arXiv:2302.03733v1 [physics.comp-ph] 7 Feb 2023

场发射体静电学：用于高精度计算场增强因子的高效改进模拟技术

Fernando F. Dall'Agnol[1], * Thiago A. de Assis[2, 3], † 和 Richard G. Forbes[4], ‡

[1] *Department of Exact Sciences and Education (CEE), Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Blumenau, Rua João Pessoa, 2514, Velha, Blumenau 89036-004, SC, Brazil*

[2] *Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário da Federação, Rua Barão de Jeremoabo s/n 40170-115 Salvador BA Brazil , , , , , ,*

[3] *Instituto de Física Universidade Federal Fluminense Avenida Litorânea s/n, 24210-340, Niterói, RJ, Brazil*

[4] *Advanced Technology Institute & School of Computer Science and Electronic Engineering, University of Surrey, Guildford, Surrey GU2 7XH, UK*

通过计算机模拟数值求解拉普拉斯方程，以确定代表场发射体的形状模型表面的场值时，必须定义一个模拟盒，并在其中定义一个模拟域。该计算域不能过小，否则模拟盒边界会对预测的场值产生不利影响。近期一篇论文讨论了轴对称场发射体模型竖立于一对间距较大的平行板之一上的情形。这种几何结构可用二维计算域进行模拟。对于圆柱形模拟盒，先前已有公式给出计算此类模型的场增强因子顶点值所需的最小计算域尺寸（MDD）（高度和半径），且误差幅值始终不超过"容差" $\epsilon_{\rm tol}$。该最小域尺寸判据有助于避免无意的误差和过大的计算域。本文（较以往更深入地）探讨了 MDD 方法的一项重大改进；这项改进称为 MDD 外推技术（MDDET）。通过采用相对较小的 MDD 值进行两次模拟，便可达到与使用大得多的模拟域进行单次模拟相当的精度。对于某些模拟，这有望显著节省内存需求和计算时间。在简要重述原始 MDD 方法后，本文通过将 MDDET 方法应用于平面上的半椭球体（HEP）和半球-圆柱柱体（HCP）发射体形状模型，对其进行了说明。

关键词：场发射、场发射体静电学、场增强因子、有限元法、最小计算域尺寸（MDD）、静电去极化。

I. 引言

计算机模拟正日益成为研究场电子发射（FE）系统表征参数的普遍工具。特别是，用于分析场发射体静电学的数值方法长期以来都很有用 [1–4], ，因为这些方法建立了一些相对简单的公式，用于描述表征静电状况的参数，通常是无量纲的场增强因子（FEF）。

尤其是，柱状体形状的静电建模引起了广泛的研究兴趣。这类建模通常采用：(a) 具有圆柱对称性的经典导体柱体模型；以及 (b) 所谓的平行平板（PPP）几何结构 [5–18]。本文也主要聚焦于 PPP 几何结构中的圆柱对称柱体。

在 PPP 几何结构中，假设总高度为 h 的柱体立于一对横向尺寸很大的平行平板中的一块板上（其横向尺寸远大于两板之间的实际间距 $d_{\rm sep}$ ）。通常分析的是"标准"情形，即 (a) $h << d_{\rm sep}$，此外 (b) 柱体顶点与反电极板之间的间隙长度 $[d_{\rm gap} = d_{\rm sep} - h]$ 远大于柱体高度 [，即 $h << d_{\rm gap}$]。

本文也讨论了这种标准情况，但由于模拟盒侧面的边界条件，平行板实际上具有无限大的延伸范围。

然而，这些边界条件（将在下文讨论）也会产生镜像效应。这些镜像效应会使所模拟的发射体柱发生静电去极化，从而可能导致预测的场增强因子不准确。

模拟盒的横向尺寸越大，去极化效应就越小，误差也就越小。类似的论述（但并不完全相同）也适用于模拟盒高度（见 [19]）。较大的模拟盒需要额外的计算资源，因此需要在精度与盒体尺寸之间进行权衡。本文旨在优化这种权衡，并找出准确的 FEF 值。

* 有关数值问题的通信请联系作者：fernando.dallagnol@ufsc.br

† thiagoaa@ufba.br

‡ 有关一般问题的通信请联系作者：r.forbes@trinity.cantab.net

此时，有必要先给出一些严谨的静电定义。局部静电（*ES*）场 E_{L}是柱体表面上某个位置“L”处的静电场，该位置通常位于柱体顶点附近。柱体顶点处的局部静电场本身记为 E_{a}。

A宏观静电场是与所讨论系统整体几何形状相关的场。宏观场有几种不同类型（见 [19]）。本文关注的是不存在柱体且不考虑其存在所引起的任何影响时，两块平行板之间的宏观静电场。为简单起见，我们将这种板间场称为板间场，并记为 E_{P}。

正如宏观场有几种不同类型，无量纲宏观场增强因子也有几种不同类型。这里关注的因子是所谓的局部板间场增强因子（*PFEF*） γ_{PL} ，其定义为

$$\gamma_{\mathrm{PL}} = E_{\mathrm{L}}/E_{\mathrm{P}}. \tag{1}$$

通常，特别值得关注的是顶点 PFEF 值 γ_{Pa}，其定义为

$$\gamma_{\mathrm{Pa}} = E_{\mathrm{a}}/E_{\mathrm{P}}, \tag{2}$$

尤其值得关注的是。

此处采用传统的经典静电约定：这意味着，对于场电子发射，电场为负；而对于场致离子发射，电场为正。当然，两种情况下的场增强因子值均为正。

请注意，与我们此前发表的部分论文相比，本文采用的术语和符号更加精确。“板间场”和“板间场增强因子”（及相关符号）取代了旧论文中使用的“宏观场”和“宏观场增强因子”，而“宏观”一词现在具有更广泛的含义（见 [19]）。

另请注意，我们用符号 γ 表示无量纲场增强因子，而非场增强因子文献中通常使用的符号 β 。这样做是为了避免与 β 的另一种用法（以及有时将“场增强因子”一词用于描述场与某种类似电压的量之间关系的情况）相混淆。本文讨论的所有场增强因子都是无量纲的，因此我们今后将不再使用“无量纲”一词。

本文所述计算采用有限元法（*FEM*） [20, 21]求解拉普拉斯方程。计算在模拟域内进行，该模拟域由一个圆柱形模拟盒提供，所研究的柱体位于盒轴线上。模拟域是柱体边界与盒壁之间的体积（3D）或面积（2D）。模拟使用 COMSOL v5.3 软件包进行。

最初以及现在，都有必要考虑那些顶点 PFEF 的解析表达式已知得精确的柱体$\gamma^{(\mathrm{an})}{}_{\mathrm{Pa}}$ 。总百分比误差 ϵ_{num} 数值推导（即通过模拟推导）得到的顶点 PFEF 值 $\gamma^{(\mathrm{num})}{}_{\mathrm{Pa}}$ 的总百分比误差定义如下：

$$\epsilon_{\mathrm{num}} \equiv \left[\frac{\gamma^{(\mathrm{num})}_{\mathrm{Pa}} - \gamma^{(\mathrm{an})}_{\mathrm{Pa}}}{\gamma^{(\mathrm{an})}_{\mathrm{Pa}}}\right] \times 100\%, \tag{3}$$

参数 ϵ_{num} 原则上可以为正，也可以为负，但我们通常实际关注的是误差幅值 $|\epsilon_{\mathrm{num}}|$。请注意，对于某些几何形状，由于不存在已知的解析解，因此必须用数值计算得到的“高精度”值代替“解析”值。

此外，请注意，此处采用的惯例在某些方面不同于我们近期综述 [19], 中采用的惯例；在这些情况下，这种变化会导致ϵ_{num}的符号改变。此处修订后的定义更为常见，因此可能更清晰。

模拟的初始目标是确定最小计算域尺寸（*MDD*）。该术语指包围模拟域的模拟盒的最小高度和半径，目的是确保 $|\epsilon_{\mathrm{num}}|$ 小于预先指定的场增强因子值中的某个误差 ϵ_{tol} 。参数 ϵ_{tol} 始终取正值，因此严格来说， ϵ_{tol} 是误差幅值。我们将 ϵ_{tol} 称为模拟容差。

在我们两人撰写的关于最小计算域尺寸的原始论文 [22] 中，精确解析计算所选用的形状是“平面上的半球体”（HSP）模型。然而，在我们近期的综述论文 [19] 中，我们探讨了更有研究价值的“平面上的半椭球体”（HEP）模型。

原始论文 [22] 还提出了一种更有前景的方法，可用于确定高精度的顶点 PFEF 值，即所谓的 最小计算域尺寸外推技术 （MDDET 方法）。随后，该方法被用于 [12] 确定若干特定发射体形状的精确顶点 PFEF 值，并已在我们的综述论文 [19]中作了概述。

本文有两个目的：简要综述我们早先关于 MDD 和 MDDET 方法的研究，并更全面地讨论这些方法及其在平面上的半椭球体形状模型中的应用。本文扩展了我们在 2022年国际真空纳米电子学会议 [23]上报告的内容。

我们还需要指出，这篇文章讨论的是表面光滑的经典导体的静电学，以及如何有效地实现这类静电学计算。关于碳纳米管（例如 [24]），如何将经典导体静电学与考虑原子结构的静电处理联系起来，也存在一些重要问题。该领域近期取得了重要进展，例如 [25]。相关问题超出了本文的讨论范围，不过我们确实认为，最小计算域尺寸方面的考量将在这类更广泛的讨论中发挥作用。

II. 最小计算域尺寸（MDD）方法

我们来回顾一下关于最小计算域尺寸的讨论 [19, 22]。如前所述，所考虑的系统具有圆柱对称性，且对称轴上有一个柱体。图 1(a) 展示了穿过对称轴的“垂直”平面上的轮廓。图中显示的是一个半平面，原始对称轴位于左侧。对于预先给定的容差 A，计算域宽度（即半径）B 和高度 $\epsilon_{\rm tol}$是我们希望尽量减小的量。

我们将柱体视为理想导体，这意味着静电场不会渗透；因此，如前所述，柱体内部不属于模拟域。计算域的边界条件规定如下。柱体表面和盒体底平面均设为地电势（取为静电势$\Phi = 0$ V）。在右侧边界，以及柱体上方的左侧边界，均采用冯·诺依曼型边界条件，具体要求是边界各点处垂直于边界的静电场分量为零。顶部边界设定为具有恒定的表面电荷密度 $\sigma = \epsilon_0 E_{\rm P}$，其中 ϵ_0 为真空电容率。

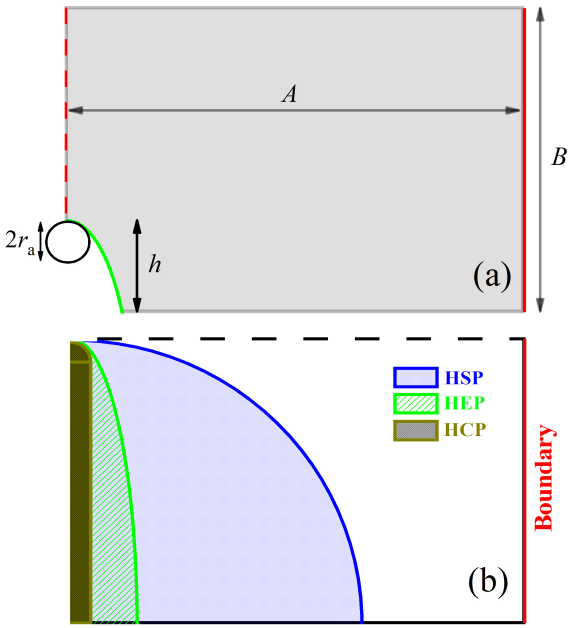

图 1。（a）以灰色显示二维模拟计算域 Ω。A 和 B 是需要最小化的特征尺寸。发射体形状模型的高度 h 和顶点半径 $r_{\rm a}$ 如图所示。模型内部被移除，因为发射体被视为处于地电势的理想导体。（b）对于平面上的半球（HSP）、平面上的半椭球体（HEP）和半球-圆柱柱体（HCP）形状模型，三者具有相同的顶点尖锐度比 $h/r_{\rm a}$，图中显示了每种形状与侧向边界之间的相对距离。

在适用情况下，我们研究系统的静电学性质随顶点尖锐度比 $\sigma_{\rm a} \equiv h/r_{\rm a}$的变化，其中 $r_{\rm a}$ 为顶点曲率半径；同时也研究其随计算域尺寸 A 和 B的变化。

请注意，需要在逻辑上区分顶点尖锐度比（如上所定义）与纵横比，后者定义为“高度”/“底部半径”（ρ），即 h/ρ。对于下文讨论的半球-圆柱柱体（HCP）模型，这两个参数的数值相等，但对于包括 HEP 模型在内的许多形状而言，情况并非如此。对于静电场增强，最受关注的参数是顶点尖锐度比。

A. 平面上的半球（HSP）的 MDD odel

最小计算域尺寸（MDD）的公式最初是针对平面上的半球（HSP）发射体形状模型推导的，对于该模型可写为以下形式 [12, 19, 22]:

$$\left(\frac{A}{r_{\rm H}}\right)_{\rm MDD-HSP} = \frac{6}{\sqrt[3]{\epsilon_{\rm tol}}}, \tag{4}$$

$$\left(\frac{B}{r_{\rm H}}\right)_{\rm MDD-HSP} = \frac{5}{\sqrt[3]{\epsilon_{\rm tol}}}. \tag{5}$$

这里，$r_{\rm H}$ 是半球的半径。“6”和“5”分别是将 5.59 和 4.64 四舍五入后的数值 [12, 22]。将分子向上取整会使 MDD 的上界稍微增大，但公式更容易记忆。

显然，在任何具体情况下，都需要确定一个合适的容差值 $\epsilon_{\rm tol}$。对于探索性数值研究，我们通常取 $\epsilon_{\rm tol} =$ 1%，以缩短计算时间。对于实际应用，通常应选择更低的值。

原则上，可以利用这些平面上的半球的结果，通过将其他柱体状形状内接于半球中，来确定它们的 MDD 值。对于平面上的半椭球体（HEP）和圆柱柱体上的半球（HCP）发射体形状模型，这一过程如图1(b) 所示。HSP 形状的边界比 HEP 和 HCP 形状的边界更靠近模拟盒右侧的边界，因此，该盒边界对 HSP 形状的静电影响大于对另外两种形状的影响。

可以通过数值方式加以证明，使用 $\epsilon_{\rm tol}$ =方程（4）和（5）中的 10%。根据模拟结果，数值误差

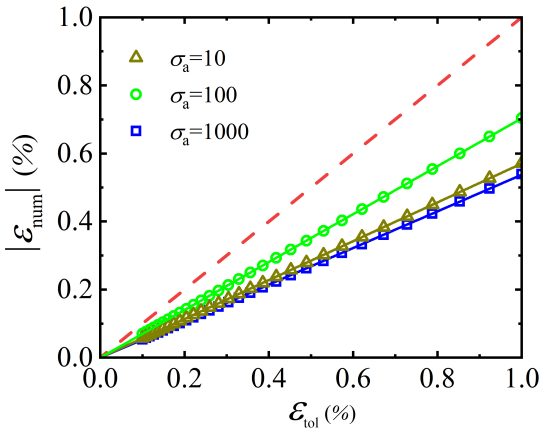

图 2. 展示将 MDD 方法应用于平面上半椭球（HEP）发射体形状模型的结果，顶点尖锐度比取值为 $\sigma_a = 10$、100 和 1000。相关模拟中实际数值误差的大小 $|\epsilon_{num}|$ 随指定的“容差”（事先指定的最大误差大小） ϵ_{tol} 的变化关系如图所示。所有情况下均观察到线性行为。红色虚线表示关系 $|\epsilon_{num}| = \epsilon_{tol}$；因此可以清楚地看到，$|\epsilon_{num}|$ 始终小于 ϵ_{tol}，符合要求。实线用于辅助观察。请注意，对于给定的 ϵ_{tol}，$|\epsilon_{num}|$ 并非 σ_a 的单调函数。虽然这并非预期结果，但我们并不感到意外；然而，目前尚不清楚这一现象的确切原因。

按照方程（3）定义，分别为：HSP 形状为 $\epsilon_{num} = -9.4$ %；带有 $\sigma_a = 30$ 的 HEP 形状为 $\epsilon_{num} = -1.83$%；带有 $\sigma_a = 30$ 的 HCP 形状为 $\epsilon_{num} = -1.20$%。HSP 和 HEP 的结果是通过使用解析顶点 PFEF 得到的。为确定 HCP 模型的 ϵ_{num}，我们计算出 $\gamma^{(num)}{}_{Pa} = 27.3$ （$\epsilon_{tol} = 10$%）以及 $\gamma^{(num)}{}_{Pa} = 27.632969$ （$\epsilon_{tol} = 0.0001$%），并将后一个 $\gamma^{(num)}{}_{Pa}$ 值视为解析值。

总之，对于 HSP 形状，误差幅度不超过 ϵ_{tol} 的 MDD 可确保内接于 HSP 中的 HEP 形状的误差幅度小于该值，而对于同时内接于二者之中的 HCP 形状，误差幅度则更小。

B. 平面上半椭球（HEP）模型的 MDD

这一认识以及 HEP 模型解析公式 [4, 26–30] 的出现，使我们得以基于 HEP 模型理论重新阐述 MDD 的论据。在这种情况下，结果取决于 HEP 形状的顶点尖锐度比（σ_a），并且经经验发现 [12, 19, 22]，最小模拟域尺寸的便捷公式为

$$\left(\frac{A}{h}\right)_{\mathrm{MDD-HEP}} = 6 \times \sqrt[3]{\frac{f(\sigma_a)}{\epsilon_{tol}}} \qquad (6)$$

$$\left(\frac{B}{h}\right)_{\mathrm{MDD-HEP}} = 5 \times \sqrt[3]{\frac{f(\sigma_a)}{\epsilon_{tol}}}, \qquad (7)$$

其中

$$f(\sigma_a) = 0.2 + 0.8 \exp\left[-0.345\left(\sigma_a^{1/2} - 1\right)\right]. \qquad (8)$$

当然，当 $\sigma_a = 1$ 时，公式（6）和（7）分别化简为公式（4）和（5）。

请注意，如果所选容差 ϵ_{tol} 大到使 A/h 接近或小于 1，这些公式的效果就不理想。不过，通常不会使用这么小的模拟盒，因此在实际应用中这并非重要限制。

C. 半球-圆柱柱体（HCP）模型的 MDD

与前文所述的 HSP 方法一样，公式（6）至（8）可用作内接于 HEP 形状的其他形状的 MDD 上界。

在考虑广泛使用的 HCP形状模型时，这一点尤其有用，因为目前尚无（可能也不存在）用于计算顶点 PFEF 的准确的简单解析公式。以下练习对此进行了说明。

与之前一样，通过将 ϵ_{tol} 设得很低，从而采用相对较大的模拟域，我们可以较为准确地估算真实的顶点 PFEF。这使我们能够很好地估算不同 ϵ_{num} 值下的 ϵ_{tol} 和 σ_a，并将其代入公式（6）至（8）。

图 2 显示了误差幅值 $|\epsilon_{num}|$ 随 ϵ_{tol}变化的情况，其中 $\sigma_a = 10$分别为 100 和 1000。显然，结果表明 $|\epsilon_{num}|$ 始终小于 ϵ_{tol}。也就是说，模拟结果中的数值误差始终小于指定的容差。

III. MDD 外推技术

A. 应用于 HEP形状模型的 MDDET 方法

现在我们来讨论应用于 HEP形状模型的*MDD* 外推技术 *(MDDET)*。我们分别对顶点锐度比为 $\sigma_a = 10$、100 和 1000 的 HEP 形状模型进行计算。对于每个 σ_a 值，我们针对多个输入指定容差 ϵ_{tol} 值进行计算。这些值的范围为 0.1% $\leqslant \epsilon_{tol} \leqslant$ 1%，并代入式 (6) 和 (7)。

结果如图 3所示。红色圆圈组显示基于模拟的顶端 PFEF（γ_{Pa}）值随由式（$|\epsilon_{num}|$ 3）推导的数值误差幅度的变化。

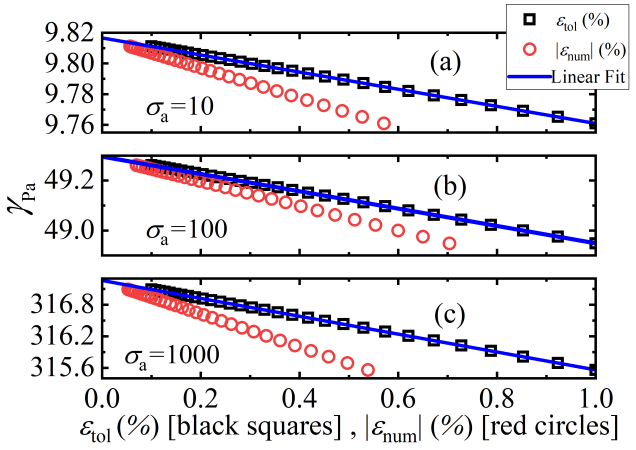

图 3. 为说明将 MDD 外推技术（MDDET 方法）应用于平面半椭球（HEP）发射体形状模型的结果，对于顶点锐度比值：(a) $\sigma_a = 10$; (b) $\sigma_a = 100$; (c) $\sigma_a = 1000$。在所有情况下，（红色）圆圈表示模拟得到的顶点 PFEF（γ_{Pa}）值，其 plotted as a function of 实际误差幅值 $|\epsilon_{num}|$；该误差幅值通过与精确解析值进行比较得到。（黑色）方块表示这些顶点 PFEF 值，其 plotted as a function of 指定输入容差 ϵ_{tol}。由于每个红色圆圈都位于相应黑色方块的左侧，这表明在所有情况下，实际数值误差幅值均小于指定容差。请注意“黑色方块图”具有良好的线性。

黑色方块显示相同的数值计算得到的顶端 PFEF 值，但其变化取决于输入指定的容差 ϵ_{tol}。在所有情况下都可以看出（因为每个红色圆圈都位于相应黑色方块的左侧），实际数值百分比误差幅度小于指定的容差。

在所有六种情况下，这些图线都基本呈线性。如果对任一图（每幅图均基于 30 个数据点）拟合回归直线，那么该直线与垂直（“零误差”）轴的交点值预计能很好地估算给定输入值 σ_a 对应的真实顶端 PFEF 值。

实际上，我们发现，对大量数据点拟合回归直线有些“杀鸡用牛刀”。实践中，似乎只需在（延长后的）“黑色方块”直线上选取两个恰当的点，就足以估算截距值。这种“两点法”比拟合回归直线更直接，也使 MDDET 方法易于实现。

我们目前采用的在“黑色方块”直线上选取两个点的步骤如下。

(i) 设定 MD- DET 结果所需的最终容差 ϵ_{tol}。该容差通常可取约 0.001 %。

(ii) 定义两个高得多的容差值 ϵ_1 =100 ϵ_{tol} 和 ϵ_2 = 1000 ϵ_{tol}，通常可分别设为 0.1% 和 1%。

(iii) 使用计算域尺寸组确定两个顶端 PFEF 数值估计值$\gamma^{(num)}_{Pa,\ 1}$ 和 $\gamma^{(num)}_{Pa,\ 2}$ 通过分别将 ϵ_1 和 ϵ_2 作为输入代入公式（6）和（7）得到。

(iv) 利用这两个数据点，可通过纵轴（“误差 = 0”轴）上的截距，按照以下公式得出顶点 PFEF 的“提取估计值” $\gamma^{(extr)}_{Pa}$

$$\gamma^{(extr)}_{Pa} = \gamma^{(num)}_{Pa,1} - \epsilon_1 \left[\frac{\gamma^{(num)}_{Pa,2} - \gamma^{(num)}_{Pa,1}}{\epsilon_2 - \epsilon_1} \right]. \qquad (9)$$

要对这一结果的准确性作出经验推导的估计并不简单。不过，对于本文讨论的 HEP 模型，可以轻松地将提取出的顶端PFEF值与精确解析结果进行比较。表I列出了一些选定的比较结果。

表I 比较了顶点尖锐度比 σ_a取六个值时的顶点 PFEF 值。第 2 列显示精确解析结果的值，对应于模拟盒尺寸趋于无限大的理想情况。第 3 列和第 4 列显示通过 MDD 方法得到的顶端PFEF值及相应的百分比误差（相对于解析结果）。第 4 列和第 5 列显示 MDDET 方法的对应数据。所有情况下，所采用的基础要求容差均为 $\epsilon_{tol} = 0.001$ %。最后，第 6 列显示比值 $\epsilon_{num}/\epsilon_{extr}$。

请注意，在所有情况下，对于 MDD 和 MDDET 方法，这些方法的数值误差幅度均小于指定的容差。

当顶点锐度比小于约 200 时，MDDET 方法的数值误差幅度小于 MDD 方法，如表 I的最后一列所示。

与 MDD 方法相比，MDDET 方法的真正优势在于节省计算机内存需求和计算时间。这是因为，执行两次高容差计算（使用较小的模拟盒尺寸）比执行一次低容差计算（使用较大的模拟盒尺寸）更快。

图 4 说明了这种节省是如何产生的基本原理。彩色矩形是相关模拟域大小的可视化表示。两个小矩形的合计面积约为 1/20，体积约为 1/90。内存需求和计算时间与矩形的大小“相关”，但并非简单直接的关系。两个小矩形合计的体积相对较小，因此 MDDET 方法在三维模型中尤其有优势。

下面说明另一种 MDDET 方法具有优势的情形。若由于某种技术计算原因，可实现的最大区域尺寸对应于图 4中的红色（0.1%）方形，那么 MDDET 方法给出的顶点 PFEF 估计值可能比 MDD 方法给出的估计值精确得多。

表 I. 对于 $\epsilon_{\rm tol} = 0.001\%$ 的平面上的半椭球体（HEP）发射体形状模型，顶板场增强因子（PFEF）及带符号百分比误差。针对顶点尖锐度比 $\sigma_{\rm a}$的若干取值，对 MDD 方法和 MDDET 方法进行了比较。对于顶点 PFEF，$\gamma^{(\rm an)}_{\rm Pa}$ 是精确解析结果，$\gamma^{(\rm num)}_{\rm Pa}$ 是 MDD 方法得到的数值结果，而 $\gamma^{(\rm extr)}_{\rm Pa}$ 是从 MDDET 方法中提取的结果。相关的（带符号）误差记为 $\epsilon_{\rm num}$ 和 $\epsilon_{\rm extr}$。最后一列给出了误差幅值的比值 $R_{\rm mag}$，其定义如 $R_{\rm mag} = |\epsilon_{\rm num}|/|\epsilon_{\rm extr}|$所示。

$\sigma_{\rm a}$(HEP)	$\gamma^{(\rm an)}_{\rm Pa}$	$\gamma^{(\text{数量})}_{\rm Pa}$	$\epsilon_{\rm num}$(%)	$\gamma^{(\text{提取})}_{\rm Pa}$	$\epsilon_{\rm extr}$(%)	比值
-	-	(MDD)	(MDD)	(MDDET)	(MDDET)	$R_{\rm mag}$
10	9.816638	9.816587	−0.000509	9.816642	+0.000047	11
20	15.386358	15.386284	−0.000483	15.386371	+0.000085	5.7
50	29.324367	29.324211	−0.000529	29.3244412	+0.000253	2.1
100	49.295371	49.295096	−0.000558	49.295574	+0.000412	1.4
200	84.701121	84.700650	−0.000556	84.701546	+0.000501	1.1
500	177.975511	177.974684	−0.000464	177.976428	+0.000515	0.9

表 II. 半球顶圆柱柱发射体形状模型的尖端场增强因子和带符号百分比误差，适用于$\epsilon_{\rm tol} = 0.001\%$。其他符号如表I图注所述，但 $\gamma^{(\rm precise)}_{\rm Pa}$ 取代了 $\gamma^{(\rm an)}_{\rm Pa}$。

$\sigma_{\rm a}$(HCP)	$\gamma^{(\text{精确})}_{\rm Pa}$	$\gamma^{(\text{数值})}_{\rm Pa}$	$\epsilon_{\rm num}$(%)	$\gamma^{(\text{提取})}_{\rm Pa}$	$\epsilon_{\rm extr}$(%)	比值
-	-	(MDD)	（MDD）	（MDDET）	（MDDET）	$R_{\rm mag}$
10	11.795696	11.795792	+0.000809	11.795791	+0.000805	1.0
20	19.986730	19.986665	−0.000322	19.986759	+0.000143	2.2
50	42.205122	42.205149	0.000064	42.205087	−0.000082	0.78
100	76.331892	76.331393	−0.000653	76.331757	−0.000176	3.7
200	140.359346	140.359108	−0.000169	140.360266	+0.000656	0.26
500	319.766109	319.765436	−0.000210	319.767827	+0.000537	0.39
1000	602.263731	602.263189	−0.000090	602.266315	+0.000428	0.21

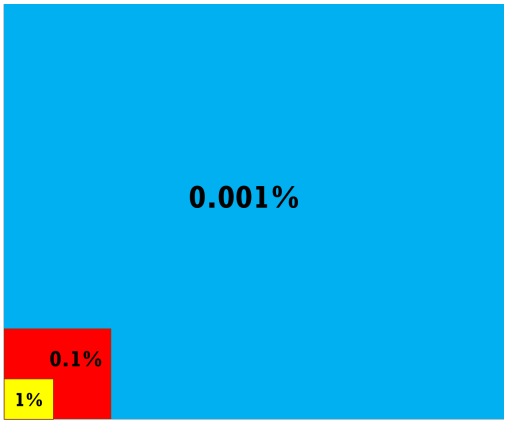

图 4. 为保证达到图示百分比误差水平的容差（即误差幅值上界），对二维模拟域所需面积的预测值进行比较。MDDET 方法采用两个较小模拟域进行两次模拟，而不是基于较大的（蓝色）模拟域进行一次计算。这有助于降低内存需求和计算时间。

B. MDDET 方法应用于 HCP形状模型

现在讨论如何将 MDDET 方法应用于半球-圆柱柱体（HCP）形状模型。在这种情况下，没有已知的解析解，因此我们改用 $\gamma^{(\rm precise)}_{\rm Pa}$ 的高精度数值估计结果，该估计采用了 0.001 % 的容差。除此之外，步骤与上一节所述相似。结果见表 II，格式与表 I相同。

在这个 HCP 形状模型案例中，使用 MDDET 方法通常不会显著提高数值精度（如果有变化，反而可能降低）。MDDET 方法的优势（原则上）在于减少内存需求和计算时间。对于任何给定的仿真几何结构，这些优势是否显著到足以在实践中发挥作用，可能需要单独考量。

通过简单比较，可以直接检验 MDDET 相较于 MDD 在计算时间和内存方面的优势。在表III中，第

2 列给出了以 0.001% 的容差运行 MDDET 所需的总计算时间。第 3 列给出了以相同的 0.001% 容差运行普通 MDD 所需的时间。对于需要遍历多个参数的模拟而言，节省时间至关重要。然而，这一优势并不容易直接量化。

模拟器使用的内存往往会随着网格单元数量（即顶点尖锐度比 σ_{a}）的增加而增加。不过，这种依赖关系有些不规则。此外，由于 COMSOL 软件包并非开源，无法了解其内存分配管理的工作方式，因此很难确切弄清内存为何不会随网格单元数量成比例增长。

模拟中使用的网格单元数量远超所需，足以使实际数值误差幅度低于指定容差。正如前文所述，无论网格单元数量有多少，边界的邻近性始终会限制模拟的精度。

C. 其他形状模型的方法

要将 MDD 或 MDDET 方法应用于 HCP 以外的发射体形状模型，可将给定形状内接于一个半椭球中。图 1 展示了 HCP 模型形状的这一做法。随后，可将包围该形状的 HEP 模型的顶点尖锐度比 σ_{a} 用作所关注模型形状的上限。

IV. 评论与总结

A. MDD 与 MDDET 方法的选择 ods

通常，如果顶点或其他位置的 PFEF 值只需要有限的精度（例如 $\epsilon_{\mathrm{tol}} \geq 0.1\%$），那么我们建议使用 MDD 方法（而非 MDDET 方法）。MDD 方法更简单，因为只需进行一次模拟。

事实上，如果尝试在精度要求较低时（例如容差值较高，为 $\epsilon_{\mathrm{tol}} > 10\%$）应用 MDDET 方法，该方法可能效果不佳。若精度要求极高，例如达到 $\epsilon_{\mathrm{tol}} \leq 0.001\%$，那么 MDDET 方法在实用性和可靠性方面尤其具有优势。

B. 扩展至无限矩形阵列

本文中的论证可轻松扩展到对无限正方形和矩形阵列的分析。这类阵列可通过将柱体置于正方形或矩形模拟盒底面的中心来建模。侧壁中的镜像与中心的柱体共同构成该阵列，阵列中的间距由箱体底面各边的长度决定。

对于正方形或矩形模拟盒，其壁面几乎全部都比圆柱形模拟盒的壁面距离柱体更远；该圆柱形模拟盒的半径等于正方形或矩形模拟盒底面较短边长度的一半。因此，在给定容差的情况下，预计阵列的 PFEF 结果精度会高于单柱体情形下的 PFEF 结果精度。

C. 网格划分误差

迄今为止，所有讨论都围绕仿真盒边界（以及计算域尺寸的作用）对模拟所得场增强因子值的误差幅度 ϵ_{num} 的影响。然而，系统中还存在其他潜在误差来源，其中最主要的是有限元网格的选取和细化方式。如果最终网格“足够精细”，尤其是在所选形状的顶点附近，那么网格划分误差幅度就可以显著小于仿真盒边界邻近中央柱状结构所导致的模拟误差幅度，因而可以忽略前者。我们的做法始终是在网格划分误差小到可以忽略的范围内进行计算。

作为通常的工作起点，我们假设在形状顶点附近，网格长度应为 $r_{\mathrm{a}}/30$ 或更小，其中 r_{a} 是顶点曲率半径。得到模拟场增强因子值后，我们会检查改变网格划分是否会在所关注的显著性水平上显著改变推导出的场增强因子值。如果情况并非如此，就继续细化网格，直至模拟结果实际上不再受网格细节影响，从而使模拟结果“免受网格划分误差影响”。本文中的所有结果均认为免受网格划分误差影响。

D. 总结

我们的结论总结如下。此前已介绍过 MDD 和 MDDET 方法，此处再次阐述。MDD 方法的优点在于，研究人员可以缩小模拟域的尺寸，从而获得符合指定精度要求的结果。这有助于减少所需的计算时间和内存。

更重要的是，我们为 MDDET 方法提供了更完善的形式结构。MDDET 方法的主要优势在于，对于给定的所需容差，它允许使用小得多的模拟域；这在复杂且耗时的计算中尤其有用。对于顶点（或其他位置）的 PFEF 值，MDDET 方法可以通过使用尺寸较小的模拟盒进行两次计算，而非使用一个尺寸较大的模拟盒，从而获得达到（或超过）指定精度的结果，

表 III. 内存资源

σ_a(HCP) 时间 (s)	时间 (s)	内存 (GB)	内存 (GB)	
	MDDET	MDD	MDDET	MDD
10	89	445	≈ 1.5	2.2
50	118	1540	1.6	1.8
100	188	2242	3	7.8
200	265	4360	5.1	17

这种方法适用于任何可内接于旋转半椭球中的轴对称形状。

不过，如果精度要求较低（例如，$\epsilon_{\text{tol}} \geq 0.1\%$），那么使用 MDD 方法可能更简单且更可取。

V. 致谢

T A dA 感谢巴西国家科学技术发展委员会（CNPq）（编号：310311/2020-9）和里约热内卢州研究支持基金会（FAPERJ）（编号：E-26/203.860/2022）提供的资助。

VI. 作者声明

A. 利益冲突

作者声明不存在需要披露的利益冲突。

B. 数据可用性

支持本研究结果的数据可在本文中获取。

C. 作者贡献

Fernando Dall'Agnol：概念化（协助）；数据整理（共同）；正式分析（共同）；方法学（共同）；项目管理（共同）；资源（共同）；软件（共同）；监督（共同）；验证（共同）；可视化（共同）；撰写／原稿（主导）；撰写／综述与编辑（协助）。

Thiago de Assis：概念构思（主要贡献）；数据整理（同等贡献）；正式分析（同等贡献）；经费获取（主要贡献）；方法学（同等贡献）；项目管理（同等贡献）；资源提供（同等贡献）；软件（同等贡献）；监督（同等贡献）；验证（同等贡献）；可视化（同等贡献）；撰写/原始稿件（协助）；撰写/审阅与编辑（协助）。

Richard Forbes：概念构思（协助）；数据整理（同等贡献）；正式分析（同等贡献）；方法学（同等贡献）；项目管理（同等贡献）；资源提供（主要贡献）；监督（同等贡献）；验证（协助）；可视化（同等贡献）；撰写/原始稿件（协助）；撰写/审阅与编辑（主要贡献）。

[1] C. J. Edgcombe 和 U. Valdr`e。场增强因子与非晶碳场发射体的表征。 *Solid State Electron.*，45：857–863，2001年。[2] C. J. Edgcombe。由碳污染生长的非晶碳单纳米尖端场发射特性的实验与计算研究 II：理论。 *Phil. Mag. B*，82：1009–1026，2002年。[3] C. J. Edgcombe 和 U. Valdr`e。由碳污染生长的非晶碳单纳米尖端场发射特性的实验与计算研究 I：实验与计算。 *Phil. Mag. B*，82：987–1007，2002年。[4] R. G. Forbes、C. J. Edgcombe 和 U. Valdr`e。关于场增强模型的一些评论。 *Ultramicrosc.*，95：57–65，2003年。[5] Y. W. Zhu、T. Yu、F. C. Cheong、X. J. Xu、C. T. Lim，V. B. C. Tan、J. T. L. Thong 和 C. H. Sow。垂直取向的CuO纳米线薄膜的大规模合成与场发射性质。 *Nanotechnology* 16 88 92, , ：–。2005
[6] S. Podenok、M. Sveningssom、K. Hansen 和 E. E. B. Campbell。金属端部封闭圆柱体周围的电场增强因子。 *Nanotechnol. Rev.*，1:87–93，2006。[7] W. Zeng、G. J. Fang、N. S. Liu、L. Y. Yuan、X. X. Yang、S. S. Guo、D. J. Wang、Z. Q. Liu 和 X. Z. Zhao。平行板几何结构中垂直碳纳米管的场增强因子和场放大因子的数值计算。 *Diam. Relat. Mater.*，18:1381–1386，2009。[8] D. S. Roveri、G. M. Sant'Anna、H. H. Bertan、J. F. Mologni、M. A. R. Alves 和 E. S. Braga。模拟

使用有限元法计算单个三维半球顶柱状场发射体的增强因子。 *Ultramicroscopy*，160:247–251，2016。[9] M. V. Amorim、F. F. Dall'Agnol、D. den Engelsen、T. A. de Assis 和 V. Baranauskas。阵列冷场电子发射中名义面积的数值分析。 *J. Phys.: Condens. Matter*，30:385303，2018。[10] T. A. de Assis 和 F. F. Dall'Agnol。具有理想特征场增强因子的机械稳定纳米结构：静电学中尺度不变性的响应。 *Nanotechnology*，27:44LT01，2016。[11] T. A. de Assis 和 F. F. Dall'Agnol。两级场发射体结构的静电效率与机械稳定性之间的权衡。 *J. Appl. Phys.*，121:014503，2017。[12] F. F. Dall'Agnol、S. V. Filippov、E. O. Popov、A. G. Kolosko 和 T. A. de Assis。以高数值精度确定各种场电子发射体的场增强因子。 *J. Vac. Sci. Technol. B*，39 032801，2021：。[13] F. F. Dall' Agnol、T. A. de Assis、S. B. Fairchild、J. Ludwick、G. Tripathi 和 M. Cahay。具有巨大场增强因子的环状碳纳米管纤维作为阴极。 *Appl. Phys. Lett.*，117:253101，2020。[14] F. F. Dall'Agnol 和 T. A. de Assis。小型发射体簇产生的近距离静电效应。 *J.Phys.: Condens. Matter*，29:40LT01，2017。[15] F. F. Dall'Agnol、T. A. de Assis 和 R. G. Forbes。基于物理学推导两个柱状场发射体相互去极化的公式。

J. Phys.: , : 。 *Condens. Matter* 30 375703, 2018

[16] Thiago A. de Assis、Fernando F. Dall'Agnol 和 Marc Cahay。优化大面积场发射体场增强因子时邻近性与长宽比之间的普适权衡。 *Appl. Phys. Lett.*，116:203103，2020。[17] K. L. Jensen。 *Introduction to the Physics of Electron Emission* 2018 。

Wiley，新泽西州霍博肯，。[18] R. G. Forbes、E. O. Popov、A. G. Kolosko 和 S. V. Filippov。前指数电压指数作为场发射理论的敏感测试参数。

R. Soc. , : 。 *Open Sci.* 8 201986, 2021

[19] T. A. de Assis、F. F. Dall'Agnol 和 R. G. Forbes。场发射体静电学：综述，特别关注现代高精度有限元建模。

J. Phys. , : . [20] *Condens. Matter* 34 493001, 2022 J.-M. Jin。 *The Finite Element Method in Electromagnetics 3rd Edition* 2014 , 。 Wiley，英国奇切斯特。[21] P. G. Ciarlet。 *The Finite Element Method for Elliptic Problems* 2002 。工业与应用数学学会，。[22] T. A. de Assis 和 F. F. Dall'Agnol。以指定精度进行场增强因子数值模拟所需的最小区域尺寸。

J. Vac. Sci. Technol. , : . [23] F. *B* 37 022902, 2019 F. Dall'Agnol、T. A. de Assis 和 R. G. Forbes。采用外推的最小计算域尺寸技术，以高精度数值计算局部场增强因子，载于 *2022 35th International Vacuum Nanoelectronics Conf.* 28, 2022 ，页码 July 。[24] C. P. de Castro、T. A. de Assis、R. Rivelino、F. de B. Mota、C. M. C. de Castilho 和 R. G. Forbes。通过电子结构计算恢复碳纳米管场发射增强因子所呈现的经典行为。 *J. Phys. Chem. C*，123:5144–5149，2019年。[25] C. J. Edgcombe、S. M. Masur、E. B. Linscott、J. A. J. Whaley-Baldwin 和 C. H. W. Barnes。采用线性标度密度泛函理论分析封端碳纳米管。 *Ultrarmicroscopy*, 198:26–32，2019年。[26] R. V. Latham。 *High Voltage Vacuum Insulation: The Physical Basis* 1981 。学术出版社，伦敦，。[27] F. Rohrbach。*CERN Report, 71-5/TC-L*。欧洲核子研究中心，日内瓦，1971年。[28] H. G. Kosmahl。椭球锥和椭圆截面楔形体场发射增强因子的解析计算。 *IEEE Trans. Electron Devices*, 38:1534–1537，1991年。[29] E. G. Pogorelov、A. I. Zhbanov 和 Y.-C. Chang。纳米针发射体中的增强因子、静电力和发射电流。 *EPL*, 85:17001，2009年。[30] E. G. Pogorelov、A. I. Zhbanov 和 Y.-C. Chang。半椭球形金属针的场增强因子和场发射。

Ultramicroscopy 109 373 378, , : – 。 2009