON SANCHEZ, Lizandro Yael (CIQ UAEM)

Co-author(s) : Dr. GARCÍA BETANCOURT, María Luisa (CIQ UAEM); Dr. HÔ, Minhuy (CIQ UAEM); Dr. MORERA BOADO, Cercis (CIQ UAEM); Dr. MÉNDEZ SÁNCHEZ, Rafael Alberto (ICF UNAM)

Presenter(s) : RENDON SANCHEZ, Lizandro Yael (CIQ UAEM)