

原子力显微镜：悬臂梁、跳触失稳与热噪声标定

第 43 届决赛短训讲义组

2026 年 10 月

目录

1 导读	3
2 名词与符号	4
3 AFM 的工作原理与典型参数	6
3.1 针尖、悬臂、检测与反馈	6
3.2 三种基本工作模式	7
3.3 典型悬臂参数	7
4 前置模块：梁的弯曲与悬臂的静刚度	8
4.1 应力、应变与杨氏模量	8
4.2 纯弯曲：中性层与线性应变分布	8
4.3 曲率与挠度	10
4.4 剪力、弯矩与悬臂的静挠度	10
5 悬臂梁的振动	12
5.1 欧拉-伯努利梁方程	12
5.2 分离变量：振型与频率方程	13
5.3 瑞利能量法	15
5.4 有效质量与“弹簧-质点”模型	16
6 针尖-样品相互作用与跳触失稳	17
6.1 范德瓦尔斯力：从一对分子到球-平面	17
6.2 接触排斥与 DMT 模型	19
6.3 静态平衡与稳定性	20
6.4 跳触与脱离的临界条件	21

7 动态模式：频率调制与振幅调制	22
7.1 受迫阻尼振子与品质因数	22
7.2 小振幅 FM-AFM：频移正比于力梯度	23
7.3 大振幅：频移是力梯度的加权平均	24
7.4 振幅调制：品质因数的双重作用	26
8 热噪声：能量均分、功率谱与标定	27
8.1 能量均分：悬臂在室温下抖多大	27
8.2 功率谱密度	28
8.3 朗之万方程与涨落-耗散关系	29
8.4 热噪声标定法	30
8.5 最小可测力与力梯度	31
9 决赛风格例题	32
10 实验与数据处理：钢片悬臂与热噪声谱	37
10.1 题目	37
10.2 解答	39
11 小结：推导链	40
A 悬臂模态的数学性质	44
A.1 频率方程的数值求根	44
A.2 正交性	44
A.3 振型平方积分的闭式	44
A.4 柔度求和规则与瑞利上界	45
B Hamaker 积分	45
C 端部附加质量的频率方程	46
D 热噪声的两个计算	47
D.1 响应函数平方的积分	47
D.2 自激振荡悬臂的热频率噪声	47
E 光杠杆检测下的多模修正	48
F 名词解释	49

1 导读

背景：从“隧穿电流”到“原子间的力”

1981 年，IBM 苏黎世实验室的 G. Binnig、H. Rohrer 等人让一根金属针尖与导电样品之间隔着不到 1 nm 的真空间隙通过隧穿电流，并用压电陶瓷让针尖逐点扫描，得到了第一批扫描隧道显微镜 (STM) 图像 [1, 2]；Binnig 与 Rohrer 因此与电子显微镜的发明者 E. Ruska 分享了 1986 年诺贝尔物理学奖 (Ruska 得一半，Binnig、Rohrer 各得四分之一) [3]。STM 只能观察导电样品。Binnig 意识到：针尖离样品如此之近时，两者之间必然有可观的力，如果能“称”出这个力，就能观察绝缘体。1986 年 Binnig、Quate 与 Gerber 发表了原子力显微镜 (AFM) [4]：一根极软的悬臂（第一台用的是粘着金刚石针尖的金箔，偏转由背面的另一根 STM 针尖探测 [2]）在力作用下弯曲，弯曲量就是力的读数。论文摘要宣称这一方案原理上可测 10^{-18} N 量级的力，在空气中已达到横向 3 nm、纵向小于 0.1 nm 的分辨率 [4]。

此后的关键进展包括：1988 年 Meyer 与 Amer 的光杠杆检测 [5]；1990 年 Albrecht 等人批量微加工的 SiO_2 与 Si_3N_4 悬臂，以及随后带集成针尖的硅悬臂 [2, 6]；1991 年 Albrecht、Grütter、Horne 与 Rugar 提出调频 (FM) 检测 [7]；1995 年 Giessibl 用 FM-AFM 首次在超高真空中分辨了 Si(111)-(7×7) 表面的原子 (悬臂 $k = 17$ N/m、 $f_0 = 114$ kHz、振幅 34 nm、 $Q = 28000$) [2, 8]；1998 年 Giessibl 把石英音叉的一臂固定，做成第一代“qPlus”传感器 (刚度约 3×10^3 N/m) [9, 10]，如今的标准 S1.0 型为 1800 N/m [10]；2001 年安藤敏夫 (T. Ando) 等人用微小悬臂 (共振频率空气中 1.3–1.8 MHz、水中 450–650 kHz，刚度 0.15–0.28 N/m) 实现了每帧 80 ms 的高速 AFM，拍到肌球蛋白 V 分子在云母上运动 [11]；2009 年 IBM 的 Gross 等人在约 5 K 的超高真空中，用针尖吸附一个 CO 分子的 qPlus-AFM 拍出了并五苯分子的化学结构——五个苯环的碳骨架清晰可辨 ($f_0 = 23$ kHz、 $k = 1800$ N/m、振幅仅 20 pm，频移 -2 到 -7 Hz) [10, 12, 13]。

这些成就背后的物理，核心只有三件事：

1. **悬臂是一根弹性梁**：它的刚度 k 和共振频率 f_0 由尺寸和材料决定，二者的组合决定了 AFM 能“多软、多快”；
2. **针尖-样品力随距离急剧变化**：软弹簧挂在随距离变陡的吸引力上会失稳——“跳触”；而让悬臂振动、测量频率的微小变化，可以把力梯度读出来；
3. **悬臂在室温下自己会抖**：热涨落既是最终的噪声极限，又被巧妙地用来标定 k 。

本讲目标 学完后你应当能够：(1) 从纯弯曲出发推导悬臂静刚度 $k = Ewh^3/(4L^3)$ 和欧拉-伯努利梁方程，求出悬臂的固有频率与振型，理解“有效质量 $0.243m$ ”的含义；(2) 由分子间 $1/r^6$ 吸引推出球-平面的范德瓦尔斯力，用势能曲线分析平衡与稳定性，求跳触与脱离的临界条件；(3) 推导 FM-AFM 频移与力梯度的关系，理解 AM 模式中 Q 的双重作用；(4) 理解功率谱密度、阻尼振子热噪声谱与最简形式的涨落-耗散关系，掌握热噪声标定法及其多模修正；(5) 完成一道用悬臂振动测弹性模量、刚度和有效质量的数据处理题。

前置知识 普通物理力学（胡克定律、转动平衡、受迫阻尼振动）、热学（玻尔兹曼分布）、微积分与复数。超出这一范围的工具——梁的弯曲理论、偏微分方程的分离变量、功率谱密度、涨落-耗散关系——都会在首次使用前介绍。42 届决赛实验中出现过的光杠杆放大只作简要回顾。

建议学时 2 学时：第 3-5 节约 40 分钟，第 6-7 节约 35 分钟，第 8 节约 30 分钟，例题与实验题选讲 15 分钟，其余课后阅读。

2 名词与符号

表 1 本讲主要符号（悬臂部分）

符号	含义	单位
L, w, h	悬臂长、宽、厚（矩形截面）	m
E, ρ	杨氏模量、密度	Pa, kg/m ³
$I = wh^3/12$	截面惯性矩（截面二次矩）	m ⁴
$\mu = \rho wh$	单位长度质量（线密度）	kg/m
$m = \mu L$	悬臂总质量	kg
x	沿悬臂的坐标，固定端 $x = 0$ ，自由端 $x = L$	m
y	截面内到中性层的距离（指向凸侧为正）	m
$u(x, t)$	横向挠度（向上为正）	m
ϱ	中性层曲率半径	m
ε, σ	纵向应变、正应力	1, Pa
$M(x), V(x)$	截面上的弯矩、剪力	N·m, N
k	悬臂端部静刚度 $3EI/L^3$	N/m
δ	端部静挠度	m
$\lambda_n = \beta_n L$	第 n 阶模的无量纲本征值	1
$\phi_n(x)$	第 n 阶振型（自由端归一 $\phi_n(L) = 1$ ）	1
$\omega_n = 2\pi f_n$	第 n 阶固有角频率	rad/s
f_0, ω_0	一阶固有频率（= f_1 ，动态模式中的习惯写法）	Hz, rad/s
$m_{\text{eff}} = k/\omega_1^2$	有效质量	kg
m_n, k_n	第 n 阶模的模态质量、模态刚度	kg, N/m
$p(x, t)$	单位长度的横向分布外力	N/m
ν	泊松比	1

注：记号提醒

为避免与时间 t 、宽度 w 混淆，本讲厚度记 h 、挠度记 u ，曲率半径用 ϱ （与密度 ρ 区分）。文献中 $k = Ewt^3/(4L^3)$ 的 t 就是本讲的 h 。“频率” f 与“角频率” $\omega = 2\pi f$ 严格区分。

表 2 本讲主要符号（相互作用、动态与噪声部分）

符号	含义	单位
z	针尖-样品间隙	m
z_0	悬臂基座位置（悬臂不弯时针尖所在的间隙）	m
$F(z), V(z)$	针尖-样品力（推离样品为正）及势能, $F = -dV/dz$	N, J
$F'(z)$	力梯度 dF/dz	N/m
C, n_1, n_2	分子对势 $-C/r^6$ 的系数、两物体的分子数密度	J·m ⁶ , m ⁻³
$H = \pi^2 C n_1 n_2$	Hamaker 常数	J
R	针尖曲率半径	m
a_0	接触截断距离（原子“接触”间距）	m
E^*	接触的约化模量	Pa
F_{ad}	粘附力（拉脱力）	N
δ_c	接触压入深度	m
ℓ	短程力的衰减长度	m
A	悬臂振幅	m
Q	品质因数	1
$\eta = 2Q(\omega - \omega_0)/\omega_0$	共振附近的无量纲失谐	1
b	粘滞阻尼系数（阻力 $-b\dot{q}$ ）	kg/s
Δf	相互作用引起的频移	Hz
$S_x(f), S_F(f)$	位移、力的单边功率谱密度	m ² /Hz, N ² /Hz
B	频率（或力）检测的单边带宽	Hz
δ^*	光杠杆报告的“虚拟挠度”（文献记 z^* ）	m
T, k_B	温度、玻尔兹曼常数	K, J/K

3 AFM 的工作原理与典型参数

3.1 针尖、悬臂、检测与反馈

图 1 是 AFM 的基本结构。一块几十到几百微米长的悬臂 (cantilever) 从芯片上伸出, 自由端下方有一个曲率半径约 10 nm 的针尖。样品放在压电扫描器上, 可在 x, y, z 三个方向以亚纳米精度移动。针尖受样品的力 F 时悬臂弯曲, 自由端挠度 δ 与力成正比: $F = k\delta$, k 就是悬臂的“弹簧常数”。悬臂背面反射一束激光到四象限光电二极管上, 光斑位置的变化反映悬臂端的倾角变化。反馈控制器调节样品高度 z , 使偏转 (或振动的振幅、频率) 保持恒定; 记录反馈信号随 (x, y) 的变化, 就得到“等力面”即表面形貌。

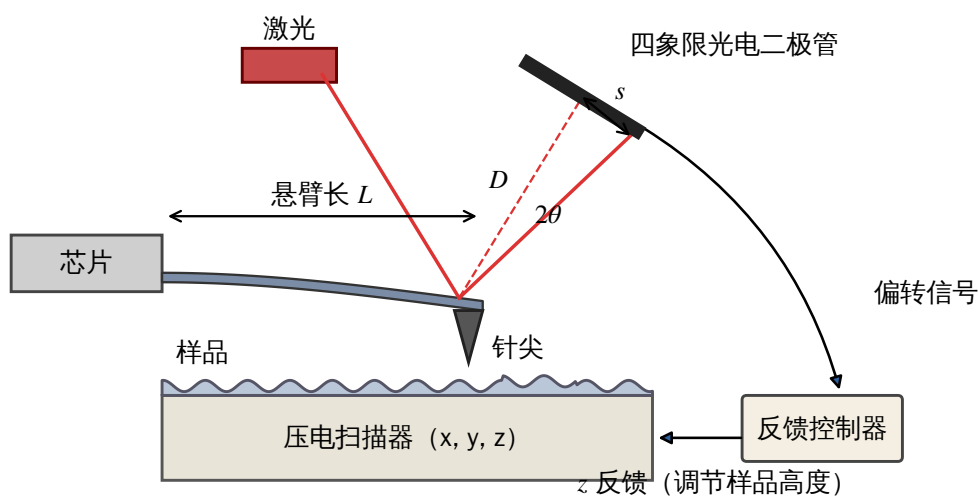


图 1 AFM 工作原理示意: 悬臂端在力的作用下偏转, 反射激光在距离 D 处的光电二极管上移动 s ; 反馈控制器调节样品高度。为清楚起见悬臂弯曲被大大夸张。

前置知识: 光杠杆回顾

镜面转过角 θ , 反射光转过 2θ , 于是距离 D 处光斑移动 $s \approx 2D\theta$ (小角)。悬臂端的倾角 θ 与挠度 δ 的关系要用到悬臂的弯曲形状: 第 4 节将证明端部受力时 $\theta = 3\delta/(2L)$ (式 (4.11)), 所以

$$\frac{s}{\delta} = \frac{2D\theta}{\delta} = \frac{3D}{L}. \quad (3.1)$$

例如 $D = 3 \text{ cm}$ 、 $L = 100 \mu\text{m}$ 时放大倍数约 900。注意光杠杆测的是**倾角**而不是挠度; 把它换算成挠度时默认了“静态受力”的弯曲形状。悬臂振动时形状不同, 这一点使第 8.4 节的热噪声标定结果需乘以因子 0.817 (不修正会把 k 高估约 22%)。

3.2 三种基本工作模式

定义：接触模式、振幅调制模式、频率调制模式

- **接触（静态）模式**：针尖压在样品上，测量悬臂的静态偏转 δ ，力 $F = k\delta$ 。要求悬臂软 ($k \lesssim 1 \text{ N/m}$)，以免压坏样品，并且使小力就有可测的偏转。
- **振幅调制模式 (AM-AFM)**：用压电片以固定频率驱动悬臂振动，针尖靠近样品时相互作用改变悬臂的有效共振频率和耗散，振幅随之变化，反馈保持振幅不变。最早在吸引区以非接触方式工作 [14]；振幅较大、每周期在排斥区与样品短暂接触的变体就是今天最常用的**轻敲模式** (tapping mode) [15]。
- **频率调制模式 (FM-AFM，又称非接触模式 nc-AFM)**：用自激振荡电路让悬臂始终在自身的共振频率上以恒定振幅振动，测量相互作用引起的频移 Δf [7]。

3.3 典型悬臂参数

表 3 几种代表性力传感器的标称参数（高速 AFM 小悬臂的 f_0 为空气中的值，水中降为 450–650 kHz）

传感器	$L \times w \times h / \mu\text{m}$	$k / (\text{N/m})$	f_0
Si_3N_4 接触悬臂 MLCT (6 根) [16]	$L = 85\text{--}310, h = 0.55$	0.01–0.6	7–125 kHz
Si 轻敲悬臂 TESPA-V2 [17]	$123 \times 40 \times 3.3$	37	320 kHz
Si 悬臂 (Olympus, 图 2a) [2]	$120 \times 30 \times 2.8$	15	300 kHz
高速 AFM 小悬臂 [11]	—	0.15–0.28	1.3–1.8 MHz
qPlus (S1.0 型) [10]	$2360 \times 127 \times 214$	1800	32.768 kHz

表 3 说明：AFM 力传感器的刚度跨越五个数量级（约 10^{-2} 到 $2 \times 10^3 \text{ N/m}$ ），频率从几 kHz 到 1 MHz 以上。一个自然的问题是：为什么不能简单地“又软又快”？第 5 节会看到， $k \propto wh^3/L^3$ 而 $f_0 \propto h/L^2$ ，把悬臂做薄会同时降低两者；出路是整体缩小尺寸（例题 4）。

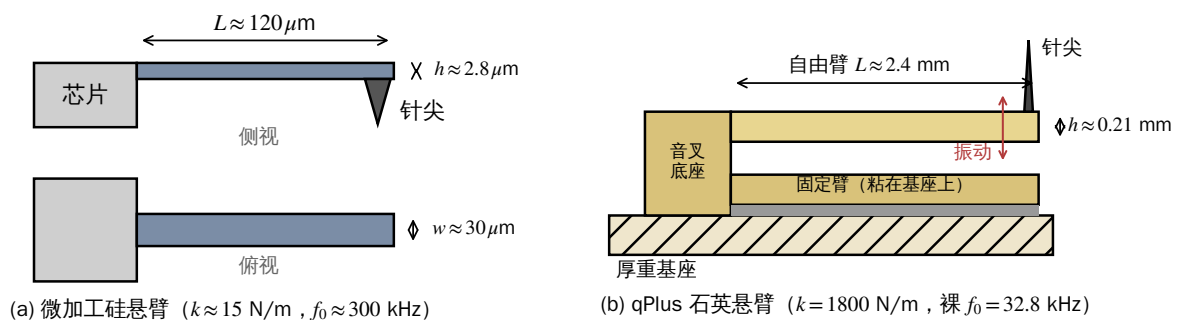


图 2 两种力传感器的结构示意图（本讲自绘，非按比例；尺寸为表 3 与第 5 节练习中的标称值）。(a) 带集成针尖的微加工硅悬臂：从芯片边缘伸出的矩形梁，针尖在自由端下方；(b) qPlus 传感器：石英音叉的一臂粘在厚重基座上，另一臂末端粘一根针尖，力学上等价于一根普通悬臂，偏转由石英的压电效应直接转换成电信号 [9, 10]。

4 前置模块：梁的弯曲与悬臂的静刚度

普通物理里，杆的拉伸由胡克定律 $\sigma = E\varepsilon$ 描述；悬臂受横向力时的“弯曲”则是拉伸与压缩在截面上的线性分布。本节从这一点出发，一步步得到悬臂端部的刚度。

4.1 应力、应变与杨氏模量

定义：正应力、线应变、杨氏模量

在杆内取一个垂直于杆轴的截面，单位面积上沿杆轴方向的内力称为**正应力** σ （拉为正，单位 Pa）；一段原长 l_0 的细纤维伸长 Δl ， $\varepsilon = \Delta l/l_0$ 称为**线应变**（伸长为正）。线弹性材料在单轴拉压下满足胡克定律

$$\sigma = E\varepsilon, \quad (4.1)$$

E 为**杨氏模量**。单位体积储存的弹性能为 $\frac{1}{2}\sigma\varepsilon = \frac{1}{2}E\varepsilon^2$ （由 $\int_0^\varepsilon \sigma d\varepsilon'$ 得到）。

硅沿 $\langle 110 \rangle$ 晶向的杨氏模量约 169 GPa[18]（微加工悬臂通常沿此方向），密度约 2330 kg/m³[19]；钢的 $E \approx 200$ GPa、 $\rho \approx 7.8 \times 10^3$ kg/m³[19]。

4.2 纯弯曲：中性层与线性应变分布

假设：欧拉-伯努利梁的基本假设

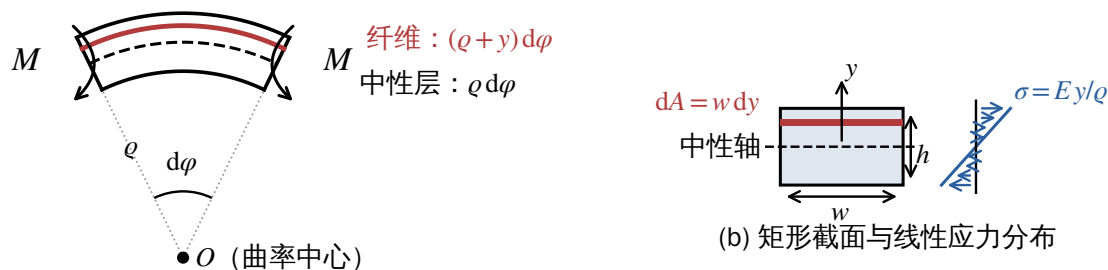
1. **细长**： $L \gg h$ （AFM 悬臂 $L/h \sim 30\text{--}300$ ），因而截面内的剪切变形可忽略（本节末尾的注估计其相对大小为 $\mathcal{O}((h/L)^2)$ ）；
2. **平截面假设**：变形前垂直于轴线的截面，变形后仍为平面并垂直于弯曲后的轴线；
3. **单轴应力**：每根纵向“纤维”只受沿自身方向的拉或压，纤维之间的横向挤压忽略；
4. **小变形、线弹性**：应变 $|\varepsilon| \ll 1$ ，满足式 (4.1)；挠度的斜率 $|\partial u/\partial x| \ll 1$ 。

平截面假设的理由：对一段只受两端等值反向力偶作用的梁（**纯弯曲**），梁的每个截面处境完全相同，由对称性，变形后每段梁都弯成同一曲率的圆弧，截面只能保持为通过曲率中心的平面（图 3a）。

推导：纤维应变 $\varepsilon = y/\varrho$

1. 弯曲后，梁段的两个端面延长后交于曲率中心 O ，夹角为 $d\varphi$ 。凸侧的纤维被拉长、凹侧的被压短；由连续性，中间必有一层纤维长度不变，称为**中性层**，其曲率半径记为 ϱ 。中性层上这段梁的长度为 $\varrho d\varphi$ ，等于变形前的原长。
2. 取一根位于中性层凸侧、距中性层 y 的纤维，它是半径 $\varrho + y$ 的圆弧，长度 $(\varrho + y)d\varphi$ ；变形前它与中性层纤维一样长。
3. 由线应变定义：

$$\varepsilon(y) = \frac{(\varrho + y)d\varphi - \varrho d\varphi}{\varrho d\varphi} = \frac{y}{\varrho}. \quad (4.2)$$



(a) 纯弯曲的梁段：凸侧伸长、凹侧缩短

图 3 (a) 纯弯曲：梁段弯成以 O 为中心的圆弧，凸侧纤维伸长、凹侧缩短，中间存在长度不变的中性层（虚线）；(b) 宽 w 、厚 h 的矩形截面，正应力沿厚度线性分布（ y 指向凸侧）。

$y < 0$ （凹侧）时 $\varepsilon < 0$ ，即压缩。

4. 由式 (4.1)，正应力 $\sigma(y) = Ey/\rho$ ，沿厚度线性分布（图 3b）。

推导：中性层的位置与弯矩 $M = EI/\rho$

1. **合力为零**。纯弯曲的截面上没有轴向外力，故 $\int \sigma dA = \frac{E}{\rho} \int y dA = 0$ 。这说明 $\int y dA = 0$ ： y 从截面的**形心**量起，即中性层通过截面形心。矩形截面的形心在厚度正中，所以 $y \in [-h/2, h/2]$ 。

2. **合力矩等于弯矩**。截面上应力对中性轴的力矩之和就是该截面传递的**弯矩**

$$M = \int \sigma y dA = \frac{E}{\rho} \int y^2 dA \equiv \frac{EI}{\rho}, \quad I \equiv \int y^2 dA. \quad (4.3)$$

I 称为截面的**惯性矩**（截面二次矩），它只取决于截面形状。 EI 称为**抗弯刚度**。

3. **矩形截面的 I** 。取高 dy 、宽 w 的窄条， $dA = w dy$ ：

$$I = \int_{-h/2}^{h/2} y^2 w dy = w \left[\frac{y^3}{3} \right]_{-h/2}^{h/2} = \frac{wh^3}{12}. \quad (4.4)$$

要点

抗弯刚度 $EI = Ewh^3/12$ 对厚度是**三次方**依赖：外侧纤维的应变正比于 y ，产生的力矩又多一个因子 y ，再对厚度积分。所以 AFM 悬臂“薄”比“窄”有效得多；厚度 10% 的误差会造成刚度约 30% 的误差——这正是需要实验标定 k 的原因之一。

推导：弯曲能

单位体积弹性能 $\frac{1}{2}E\varepsilon^2 = \frac{1}{2}Ey^2/\rho^2$ 。对长 dx 的梁段在截面上积分：

$$dU = dx \int \frac{Ey^2}{2\rho^2} dA = \frac{EI}{2\rho^2} dx. \quad (4.5)$$

这一结果第 5.3 节的能量法要用。

4.3 曲率与挠度

纯弯曲的结论可以推广到弯矩沿梁缓慢变化的情形：只要 $L \gg h$ ，每一小段仍近似纯弯曲， $1/\rho(x) = M(x)/(EI)$ 逐点成立。剩下的是把曲率与挠度曲线 $u(x)$ 联系起来。

推导：小斜率下 $1/\rho \approx u''$

1. 挠度曲线 $u(x)$ 在 x 处的切线与 x 轴夹角 $\theta = \arctan u'$ （撇号表示对 x 求导）。
2. 曲率的定义是切线方向角对弧长的变化率： $1/\rho = d\theta/ds$ ，弧长元 $ds = \sqrt{1+u'^2} dx$ 。
3. 求导： $d\theta/dx = u''/(1+u'^2)$ ，于是

$$\frac{1}{\rho} = \frac{d\theta/dx}{ds/dx} = \frac{u''}{(1+u'^2)^{3/2}} \approx u'' \quad (|u'| \ll 1). \quad (4.6)$$

小参量为 u'^2 ，舍去的是 $\mathcal{O}(u'^2)$ 的相对修正。AFM 悬臂偏转通常小于 $1 \mu\text{m}$ ，而 $L \sim 100 \mu\text{m}$ ， $u'^2 \lesssim 10^{-4}$ 。

定义：符号约定

$u'' > 0$ 表示挠度曲线**向上凹**（曲率中心在上方），此时下表面为凸侧、受拉。规定使梁向上凹的弯矩为正，于是式 (4.3)、(4.6) 合起来写成

$$M(x) = EI u''(x). \quad (4.7)$$

4.4 剪力、弯矩与悬臂的静挠度

定义：剪力与弯矩

在 x 处假想地把梁切开。截面**右侧**的材料对左侧部分施加的横向力记为剪力 $V(x)$ （向上为正），施加的力偶记为弯矩 $M(x)$ （逆时针为正）；由牛顿第三定律，左侧对右侧部分施加的是 $-V$ 与 $-M$ （图 4a）。**验证这一约定与式 (4.7) 一致**：取 $[x_1, x_2]$ 一小段， $M > 0$ 时其右端受逆时针力偶、左端受顺时针力偶，两端都向上翘，这一段向上凹（曲率中心在上方），下表面为凸侧、受拉；而式 (4.3) 中的 $M = EI/\rho$ 是只看大小的结果（ y 指向凸侧），给它加上“向上凹为正”的符号，就是 $M = EIu''$ 。

推导：微元的静力平衡

对图 4a 的微元，设单位长度横向外力为 $p(x)$ （向上为正）。

1. 竖直方向合力为零： $V(x+dx) - V(x) + p dx = 0$ ，即 $\frac{dV}{dx} = -p$ 。
2. 对微元左端面中点取矩，合力矩为零（逆时针为正）： $M(x+dx) - M(x) + V(x+dx) dx + \mathcal{O}(dx^2) = 0$ ，其中 $p dx$ 的力臂为 $dx/2$ ，只贡献二阶小量。于是

$$\frac{dM}{dx} = -V. \quad (4.8)$$

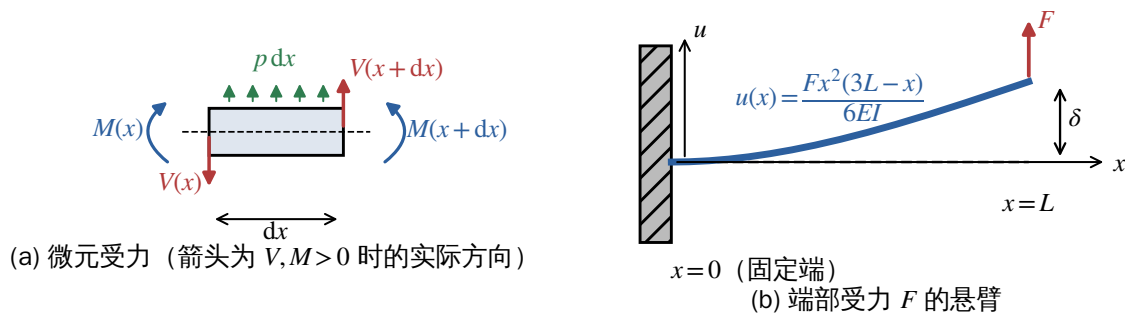


图 4 (a) 长 dx 的梁微元：右面受右侧材料的剪力 $V(x+dx)$ 与弯矩 $M(x+dx)$ ，左面受左侧材料的反向剪力与弯矩（箭头为 $V, M > 0$ 时的实际受力方向）， p 为单位长度的横向外力；(b) 自由端受向上力 F 的悬臂及其挠度曲线（按式 (4.9) 计算）。

推导：端部受力的悬臂： $\delta = FL^3/(3EI)$

悬臂在 $x=0$ 处固定 ($u=0, u'=0$)，自由端 $x=L$ 受向上集中力 F ，其余处 $p=0$ 。

- 剪力。**取 $[x, L]$ 段为研究对象：它受端部力 F 和左侧材料在截面 x 上施加的 $-V(x)$ ，竖直平衡给出 $V(x) = F$ （与 x 无关）。
- 弯矩。**由式 (4.8) 积分并用自由端无力偶 $M(L) = 0$ ： $M(x) = F(L-x)$ 。直接检验： $[x, L]$ 段对截面点的力矩平衡为 $F(L-x) - M(x) = 0$ 。
- 挠度。**由式 (4.7)， $EI u'' = F(L-x)$ 。积分一次并用 $u'(0) = 0$ ： $EI u' = F(Lx - x^2/2)$ ；再积分并用 $u(0) = 0$ ：

$$u(x) = \frac{Fx^2(3L-x)}{6EI}. \quad (4.9)$$

- 端部挠度与刚度。**令 $x = L$ ：

$$\delta = u(L) = \frac{FL^3}{3EI}, \quad k \equiv \frac{F}{\delta} = \frac{3EI}{L^3} = \frac{Ewh^3}{4L^3}. \quad (4.10)$$

- 端部倾角。** $\theta = u'(L) = FL^2/(2EI)$ ，与 δ 相比：

$$\theta = \frac{3}{2} \frac{\delta}{L}. \quad (4.11)$$

检验：量纲、标度与实例

- 量纲：** $[Ewh^3/L^3] = \text{Pa} \cdot \text{m}^4/\text{m}^3 = \text{N/m}$ 。
- 标度：** L 加倍时，固定端弯矩加倍、弯曲段变长使总转角再加倍、转角对端部挠度的“杠杆臂”又加倍，挠度共增大 8 倍，与 $k \propto L^{-3}$ 一致。
- 实例：**TESPA-V2 标称 $L = 123 \mu\text{m}$ 、 $w = 40 \mu\text{m}$ 、 $h = 3.3 \mu\text{m}$ [17]，取 $E = 169 \text{ GPa}$ ，式 (4.10) 给出 $k = 32.6 \text{ N/m}$ ，与标称值 37 N/m 相符；厂商给出的范围 $20\text{--}80 \text{ N/m}$ 的下限主要来自厚度公差 ($k \propto h^3$ ， $h = 2.8 \mu\text{m}$ 时约 20 N/m)，上限还叠加了 L 、 w 的公差与镀层的影响（仅 $h = 3.8 \mu\text{m}$ 只给出约 50 N/m ）。

注：剪切变形与宽板效应

(1) 端力 F 还会让截面发生剪切错动，剪切挠度约 $FL/(\kappa Gwh)$ (G 为剪切模量， $\kappa \approx 5/6$)，与弯曲挠度 $4FL^3/(Ewh^3)$ 之比为 $\frac{E}{4\kappa G}(h/L)^2 \sim (h/L)^2$ ，对 $L/h \gtrsim 30$ 的悬臂小于 10^{-3} 。(2) 泊松比 ν 定义为单轴拉伸时横向收缩应变与纵向伸长应变之比的负值（钢约 0.29、 Si_3N_4 约 0.25；单晶硅各向异性，沿 $\langle 110 \rangle$ 放置的悬臂在宽度方向的 $\nu \approx 0.064$ [18])。弯曲时凸侧纤维伸长、横向收缩，凹侧相反，截面因而在宽度方向产生反向的“鞍形”弯曲（反向曲率 $\approx \nu/\rho$ ）。只要这一反向弯曲能自由发生，梁公式就成立；它受到约束时（夹持端附近约一个宽度 w 的范围内，或挠度大到 Searle 参数 $w^2/(\rho h) \gtrsim 1$ 时——它是横向反弯造成的拱高 $\sim \nu w^2/(8\rho)$ 与厚度 h 之比的量度，拱高与厚度可比时截面不再能自由反弯），截面像板一样弯曲，有效模量向 $E/(1-\nu^2)$ 过渡。所以判据不是 w/h ，而是 w/L （受约束区所占比例）与 $w^2/(\rho h)$ 。修正的上限为 $\nu^2/(1-\nu^2)$ ：钢约 9%， Si_3N_4 约 7%， $\langle 110 \rangle$ 硅悬臂不到 0.5%。常见 AFM 悬臂挠度极小、 $w/L \lesssim 0.3$ ，实际修正还要再乘以受约束区所占的比例，本讲不计这两项；但对宽而短的悬臂（如第 10 节的钢片）它是值得估计的系统误差。

5 悬臂梁的振动

5.1 欧拉-伯努利梁方程

静态时梁的每个微元受力平衡；振动时微元有加速度。把牛顿第二定律用到图 4a 的微元上，就得到梁的运动方程。

假设：动力学的附加近似

(1) 微元只作横向平动，忽略截面绕自身的转动惯量（**转动惯性**）；(2) 弯矩-曲率关系 $M = EIu''$ 在振动中逐瞬时成立（材料响应远快于振动，内耗另行用 Q 描述）。近似 (1) 的相对误差约为 $(\lambda_n h/L)^2/12$ ：转动惯性项 $\mu \frac{h^2}{12} \ddot{u}'$ 与平动惯性之比为 $(h^2/12) \times (\text{波数})^2$ ，而第 n 阶模的波数约为 λ_n/L 。对 $L/h = 40$ 的一阶模约为 10^{-4} ，可放心忽略。

推导：欧拉-伯努利梁方程

以 $u(x, t)$ 表示 t 时刻的挠度， $\mu = \rho wh$ 为线密度， $p(x, t)$ 为单位长度的横向外力。

1. **平动**：微元质量 μdx ，竖直方向的牛顿第二定律为 $\mu dx \ddot{u} = V(x+dx) - V(x) + p dx$ ，即

$$\mu \ddot{u} = \frac{\partial V}{\partial x} + p. \quad (5.1)$$

2. **转动**：按假设 (1)，微元转动惯量的贡献忽略，力矩平衡与静态相同，仍为式 (4.8)： $V = -\partial M/\partial x$ 。

3. **本构**： $M = EI \partial^2 u/\partial x^2$ （式 (4.7)，均匀梁 EI 为常数）。

4. 依次代入： $\partial V/\partial x = -\partial^2 M/\partial x^2 = -EI \partial^4 u/\partial x^4$ ，于是

$$EI \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = p(x, t). \quad (5.2)$$

这就是**欧拉-伯努利梁方程**（文献中常写作 $EI u'''' + \rho A \ddot{u} = p$ ， ρA 即本讲的 μ ）。

定义：悬臂的边界条件

固定端 $x = 0$ ：位移与转角为零， $u = 0$ ， $u' = 0$ 。自由端 $x = L$ ：没有外力偶和外力，弯矩与剪力为零，即 $M = EIu'' = 0$ 与 $V = -EIu''' = 0$ ：

$$u(0, t) = 0, \quad u'(0, t) = 0, \quad u''(L, t) = 0, \quad u'''(L, t) = 0. \quad (5.3)$$

若自由端粘有质点 m_t （针尖或附加质量），剪力条件改为 $m_t \ddot{u}(L) = -V(L) = EIu'''(L)$ （质点受梁的力为 $-V$ ），见附录 C。

注：与弦振动方程的比较

弦的回复力来自张力， $T_0 u''$ 是二阶导数，波速与频率无关；梁的回复力来自弯曲，是四阶导数。把 $u \propto e^{i(\kappa x - \omega t)}$ 代入式 (5.2) ($p = 0$) 得 $EI\kappa^4 = \mu\omega^2$ ，即 $\omega \propto \kappa^2$ ：梁中的弯曲波是色散的，短波跑得快。这就是高阶模频率按 n^2 而非 n 增长的根源。

5.2 分离变量：振型与频率方程**推导：简正模的方程**

1. 寻找所有点以同一频率、同一相位振动的解（简正模）： $u(x, t) = \phi(x) \cos(\omega t + \alpha)$ 。代入式 (5.2) ($p = 0$)，两边消去 $\cos(\omega t + \alpha)$ ：

$$\phi'''' = \beta^4 \phi, \quad \beta^4 \equiv \frac{\mu\omega^2}{EI}. \quad (5.4)$$

β 的单位是 m^{-1} ，是振型在空间上的“波数”。

2. 这是常数系数线性方程，试探 $\phi = e^{rx}$ 得 $r^4 = \beta^4$ ，四个根 $r = \pm\beta, \pm i\beta$ 。相应的实函数解为 $\cos \beta x, \sin \beta x, \cosh \beta x, \sinh \beta x$ ，通解是它们的线性组合。
3. 为了方便施加边界条件，把通解写成 $\phi = a_1(\cosh \beta x + \cos \beta x) + a_2(\cosh \beta x - \cos \beta x) + a_3(\sinh \beta x + \sin \beta x) + a_4(\sinh \beta x - \sin \beta x)$ 。在 $x = 0$ 处，四个组合的函数值依次为 2, 0, 0, 0，一阶导数依次为 0, 0, 2 β , 0，所以 $\phi(0) = 2a_1$ 、 $\phi'(0) = 2\beta a_3$ 。固定端条件 $\phi(0) = \phi'(0) = 0$ 给出 $a_1 = a_3 = 0$ ，记 $C_1 = a_2$ 、 $C_2 = a_4$ ：

$$\phi(x) = C_1(\cosh \beta x - \cos \beta x) + C_2(\sinh \beta x - \sin \beta x). \quad (5.5)$$

推导：频率方程 $\cos \lambda \cosh \lambda = -1$

记 $\lambda \equiv \beta L$ ，并简写 $c = \cos \lambda$ ， $s = \sin \lambda$ ， $ch = \cosh \lambda$ ， $sh = \sinh \lambda$ 。

1. 对式 (5.5) 求导：

$$\begin{aligned} \phi'' &= \beta^2 [C_1(\cosh \beta x + \cos \beta x) + C_2(\sinh \beta x + \sin \beta x)], \\ \phi''' &= \beta^3 [C_1(\sinh \beta x - \sin \beta x) + C_2(\cosh \beta x + \cos \beta x)]. \end{aligned}$$

2. 自由端条件 $\phi''(L) = \phi'''(L) = 0$ 给出关于 (C_1, C_2) 的齐次线性方程组:

$$\begin{pmatrix} \text{ch} + c & \text{sh} + s \\ \text{sh} - s & \text{ch} + c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (5.6)$$

第一行来自 $\phi''(L) = 0$, 第二行来自 $\phi'''(L) = 0$ 。

3. 非零解要求系数行列式为零: $(\text{ch} + c)^2 - (\text{sh} + s)(\text{sh} - s) = (\text{ch}^2 - \text{sh}^2) + (c^2 + s^2) + 2c \text{ch} = 2 + 2c \text{ch}$, 用了 $\cosh^2 - \sinh^2 = 1$ 、 $\cos^2 + \sin^2 = 1$ 。于是

$$\cos \lambda \cosh \lambda = -1 \quad (5.7)$$

4. 由第一行, $C_2/C_1 = -(\text{ch} + c)/(\text{sh} + s)$, 振型为

$$\phi_n(x) \propto (\cosh \beta_n x - \cos \beta_n x) - \sigma_n (\sinh \beta_n x - \sin \beta_n x), \quad \sigma_n = \frac{\cos \lambda_n + \cosh \lambda_n}{\sin \lambda_n + \sinh \lambda_n}. \quad (5.8)$$

本讲把振型归一化为 $\phi_n(L) = 1$ (第 5.4 节将引入模态坐标 q_n , 这一归一化使它恰为第 n 阶模在针尖处的位移)。

式 (5.7) 是超越方程, 写成 $\cos \lambda = -1/\cosh \lambda$ 后可以图解 (图 5a): $-1/\cosh \lambda$ 从 -1 迅速趋于 0, 所以除第一个根外, 其余根非常接近 $\cos \lambda = 0$ 的零点 $(n - \frac{1}{2})\pi$ 。数值求根见附录 A:

$$\lambda_1 = 1.875104, \quad \lambda_2 = 4.694091, \quad \lambda_3 = 7.854757, \quad \lambda_4 = 10.995541. \quad (5.9)$$

$n \geq 3$ 时 λ_n 与 $(n - \frac{1}{2})\pi$ 的差别已小于 10^{-3} 。

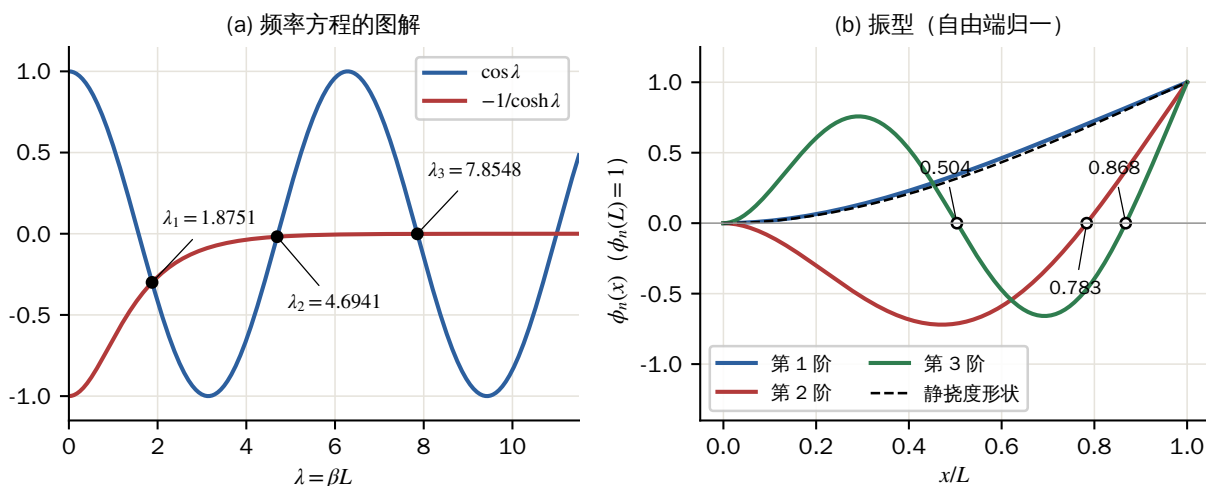


图 5 (a) 频率方程的图解: $\cos \lambda$ 与 $-1/\cosh \lambda$ 的交点即 λ_n ; (b) 前三阶振型 (式 (5.8), 自由端归一) 与端部受力的静挠度形状 $\psi = (3\xi^2 - \xi^3)/2$ (虚线, $\xi = x/L$)。空心点标出节点位置 (二阶模 $x/L = 0.783$; 三阶模 0.504 与 0.868), 由脚本数值求根并核对。

推导: 固有频率

由 $\beta^4 = \mu\omega^2/(EI)$ 解出 $\omega_n = \beta_n^2 \sqrt{EI/\mu} = \frac{\lambda_n^2}{L^2} \sqrt{\frac{EI}{\mu}}$ 。代入矩形截面 $I/(wh) = h^2/12$:

$\sqrt{EI/\mu} = \sqrt{Eh^2/(12\rho)} = h\sqrt{E/\rho}/\sqrt{12}$ 。于是

$$f_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{\lambda_n^2}{2\pi\sqrt{12}} \frac{h}{L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}}, \quad f_1 = 0.1615 \frac{h}{L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}}. \quad (5.10)$$

高阶模频率比 $f_n/f_1 = (\lambda_n/\lambda_1)^2 = 1, 6.267, 17.55, 34.39, \dots$, 不是整数倍。

检验

- 量纲: $\sqrt{E/\rho}$ 是声速量纲 (m/s), 乘以 h/L^2 (1/m) 得 1/s。
- 实例: TESP-V2 ($h = 3.3 \mu\text{m}$, $L = 123 \mu\text{m}$, $\sqrt{E/\rho} = 8517 \text{ m/s}$) 给出 $f_1 = 300 \text{ kHz}$, 标称 320 kHz [17]; 图 2a 的悬臂给出 $k = 16.1 \text{ N/m}$, $f_1 = 268 \text{ kHz}$, 标称 15 N/m , 300 kHz [2]。
- 与弦的对比: $f_n \propto \lambda_n^2 \approx (n - \frac{1}{2})^2 \pi^2$, 符合色散关系 $\omega \propto \kappa^2$ 。

交互演示: 悬臂前三阶振型的动画。调节长度 L 、厚度 h 与材料, 读出 f_1, f_2, f_3 、刚度 k 与有效质量; 观察 L 加倍时 f 降为 $1/4$ 、 k 降为 $1/8$ 。

网页版中此处为可调参数的交互动画 (演示编号 `afm-modes`)。

练习: qPlus 传感器: 标称参数的自洽与针尖质量

qPlus S1.0 型传感器的自由臂 $L = 2360 \mu\text{m}$ 、 $w = 127 \mu\text{m}$ 、 $h = 214 \mu\text{m}$, 标称 $k = 1800 \text{ N/m}$ 、裸音叉频率 $f_0 = 32768 \text{ Hz}$ [10]。(1) 用式 (4.10)、(5.10) 反推石英的 E 与 ρ 。注意: 标称 k 本身就是厂家/作者用梁公式算出的, 所以这一步只能检验各标称参数之间是否自洽, 不能检验梁模型 (况且即使 $L/h = 11$, 转动惯性 $((\lambda_1 h/L)^2/12 \approx 0.24\%)$ 与剪切修正 (约 0.5%) 合计也不到 1% , 比“标称参数自洽”的 3% 差还小, 反推 E 检验不了梁模型)。(2) Gross 等人的 qPlus 粘上针尖后 f_0 降到约 23 kHz ($k = 1800 \text{ N/m}$) [10]。设裸频率为 32768 Hz , 用式 (5.16) 估算针尖 (含胶) 质量; 再用附录 C 的精确频率方程检验。^a

^a答案: (1) $E \approx 76 \text{ GPa}$, $\sqrt{E/\rho} \approx 5.28 \text{ km/s}$, $\rho \approx 2.7 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 与石英的 $2.65 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ 相差约 3% 。(2) $m_t = k[(2\pi f)^{-2} - (2\pi f_0)^{-2}] \approx 44 \mu\text{g}$; 精确方程: $\lambda_1 = 1.8751\sqrt{23/32.768} = 1.5710$, 解得 $\alpha = m_t/m = 0.254$, 取 $m = \rho whL = 1.70 \times 10^{-7} \text{ kg}$ 得 $m_t \approx 43 \mu\text{g}$, 两者相差约 2% 。这相当于一段直径约 $50 \mu\text{m}$ 、长约 1 mm 的钨丝。

5.3 瑞利能量法

求精确振型要解超越方程。瑞利 (Rayleigh) 给出了一个只需“猜一个形状”的近似方法 [20], 它在 AFM 文献中被广泛用来估计各种复杂形状 (三角形、带针尖) 悬臂的频率。

推导: 瑞利商

1. 假设悬臂以一个固定形状振动: $u(x, t) = \psi(x)q(t)$, $\psi(L) = 1$, 于是 q 就是针尖位移。
2. 动能: $K = \int_0^L \frac{1}{2}\mu \dot{u}^2 dx = \frac{1}{2} \left(\mu \int_0^L \psi^2 dx \right) \dot{q}^2 \equiv \frac{1}{2} m_\psi \dot{q}^2$ 。
3. 弯曲势能: 由式 (4.5) 与 $1/\varrho \approx u''$, $U = \int_0^L \frac{1}{2} EI u''^2 dx = \frac{1}{2} \left(EI \int_0^L \psi''^2 dx \right) q^2 \equiv \frac{1}{2} k_\psi q^2$ 。

4. 这是一个质量 m_ψ 、劲度 k_ψ 的谐振子, $\omega^2 \approx k_\psi/m_\psi$:

$$\omega_R^2 = \frac{EI \int_0^L \psi''^2 dx}{\mu \int_0^L \psi^2 dx}. \quad (5.11)$$

推导：用静挠度形状作试探函数

取式 (4.9) 归一化后的 $\psi = (3\xi^2 - \xi^3)/2$, $\xi = x/L$ 。

$$1. \int_0^L \psi^2 dx = \frac{L}{4} \int_0^1 (9\xi^4 - 6\xi^5 + \xi^6) d\xi = \frac{L}{4} \left(\frac{9}{5} - 1 + \frac{1}{7} \right) = \frac{33}{140} L.$$

$$2. \psi'' = 3(L-x)/L^3, \int_0^L \psi''^2 dx = \frac{9}{L^6} \cdot \frac{L^3}{3} = \frac{3}{L^3}, \text{ 所以 } k_\psi = 3EI/L^3 = k \text{——静挠度形状的弯曲能恰好是 } \frac{1}{2}k\delta^2, \text{ 与“外力做功 } \frac{1}{2}F\delta\text{”一致。}$$

3. 于是 $m_\psi = \frac{33}{140}m = 0.2357m$, 且

$$\omega_R^2 = \frac{140}{33} \cdot \frac{3EI}{\mu L^4} = 12.73 \frac{EI}{\mu L^4}, \quad \frac{\omega_R}{\omega_1} = \sqrt{\frac{12.727}{\lambda_1^4}} = \sqrt{\frac{12.727}{12.362}} = 1.0147. \quad (5.12)$$

要点：瑞利法的两条性质

(1) 用任意满足几何边界条件的形状, $\omega_R \geq \omega_1$, 等号当且仅当 ψ 正是一阶振型 (附录 A 用模态展开证明: 试探函数里混进的高阶模只会抬高“平均刚度/平均质量”)。(2) 误差是试探函数误差的二阶小量: 静挠度形状与一阶振型非常接近 (图 5b 中两条曲线几乎重合), 频率误差只有 1.5%。

5.4 有效质量与“弹簧-质点”模型

AFM 的大部分分析把悬臂当成一个挂在弹簧 k 上的质点。这个质点的质量应取多少? 有两种常用、彼此一致的定义, 必须分清。

定义：有效质量 m_{eff}

让一个劲度为**静刚度** k 的弹簧振子复现一阶频率 ω_1 , 所需的质量

$$m_{\text{eff}} \equiv \frac{k}{\omega_1^2} = \frac{3EI/L^3}{\lambda_1^4 EI/(\mu L^4)} = \frac{3}{\lambda_1^4} m = 0.2427 m. \quad (5.13)$$

定义：模态坐标、模态质量与模态刚度

把任意挠度按振型展开: $u(x, t) = \sum_n q_n(t) \phi_n(x)$ ($\phi_n(L) = 1$, q_n 是第 n 阶模对针尖位移的贡献)。可以证明这组振型像傅里叶级数的正弦、余弦一样构成**完备集**: 满足固定端条件的任意光滑挠度都能展开成它们的线性组合 (本讲直接使用这一结论; 附录 A 的柔度求和规则 $\sum 12/\lambda_n^4 = 1$ 的数值核对可作佐证)。附录 A 证明振型的**正交性**: $\int_0^L \phi_m \phi_n dx = 0$, $\int_0^L \phi_m'' \phi_n'' dx = 0$ ($m \neq n$)。于是总动能与弯曲能都分解为各模之和:

$$K = \sum_n \frac{1}{2} m_n \dot{q}_n^2, \quad U = \sum_n \frac{1}{2} k_n q_n^2, \quad m_n = \mu \int_0^L \phi_n^2 dx = \frac{m}{4}, \quad k_n = m_n \omega_n^2 = \frac{\lambda_n^4}{12} k. \quad (5.14)$$

$m_n = m/4$ 对所有 n 都成立 (附录 A)。特别地 $k_1 = \lambda_1^4 k/12 = 1.0302 k$ 。

注：0.243m 与 0.25m 为何不矛盾

两种定义都满足 $k/m_{\text{eff}} = k_1/m_1 = \omega_1^2$ 。差别在于：静力 F 压在针尖上时，悬臂的静挠度形状并不完全是一阶振型，而是各阶模的叠加；每个模都分担一点位移，所以静刚度 k 比只有一阶模时的 k_1 软一点。附录 A 证明

$$\frac{1}{k} = \sum_n \frac{1}{k_n} = \frac{1}{k} \sum_n \frac{12}{\lambda_n^4}, \quad \text{即} \quad \sum_n \frac{12}{\lambda_n^4} = 1, \quad (5.15)$$

其中一阶模占 $12/\lambda_1^4 = 97.07\%$ ，二阶 2.47%，三阶 0.32%。这里的柔度是刚度的倒数 $1/k$ ，即单位力产生的位移；这个“柔度求和规则”在第 8.4 节的热噪声标定中会再次出现。

要点：弹簧-质点模型的适用范围

单模模型 $m_{\text{eff}}\ddot{q} + b\dot{q} + kq = F_{\text{tip}}(t)$ 成立的条件：(1) 力作用在针尖处；(2) 关心的频率远低于二阶模 $f_2 = 6.27f_1$ ，于是高阶模只作准静态的微小修正；(3) 小挠度、线弹性。不适用的典型情形：轻敲模式中针尖撞击样品的冲击力（含丰富高频成分，激发高阶模）；热噪声的全谱（约 3% 的均方位移在高阶模上）；端部有较重附加质量时 m_{eff} 会从 $0.2427m$ 变到 $\frac{33}{140}m = 0.2357m$ (附录 C)。

推导：附加端质量： $(2\pi f)^{-2}$ 对 m_t 近似线性

在针尖处加质点 m_t 。若振型几乎不变，动能多出 $\frac{1}{2}m_t\dot{q}^2$ ，弹簧-质点模型给出

$$\omega^2 \approx \frac{k}{m_{\text{eff}} + m_t} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{1}{(2\pi f)^2} \approx \frac{m_t}{k} + \frac{m_{\text{eff}}}{k}. \quad (5.16)$$

以 $(2\pi f)^{-2}$ 对 m_t 作图，斜率是 $1/k$ 、截距是 m_{eff}/k ：这就是 Cleveland 等人标定悬臂刚度的“附加质量法” [21]，也是第 10 节实验题的原理。附录 C 由精确频率方程表明，严格的等效质量随 m_t/m 从 0.243 缓慢降到 0.236，所以式 (5.16) 只是近似；在 $0 \leq m_t \leq m$ 范围内作线性拟合给出 $m_{\text{eff}} \approx 0.242m$ ，斜率给出的 k 偏差约 0.5%。

6 针尖-样品相互作用与跳触失稳

6.1 范德瓦尔斯力：从一对分子到球-平面

前置知识：分子间色散力为什么是 $-C/r^6$

两个中性非极性原子之间也有吸引：原子 1 的电子云瞬时涨落产生偶极矩 p_1 ，它在距离 r 处产生电场 $\mathcal{E} \sim p_1/(4\pi\epsilon_0 r^3)$ （偶极场随 r^{-3} 衰减）；原子 2 被极化出感应偶极 $p_2 = \alpha\mathcal{E}$ （ α 为极化率）；感应偶极在场中的能量 $-\frac{1}{2}\alpha\mathcal{E}^2 \propto -\alpha p_1^2/r^6$ 。 p_1 的时间平均为零，但 p_1^2 的平均不为零，所以平均能量为

$$w(r) = -\frac{C}{r^6}, \quad C > 0. \quad (6.1)$$

这称为伦敦色散力；极性分子之间的取向力、诱导力也都是 r^{-6} ，三者合称范德瓦尔斯相互作用 [22]。当 r 超过约 5 nm–10 nm，电磁场传播的推迟效应使衰减变快，本讲只考虑几纳米以内，可忽略推迟。

假设：Hamaker 的两条假设 [23]

(1) **两两可加**：宏观物体间的相互作用能等于所有分子对的 $w(r)$ 之和；(2) **连续介质**：把求和换成以分子数密度 n_1, n_2 加权的体积分。两条假设在分子间距远小于物体间距时较好，在原子尺度接触时失效（由下面的接触模型接管）。

推导：一个分子与半无限大平板

分子位于平板表面上方 Z 处。把平板切成平行于表面的薄层，深度坐标 ζ 从分子量起， $\zeta \in [Z, \infty)$ ；每层再切成以分子正下方为圆心、半径 r 的细圆环，体积 $2\pi r dr d\zeta$ ，到分子的距离 $\sqrt{\zeta^2 + r^2}$ 。

$$1. \text{ 对圆环求和: } \int_0^\infty \frac{2\pi r dr}{(\zeta^2 + r^2)^3} = \left[-\frac{\pi}{2(\zeta^2 + r^2)^2} \right]_0^\infty = \frac{\pi}{2\zeta^4}.$$

2. 对薄层求和：

$$w_m(Z) = -Cn_2 \int_Z^\infty \frac{\pi}{2\zeta^4} d\zeta = -\frac{\pi Cn_2}{6Z^3}. \quad (6.2)$$

衰减从单个分子的 r^{-6} 变成 Z^{-3} ：平板中离分子越远的部分体积越大，部分抵消了衰减。

推导：球形针尖与平板： $V = -HR/(6z)$ ($z \ll R$)

半径 R 的球（分子数密度 n_1 ），最低点距平板 z 。把球切成平行于平板的薄片，薄片到平板的距离为 $s \in [z, z + 2R]$ 。

1. 薄片半径 ϱ_s 满足 $\varrho_s^2 = R^2 - (R - (s - z))^2 = 2R(s - z) - (s - z)^2$ 。 $z \ll R$ 时相互作用集中在 $s - z \ll R$ 的球冠底部，取 $\varrho_s^2 \approx 2R(s - z)$ ，即舍去 $-(s - z)^2$ 项；它对远处薄片才重要，下一步讨论其影响。

2. 薄片内的每个分子与平板的作用能都是 $w_m(s)$ ，薄片的分子数 $n_1 \pi \varrho_s^2 ds$ ：

$$V(z) \approx \int_z^\infty n_1 \cdot 2\pi R(s - z) \cdot \left(-\frac{\pi Cn_2}{6s^3} \right) ds.$$

（上限也改成了 ∞ 。）**误差**：对力 $F = -dV/dz$ ，这两处近似舍去的是 $\mathcal{O}(z/R)$ 的相对修正；但对**能量** V ，被舍去的 $-(s - z)^2/s^3 \sim -1/s$ 积分后按对数增长，主项修正为 $(z/R) \ln(2R/z)$ （按此式 $z/R = 0.05$ 时为 18%）；附录 B 的精确式给出 $z/R = 0.05$ 时比值 0.839（差 16%，含次级项 $+z/2R$ ）， $z/R = 0.0165$ 时 0.93（差 7%）。因此 $F = -HR/6z^2$ 在 $z \ll R$ 时可靠，而 $V = -HR/6z$ 只是较粗的近似。

3. 积分 $\int_z^\infty \frac{s - z}{s^3} ds = \frac{1}{z} - \frac{z}{2z^2} = \frac{1}{2z}$ ，得

$$V(z) = -\frac{HR}{6z}, \quad F(z) = -\frac{dV}{dz} = -\frac{HR}{6z^2}, \quad H \equiv \pi^2 Cn_1 n_2. \quad (6.3)$$

不作 $z \ll R$ 近似的精确结果见附录 B。

定义：Hamaker 常数

$H = \pi^2 C n_1 n_2$ 把分子层面的 C 与密度合成为一个能量量纲的材料常数。大多数固体之间隔着真空, $H \sim (0.4-4) \times 10^{-19} \text{ J}$, 即约 1 eV 量级 [2, 22]。本讲例题取 $H = 1.0 \times 10^{-19} \text{ J}$ 。

检验

量纲: $[C] = \text{J m}^6$, $[n_1 n_2] = \text{m}^{-6}$, 故 $[H] = \text{J}$, $[HR/z^2] = \text{N}$ 。数量级: $R = 10 \text{ nm}$ 、 $z = 0.5 \text{ nm}$ 时 $F = -0.67 \text{ nN}$; Giessibl 估计 $R = 100 \text{ nm}$ 的刻蚀金属针尖在 $z = 0.5 \text{ nm}$ 处受约 -10 nN 的范德瓦尔斯力 [2], 与式 (6.3) (取 $H \approx 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ 得 -10.7 nN) 一致。比较: 单个化学键的力约为 nN 量级——长程的范德瓦尔斯背景并不弱。

6.2 接触排斥与 DMT 模型

间隙小到原子“接触”后, 电子云重叠产生强烈的泡利排斥, 宏观上表现为针尖与样品的弹性压陷。

前置知识：赫兹接触

半径 R 的弹性球压在弹性平面上, 压入深度为 δ_c 时的弹性力为 [24]

$$F_H = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R} \delta_c^{3/2}, \quad \frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2}, \quad (6.4)$$

$\nu_{1,2}$ 为泊松比, E^* 为约化模量。 $\delta_c^{3/2}$ 的来源可以用标度论证看清: 接触圆半径 $a \sim \sqrt{R \delta_c}$ (球冠的几何), 接触区内应变 $\sim \delta_c/a$, 应力 $\sim E^* \delta_c/a$, 力 $\sim$ 应力 $\times a^2 \sim E^* \delta_c a \sim E^* \sqrt{R} \delta_c^{3/2}$ 。前因子 4/3 来自赫兹的精确解, 本讲直接引用。硅-硅接触的 E^* 约 90 GPa。

推导：两平板之间的粘附能

两块半无限平板相距 Z 。对式 (6.2) 再对第二块板的分子求和: 单位面积的作用能

$$W(Z) = \int_Z^\infty n_1 \left(-\frac{\pi C n_2}{6 \zeta^3} \right) d\zeta = -\frac{H}{12\pi Z^2}. \quad (6.5)$$

把“接触”定义为两表面相距一个原子间距量级的截断距离 a_0 , 则把两板从接触拉开到无穷远需做功 $|W(a_0)| = H/(12\pi a_0^2)$ (单位面积), 称为**粘附功**。Israelachvili 指出, 取“普适”截断 $a_0 \approx 0.165 \text{ nm}$ 时, $H/(24\pi a_0^2)$ 与大量材料实测的表面能吻合 [22]。

定义：DMT 模型的针尖-样品力 (本讲采用的模型)

Derjaguin、Muller 与 Toporov[25] 的模型假设: 接触区内是赫兹弹性排斥, 接触区外的吸引力不改变接触形状, 只在合力上叠加一个常数粘附力 $-F_{ad}$, $F_{ad} = 2\pi R |W(a_0)| = HR/(6a_0^2)$ 。与式 (6.3) 拼接, 力随间隙 z 为

$$F(z) = \begin{cases} -\frac{HR}{6z^2}, & z \geq a_0, \\ -\frac{HR}{6a_0^2} + \frac{4}{3} E^* \sqrt{R} (a_0 - z)^{3/2}, & z < a_0. \end{cases} \quad (6.6)$$

它在 $z = a_0$ 处连续，这并非巧合：比较式 (6.3) 与 (6.5)，对任意 $z \ll R$ 都有 $F_{\text{球}}(z) = -\frac{HR}{6z^2} = 2\pi R \cdot \left(-\frac{H}{12\pi z^2}\right) = 2\pi R W_{\text{平板}}(z)$ ——球-平面的力等于 $2\pi R$ 乘以两平板单位面积的作用能，这称为 **Derjaguin 近似**（对任何短程、可叠加的面间相互作用都成立）。DMT 的 $F_{\text{ad}} = 2\pi R |W(a_0)|$ 正是它在接触点的应用。这是动态 AFM 模拟中最常用的模型之一 [26]，但它是**模型**：真实的短程化学键力、针尖形状与软材料的大变形都没有包括。

6.3 静态平衡与稳定性

定义：坐标与力的符号

z ：针尖与样品表面的间隙； $F(z)$ ：样品对针尖的力，推离样品 ($+z$) 为正，所以吸引力 $F < 0$ ； z_0 ：悬臂基座的位置，用“悬臂不弯时针尖所在的间隙”表示，由压电陶瓷控制。悬臂对针尖的力为 $k(z_0 - z)$ ：针尖被吸下去 ($z < z_0$) 时悬臂向上拉。

推导：平衡条件与稳定性条件

1. 准静态下 (z_0 变化远慢于悬臂周期)，针尖坐标 z 是唯一的力学自由度，系统势能为悬臂弹性能与相互作用能之和：

$$U(z; z_0) = \frac{1}{2}k(z - z_0)^2 + V(z). \quad (6.7)$$

2. 平衡： $\partial U / \partial z = k(z - z_0) - F(z) = 0$ ，即

$$F(z) = k(z - z_0). \quad (6.8)$$

3. 稳定：平衡点必须是 U 的极小， $\partial^2 U / \partial z^2 = k - F'(z) > 0$ ：

$$k > F'(z) \equiv \frac{dF}{dz}. \quad (6.9)$$

注：符号的物理意义

吸引区内针尖越靠近，吸引越强： z 减小时 F 变得更负，所以 $F' > 0$ 。这相当于给针尖并联了一根**负刚度**弹簧 $k_{\text{ts}} \equiv -F'$ (Giessibl 的记号 $k_{\text{ts}} = \partial^2 V / \partial z^2$ [2])。式 (6.9) 就是“总刚度 $k + k_{\text{ts}}$ 为正”。接触区内 $F' = -2E^* \sqrt{R}(a_0 - z)^{1/2} < 0$ ，排斥区永远稳定。

图解法 式 (6.8) 的右端是过点 $(z_0, 0)$ 、斜率为 k 的直线，平衡点是它与曲线 $F(z)$ 的交点；在交点处直线比曲线陡 ($k > F'$) 的是稳定平衡。图 6a 画出了三条直线： z_0 较大时有三个交点——外侧的稳定平衡（针尖悬在样品上方）、中间的不稳定平衡、接触区内的稳定平衡； z_0 减小到某个临界值 z_0^* 时，外侧两个交点在**切点** z^* 处合并后消失，针尖失去悬空的平衡位置，突然被吸到接触区——这就是**跳触** (snap-in, jump-to-contact)。

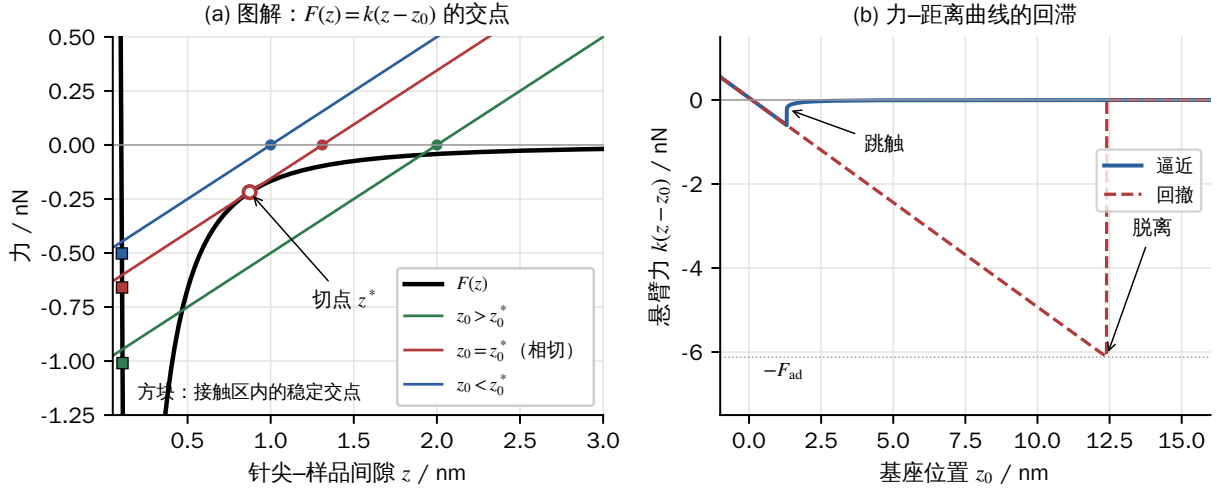


图 6 (a) 图解平衡：黑线为式 (6.6) 的 $F(z)$ ($H = 10^{-19}$ J、 $R = 10$ nm、 $a_0 = 0.165$ nm、 $E^* = 90$ GPa)，彩色直线为 $k(z - z_0)$ ， $k = 0.5$ N/m；相切时 $z^* = 0.874$ nm、 $z_0^* = \frac{3}{2}z^* = 1.310$ nm；方块标出每条直线在接触区 ($z < a_0$) 内的稳定交点。(b) 准静态数值扫描得到的“力-距离曲线”：逼近时在 $z_0 = z_0^*$ 跳触，回撤时针尖粘在样品上直到 $z_0 = a_0 + F_{ad}/k = 12.41$ nm 才脱离，拉脱力 $F_{ad} = 6.12$ nN。图中跳变位置由数值扫描得到，并在脚本中与式 (6.10)、(6.11) 核对。

6.4 跳触与脱离的临界条件

推导：跳触距离

临界状态由“相交且相切”两个条件确定：

1. 相切（斜率相等）： $F'(z^*) = k$ 。对 $F = -HR/(6z^2)$ ， $F' = HR/(3z^3)$ ，所以 $z^* = (HR/3k)^{1/3}$ 。

2. 相交： $z_0^* = z^* - F(z^*)/k = z^* + \frac{HR}{6kz^{*2}}$ 。由第 1 步 $HR/k = 3z^{*3}$ ，第二项等于 $z^*/2$ ：

$$z^* = \left(\frac{HR}{3k}\right)^{1/3}, \quad z_0^* = \frac{3}{2}z^* = \frac{3}{2}\left(\frac{HR}{3k}\right)^{1/3}. \quad (6.10)$$

3. 跳触前一瞬间悬臂已被吸下 $z_0^* - z^* = z^*/2$ ，力为 $F(z^*) = -kz^*/2$ 。

检验

- 量纲： $[HR/k] = \text{J} \cdot \text{m}/(\text{N}/\text{m}) = \text{m}^3$ 。
- 极限： $k \rightarrow \infty$ 时 $z^* \rightarrow 0$ ，硬悬臂不跳触； $k \rightarrow 0$ 时 $z_0^* \rightarrow \infty$ ，再弱的吸引也能把无限软的弹簧拉过去。
- 标度： $z^* \propto k^{-1/3}$ ，弱依赖： k 减小 1000 倍，跳触距离只增大 10 倍。
- 数值： $k = 0.1$ N/m， $H = 10^{-19}$ J， $R = 10$ nm： $z^* = 1.49$ nm， $z_0^* = 2.24$ nm。

要点：一般判据

对任意力律，准静态逼近中不发生跳触的充要条件是悬臂刚度大于所经过区间内力梯度的最大值： $k > \max F'(z)$ [2]。对式 (6.6)， F' 在 $z = a_0$ 处最大， $HR/(3a_0^3) = 74 \text{ N/m}$ ；普通接触模式悬臂 ($k < 1 \text{ N/m}$) 总会跳触，而 qPlus ($k = 1800 \text{ N/m}$) 不会。

推导：脱离 (jump-off) 与拉脱力

回撤时 z_0 增大，针尖先留在接触区（这一支 $F' < 0$ ，始终稳定）。

1. 随着悬臂向上拉，针尖逐渐“卸载”，间隙 z 增大到 a_0 时力达到最负值 $-F_{\text{ad}}$ 。
2. 刚越过 a_0 ， $F' = HR/(3a_0^3)$ 远大于 k ，稳定性条件被破坏，针尖立即弹离。由平衡条件 $-F_{\text{ad}} = k(a_0 - z_0)$ ：

$$z_0^{\text{off}} = a_0 + \frac{F_{\text{ad}}}{k}, \quad F_{\text{ad}} = \frac{HR}{6a_0^2}. \quad (6.11)$$

3. 脱离前悬臂读到的力就是 $-F_{\text{ad}}$ 。实验中由此可以测出粘附功 $|W| = F_{\text{ad}}/(2\pi R)$ ，这是 AFM “力谱” 测量表面能的原理。

要点：回滞与耗散

逼近与回撤走不同的路径（图 6b），一个循环中压电陶瓷对系统做的净功不为零，变成了跳变后悬臂振动的能量并最终被阻尼耗散。每次跳变都发生在 z_0 固定的瞬间，耗散的能量等于跳变前后势能 $U(z; z_0)$ 的差。对软悬臂，脱离时的耗散 $\approx F_{\text{ad}}^2/(2k)$ 占主导（例题 1）。 k 越小，同样的粘附力对应越大的弹性储能，这也是软悬臂在接触成像中容易拖拽、损伤样品的原因之一。

交互演示：力-距离曲线的图解法。拖动基座位置 z_0 或按“自动扫描”，观察直线 $k(z - z_0)$ 与 $F(z)$ 的交点如何合并消失、针尖如何跳触；回撤时针尖沿另一支返回，形成回滞环。调节 k 观察 $z_0^* \propto k^{-1/3}$ 与 $z_0^{\text{off}} \approx F_{\text{ad}}/k$ 。

网页版中此处为可调参数的交互动画（演示编号 afm-snapin）。

7 动态模式：频率调制与振幅调制

静态模式受制于跳触和低频噪声。让悬臂在共振频率附近振动，相互作用的力梯度会改变“等效弹簧”，从而改变频率或振幅。本节先复习受迫阻尼振子，再分别讨论 FM 与 AM 两种读出方式。

7.1 受迫阻尼振子与品质因数

前置知识：受迫阻尼振子

单模模型： $m\ddot{q} + b\dot{q} + kq = F_d \cos \omega t$ ，其中 m 取 m_{eff} ， $\omega_0^2 = k/m$ ， b 为粘滞阻尼系数。

1. 品质因数定义为

$$Q \equiv \frac{m\omega_0}{b}. \quad (7.1)$$

无驱动时 $q \propto e^{-t/\tau} \cos(\omega_0 t)$ ($Q \gg 1$), 振幅衰减时间 $\tau = 2m/b = 2Q/\omega_0$; 能量 $\propto e^{-2t/\tau}$, 每周期损失的能量占储能的 $2\pi/Q$ 。空气中微悬臂的 Q 约几十到几百 (空气粘滞), 真空中可达 10^4 – 10^5 [2]。

2. **稳态响应**。设 $q = \text{Re}[Xe^{i\omega t}]$, 代入得复振幅

$$X = \frac{F_d/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\omega_0/Q}, \quad A(\omega) = |X| = \frac{F_d/m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega\omega_0/Q)^2}}. \quad (7.2)$$

共振时 $A = QF_d/k$, 比静态响应大 Q 倍, 相位落后 90° 。

3. **共振附近的洛伦兹近似**。令 $\omega = \omega_0 + \Delta$, $|\Delta| \ll \omega_0$, 则 $\omega_0^2 - \omega^2 = -2\omega_0\Delta + \mathcal{O}(\Delta^2)$, $\omega\omega_0/Q \approx \omega_0^2/Q$, 舍去 $\mathcal{O}(\Delta/\omega_0)$ 与 $\mathcal{O}(1/Q)$ 的相对修正:

$$A \approx \frac{A_{\max}}{\sqrt{1 + \eta^2}}, \quad \eta \equiv \frac{2Q\Delta}{\omega_0}, \quad A_{\max} = \frac{QF_d}{k}. \quad (7.3)$$

A^2 是洛伦兹线型, 其半高全宽为 $\Delta\omega = \omega_0/Q$ (即 $\eta = \pm 1$)。

7.2 小振幅 FM-AFM: 频移正比于力梯度

前置知识: FM-AFM 怎样测频移: 自激振荡与检测带宽

把悬臂偏转信号移相 90° (使驱动力与速度同相)、放大后回馈给驱动压电片, 悬臂就始终在**它自己当前的**共振频率上振荡, 这叫**自激振荡**; 一个振幅控制器自动调节增益, 使振幅 A 保持恒定 (驱动正好补偿阻尼)。相互作用改变等效刚度 $k_{\text{eff}} = k - F'$ (见下面的推导) 时, 振荡频率立即跟着改变, 由锁相环 (让内部振荡器的相位始终跟踪输入信号、从而读出其瞬时频率的电路) 或频率计输出瞬时频率 $f(t)$, 再经截止频率为 B 的低通滤波——相当于在约 $T_{\text{avg}} \approx 1/(2B)$ 的时间内取平均——得到频移 Δf 。 B 越小, 读数越平稳, 但成像越慢。本讲中的 B 一律指这一**单边**检测带宽 (只计 $0 \leq f \leq B$ 的正频率, 单边谱的定义见第 8 节), A 指峰值振幅。

假设: 小振幅近似

振幅 A 远小于力梯度变化的长度尺度: 在 $[z_c - A, z_c + A]$ 内 $F'(z)$ 近似为常数 (z_c 为振动中心)。另设 $|F'| \ll k$ 。

推导: $\Delta f \approx -\frac{f_0}{2k} F'$

1. 设针尖位置为 $z = z_c + q(t)$, z_c 为平衡位置 (满足 $F(z_c) = k(z_c - z_0)$)。单模运动方程 (阻尼被自激电路补偿, 略去): $m\ddot{q} = -k(z_c + q - z_0) + F(z_c + q)$ 。
2. 把 F 在 z_c 处展开到一阶: $F(z_c + q) = F(z_c) + F'(z_c)q + \mathcal{O}(q^2)$ 。零阶项与 $-k(z_c - z_0)$ 抵消 (平衡条件), 剩下

$$m\ddot{q} = -(k - F'(z_c))q, \quad k_{\text{eff}} = k - F'. \quad (7.4)$$

3. 新的固有频率 $f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{(k - F')/m} = f_0 \sqrt{1 - F'/k}$ 。对小量 F'/k 作泰勒展开, $\sqrt{1 - \epsilon} =$

$$1 - \epsilon/2 + \mathcal{O}(\epsilon^2):$$

$$\Delta f \equiv f - f_0 \approx -\frac{f_0}{2k} F'(z_c) \quad (7.5)$$

检验

- 符号：吸引区 $F' > 0$ ，频率降低（“软化”）；排斥区 $F' < 0$ ，频率升高。这与实验中接近样品时频移先变负、在排斥区回升的行为一致 [2]。
- 稳定性： $k_{\text{eff}} > 0$ 正是静态稳定条件式 (6.9)； $k_{\text{eff}} \rightarrow 0$ 时频率降到零——跳触就是“等效弹簧变为零刚度”。
- 量级：qPlus ($k = 1800 \text{ N/m}$, $f_0 = 23 \text{ kHz}$) 测得 $\Delta f = -2$ 到 -7 Hz [10]，对应 $F' = 0.31$ – 1.1 N/m ，确有 $F'/k \sim 10^{-4} \ll 1$ 。

注：用 k 还是 k_1 ？

更严格地，力作用在针尖上、把悬臂投影到一阶模（式 (5.14)）后，一阶微扰给出 $\Delta f = -f_0 F'/(2k_1)$ ， $k_1 = 1.030k$ 是模态刚度。式 (7.5) 用静刚度 k 是文献的通行写法，两者差 3%，小于 k 本身通常的标定误差。凡需要 1% 精度时，应注意这一区别。

7.3 大振幅：频移是力梯度的加权平均

实际 FM-AFM 常用纳米级振幅（1995 年的 Si(7×7) 实验 $A = 34 \text{ nm}$ ），远大于化学键力的作用范围。此时 F' 在一个周期内变化很大，需要更一般的处理。

假设：大振幅下的近似

(1) 相互作用只是小扰动： $|\Delta f| \ll f_0$ ，运动仍近似为正弦 $q = A \cos \omega t$ ；(2) 振幅由反馈保持恒定，自激驱动力恰好补偿阻尼，二者均与 $\cos \omega t$ 正交（相位差 90° ），不影响频率。

推导：一阶谐波平衡

1. 去掉被补偿的阻尼与驱动后， $m\ddot{q} + kq = F(z_c + q) - F(z_c)$ 。（减去常数 $F(z_c)$ 只是把平衡位置定在 z_c ，不影响下面的投影，因为 $\int_0^{2\pi} \cos \theta d\theta = 0$ 。）
2. 代入 $q = A \cos \theta$ ， $\theta = \omega t$ ： $(k - m\omega^2)A \cos \theta = F(z_c + A \cos \theta) - F(z_c)$ 。
3. 正弦试探解不能精确满足方程：右端 $F(z_c + A \cos \theta)$ 作为 θ 的周期函数含有 $\cos n\theta$ 各次谐波（ F 是偶函数 $\cos \theta$ 的函数，不含 $\sin n\theta$ ）。 $n \geq 2$ 的谐波以 $n\omega$ 驱动振子，远离共振，只产生相对大小 $\sim |F|/(kA)$ 的小畸变；只有一次谐波与振子共振，若它不为零就会使振幅不断增长或改变振荡频率——自治的稳态要求**一次谐波的残差为零**。取出一次谐波，就是等式两边乘 $\cos \theta$ 并对一个周期积分（“投影到 $\cos \theta$ 上”），用 $\int_0^{2\pi} \cos^2 \theta d\theta = \pi$ ：

$$(k - m\omega^2)\pi A = \int_0^{2\pi} F(z_c + A \cos \theta) \cos \theta d\theta \equiv I(z_c, A).$$

4. 解出 $\omega^2 = \omega_0^2 - I/(\pi mA)$ ，再按 $|\Delta\omega| \ll \omega_0$ 展开 $\omega \approx \omega_0 - I/(2\pi m\omega_0 A)$ ：

$$\frac{\Delta f}{f_0} = -\frac{1}{2\pi kA} \int_0^{2\pi} F(z_c + A \cos \theta) \cos \theta d\theta. \quad (7.6)$$

推导：分部积分：半圆权重

1. 换元 $s = \cos \theta$ 。 $\theta \in [0, \pi]$ 与 $[\pi, 2\pi]$ 两段贡献相同， $d\theta = -ds/\sqrt{1-s^2}$ ： $I = 2 \int_{-1}^1 F(z_c + As) \frac{s}{\sqrt{1-s^2}} ds$ 。

2. 注意 $s/\sqrt{1-s^2} = -d\sqrt{1-s^2}/ds$ ，分部积分；边界项含 $\sqrt{1-s^2}|_{\pm 1} = 0$ ：

$$I = 2 \int_{-1}^1 A F'(z_c + As) \sqrt{1-s^2} ds.$$

3. 代回式 (7.6)：

$$\Delta f = -\frac{f_0}{2k} \langle F' \rangle, \quad \langle F' \rangle \equiv \int_{-1}^1 F'(z_c + As) \frac{2}{\pi} \sqrt{1-s^2} ds. \quad (7.7)$$

权重 $\frac{2}{\pi} \sqrt{1-s^2}$ 是归一化的半圆 ($\int_{-1}^1 \frac{2}{\pi} \sqrt{1-s^2} ds = 1$)。这一形式由 Giessibl 给出 [2]。

检验：两个极限

- $A \rightarrow 0$ ： $F'(z_c + As) \rightarrow F'(z_c)$ ， $\langle F' \rangle = F'(z_c)$ ，回到式 (7.5)。
- A 远大于最近距离 $d = z_c - A$ (大振幅极限)，对范德瓦尔斯力 $F' = HR/(3z^3)$ ：积分只在下转折点 $s \approx -1$ 附近有贡献。令 $s = -1 + (d/A)v$ ($v \geq 0$ ，主要贡献来自 $v \sim 1$ ，即 $1+s \sim d/A \ll 1$)，则 $\sqrt{1-s^2} \approx \sqrt{2(1+s)} = \sqrt{2dv/A}$ ， $z_c + As = d(1+v)$ ， $ds = (d/A)dv$ ，上限 $v = 2A/d$ 可换成 ∞ ：

$$\langle F' \rangle \approx \frac{2}{\pi} \cdot \frac{HR}{3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{2dv/A}}{d^3(1+v)^3} \frac{d}{A} dv = \frac{2\sqrt{2}HR}{3\pi} \frac{1}{A^{3/2}d^{3/2}} \int_0^\infty \frac{v^{1/2} dv}{(1+v)^3},$$

最后的积分为 $\pi/8$ (附录 B 末)，于是

$$\Delta f \approx -\frac{f_0}{k} \frac{\sqrt{2}HR}{24 A^{3/2}d^{3/2}} \quad (A \gg d). \quad (7.8)$$

频移随 $A^{-3/2}$ 下降：针尖只在每周期的一小段时间里靠近样品。两个极限之间的完整数值结果见图 7。

要点：振幅、刚度与稳定性

(1) 振动的悬臂在下转折点受到吸引力 F ，回复力为 kA ；只要 $kA > \max |F|$ ，针尖就能被拉回，不会粘在样品上——这是 Giessibl 给出的动态稳定判据 [2]，与静态判据 $k > \max F'$ 并列。1995 年的实验用 $k = 17 \text{ N/m}$ 、 $A = 34 \text{ nm}$ ， $kA \approx 580 \text{ nN}$ ；qPlus 用 $k = 1800 \text{ N/m}$ ，振幅可小到几十皮米。(2) 振幅的取舍：热频率噪声 $\propto 1/A$ (第 8.5 节)，这一点偏向大振幅；而由式 (7.7)，作用程为 ℓ 的短程力所产生的频移在 $A \lesssim \ell$ 时与 A 无关、在 $A \gg \ell$ 时按 $A^{-3/2}$ 下

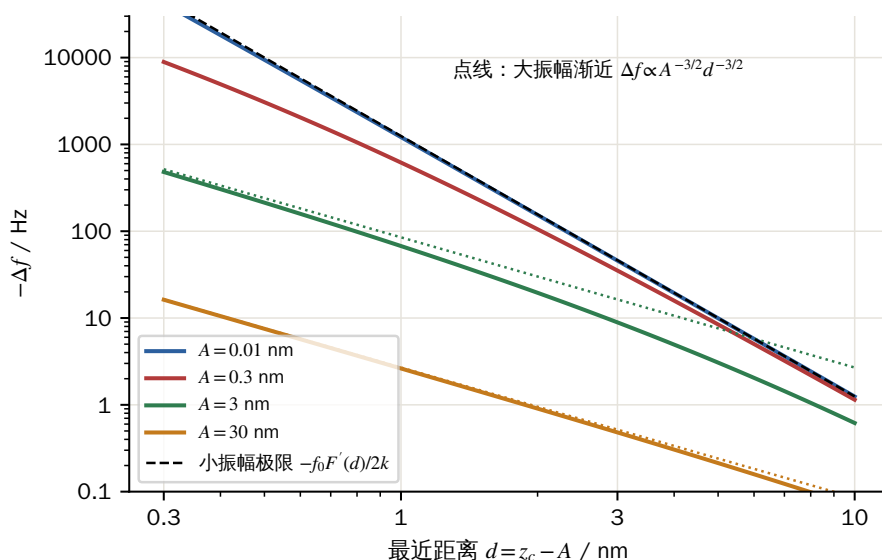


图7 球形针尖受范德瓦尔斯力 ($H = 10^{-19}$ J, $R = 10$ nm) 时, 频移 $-\Delta f$ 随最近距离 d 的变化 ($k = 40$ N/m, $f_0 = 300$ kHz)。实线由式 (7.7) 数值积分 (并与式 (7.6) 交叉核对, 差别 $< 0.2\%$) ; 黑虚线为小振幅极限式 (7.5), 点线为大振幅渐近式 (7.8) ($A = 30$ nm、 $d = 0.3$ nm 处两者相差 0.7%)。

降, 这一点偏向小振幅。信噪比 $\propto A \langle F' \rangle$ 因而在 $A \approx \ell$ 时最大 (Giessibl 等人的分析 [2]); 大振幅时长程的范德瓦尔斯背景占比也会上升。Gross 等人用 $A = 20$ pm 才能把 CO 针尖与分子之间亚埃尺度的短程力分辨出来 [10, 12]。

交互演示：FM-AFM 频移与振幅。 上图为 $-\Delta f$ 随最近距离 d 的双对数曲线 (虚线为小振幅极限), 下图为一个振动周期内的半圆权重、力梯度 F' 及其乘积; 调节振幅 A 与传感器, 观察大振幅时只有下转折点附近起作用、 $\Delta f \propto A^{-3/2}$, 并检查稳定判据 $kA > \max |F|$ 。

网页版中此处为可调参数的交互动画 (演示编号 afm-fm)。

7.4 振幅调制：品质因数的双重作用

推导：力梯度引起的振幅变化

1. 驱动频率 ω_d 固定。由式 (7.4), 力梯度把共振频率移到 $\omega'_0 \approx \omega_0(1 - F'/2k)$, 即 $\delta\omega_0 = -\omega_0 F'/(2k)$ 。
2. 由式 (7.3), A 只依赖于 $\eta = 2Q(\omega_d - \omega_0)/\omega_0$ 。 ω_0 变化 $\delta\omega_0$ 相当于 η 变化 $\delta\eta = -2Q \delta\omega_0/\omega_0 = QF'/k$ 。
3. 一阶近似 $\delta A \approx (dA/d\eta) \delta\eta$ 。 $dA/d\eta = -A_{\max} \eta / (1 + \eta^2)^{3/2}$, 令其导数为零得斜率最大处 $\eta = \pm 1/\sqrt{2}$, 最大斜率 $|dA/d\eta|_{\max} = A_{\max} \cdot \frac{1/\sqrt{2}}{(3/2)^{3/2}} = \frac{2}{3\sqrt{3}} A_{\max}$ 。
4. 于是在最大斜率处驱动 ($\omega_d = \omega_0[1 \pm 1/(\sqrt{8}Q)]$) 时

$$|\delta A| \approx \frac{2Q}{3\sqrt{3}} A_{\max} \frac{|F'|}{k}. \quad (7.9)$$

要点：Q 的双重作用

式 (7.9) 表明 AM 的灵敏度正比于 Q ：共振越尖锐，同样的频率移动造成的振幅变化越大。但振幅不能瞬时跟上：由受迫振子的暂态，新稳态要经过时间 $\tau = 2Q/\omega_0$ 才建立 (图 8b)。真空中 $Q \sim 3 \times 10^4$ 、 $f_0 \sim 70$ kHz 时 $\tau \approx 0.14$ s，逐点成像慢得无法接受。Albrecht 等人因此改用 FM：自激振荡的频率在一个周期内就跟随 k_{eff} 变化，带宽不再受 Q 限制，而高 Q 反而降低频率噪声 (第 8.5 节) [7]。空气和液体中 Q 低，AM (轻敲) 模式简单可靠，至今仍是最常用的成像模式。

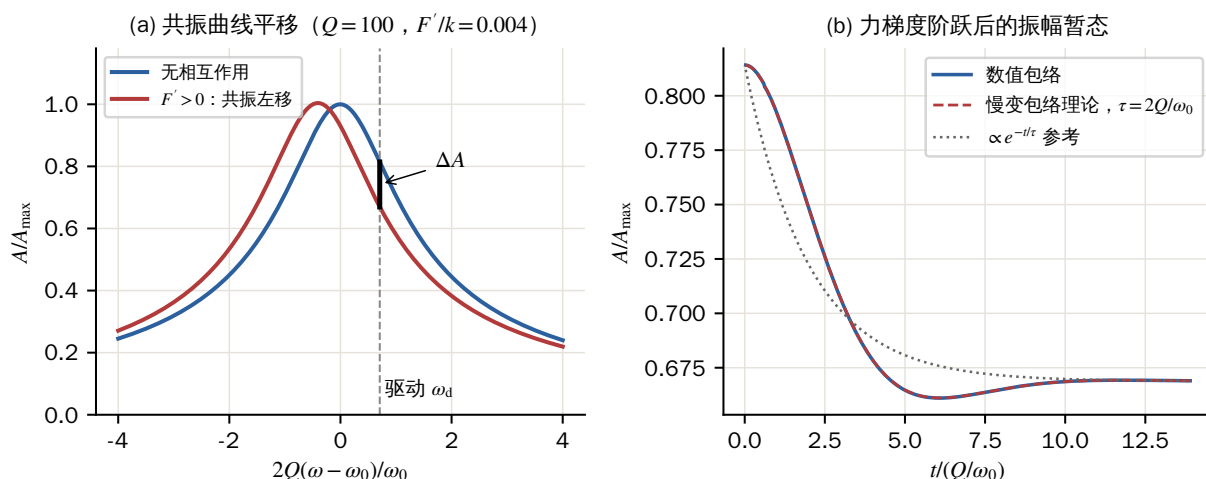


图 8 AM 模式。(a) $Q = 100$ 、 $F'/k = 0.004$ 时共振曲线左移，在高频侧最大斜率点 $\omega_d = \omega_0[1 + 1/(\sqrt{8}Q)]$ 驱动，振幅下降 δA ；数值结果 $\delta A/A_{\text{max}} = -0.145$ ，式 (7.9) 的线性估计为 -0.154 。(b) $t = 0$ 时力梯度阶跃，龙格-库塔积分得到的振幅包络 (实线) 与慢变包络理论 (虚线，衰减时间 $\tau = 2Q/\omega_0$ ，叠加失谐引起的拍) 重合。

交互演示：振幅调制。上图：固定驱动频率下，力梯度使共振曲线平移、振幅改变；下图：力梯度突然改变后振幅的暂态 (数值积分)。调节 Q ，比较灵敏度 $\propto Q$ 与响应时间 $\tau = 2Q/\omega_0$ 的权衡。

网页版中此处为可调参数的交互动画 (演示编号 afm-am)。

8 热噪声：能量均分、功率谱与标定

8.1 能量均分：悬臂在室温下抖多大

前置知识：玻尔兹曼分布与能量均分

与温度 T 的环境处于热平衡的系统，处于能量为 E 的状态的概率正比于玻尔兹曼因子 $e^{-E/k_B T}$ 。若某个坐标 q 只以二次型 $\frac{1}{2}\kappa q^2$ 出现在能量中，则 q 服从高斯分布 $p(q) \propto e^{-\kappa q^2/2k_B T}$ ，其平均

$$\langle \frac{1}{2}\kappa q^2 \rangle = \frac{\int \frac{1}{2}\kappa q^2 e^{-\kappa q^2/2k_B T} dq}{\int e^{-\kappa q^2/2k_B T} dq} = \frac{1}{2}k_B T, \quad (8.1)$$

用到高斯积分 $\int x^2 e^{-ax^2} dx / \int e^{-ax^2} dx = 1/(2a)$ 。这就是**能量均分定理**：每个二次型自由度平均分得 $\frac{1}{2}k_B T$ ，与 κ 无关。注意它只要求热平衡，与阻尼机制无关。

推导：各阶模的热振动与端部总均方位移

1. 由式 (5.14)，悬臂的能量是各阶模能量之和 $\sum_n (\frac{1}{2}m_n \dot{q}_n^2 + \frac{1}{2}k_n q_n^2)$ ，没有交叉项。玻尔兹曼因子因而分解为各模因子之积：各 q_n 统计独立， $\langle q_m q_n \rangle = 0$ ($m \neq n$)。
2. 对每个模用式 (8.1)： $\langle q_n^2 \rangle = k_B T / k_n$ 。
3. 针尖位移 $u(L) = \sum_n q_n$ ($\phi_n(L) = 1$)，其均方值 $\langle u(L)^2 \rangle = \sum_n \langle q_n^2 \rangle$ (交叉项为零)，再用柔度求和规则式 (5.15)：

$$\langle u(L)^2 \rangle = k_B T \sum_n \frac{1}{k_n} = \frac{k_B T}{k}, \quad \langle q_1^2 \rangle = \frac{k_B T}{k_1} = 0.971 \frac{k_B T}{k}. \quad (8.2)$$

要点

针尖热振动的总均方位移**精确地**等于 $k_B T / k$ ——好像整根悬臂就是一个刚度为 k 的弹簧。原因是： k 本身就是“所有模并联的柔度之和”。实验中通常只能干净地测量一阶共振峰，它只占 97.1%。数量级 ($T = 300 \text{ K}$, $k_B T = 4.14 \times 10^{-21} \text{ J}$)： $k = 0.1 \text{ N/m}$ 时 $\sqrt{k_B T / k} = 0.20 \text{ nm}$ ； $k = 40 \text{ N/m}$ 时 10 pm ；qPlus ($k = 1800 \text{ N/m}$) 时 1.5 pm ，与 Giessibl 给出的 1.52 pm 一致 [10]。软悬臂的热抖动与原子尺寸相当！

8.2 功率谱密度

能量均分只告诉我们涨落的总大小。要把一阶模的贡献与高阶模、与仪器噪声分开，需要知道涨落在各个频率上的分布。

定义：单边功率谱密度

设 $x(t)$ 是一个平稳的涨落信号（统计性质不随时间变化）。让它通过一个中心频率 f 、带宽 Δf 很窄的理想带通滤波器，输出的均方值记为 $\langle x^2 \rangle_{f, \Delta f}$ ，定义

$$S_x(f) \equiv \lim_{\Delta f \rightarrow 0} \frac{\langle x^2 \rangle_{f, \Delta f}}{\Delta f}, \quad f \geq 0. \quad (8.3)$$

S_x 的单位是 $[x]^2/\text{Hz}$ 。由定义，把所有频带加起来就是总均方值： $\langle x^2 \rangle = \int_0^\infty S_x(f) df$ 。

注：例子与另一种等价定义

(1) 正弦信号 $a \cos(2\pi f_1 t + \varphi)$ 的均方值 $a^2/2$ 全部集中在 f_1 ， $S_x = \frac{a^2}{2} \delta(f - f_1)$ 。(2) **白噪声**： S_x 在所关心的频段内为常数。(3) 数学上等价的定义是

$$S_x(f) = \lim_{T_{\text{rec}} \rightarrow \infty} \frac{2}{T_{\text{rec}}} \left\langle \left| \int_0^{T_{\text{rec}}} x(t) e^{-i2\pi f t} dt \right|^2 \right\rangle,$$

频谱分析仪与 FFT 正是这样计算的；本讲只需要式 (8.3) 的滤波器图像。

推导：线性系统的谱传递

线性系统对频率 f 的正弦输入 $F_0 \cos(2\pi ft)$ 给出稳态输出 $|\chi(f)| F_0 \cos(2\pi ft + \arg \chi)$, $\chi(f)$ 称为**响应函数**。对谐振子，由式 (7.2)，

$$\chi(f) = \frac{1}{k - m\omega^2 + ib\omega}, \quad \omega = 2\pi f. \quad (8.4)$$

把随机输入 $F(t)$ 分解到许多窄频带，每个窄带内的信号近似是频率为 f 、振幅与相位缓慢随机变化的正弦波；线性系统把这个窄带的振幅乘以 $|\chi(f)|$ ，均方值乘以 $|\chi(f)|^2$ 。由式 (8.3)，

$$S_x(f) = |\chi(f)|^2 S_F(f). \quad (8.5)$$

(不同频带的分量互不相关，所以只需逐带相乘，不必考虑交叉项。)

8.3 朗之万方程与涨落-耗散关系**假设：热力的模型**

悬臂周围的气体分子（真空中则是悬臂材料内部的缺陷、声子等耗散通道）一方面造成平均的粘滞阻力 $-b\dot{q}$ ，另一方面给出随机的涨落力 $F_{th}(t)$ ，其平均为零：

$$m\ddot{q} + b\dot{q} + kq = F_{th}(t) \quad (\text{朗之万方程}). \quad (8.6)$$

单次分子碰撞的持续时间（皮秒量级）远短于悬臂周期（微秒量级），所以在 f_0 附近很宽的频段内 F_{th} 是白噪声： $S_F(f) = S_F$ 为常数。

推导： $S_F = 4k_B T b$ ：最简单的涨落-耗散关系

1. 由式 (8.5), $\langle q^2 \rangle = \int_0^\infty S_F |\chi|^2 df = S_F \int_0^\infty \frac{df}{(k - m\omega^2)^2 + b^2\omega^2}$ 。
2. 附录 D 计算这个积分： $\int_0^\infty \frac{df}{(k - m\omega^2)^2 + b^2\omega^2} = \frac{1}{4bk}$ 。于是 $\langle q^2 \rangle = S_F/(4bk)$ 。
3. 热平衡时能量均分要求 $\langle q^2 \rangle = k_B T/k$ 。两式相等：

$$S_F = 4k_B T b \quad (8.7)$$

要点：涨落-耗散关系的含义

随机力的强度不是独立参数：它正比于阻尼 b 和温度 T 。阻尼大的系统，环境“踢”它也踢得狠——同一群分子既是摩擦的来源，也是涨落的来源；两者必须平衡，才能让悬臂的平均能量恰好是 $k_B T$ 。式 (8.7) 与电阻的约翰逊-奈奎斯特噪声 $S_V = 4k_B T R$ 形式完全相同 ($b \leftrightarrow R$)，是涨落-耗散定理最简单的特例。这里的推导用能量均分“反推”了 S_F ，适用前提是：热平衡、线性阻尼、白噪声。

推导：悬臂的热噪声谱

把式 (8.7) 代入式 (8.5)，并用 $b = m\omega_0/Q = k/(\omega_0 Q)$ 改写：

$$S_x(f) = \frac{4k_B T}{k\omega_0 Q} \cdot \frac{1}{(1 - f^2/f_0^2)^2 + (f/f_0 Q)^2}. \quad (8.8)$$

- 低频 ($f \ll f_0$): $S_x(0) = 4k_B T/(k\omega_0 Q)$ ，白噪声台阶；高频 ($f \gg f_0$): $S_x \propto f^{-4}$ 。
- 共振峰: $S_x(f_0) = 4k_B T Q/(k\omega_0)$ ，比台阶高 Q^2 倍 (图 9a)。
- 洛伦兹近似: 在 $|f - f_0| \ll f_0$ 处，与式 (7.3) 同样展开得

$$S_x(f) \approx \frac{S_x(f_0)}{1 + 4Q^2(f - f_0)^2/f_0^2}, \quad \text{半高全宽} \Gamma = \frac{f_0}{Q}. \quad (8.9)$$

其下面积 $\frac{\pi}{2} S_x(f_0) \Gamma = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{4k_B T Q}{k \cdot 2\pi f_0} \cdot \frac{f_0}{Q} = k_B T/k$ ，与能量均分**精确**一致 (不仅是近似)。

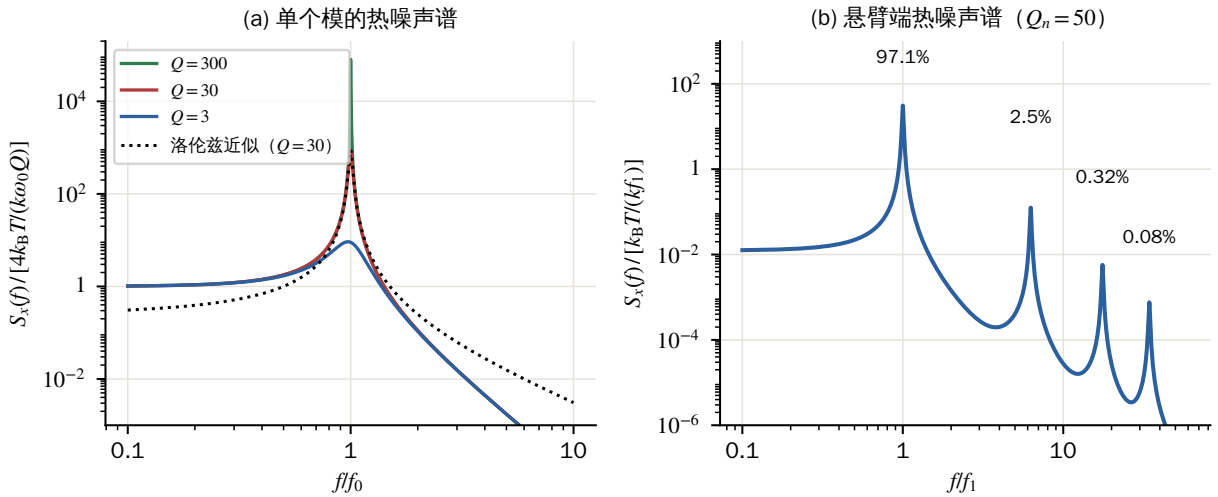


图 9 (a) 式 (8.8) 的无量纲谱, $Q = 3, 30, 300$; 点线为 $Q = 30$ 的洛伦兹近似式 (8.9), 只在峰附近适用。对每个 Q , 数值积分验证了 $\int S_x df = k_B T/k$ 。(b) 把前四阶模 (模态刚度 $k_n = \lambda_n^4 k/12$, 频率 $f_n \propto \lambda_n^2$, $Q_n = 50$) 的谱相加得到的针尖热噪声谱, 峰上数字为各阶占 $k_B T/k$ 的份额 $12/\lambda_n^4$ 。

交互演示：悬臂热噪声的朗之万模拟 (随机力按式 (8.7) 取强度)。上图为位移的时间序列，下图为位移直方图与高斯分布 $\sigma = \sqrt{k_B T/k}$ 的比较；调节 k 、 T 、 Q ，观察均方位移只依赖 $k_B T/k$ ，而 Q 只改变涨落的“节奏” (相关时间：涨落“记住”自身取值的时间尺度，这里是振幅衰减时间 $2Q/\omega_0$) 以及达到同样统计精度所需的记录时长。

网页版中此处为可调参数的交互动画 (演示编号 afm-thermal)。

8.4 热噪声标定法

式 (4.10) 依赖于厚度的三次方，而厚度和杨氏模量 (镀膜、掺杂) 都不准确，标称 k 常有 2 倍以上的不确定性 (表 3 中 TESPA-V2 的范围是 20–80 N/m)。Hutter 与 Bechhoefer 在 1993 年提出 [27]：既然 $\langle q_1^2 \rangle$ 由温度唯一确定，测出热振动的均方值就能反推 k ，无需知道尺寸和材料。

定义：热噪声标定的步骤

1. **偏转灵敏度**：把针尖压在硬样品上，记录光电二极管电压随压电位移的斜率，得到“电压/挠度”的换算系数（此时悬臂呈静挠度形状）。
2. **记录热噪声谱**：悬臂远离样品，测量偏转信号的功率谱，多次平均。
3. **拟合一阶峰**：用式 (8.8)（或洛伦兹形）加上平坦的仪器噪声背景拟合，得到峰下面积，即所测信号在一阶模上的均方值（扣除背景），同时得到 f_0 与 Q 。
4. **计算 k** ：由均方值与能量均分求 k 。所测信号是针尖位移还是倾角，对应的公式不同，见下面的推导。

推导：两种检测方式下的修正因子

1. **直接测针尖位移**（如干涉仪对准针尖）：一阶峰给出 $\langle q_1^2 \rangle = k_B T / k_1$ ，于是先得到模态刚度 k_1 ，再换算 $k = k_1 / 1.030 = 0.971 k_B T / \langle q_1^2 \rangle$ [28, 29]。
2. **光杠杆**：测的是端部倾角 $u'(L)$ 。第 1 步的标定用的是静挠度形状，即把读数解释为“虚拟挠度” $\delta^* \equiv \frac{2L}{3} u'(L)$ （由式 (4.11)；Butt–Jaschke 等文献记作 z^* ）。对一阶模， $u'(L) = q_1 \phi_1'(L)$ ，而 $L \phi_1'(L) = 1.3765$ （附录 E），所以 $\delta_1^* = \frac{2}{3} \times 1.3765 q_1 = 0.9177 q_1$ ：一阶模的倾角比“同样挠度的静态形状”小。于是

$$\langle \delta_1^{*2} \rangle = 0.8422 \langle q_1^2 \rangle = 0.8422 \frac{k_B T}{k_1} = 0.8174 \frac{k_B T}{k} \implies k = 0.817 \frac{k_B T}{\langle \delta_1^{*2} \rangle}. \quad (8.10)$$

若误用 $k = k_B T / \langle \delta_1^{*2} \rangle$ ，会把 k 高估 22%。这一修正由 Butt 与 Jaschke 系统分析 [30]：他们给出所有模之和 $\langle \delta^{*2} \rangle = 4k_B T / 3k$ ，一阶模的因子 0.817 也见于该分析的模式分解，并为后来的标定文献普遍采用 [31]（本讲在附录 E 独立算得 0.81743）。

注：其他误差来源

悬臂通常倾斜约 10° 安装（引入 $\cos^2$ 量级的修正）、激光光斑有限大且不一定在端部、针尖质量改变振型、温度读数等，都会带来百分之几到十几的系统误差；此外还有基于流体阻尼的 Sader 法 [32] 与附加质量法 [21]。热噪声法的长处是非破坏、快速、适用于各种形状。

8.5 最小可测力与力梯度**推导：静态力的热噪声极限**

在带宽 B 内（ $B \ll f_0$ ，即低频的白噪声台阶），热力的均方根为 $\delta F_{\min} = \sqrt{S_F B}$ ：

$$\delta F_{\min} = \sqrt{4k_B T b B} = \sqrt{\frac{4k k_B T B}{\omega_0 Q}} = \sqrt{\frac{4k_B T \sqrt{k m_{\text{eff}}} B}{Q}}. \quad (8.11)$$

最后一步用了 $b = m_{\text{eff}} \omega_0 / Q = \sqrt{k m_{\text{eff}}} / Q$ 。设计启示：要测小力，就要让 $\sqrt{k m_{\text{eff}}} / Q$ 小——软、轻、高 Q 。

推导：FM 检测的频率噪声（结论；推导见附录 D）

自激振荡的悬臂以振幅 A 振动，热力中与位移同相（与速度正交）的分量随机地推前或拖后振动相位，使测得的频率在测量带宽 B 内有均方根涨落 δf 。附录 D 用慢变振幅-相位方程推出

$$\frac{\delta f}{f_0} = \sqrt{\frac{k_B T B}{\pi k A^2 f_0 Q}}, \quad \delta F'_{\min} = \frac{2k \delta f}{f_0} = \sqrt{\frac{4k k_B T B}{\omega_0 Q \langle q_{\text{osc}}^2 \rangle}}, \quad \langle q_{\text{osc}}^2 \rangle = \frac{A^2}{2}, \quad (8.12)$$

这正是 Albrecht 等人 1991 年的结果 [2, 7]；其中 B 为频率检测的单边带宽（第 7 节的前置知识）， A 为峰值振幅。第二式由式 (7.5) 把频率噪声换算成力梯度噪声。

要点：式 (8.12) 的物理意义与适用条件

$(\delta f/f_0)^2 \sim \frac{k_B T}{k A^2/2} \cdot \frac{1}{Q} \cdot \frac{B}{f_0}$ ：热能与振动能之比、除以 Q 、乘以“测量带宽占振荡频率的比例”。所以大振幅、高 Q 、窄带宽都降低噪声；与 AM 不同， Q 高并不拖慢 FM 的响应。条件：只计悬臂自身的热噪声，忽略检测器噪声（检测器噪声给出 $\delta f \propto B^{3/2}$ 的另一项，在高 Q 或大带宽时往往占主导 [2]）。

9 决赛风格例题

以下四题的数值答案均由 `scripts/verify_examples.py` 重算核对。

例题 1：偏压针尖的跳触——范德瓦尔斯力、静电力与 Kelvin 补偿

在干燥氮气中用导电针尖（半径 $R = 10 \text{ nm}$ ）、软悬臂（ $k = 0.05 \text{ N/m}$ ）对一块惰性的导电样品（如新解理的石墨）测力-距离曲线。针尖与样品之间加偏压 U ；两种材料的功函数不同，存在接触电势差 U_c ，所以真正起作用的电压是 $U - U_c$ 。范德瓦尔斯部分仍用 DMT 模型式 (6.6)（ $H = 1.0 \times 10^{-19} \text{ J}$ ， $a_0 = 0.165 \text{ nm}$ ）。

- 幂律吸引的跳触。**设吸引力为 $F = -\Gamma_n/z^n$ （强度系数 $\Gamma_n > 0$ ， $n > 0$ ；用 Γ 以免与分子对势系数 C 混淆）。证明跳触时的切点与基座位置为 $z^* = (n\Gamma_n/k)^{1/(n+1)}$ 、 $z_0^* = (1+1/n)z^*$ ，跳触前悬臂力为 $-kz^*/n$ ；验证 $n = 2$ 时回到式 (6.10)。
- 静电力。**两块平行导体板相距 Z 、电压 U' 时，单位面积受吸引压强 $\varepsilon_0 U'^2/(2Z^2)$ 。把球形针尖看成许多同心圆环，每个圆环与样品之间近似为平行板（间隙 $Z = z + r^2/2R$ ， $z \ll R$ ）。证明球-平面静电力为 $F_e = -\pi\varepsilon_0 R(U - U_c)^2/z$ 。
- 用 (1)(2) 的幂律式，分别求 $U = U_c$ 与 $|U - U_c| = 1.0 \text{ V}$ 时（后者分“只计静电力”与“两种力合计”两种情形）的 z^* 、 z_0^* 。
- 检查近似。**(3) 中 z^*/R 有多大？(2) 中抛物面近似 $Z = z + r^2/2R$ 的误差是什么量级？用真实球面 $Z = z + R - \sqrt{R^2 - r^2}$ （只计下半球）重做 (2) 的积分，证明 $F_e = -\pi\varepsilon_0 (U - U_c)^2 [R/z - \ln(1 + R/z)]$ ；范德瓦尔斯力改用附录 B 精确式 (B.1) 对 z 求导所得的力，数值重算 (3) 的 z_0^* ，并评论。
- 实验者希望静电力在跳触点附近不超过范德瓦尔斯力的 10%， $|U - U_c|$ 必须补偿到多小？

说明怎样利用 $z_0^*(U)$ 的测量求出 U_c 。

6. 若要静态下完全不跳触, $U = U_c$ 与 $|U - U_c| = 1 \text{ V}$ 时 k 各至少多大?

7. 取 $U = U_c$ 。回撤时在何处脱离? 求一个逼近-回撤循环中耗散的能量 (用 eV 表示), 说明主要来自哪一次跳变; 用 $V = -HR/6z$ (而非附录 B 的精确式) 带来的误差有多大? 由拉脱力求表面能 $\gamma = |W(a_0)|/2$, 并评论本模型对超高真空中洁净硅表面是否适用。

解答

(1) 相切 $F'(z^*) = k$: $F' = n\Gamma_n/z^{n+1}$, 故 $z^{*n+1} = n\Gamma_n/k$ 。相交 $z_0^* = z^* - F(z^*)/k = z^* + \Gamma_n/(kz^{*n}) = z^* + z^*/n$ (用了 $\Gamma_n/k = z^{*n+1}/n$)。跳触前悬臂力 $k(z^* - z_0^*) = -kz^*/n$ 。
 $n = 2$: $z^* = (2\Gamma_2/k)^{1/3} = (HR/3k)^{1/3}$, $z_0^* = \frac{3}{2}z^*$, 与式 (6.10) 一致。【要点: 力律越“软” (n 越小), 预先被吸下的比例 $1/n$ 越大, 跳触距离对 k 的依赖 $k^{-1/(n+1)}$ 越强。】

(2) 半径 r 、宽 dr 的圆环面积 $2\pi r dr$ 。由 $Z = z + r^2/2R$ 得 $dZ = r dr/R$, 所以 $2\pi r dr = 2\pi R dZ$ 。合力

$$F_e = - \int_z^\infty \frac{\varepsilon_0(U - U_c)^2}{2Z^2} 2\pi R dZ = - \frac{\pi\varepsilon_0 R(U - U_c)^2}{z}.$$

这正是第 6 节的 Derjaguin 近似: $F = 2\pi R \int_z^\infty p(Z) dZ$ 。它的误差留到 (4) 讨论。这是 $n = 1$ 的幂律, $\Gamma_1 = \pi\varepsilon_0 R(U - U_c)^2$ 。

(3) (主项估计) $U = U_c$: $\Gamma_2 = HR/6 = 1.667 \times 10^{-28} \text{ J m}$, $z^* = (2\Gamma_2/k)^{1/3} = 1.88 \text{ nm}$, $z_0^* = 2.82 \text{ nm}$ 。只计静电力 (1 V): $\Gamma_1 = 2.78 \times 10^{-19} \text{ N m}$, $z^* = \sqrt{\Gamma_1/k} = 2.36 \text{ nm}$, $z_0^* = 2z^* = 4.72 \text{ nm}$ 。两者合力: 相切条件 $2\Gamma_2/z^3 + \Gamma_1/z^2 = k$ 无简单解析解, 迭代 (如 $z \leftarrow \sqrt{(\Gamma_1 + 2\Gamma_2/z)/k}$, 从 $z = 2.36 \text{ nm}$ 出发) 得 $z^* = 2.82 \text{ nm}$, $z_0^* = z^* - F(z^*)/k = 5.21 \text{ nm}$ 。1 V 的偏压使跳触距离几乎翻倍。

(4) $z^*/R \approx 0.19 - 0.28$, 并不 $\ll 1$ 。抛物面近似高估了远处圆环的面积: 真实球面上 $dZ = r dr/\sqrt{R^2 - r^2}$, 即 $2\pi r dr = 2\pi(R + z - Z)dZ$, 比 $2\pi R dZ$ 少了 $-2\pi(Z - z)dZ$ 。静电压强与 Hamaker 能量的核一样按 Z^{-2} 衰减, 这一项积分后按对数增长, 相对误差为 $(z/R) \ln(R/z)$ 量级——与第 6 节讨论的 Hamaker 能量误差同一机制, 而不是 $\mathcal{O}(z/R)$ 。精确积分 (Z 从 z 到 $z + R$):

$$F_e = -\pi\varepsilon_0(U - U_c)^2 \int_z^{z+R} \frac{R + z - Z}{Z^2} dZ = -\pi\varepsilon_0(U - U_c)^2 \left[\frac{R}{z} - \ln\left(1 + \frac{R}{z}\right) \right].$$

在 $z = 1.9, 2.4, 2.8 \text{ nm}$ 处它分别只有抛物面式的 0.65、0.61、0.57; 同处范德瓦尔斯力的精确值也只有 $-HR/6z^2$ 的 0.84、0.80、0.77。数值重算相切条件: 纯范德瓦尔斯 $z_0^* = 2.67 \text{ nm}$ (主项 2.82), 只计静电力 $z_0^* = 3.77 \text{ nm}$ (4.72), 两者合力 $z_0^* = 4.25 \text{ nm}$ (5.21)。定性结论 (偏压使跳触距离明显增大) 不变, 但 (3) 的数值只是主项估计, 有 5%–25% 的偏差。模型本身还有局限: 真实针尖的锥体和悬臂在几纳米以外也贡献静电吸引, 只算球得到的是吸引力的下限。

(5) 比值 $F_e/F_{\text{vdW}} = \frac{\pi\varepsilon_0 R(U - U_c)^2/z}{HR/6z^2} = \frac{6\pi\varepsilon_0(U - U_c)^2 z}{H}$ 。在 $z \approx z^* = 1.88 \text{ nm}$ 处要求小于 0.1: $|U - U_c| < 0.18 \text{ V}$ (用 (4) 的精确式在精确切点 1.82 nm 处计算得 0.20 V , 量级不变)。由于 $F_e \propto (U - U_c)^2$, $z_0^*(U)$ 关于 $U = U_c$ 对称并在该处取极小; 在几个偏压下测跳触位置, 拟合抛物线状曲线的对称轴即得 U_c 。这正是 Kelvin 探针力显微镜“施加偏压使静电力 (或其调制分量) 为零”的思想。

(6) 静态不跳触要求 $k > \max F'$, 最大值在 $z = a_0$: $U = U_c$ 时 $HR/(3a_0^3) = 74 \text{ N/m}$; 1 V 时再加 $\Gamma_1/a_0^2 = 10 \text{ N/m}$ ($z = a_0 \ll R$, 抛物面近似此时足够准确), 需 $k > 84 \text{ N/m}$ 。

(7) 脱离: $z_0^{\text{off}} = a_0 + F_{\text{ad}}/k$, $F_{\text{ad}} = HR/(6a_0^2) = 6.12 \text{ nN}$, $z_0^{\text{off}} = 123 \text{ nm}$, 悬臂读到拉脱力 6.12 nN 。脱离前悬臂储能 $F_{\text{ad}}^2/(2k) = 3.75 \times 10^{-16} \text{ J} = 2.34 \times 10^3 \text{ eV}$, 跳变后转为振动并被阻尼耗散; 跳触时的耗散只有几 eV (量级为 $|V(a_0)| = HR/6a_0 = 6.3 \text{ eV}$)。所以总耗散约 2.3 keV , 几乎全部来自脱离, $\propto F_{\text{ad}}^2/k$: 悬臂越软越大。近似式 $V = -HR/6z$ 在 $z = a_0$ 处比精确式偏大 7% (附录 B: 比值 0.93), 即约 0.45 eV , 对 keV 量级的结论没有影响。表面能 $\gamma = H/(24\pi a_0^2) = 0.049 \text{ J/m}^2$, 是范德瓦尔斯固体的典型量级 [22]。洁净硅在超高真空中有悬挂键, 针尖接触后会形成共价键, 粘附大一个数量级以上, 本模型不适用——这也是本题选惰性样品、在气氛中测量的原因。

例题 2: 用 qPlus 看见分子的化学结构

Gross 等人的并五苯成像使用 qPlus 传感器: $k = 1800 \text{ N/m}$, $f_0 = 23.0 \text{ kHz}$, 振幅 $A = 20 \text{ pm}$, 温度 5 K ; 图像中的频移在 -2 到 -7 Hz 之间 [10, 12]。另取 $Q = 5 \times 10^4$ (采用同类设置的文献给出的典型值 [33]) 与频率检测带宽 $B = 10 \text{ Hz}$ (题设值)。

1. 把频移范围换算为力梯度 F' , 并检验小振幅公式式 (7.5) 的两个前提。
2. 在某一位置上方测得频移随振动中心高度的变化 $\Delta f(z_c) = -\Delta f_1 e^{-(z_c - z_1)/\ell}$, $\Delta f_1 = 5.0 \text{ Hz}$, 衰减长度 $\ell = 50 \text{ pm}$ 。(a) 在小振幅近似下求 $F'(z)$ 与 $F(z)$ (取 $F(\infty) = 0$), 给出 $F(z_1)$ 。(b) 用式 (7.7) 把 $\langle F' \rangle$ 展开到 $(A/\ell)^2$, 估计小振幅近似的误差。
3. 求热噪声决定的频率噪声 δf 与最小可测力梯度 $\delta F'_{\min}$; 若在室温下工作呢?
4. 若用 $k = 40 \text{ N/m}$ 的硅悬臂以同样的 20 pm 振幅工作, 按两条稳定判据会遇到什么问题?
5. 保持最近距离 $d = z_1$ 不变, 比较 $A = 20 \text{ pm}$ 与 $A = 10 \text{ nm}$ 时短程力引起的频移与热频率噪声之比 (信噪比)。

解答

(1) $F' = -2k\Delta f/f_0$: $\Delta f = -2 \text{ Hz}$ 对应 $F' = 0.31 \text{ N/m}$, -7 Hz 对应 1.10 N/m 。前提一 $F'/k \leq 6 \times 10^{-4} \ll 1$ (满足); 前提二要求 A 远小于力梯度的变化尺度, 见 (2b)。

(2)(a) $F'(z) = -\frac{2k}{f_0}\Delta f = \frac{2k\Delta f_1}{f_0}e^{-(z-z_1)/\ell}$, $F'(z_1) = 0.783 \text{ N/m}$ 。由 $F(\infty) = 0$, $F(z) = -\int_z^\infty F'(z')dz' = -\frac{2k\ell\Delta f_1}{f_0}e^{-(z-z_1)/\ell}$, $F(z_1) = -39 \text{ pN}$ 。【要点: 频移给梯度, 力要积分; 符号: 吸引。】

(2)(b) 令 $\alpha = A/\ell = 0.4$, $F'(z_c + As) = F'(z_c)e^{-\alpha s} = F'(z_c)(1 - \alpha s + \frac{1}{2}\alpha^2 s^2 - \dots)$ 。半圆权重下 $\langle s \rangle = 0$, $\langle s^2 \rangle = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 s^2 \sqrt{1-s^2} ds = \frac{1}{4}$, 所以 $\langle F' \rangle = F'(z_c)(1 + \alpha^2/8 + \dots) = 1.020 F'(z_c)$ (选读: 精确结果为 $2I_1(\alpha)/\alpha = 1.0201$, I_1 为修正贝塞尔函数, 此处仅用于核对, 不要求掌握)。小振幅近似的误差仅 2%。

(3) 由式 (8.12): $k_B T = 6.90 \times 10^{-23} \text{ J}$, $kA^2 = 7.2 \times 10^{-19} \text{ J}$,

$$\frac{\delta f}{f_0} = \sqrt{\frac{6.90 \times 10^{-23} \times 10}{\pi \times 7.2 \times 10^{-19} \times 23000 \times 5 \times 10^4}} = 5.2 \times 10^{-7},$$

$$\delta f = 0.012 \text{ Hz}, \quad \delta F'_{\min} = \frac{2k \delta f}{f_0} = 1.9 \times 10^{-3} \text{ N/m}.$$

信号 $F' \sim 0.3\text{--}1 \text{ N/m}$, 信噪比约 10^2 以上。室温下 $\delta f \propto \sqrt{T}$ 增大 $\sqrt{60} = 7.7$ 倍, 为 0.09 Hz 。

(4) 动态判据 $kA = 40 \times 20 \text{ pm} = 0.8 \text{ nN}$, 而针尖尖端的范德瓦尔斯力与化学键力可达 nN 量级, 回复力可能不足, 针尖会被“粘住”; 静态判据 $k = 40 \text{ N/m}$ 与单个化学键的力梯度 (几十 N/m 量级) 相当, 振动中途就可能失稳。qPlus 的 $kA = 36 \text{ nN}$ 、 $k = 1800 \text{ N/m}$ 两条都满足——这正是它能用皮米振幅的原因 [2]。

(5) 以 $\Delta f_s = \frac{f_0}{2k} F'(d)$ 为参照 ($= 5 \text{ Hz}$)。 $A = 20 \text{ pm}$: 半圆权重数值积分得 $\langle F' \rangle = 0.684 F'(d)$, 频移 3.4 Hz , 噪声 0.012 Hz , 信噪比约 290。 $A = 10 \text{ nm} \gg \ell$: 仿照式 (7.8) 的推导, $\langle F' \rangle \approx \sqrt{2/\pi} (\ell/A)^{3/2} F'(d) = 2.8 \times 10^{-4} F'(d)$, 频移 1.4 mHz ; 噪声按 $1/A$ 降为 $2.4 \times 10^{-5} \text{ Hz}$, 信噪比约 60。小振幅的信噪比高约 5 倍, 而且大振幅时长程范德瓦尔斯背景 ($\propto A^{-3/2} d^{-3/2}$, 衰减慢) 占比更大。

例题 3: 热噪声标定中的光斑位置

一根矩形接触模式悬臂用光杠杆检测, 激光光斑打在 $x_s = 0.90L$ 处 (而不是端部)。先把针尖压在硬样品上标定偏转灵敏度 (此时悬臂呈端部受力的静挠度形状, 光斑位置不变), 然后在 $T = 298 \text{ K}$ 下测量仪器报告的“挠度” δ^* 的热噪声谱, 扣除平坦背景后一阶峰可用式 (8.8) 很好地拟合: $f_0 = 10.0 \text{ kHz}$, $Q = 25$, 峰值 $S_{\delta^*}(f_0) = 107 \text{ pm}^2/\text{Hz}$ 。已知一阶振型在 $x = 0.90L$ 处 $L\phi'_1 = 1.3745$ 、 $\phi_1 = 0.8624$ ($\phi_1(L) = 1$ 归一)。

1. 证明对阻尼振子谱, 峰下面积恰为 $\pi f_0 S(f_0)/(2Q)$, 并求 $\langle \delta_1^{*2} \rangle$ 。
2. 光杠杆读数正比于光斑处的倾角 $u'(x_s)$ 。证明一般地 $k = \mathcal{K}(x_s) k_B T / \langle \delta_1^{*2} \rangle$, 其中 $\mathcal{K}(x_s) = [\phi'_1(x_s)/\psi'(x_s)]^2 (k/k_1)$, $\psi = (3\xi^2 - \xi^3)/2$ 为归一化的静挠度形状; 求 $\mathcal{K}(L)$ 与 $\mathcal{K}(0.9L)$ 。
3. 分别按“不修正”、“按端部光斑修正”、“按实际光斑修正”计算 k , 并评论光斑位置不确定 $\pm 0.1L$ 带来的系统误差。
4. 若改用干涉仪测光斑处的位移、并同样用静挠度形状换算到端部, 修正因子变为什么? 在 $x_s = L$ 与 $0.9L$ 处各为多少?
5. 求该悬臂在低频、带宽 $B = 1 \text{ kHz}$ 内的热力噪声 $\delta F_{\min}$ 。

解答

(1) 由式 (8.8), $S(f_0) = 4k_B T Q / (k \omega_0)$, 而 $\int S df = k_B T / k$, 两式相除: $\int S df = \frac{\omega_0 S(f_0)}{4Q} = \frac{\pi f_0 S(f_0)}{2Q}$ ——精确结果, 与洛伦兹近似的 $\frac{\pi}{2} S_0 \Gamma$ ($\Gamma = f_0/Q$) 相同。代入: $\langle \delta_1^{*2} \rangle = \pi \times 10^4 \times 107 \times 10^{-24} / 50 = 6.72 \times 10^{-20} \text{ m}^2$, 均方根 0.259 nm 。

(2) 标定时: 端部挠度 δ 对应光斑倾角 $\delta \psi'(x_s)$, 所以仪器把倾角 θ_s 报告为 $\delta^* = \theta_s / \psi'(x_s)$ 。热振动中一阶模给出 $\theta_s = q_1 \phi'_1(x_s)$, 故 $\delta_1^* = q_1 \phi'_1(x_s) / \psi'(x_s)$, $\langle \delta_1^{*2} \rangle = [\phi'_1 / \psi']^2 k_B T / k_1 = \mathcal{K} k_B T / k$, 即所证。 $L\psi'(\xi) = \frac{3}{2}(2\xi - \xi^2)$: $\xi = 1$ 时 1.5, $\xi = 0.9$ 时 1.485。于是 $\mathcal{K}(L) = (1.3765/1.5)^2 / 1.0302 = 0.8174$ (回到式 (8.10)), $\mathcal{K}(0.9L) = (1.3745/1.485)^2 / 1.0302 = 0.832$ 。

(3) $k_B T = 4.11 \times 10^{-21} \text{ J}$ 。不修正: $k = k_B T / \langle \delta_1^2 \rangle = 0.0612 \text{ N/m}$; 按端部修正: $0.8174 \times 0.0612 = 0.0500 \text{ N/m}$; 按实际光斑: $0.832 \times 0.0612 = 0.0509 \text{ N/m}$ 。光斑从 L 移到 $0.9L$, $\mathcal{K}$ 变化 1.7%; 再移到 $0.8L$ 时 $\mathcal{K} = 0.867$, 变化 6%。所以光斑位置要控制在 $\pm 0.1L$ 以内, 才能把这项误差压到几个百分点; 不修正的 22% 误差则大得多。

(4) 干涉仪读的是位移 $u(x_s)$, 换算到端部时除以 $\psi(x_s)$, 于是因子为

$$\mathcal{K}_{\text{int}}(x_s) = \left[\frac{\phi_1(x_s)}{\psi(x_s)} \right]^2 \frac{k}{k_1}.$$

$x_s = L$ 时 $\mathcal{K}_{\text{int}} = 1/1.0302 = 0.971$; $x_s = 0.9L$ 时 $\psi = 0.8505$,

$$\mathcal{K}_{\text{int}}(0.9L) = \frac{(0.8624/0.8505)^2}{1.0302} = 0.998.$$

【要点: 修正因子取决于“测什么量、在哪里测、用什么形状标定”。】

(5) 取 $k = 0.0509 \text{ N/m}$: $b = k/(\omega_0 Q) = 3.24 \times 10^{-8} \text{ kg/s}$, $S_F = 4k_B T b = 5.3 \times 10^{-28} \text{ N}^2/\text{Hz}$, $\sqrt{S_F} = 23 \text{ fN}/\sqrt{\text{Hz}}$, $\delta F_{\text{min}} = \sqrt{S_F B} = 0.73 \text{ pN}$ 。

例题 4: 又软又快——高速 AFM 的悬臂设计

高速 AFM 要在水中逐点成像生物分子: 既要软 ($k \lesssim 0.2 \text{ N/m}$, 避免压坏分子), 又要快 (共振频率高, 响应时间短)。悬臂用硅 ($E = 169 \text{ GPa}$, $\rho = 2330 \text{ kg/m}^3$) 制作, 矩形截面。

1. 证明: 若 L 、 w 、 h 同比例缩小为原来的 κ 倍 ($\kappa < 1$), 则 $k \propto \kappa$ 、 $f_1 \propto 1/\kappa$; 而只把悬臂减薄会使 k 与 f_1 同时下降。
2. 要求空气中 $k = 0.20 \text{ N/m}$ 、 $f_1 = 1.2 \text{ MHz}$ (与 Ando 等人小悬臂在空气中的 $1.3\text{--}1.8 \text{ MHz}$ 同量级 [11]), 宽度取 $w = 2.0 \mu\text{m}$, 求 L 、 h 、总质量 m 与有效质量 m_{eff} 。
3. 与同样 $k = 0.20 \text{ N/m}$ 、但 $w = 20 \mu\text{m}$ 、 $h = 0.50 \mu\text{m}$ 的“常规”软悬臂比较: 后者 L 与 f_1 是多少? 在 Q 相同时, 两者的热噪声 $\sqrt{S_F}$ 与振幅响应时间 $\tau = 2Q/\omega_0$ 之比是多少?
4. Ando 等人的高速 AFM 每 80 ms 采集一幅 100×100 像素的图像 [11]。若 AM 成像要求振幅响应时间不超过每个像素的停留时间, 在水中 (设小悬臂 $f_1 = 0.60 \text{ MHz}$ 、 $Q = 2$; 常规悬臂 $f_1 = 40 \text{ kHz}$ 、 $Q = 2$) 哪一种满足?

解答

(1) $k = Ewh^3/(4L^3)$: 分子 $\propto \kappa^4$ 、分母 $\propto \kappa^3$, $k \propto \kappa$; $f_1 = 0.1615 (h/L^2) \sqrt{E/\rho} \propto \kappa/\kappa^2 = 1/\kappa$ 。只减薄 ($h \rightarrow \kappa h$): $k \propto \kappa^3$ 、 $f_1 \propto \kappa$, 同时下降。【要点: 要同时“软”和“快”必须小型化。】

(2) 由 f_1 定 $h/L^2 = f_1/(0.1615 \sqrt{E/\rho}) = 1.2 \times 10^6/(0.1615 \times 8517) = 872 \text{ m}^{-1}$ 。代入 $k = \frac{Ew}{4} (h/L^2)^3 L^3$: $L^3 = \frac{4k}{Ew (h/L^2)^3}$, 得 $L = 15.3 \mu\text{m}$, $h = 872 \times L^2 = 0.204 \mu\text{m}$ 。 $m = \rho w L h = 1.45 \times 10^{-14} \text{ kg}$, $m_{\text{eff}} = 0.243m = 3.5 \times 10^{-15} \text{ kg}$ 。

(3) $L = (Ewh^3/4k)^{1/3} = 80.8 \mu\text{m}$, $f_1 = 105 \text{ kHz}$ 。 $S_F = 4k_B T k/(\omega_0 Q)$: 同 k 、同 Q 时 $\sqrt{S_F} \propto f_1^{-1/2}$, 小悬臂低 $\sqrt{1200/105} = 3.4$ 倍 (室温 $Q = 1$ 时分别为 $21 \text{ fN}/\sqrt{\text{Hz}}$ 与 $71 \text{ fN}/\sqrt{\text{Hz}}$); $\tau \propto 1/f_1$, 小悬臂快 11 倍。

(4) 像素停留时间 $80\text{ ms}/10^4 = 8\text{ }\mu\text{s}$ 。小悬臂 $\tau = 2Q/\omega_0 = 4/(2\pi \times 6 \times 10^5) = 1.1\text{ }\mu\text{s}$ ，满足；常规悬臂 $\tau = 4/(2\pi \times 4 \times 10^4) = 16\text{ }\mu\text{s}$ ，不满足。另外， $w = 2\text{ }\mu\text{m}$ 的悬臂要求激光聚焦到微米量级的光斑，这正是 Ando 等人采用“物镜型”偏转检测的原因 [11]。

10 实验与数据处理：钢片悬臂与热噪声谱

注：数据说明

本题表 4-6 均为**模拟数据**：由第一性原理模型（式 (5.10)、附录 C 的精确频率方程、式 (8.8)）加高斯噪声生成，生成代码为 `scripts/exp_data.py`（随机种子 20261003），其中有意加入了夹持柔性等系统误差。

前置知识：最小二乘直线拟合

对 n 组数据 (x_i, y_i) 拟合 $y = c_0 + c_1x$ ，使残差平方和最小，得

$$c_1 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2}, \quad c_0 = \bar{y} - c_1\bar{x}, \quad (10.1)$$

$$\sigma_{c_1} = \sqrt{\frac{s_r^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}}, \quad \sigma_{c_0} = \sqrt{s_r^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right)}, \quad s_r^2 = \frac{\sum (y_i - c_0 - c_1x_i)^2}{n-2}. \quad (10.2)$$

s_r 是残差的标准差估计（自由度 $n-2$ ）。间接量 $g(c_0, c_1)$ 的不确定度按误差传递 $\sigma_g^2 \approx (\partial g/\partial c_0)^2 \sigma_{c_0}^2 + (\partial g/\partial c_1)^2 \sigma_{c_1}^2$ （本题中 c_0, c_1 的相关性对结论影响不大，可忽略）。

10.1 题目

一根弹簧钢片（宽 $w = 25.0\text{ mm}$ ，千分尺测得厚度 $h = (0.600 \pm 0.010)\text{ mm}$ ，密度 $\rho = 7.85 \times 10^3\text{ kg/m}^3$ ）一端用台钳夹紧，宽面竖直放置，使钢片在水平面内振动（重力只作用在刚度极大的宽度方向，不影响这一振动）。拨动自由端，在自由端附近放一个光电门（不接触钢片，不附加质量），由计时器记录 20 个完整周期的时间得到一阶频率；(a) 部分频率的相对不确定度约 0.4%，(b) 部分加了端质量后振动衰减较慢、可数更多周期，约 0.2%。 L 为从钳口量起的伸出长度。

(a) **频率与长度** 测得表 4。

表 4 钢片一阶频率 f 随伸出长度 L 的变化（模拟数据）

L / m	0.100	0.120	0.140	0.160	0.180	0.200
f / Hz	45.97	32.12	23.71	18.30	14.44	11.76
L / m	0.220	0.240	0.260	0.280	0.300	
f / Hz	9.79	8.21	7.03	6.07	5.30	

(1) 由欧拉-伯努利梁理论写出 f 与 L 的关系 $f = \Lambda/L^2$ ，给出 Λ 的表达式。

(2) 作 $\ln f - \ln L$ 的最小二乘拟合，求指数 n 及其不确定度。它与 -2 一致吗？

(3) 钳口并非理想固定：钳口内的一小段钢片也参与弯曲，可以用一个等效附加长度 ΔL 描述， $f = \Lambda/(L + \Delta L)^2$ 。设计一个线性化方案，求 Λ 、 ΔL 。

(4) 求钢的杨氏模量 E 及其不确定度。若忽略 ΔL 、直接用 $\overline{fL^2}$ 计算 Λ ， E 偏差多少？钢片很宽 (w/L 达 0.25)，宽板效应（第 4 节末尾的注）会怎样影响 E ？

(b) **端部附加质量** 固定 $L = 250 \text{ mm}$ ，在自由端用小磁铁夹附加质量 m_t （质心在端部，尺寸远小于 L ），测得表 5。

表 5 $L = 250 \text{ mm}$ 时一阶频率随端部附加质量的变化（模拟数据）

m_t / g	0	5	10	15	20	25	30
f / Hz	7.560	5.862	4.904	4.321	3.905	3.599	3.350

(5) 选择合适的变量把数据线性化，用最小二乘求钢片的刚度 k 与有效质量 m_{eff} ，并求 m_{eff}/m (m 为伸出部分的质量)。

(6) 把 (5) 的 k 与由 (a) 的 E 算出的 $3EI/L^3$ 比较，分别用 L 和 $L + \Delta L$ 计算。你的结论是什么？

(7) m_{eff}/m 与理论值 $3/\lambda_1^4 = 0.243$ 是否一致？列出可能造成偏差的原因。

(c) **(选做) AFM 悬臂的热噪声谱** 用光纤干涉仪直接测量一根 AFM 悬臂针尖的位移，在 $T = 295 \text{ K}$ 下、平均 1000 次得到一阶共振附近的位移功率谱（已扣除平坦的仪器噪声），见表 6。

表 6 针尖位移的热噪声功率谱 S_x ，单位 pm^2/Hz （模拟数据）

f / kHz	74.40	74.46	74.52	74.58	74.64	74.70	74.76
S_x	0.368	0.433	0.527	0.637	0.841	0.964	1.234
f / kHz	74.82	74.88	74.94	75.00	75.06	75.12	75.18
S_x	1.538	1.989	2.344	2.557	2.446	2.092	1.594
f / kHz	75.24	75.30	75.36	75.42	75.48	75.54	75.60
S_x	1.273	1.004	0.808	0.591	0.542	0.454	0.358

(8) 用洛伦兹近似式 (8.9) 设计线性化方案，求峰值 S_0 、半高全宽 Γ 与 Q 。

(9) 求一阶模的均方位移与模态刚度 k_1 ，再换算为静刚度 k ，给出不确定度。

(10) 讨论：每个谱点的相对涨落约为 $1/\sqrt{1000}$ ，这对拟合方式的选择有什么启示？还有哪些系统误差？

10.2 解答

解答：(a) 部分

(1) 由式 (5.10), $f = \Lambda/L^2$, $\Lambda = \frac{\lambda_1^2 h}{2\pi\sqrt{12}} \sqrt{\frac{E}{\rho}} = 0.1615 h \sqrt{E/\rho}$.

(2) 取 $x = \ln L$, $y = \ln f$, 按式 (10.1)–(10.2) 得 $n = c_1 = -1.966 \pm 0.002$. 偏离 -2 约 20 倍标准差, 说明存在系统偏差: 数据点在双对数图上并非严格直线, 短 L 端的频率偏低。【要点: 统计上显著的偏离意味着模型缺项, 而非“误差大”。】

(3) 由 $f = \Lambda/(L + \Delta L)^2$ 得 $f^{-1/2} = (L + \Delta L)/\sqrt{\Lambda}$, 对 L 是直线。以 $x = L$, $y = f^{-1/2}$ 拟合 (图 10a):

$$c_1 = (1.4339 \pm 0.0016) \text{ Hz}^{-1/2} \text{ m}^{-1}, \quad c_0 = (4.49 \pm 0.34) \times 10^{-3} \text{ Hz}^{-1/2},$$

于是 $\Lambda = 1/c_1^2 = (0.4864 \pm 0.0011) \text{ Hz m}^2$, $\Delta L = c_0/c_1 = (3.1 \pm 0.2) \text{ mm}$. 残差无系统趋势。

(4) 由 (1) 解出

$$E = 12\rho \left(\frac{2\pi\Lambda}{\lambda_1^2 h} \right)^2 = 197.7 \text{ GPa}.$$

相对不确定度 $\sigma_E/E = \sqrt{(2\sigma_\Lambda/\Lambda)^2 + (2\sigma_h/h)^2} = \sqrt{0.0045^2 + 0.033^2}$, 由厚度主导, $E = (198 \pm 7) \text{ GPa}$. 若忽略 ΔL , $\overline{fL^2} = 0.4699 \text{ Hz m}^2$, 得 $E = 184.5 \text{ GPa}$, 偏低 7%。宽板效应: 在钳口附近约一个宽度 w 的范围内, 截面的反向弯曲受到约束, 局部有效模量升到 $E/(1 - \nu^2)$ (钢 $\nu \approx 0.29$, 升高约 9%)。一阶模的弯曲能集中在固定端附近 (静挠度形状的曲率 $\propto L - x$, $x < w$ 段占弯曲能的 $1 - (1 - w/L)^3$, 小 w/L 时约 $3w/L$; $w/L = 0.25$ 时为 0.58, 对一阶振型约 0.70), 所以由频率反推的 E 偏高的量级为 $0.09 \times [1 - (1 - w/L)^3] \times$ (小于 1 的约束衰减因子): $w/L = 0.1$ 时约 1%–3%, $w/L = 0.25$ 时可达几个百分点, 与 $\pm 3.4\%$ 的不确定度同量级。它还随 L 变化 (短 L 时更大, 使短 L 端频率偏高), 会与 ΔL 的拟合部分抵消。改进: 改用窄钢条 ($w \lesssim L/10$), 或在宽、窄两种钢片上比较; 并保持小振幅 (端部振幅 $\lesssim 2 \text{ mm}$), 因为 $L = 250 \text{ mm}$ 时端部振幅 2–10 mm 对应固定端的 $w^2/(\rho h) \approx 0.1$ –0.5, 并不总是 $\ll 1$ 。【要点: $E \propto h^{-2}$, 测厚是精度瓶颈; 夹持端修正与宽板效应都是需要估计的一阶系统误差。】

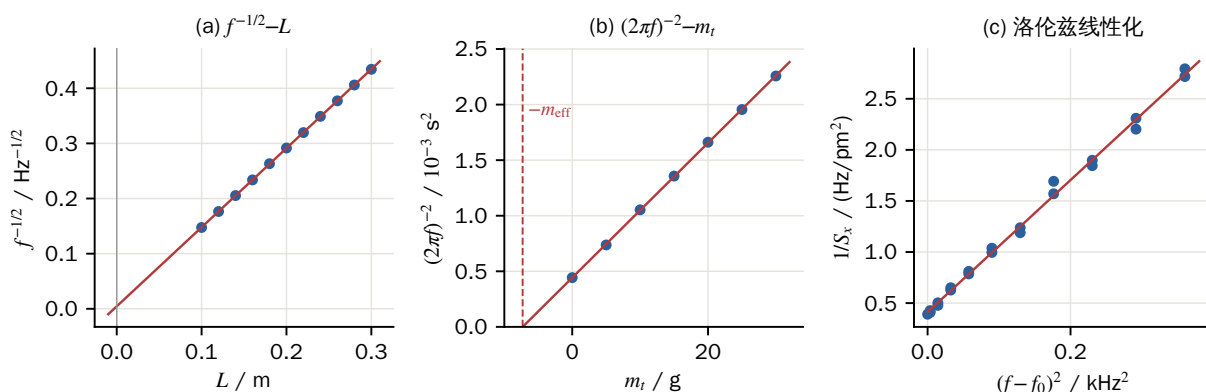


图 10 实验题的线性化拟合 (模拟数据, 点为表中数据, 线为最小二乘拟合)。(a) $f^{-1/2}-L$, 延长线与横轴交于 $L = -\Delta L$; (b) $(2\pi f)^{-2}-m_t$, 延长线与横轴交于 $m_t = -m_{\text{eff}}$; (c) $1/S_x-(f-f_0)^2$ 。

解答：(b) 部分

(5) 由式 (5.16), $Y \equiv (2\pi f)^{-2} = m_t/k + m_{\text{eff}}/k$ 。以 $x = m_t$ 、 $y = Y$ 拟合 (图 10b): 斜率 $c_1 = (6.062 \pm 0.022) \times 10^{-2} \text{ s}^2/\text{kg}$, 截距 $c_0 = (4.428 \pm 0.041) \times 10^{-4} \text{ s}^2$ 。于是

$$k = \frac{1}{c_1} = (16.50 \pm 0.06) \text{ N/m}, \quad m_{\text{eff}} = \frac{c_0}{c_1} = (7.30 \pm 0.07) \text{ g}.$$

伸出部分质量 $m = \rho whL = 29.44 \text{ g}$, $m_{\text{eff}}/m = 0.248 \pm 0.002$ 。

(6) 由 (a) 的 $E:I = wh^3/12 = 4.50 \times 10^{-13} \text{ m}^4$ 。用 $L = 250 \text{ mm}$, $3EI/L^3 = 17.08 \text{ N/m}$, 比 (5) 高 3.5%; 用 $L + \Delta L = 253.1 \text{ mm}$, $3EI/(L + \Delta L)^3 = 16.46 \text{ N/m}$, 与 (5) 在 0.3% 内一致 (由 (a) 得到的 $E \propto h^{-2}$, 故 $EI \propto Eh^3 \propto h$, h 的 1.7% 误差只部分保留, $3EI/(L + \Delta L)^3 = (16.5 \pm 0.3) \text{ N/m}$)。结论: 两种独立方法在计入夹持修正后自洽; 不计修正则出现 3.5% 的系统差。

(7) 0.248 比 0.243 大约 2% (约 2.5 倍标准差)。原因: (i) 夹持段 ΔL 也参与振动, 若用 $L + \Delta L$ 计算 m (29.81 g), 比值为 0.245; (ii) 式 (5.16) 只是近似, 精确的 m_{eff} 随 m_t/m 由 0.243 缓慢变到 0.236 (附录 C), 在本题范围内线性拟合给出约 0.242; (iii) 附加质量有转动惯量、质心不严格在端部, 小磁铁夹本身也有质量 (应计入 m_t); (iv) 统计涨落。在 2% 水平上验证了 $m_{\text{eff}} \approx 0.24m$ 。

解答：(c) 部分

(8) 由式 (8.9), $\frac{1}{S_x} = \frac{1}{S_0} + \frac{4}{S_0 \Gamma^2} (f - f_0)^2$, 以 $x = (f - f_0)^2$ 、 $y = 1/S_x$ 作直线。 f_0 取谱峰处 75.00 kHz (两侧数据对称, 也可微调 f_0 使两侧点重合以检验)。拟合 (图 10c) 得截距 $c_0 = (0.412 \pm 0.016) \text{ Hz/pm}^2$, 斜率 $c_1 = (6.46 \pm 0.09) \text{ Hz pm}^{-2} \text{ kHz}^{-2}$ 。于是 $S_0 = 1/c_0 = (2.43 \pm 0.09) \text{ pm}^2/\text{Hz}$, $\Gamma = \sqrt{4/(S_0 c_1)} = (0.505 \pm 0.010) \text{ kHz}$, $Q = f_0/\Gamma = 148 \pm 3$ 。

(9) $\langle q_1^2 \rangle = \frac{\pi}{2} S_0 \Gamma = 1.92 \times 10^{-21} \text{ m}^2$ (均方根 44 pm), $k_1 = k_B T / \langle q_1^2 \rangle = (2.12 \pm 0.09) \text{ N/m}$, 静刚度 $k = k_1/1.030 = (2.05 \pm 0.09) \text{ N/m}$ 。(生成数据所用的真值为 $k = 2.00 \text{ N/m}$, 在 1σ 内。)

(10) 等权最小二乘假定各 y_i 误差相同; 这里 S_x 的相对误差相同 (约 3%), 故 $1/S_x$ 的相对误差也相同、绝对误差在两翼更大。更好的做法是加权拟合 (权重 $\propto S_x^2$) 或直接对 S_x 作非线性拟合; 只用峰附近 $|f - f_0| \leq 1.2\Gamma$ 的数据也是为了减小这一问题和洛伦兹近似的误差 ($Q = 148$ 时后者远小于 1%)。系统误差: 仪器噪声背景扣除不准 (会直接加到面积上)、温度读数、干涉仪光斑不在针尖处 (测到的是 $q_1 \phi_1(x_{\text{spot}})$)、频谱分析仪的窗函数与频率分辨率导致峰被展宽或削低、悬臂倾斜。

11 小结：推导链**要点：本讲的依赖关系**

1. 胡克定律 + 平截面假设 $\Rightarrow \varepsilon = y/\varrho \Rightarrow M = EI/\varrho$, $I = wh^3/12$ (式 (4.3)、(4.4)); 小斜率 $\Rightarrow M = EIu''$ 。
2. 微元平衡 $dM/dx = -V$ + 端部受力 $\Rightarrow u = Fx^2(3L - x)/6EI \Rightarrow k = Ewh^3/4L^3$, $\theta = 3\delta/2L$ (光杠杆)。
3. 微元的牛顿第二定律 $\Rightarrow$ 欧拉-伯努利方程 $\Rightarrow$ 分离变量 + 四个边界条件 $\Rightarrow \cos \lambda \cosh \lambda =$

$$-1 \Rightarrow f_n = \frac{\lambda_n^2}{2\pi\sqrt{12}} \frac{h}{L^2} \sqrt{E/\rho}.$$

4. **能量**(弯曲能 + 动能) $\Rightarrow$ 瑞利商(上界, 误差 1.5%); **模态正交** $\Rightarrow m_n = m/4, k_n = \lambda_n^4 k/12, \sum 1/k_n = 1/k; m_{\text{eff}} = k/\omega_1^2 = 0.243m \Rightarrow$ 附加质量法。
5. $-C/r^6 +$ **两两可加** $\Rightarrow V = -HR/6z$; **赫兹** + **DMT** $\Rightarrow$ 模型力 $F(z)$ 。
6. **势能极小** $\Rightarrow$ 平衡 $F = k(z - z_0)$ 、稳定 $k > F' \Rightarrow$ 相切条件 $\Rightarrow z_0^* = \frac{3}{2}(HR/3k)^{1/3}$; 脱离 $z_0^{\text{off}} = a_0 + F_{\text{ad}}/k$; 耗散 $\approx F_{\text{ad}}^2/2k$ 。
7. **线性化** $k_{\text{eff}} = k - F' \Rightarrow \Delta f = -f_0 F'/2k$; **谐波平衡** + **分部积分** $\Rightarrow$ 半圆加权 $\langle F' \rangle \Rightarrow$ 大振幅 $A^{-3/2}$; **洛伦兹斜率** $\Rightarrow$ AM 的 $\delta A \propto Q$, 但 $\tau = 2Q/\omega_0$ 。
8. **玻尔兹曼分布** $\Rightarrow$ 能量均分 $\langle q_n^2 \rangle = k_B T/k_n$; **功率谱** + **线性响应** $S_x = |\chi|^2 S_F$; **能量均分反推** $\Rightarrow S_F = 4k_B T b \Rightarrow$ 热噪声谱 $\Rightarrow$ 热标定 (0.971 / 0.817 修正) 与噪声极限 $\delta F_{\text{min}}, \delta F'_{\text{min}}$ 。

几条贯穿全讲的物理图像：(1) 刚度、频率与噪声都由尺寸标度决定——小型化是“又快又灵”的唯一途径；(2) 稳定性就是“总刚度为正”，跳触、FM 频移、AM 振幅变化都来自力梯度对等效弹簧的修正；(3) 涨落与耗散同源，既是测量的极限，也是标定的工具。

参考文献

- [1] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel. Surface studies by scanning tunneling microscopy. *Physical Review Letters*, 49:57–61, 1982. doi: 10.1103/PhysRevLett.49.57.
- [2] Franz J. Giessibl. Advances in atomic force microscopy. *Reviews of Modern Physics*, 75: 949–983, 2003. doi: 10.1103/RevModPhys.75.949. arXiv:cond-mat/0305119.
- [3] Nobel Prize Outreach. The nobel prize in physics 1986: Ernst ruska, gerd binnig, heinrich rohrer. <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1986/summary/>, 1986. URL <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1986/summary/>.
- [4] G. Binnig, C. F. Quate, and Ch. Gerber. Atomic force microscope. *Physical Review Letters*, 56:930–933, 1986. doi: 10.1103/PhysRevLett.56.930.
- [5] Gerhard Meyer and Nabil M. Amer. Novel optical approach to atomic force microscopy. *Applied Physics Letters*, 53:1045–1047, 1988. doi: 10.1063/1.100061.
- [6] T. R. Albrecht, S. Akamine, T. E. Carver, and C. F. Quate. Microfabrication of cantilever styli for the atomic force microscope. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 8:3386–3396, 1990. doi: 10.1116/1.576520.
- [7] T. R. Albrecht, P. Grütter, D. Horne, and D. Rugar. Frequency modulation detection using high-Q cantilevers for enhanced force microscope sensitivity. *Journal of Applied Physics*, 69: 668–673, 1991. doi: 10.1063/1.347347.

- [8] Franz J. Giessibl. Atomic resolution of the silicon (111)-(7x7) surface by atomic force microscopy. *Science*, 267:68–71, 1995. doi: 10.1126/science.267.5194.68.
- [9] Franz J. Giessibl. High-speed force sensor for force microscopy and profilometry utilizing a quartz tuning fork. *Applied Physics Letters*, 73:3956–3958, 1998. doi: 10.1063/1.122948.
- [10] Franz J. Giessibl. The qPlus sensor, a powerful core for the atomic force microscope. *Review of Scientific Instruments*, 90:011101, 2019. doi: 10.1063/1.5052264.
- [11] T. Ando, N. Kodera, E. Takai, D. Maruyama, K. Saito, and A. Toda. A high-speed atomic force microscope for studying biological macromolecules. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 98:12468–12472, 2001. doi: 10.1073/pnas.211400898.
- [12] Leo Gross, Fabian Mohn, Nikolaj Moll, Peter Liljeroth, and Gerhard Meyer. The chemical structure of a molecule resolved by atomic force microscopy. *Science*, 325:1110–1114, 2009. doi: 10.1126/science.1176210.
- [13] Phys.org. Scientists image the ‘anatomy’ of a molecule. <https://phys.org/news/2009-08-scientists-image-anatomy-molecule-video.html>, 2009. URL <https://phys.org/news/2009-08-scientists-image-anatomy-molecule-video.html>.
- [14] Y. Martin, C. C. Williams, and H. K. Wickramasinghe. Atomic force microscope–force mapping and profiling on a sub 100-Å scale. *Journal of Applied Physics*, 61:4723–4729, 1987. doi: 10.1063/1.338807.
- [15] Q. Zhong, D. Inniss, K. Kjoller, and V. B. Elings. Fractured polymer/silica fiber surface studied by tapping mode atomic force microscopy. *Surface Science*, 290:L688–L692, 1993. doi: 10.1016/0039-6028(93)90582-5.
- [16] Bruker AFM Probes. MLCT probe specifications. <https://www.brukerafmprobes.com/p-3444-mlct.aspx>, 2026. URL <https://www.brukerafmprobes.com/p-3444-mlct.aspx>.
- [17] Bruker AFM Probes. TESPA-V2 probe specifications. <https://www.brukerafmprobes.com/p-3844-tespa-v2.aspx>, 2026. URL <https://www.brukerafmprobes.com/p-3844-tespa-v2.aspx>.
- [18] Matthew A. Hopcroft, William D. Nix, and Thomas W. Kenny. What is the young’s modulus of silicon? *Journal of Microelectromechanical Systems*, 19:229–238, 2010. doi: 10.1109/JMEMS.2009.2039697.
- [19] W. M. Haynes, editor. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, Boca Raton, 97th edition, 2016.
- [20] J. W. (Lord Rayleigh) Strutt. *The Theory of Sound*, volume 1. Macmillan, London, 1877.
- [21] J. P. Cleveland, S. Manne, D. Bocek, and P. K. Hansma. A nondestructive method for determining the spring constant of cantilevers for scanning force microscopy. *Review of Scientific Instruments*, 64:403–405, 1993. doi: 10.1063/1.1144209.

- [22] Jacob N. Israelachvili. *Intermolecular and Surface Forces*. Academic Press, Amsterdam, 3rd edition, 2011. ISBN 978-0-12-375182-9.
- [23] H. C. Hamaker. The London–van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*, 4:1058–1072, 1937. doi: 10.1016/S0031-8914(37)80203-7.
- [24] K. L. Johnson. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1985. doi: 10.1017/CBO9781139171731.
- [25] B. V. Derjaguin, V. M. Muller, and Yu. P. Toporov. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. *Journal of Colloid and Interface Science*, 53:314–326, 1975. doi: 10.1016/0021-9797(75)90018-1.
- [26] Ricardo García and Rubén Pérez. Dynamic atomic force microscopy methods. *Surface Science Reports*, 47:197–301, 2002. doi: 10.1016/S0167-5729(02)00077-8.
- [27] Jeffrey L. Hutter and John Bechhoefer. Calibration of atomic-force microscope tips. *Review of Scientific Instruments*, 64:1868–1873, 1993. doi: 10.1063/1.1143970.
- [28] John Melcher, Shuiqing Hu, and Arvind Raman. Equivalent point-mass models of continuous atomic force microscope probes. *Applied Physics Letters*, 91:053101, 2007. doi: 10.1063/1.2767173.
- [29] Jannis Lübke, Matthias Temmen, Philipp Rahe, Angelika Kühnle, and Michael Reichling. Determining cantilever stiffness from thermal noise. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 4: 227–233, 2013. doi: 10.3762/bjnano.4.23.
- [30] Hans-Jürgen Butt and Manfred Jaschke. Calculation of thermal noise in atomic force microscopy. *Nanotechnology*, 6:1–7, 1995. doi: 10.1088/0957-4484/6/1/001.
- [31] D. A. Walters, J. P. Cleveland, N. H. Thomson, P. K. Hansma, M. A. Wendman, G. Gurley, and V. Elings. Short cantilevers for atomic force microscopy. *Review of Scientific Instruments*, 67:3583–3590, 1996. doi: 10.1063/1.1147177.
- [32] John E. Sader, James W. M. Chon, and Paul Mulvaney. Calibration of rectangular atomic force microscope cantilevers. *Review of Scientific Instruments*, 70:3967–3969, 1999. doi: 10.1063/1.1150021.
- [33] Fabien Castanié, Laurent Nony, Sébastien Gauthier, and Xavier Bouju. Graphite, graphene on SiC, and graphene nanoribbons: Calculated images with a numerical FM-AFM. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 3:301–311, 2012. doi: 10.3762/bjnano.3.34.

A 悬臂模态的数学性质

A.1 频率方程的数值求根

令 $g(\lambda) = \cos \lambda \cosh \lambda + 1$ 。由图 5a, 第 n 个根位于 $(n - \frac{1}{2})\pi$ 附近。用牛顿迭代 $\lambda \leftarrow \lambda - g(\lambda)/g'(\lambda)$, $g' = -\sin \lambda \cosh \lambda + \cos \lambda \sinh \lambda$, 从 $(n - \frac{1}{2})\pi$ 出发, 几步即收敛到表 7 的值。 $n \geq 2$ 时还有渐近公式: 在 $\lambda_0 = (n - \frac{1}{2})\pi$ 附近 $\cos \lambda \approx -\sin \lambda_0 (\lambda - \lambda_0)$, $1/\cosh \lambda \approx 2e^{-\lambda_0}$, 代入 $\cos \lambda = -1/\cosh \lambda$ 得

$$\lambda_n \approx (n - \frac{1}{2})\pi + (-1)^{n+1} 2e^{-(n-\frac{1}{2})\pi}, \quad (\text{A.1})$$

例如 $n = 2$ 给出 4.69442 (误差 3×10^{-4}), $n = 3$ 给出 7.854758 (误差 10^{-6}); $n = 1$ 时 $e^{-\lambda_0}$ 不小, 公式失效。

表 7 悬臂模态的数值 ($\phi_n(L) = 1$ 归一)

n	λ_n	f_n/f_1	$k_n/k = \lambda_n^4/12$	k/k_n	$L\phi'_n(L)$
1	1.875104	1	1.0302	0.9707	1.3765
2	4.694091	6.267	40.46	0.02472	4.7808
3	7.854757	17.55	317.2	0.003152	7.8487
4	10.995541	34.39	1218	0.000821	10.9959

A.2 正交性

推导: $\int_0^L \phi_m \phi_n dx = 0, m \neq n$

1. 对 $\int_0^L \phi_m \phi_n'''' dx$ 分部积分两次: $\int_0^L \phi_m \phi_n'''' dx = [\phi_m \phi_n''' - \phi_m' \phi_n'']_0^L + \int_0^L \phi_m'' \phi_n'' dx$ 。
2. 边界项: $x = 0$ 处 $\phi_m = \phi_m' = 0$; $x = L$ 处 $\phi_n'' = \phi_n''' = 0$ 。全部为零。
3. 用 $\phi_n'''' = \beta_n^4 \phi_n$: $\beta_n^4 \int \phi_m \phi_n dx = \int \phi_m'' \phi_n'' dx$ 。右端对 m, n 对称, 交换 m, n 后相减: $(\beta_n^4 - \beta_m^4) \int \phi_m \phi_n dx = 0$ 。
4. $m \neq n$ 时 $\beta_n \neq \beta_m$, 故 $\int \phi_m \phi_n dx = 0$, 进而 $\int \phi_m'' \phi_n'' dx = 0$ 。取 $m = n$ 得 $\int \phi_n''^2 dx = \beta_n^4 \int \phi_n^2 dx$, 即 $k_n = EI \int \phi_n''^2 = \beta_n^4 EI \int \phi_n^2 = \omega_n^2 m_n$ 。

A.3 振型平方积分的闭式

推导

对满足 $\phi'''' = \beta^4 \phi$ 的任意函数, 定义

$$G(x) = \frac{1}{4\beta^4} [x(\beta^4 \phi^2 - 2\phi' \phi''' + \phi''^2) + 3\phi \phi''' - \phi' \phi''].$$

1. 求导: x 前括号的导数为 $2\beta^4 \phi \phi' - 2\phi'' \phi''' - 2\phi' \phi'''' + 2\phi'' \phi''' = 2\beta^4 \phi \phi' - 2\beta^4 \phi' \phi = 0$ 。
2. 其余项的导数: $(\beta^4 \phi^2 - 2\phi' \phi''' + \phi''^2) + (3\phi' \phi''' + 3\phi \phi'''') - (\phi''^2 + \phi' \phi''') = \beta^4 \phi^2 + 3\beta^4 \phi^2 =$

$$4\beta^4\phi^2。$$

3. 所以 $G' = \phi^2$ 。边界值: $x = 0$ 处 $\phi = \phi' = 0$, $G(0) = 0$; $x = L$ 处 $\phi'' = \phi''' = 0$, $G(L) = L\phi(L)^2/4$ 。

于是 $\int_0^L \phi_n^2 dx = G(L) - G(0) = L\phi_n(L)^2/4$, 自由端归一时 $m_n = \mu L/4 = m/4$, 对所有 n 成立。(verify_sympy.py 符号核对了 $G' = \phi^2$ 。)

A.4 柔度求和规则与瑞利上界

推导: $1/k = \sum_n 1/k_n$

1. 静态时针尖受力 F 。把挠度展开为 $u = \sum_n a_n \phi_n$, 由正交性弯曲能为 $\sum \frac{1}{2} k_n a_n^2$; 外力做功 (势能 $-Fu(L)$) 为 $-F \sum a_n$ 。
2. 总势能 $\Pi = \sum_n (\frac{1}{2} k_n a_n^2 - F a_n)$ 。平衡态使 Π 极小 (**最小势能原理**: 静平衡位置是总势能——弹性能加外力势能——的极小, 是单自由度条件 $\partial U/\partial z = 0$ 、 $\partial^2 U/\partial z^2 > 0$ 的多自由度推广), 对每个 a_n 独立求极小: $a_n = F/k_n$ 。
3. 针尖位移 $u(L) = \sum a_n = F \sum 1/k_n$; 而静力学给出 $u(L) = F/k$ 。比较得 $1/k = \sum_n 1/k_n$, 即 $\sum_n 12/\lambda_n^4 = 1$ 。数值: 前 4 项之和 0.99938, 其余项用 $\lambda_n \approx (n - \frac{1}{2})\pi$ 求和补足 6.2×10^{-4} , 合计 1.00000。

推导: 瑞利商是上界

把试探函数展开 $\psi = \sum_n a_n \phi_n$, 由正交性

$$\omega_R^2 = \frac{EI \int \psi'^2}{\mu \int \psi^2} = \frac{\sum_n a_n^2 k_n}{\sum_n a_n^2 m_n} = \frac{\sum_n a_n^2 m_n \omega_n^2}{\sum_n a_n^2 m_n} \geq \omega_1^2,$$

因为它是 ω_n^2 以正权重 $a_n^2 m_n$ 的加权平均, 而 $\omega_n \geq \omega_1$ 。若 $\psi = \phi_1 + \epsilon \Delta\psi$ ($\Delta\psi$ 为某个偏差形状), $\omega_R^2 - \omega_1^2 = \mathcal{O}(\epsilon^2)$: 频率误差是形状误差的二阶小量。

B Hamaker 积分

推导: 球-平面的精确结果

不作 $z \ll R$ 近似, 薄片面积 $\pi[2R(s-z) - (s-z)^2]$, $s \in [z, z+2R]$:

$$V(z) = -\frac{\pi^2 C n_1 n_2}{6} \int_z^{z+2R} \frac{2R(s-z) - (s-z)^2}{s^3} ds.$$

令 $\tau = s - z$ 展开被积函数的分子 $2R\tau - \tau^2 = -s^2 + 2(R+z)s - z(2R+z)$, 逐项积分:

$$V(z) = -\frac{H}{6} \left[\frac{R}{z} + \frac{R}{z+2R} + \ln \frac{z}{z+2R} \right]. \quad (\text{B.1})$$

- $z \ll R$: 展开得 $V = -\frac{HR}{6z} \left[1 - \frac{z}{R} \ln \frac{2R}{z} + \frac{z}{2R} + \mathcal{O}\left(\frac{z^2}{R^2}\right) \right]$, 主项与式 (6.3) 一致, 但相对修正是 $(z/R) \ln(2R/z)$ 而不是 z/R : $R = 10 \text{ nm}$ 时, $z = 0.5 \text{ nm}$ 处 $V_{\text{精确}}/V_{\text{近似}} =$

0.839, $z = a_0 = 0.165 \text{ nm}$ 处为 0.93。对力求导后对数项的贡献降为 $\mathcal{O}(z/R)$: $F = -\frac{HR}{6z^2} \left[1 - \frac{z}{R} + \mathcal{O}(z^2/R^2) \right]$ ($z = 0.5 \text{ nm}$ 处约 5%)。

- $z \gg R$: 把方括号按 R/z 展开, $1/z^0$ 、 $1/z$ 、 $1/z^2$ 阶相消, 首项为 $\frac{4}{3}(R/z)^3$, 于是 $V \rightarrow -\frac{2HR^3}{9z^3}$ 。这等于 “球内分子数 $\frac{4}{3}\pi R^3 n_1$ 乘以单分子—平板势 $-\pi C n_2/(6z^3)$ ”, 符合远场图像。

(两条极限与式 (B.1) 本身均由 `verify_sympy.py` 符号核对。)

推导: $\int_0^\infty v^{1/2}(1+v)^{-3}dv = \pi/8$

令 $v = \tan^2 \vartheta$, $dv = 2 \tan \vartheta \sec^2 \vartheta d\vartheta$, $1+v = \sec^2 \vartheta$:

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\tan \vartheta \cdot 2 \tan \vartheta \sec^2 \vartheta}{\sec^6 \vartheta} d\vartheta = 2 \int_0^{\pi/2} \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta d\vartheta = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} \sin^2 2\vartheta d\vartheta = \frac{\pi}{8}.$$

C 端部附加质量的频率方程

推导

自由端粘有质点 $m_t = \alpha m$ (不计其转动惯量)。

1. 边界条件: $x = L$ 处弯矩仍为零, $\phi''(L) = 0$; 质点的牛顿第二定律 $m_t \ddot{u}(L) = -V(L) = EI u'''(L)$, 代入 $u = \phi \cos \omega t$ 并用 $\omega^2 = \beta^4 EI/\mu$ 、 $m_t/\mu = \alpha L$:

$$\phi'''(L) = -\frac{m_t \omega^2}{EI} \phi(L) = -\alpha L \beta^4 \phi(L).$$

2. 代入式 (5.5), 除以 β^3 , 第二行变为 $C_1[(\text{sh}-s)+\alpha\lambda(\text{ch}-c)]+C_2[(\text{ch}+c)+\alpha\lambda(\text{sh}-s)]=0$, 第一行不变。

3. 行列式: $(\text{ch}+c)^2 - (\text{sh}+s)(\text{sh}-s) + \alpha\lambda[(\text{ch}+c)(\text{sh}-s) - (\text{sh}+s)(\text{ch}-c)]$ 。前两项同正文为 $2+2c\text{ch}$; 方括号展开后 ch sh 与 cs 项相消, 剩 $2(c\text{sh}-s\text{ch})$ 。于是

$$1 + \cos \lambda \cosh \lambda + \alpha \lambda (\cos \lambda \sinh \lambda - \sin \lambda \cosh \lambda) = 0. \quad (\text{C.1})$$

4. 极限: $\alpha = 0$ 回到式 (5.7)。 $\alpha \rightarrow \infty$ 时 $\lambda \rightarrow 0$, 展开 $1 + \cos \lambda \cosh \lambda = 2 - \lambda^4/6 + \dots$ 、 $\cos \lambda \sinh \lambda - \sin \lambda \cosh \lambda = -\frac{2}{3}\lambda^3 + \dots$, 主项给出 $\lambda^4 = 3/\alpha$, 即 $\omega^2 = k/m_t$ 。

定义 $m_{\text{eff}}(\alpha) \equiv k/\omega^2 - m_t = m(3/\lambda^4 - \alpha)$, 数值求解式 (C.1) 得表 8。它从 $\alpha = 0$ 的 $0.2427m$ 单调减小到 $\alpha \rightarrow \infty$ 的 $\frac{33}{140}m = 0.2357m$ (后者正是用静挠度形状的瑞利动能系数: 端部质量很大时振型趋于静挠度形状)。所以式 (5.16) 的线性关系只是近似, 但偏差不到 3%; 在 $0 \leq \alpha \leq 1$ 的范围作线性拟合给出 $m_{\text{eff}} \approx 0.242m$ 。

表 8 附加端质量时的一阶根与等效质量

$\alpha = m_t/m$	0	0.1	0.25	0.5	1	2	10
λ_1	1.8751	1.7227	1.5738	1.4200	1.2479	1.0762	0.7358
m_{eff}/m	0.2427	0.2406	0.2391	0.2379	0.2370	0.2364	0.2359

D 热噪声的两个计算

D.1 响应函数平方的积分

推导

记 $\gamma = b/m$, $|\chi|^2 = \frac{1}{m^2 \mathcal{D}(\omega)}$, $\mathcal{D} = (\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2$. 求 $J = \int_0^\infty d\omega / \mathcal{D}$.

1. 换元 $\omega \rightarrow \omega_0^2/\omega$: $d\omega \rightarrow -(\omega_0^2/\omega^2)d\omega$, $\mathcal{D} \rightarrow (\omega_0^4/\omega^4)\mathcal{D}$, 上下限互换, 得 $J = \frac{1}{\omega_0^2} \int_0^\infty \frac{\omega^2 d\omega}{\mathcal{D}}$.
于是 $2J = \int_0^\infty \frac{(1 + \omega^2/\omega_0^2)d\omega}{\mathcal{D}}$.
2. 再令 $t = \omega - \omega_0^2/\omega$, $dt = (1 + \omega_0^2/\omega^2)d\omega$, ω 从 0 到 ∞ 时 t 单调地从 $-\infty$ 到 ∞ . 注意 $\mathcal{D}/\omega^2 = t^2 + \gamma^2$, 被积式 $\frac{(1 + \omega^2/\omega_0^2)d\omega}{\mathcal{D}} = \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \cdot \frac{dt}{\mathcal{D}} = \frac{1}{\omega_0^2} \cdot \frac{dt}{t^2 + \gamma^2}$.
3. $2J = \frac{1}{\omega_0^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{dt}{t^2 + \gamma^2} = \frac{\pi}{\omega_0^2 \gamma}$, $J = \frac{\pi}{2\omega_0^2 \gamma}$.
4. 换回 f : $\int_0^\infty |\chi|^2 df = \frac{1}{2\pi m^2} J = \frac{1}{4m^2 \omega_0^2 \gamma} = \frac{1}{4bk}$. 这是精确结果, 不需要高 Q 近似。

D.2 自激振荡悬臂的热频率噪声

推导: 式 (8.12) 的推导

1. **振幅-相位变量**. 悬臂方程写成 $m\ddot{q} + kq = G(t)$, G 包括阻尼、自激驱动与热力. 令 $q = A(t) \cos \Theta$, $\Theta = \omega_0 t + \varphi(t)$, 并要求 $\dot{q} = -A\omega_0 \sin \Theta$ (“常数变易法”的附加条件 $\dot{A} \cos \Theta - A\dot{\varphi} \sin \Theta = 0$). 代入方程得 $-\dot{A}\omega_0 \sin \Theta - A\omega_0 \dot{\varphi} \cos \Theta = G/m$. 两式联立解出

$$\dot{A} = -\frac{G \sin \Theta}{m\omega_0}, \quad \dot{\varphi} = -\frac{G \cos \Theta}{m\omega_0 A}.$$

这是精确的; A, φ 变化慢 (时间尺度 $\sim Q/\omega_0$ 或 $1/B$), 可以对一个周期平均。

2. **驱动不影响相位**. 自激电路的驱动力与速度同相, $\propto \sin \Theta$; 阻尼 $-b\dot{q} \propto \sin \Theta$ 也一样. 它们只进入 $\dot{A}$ (并在平均意义上相互抵消, 维持恒定振幅), 对 $\dot{\varphi}$ 的周期平均为零. 频率的变化 $\delta\omega = \dot{\varphi}$ 只来自热力。
3. **热力的正交分解**. 热力中只有 f_0 附近一个窄带 (宽 Δ_W , $B \ll \Delta_W \ll f_0$) 能显著影响慢变的 A, φ ; 其余频率的分量在周期平均中消失. 把这一窄带写成许多随机相位正弦的

叠加 $F_{\text{th}} = \sum_j a_j \cos[(\omega_0 + \delta_j)t + \varphi_j]$, $\delta_j \in [-\pi\Delta_W, \pi\Delta_W]$ 。用和角公式

$$\cos(\omega_0 t + \delta_j t + \varphi_j) = \cos(\delta_j t + \varphi_j) \cos \omega_0 t - \sin(\delta_j t + \varphi_j) \sin \omega_0 t,$$

得

$$F_{\text{th}} = F_c(t) \cos \omega_0 t - F_s(t) \sin \omega_0 t,$$

$$F_c = \sum_j a_j \cos(\delta_j t + \varphi_j), \quad F_s = \sum_j a_j \sin(\delta_j t + \varphi_j),$$

F_c, F_s 只含频率 $|\delta_j| \leq \pi\Delta_W$, 是慢变函数。 Θ 中的 $\varphi(t)$ 变化远慢于 $1/\Delta_W$, 可在一个周期内视为常数, 取 $\varphi \approx 0$; 周期平均 $\overline{\cos^2 \omega_0 t} = \frac{1}{2}$, $\overline{\sin \omega_0 t \cos \omega_0 t} = 0$, 故 $\overline{F_{\text{th}} \cos \Theta} = F_c/2$, $\delta\omega = -F_c/(2m\omega_0 A)$ 。

4. **F_c 的谱 (因子 2 的来源)**。由于各 φ_j 独立均匀分布, $\langle F_c^2 \rangle = \langle F_s^2 \rangle = \sum_j \langle a_j^2 \rangle / 2$, 且 F_c 与 F_s 互不相关; 又 $\langle F_{\text{th}}^2 \rangle = \sum_j \langle a_j^2 \rangle / 2$, 所以 $\langle F_c^2 \rangle = \langle F_{\text{th}}^2 \rangle = S_F \Delta_W$ 。但 F_c 的频率 $|\delta_j|/2\pi$ 只覆盖 $[0, \Delta_W/2]$: 上、下两个边带 $f_0 \pm |\delta|/2\pi$ 折叠到了同一个低频。于是 F_c 的单边谱 S_c 满足 $S_c \cdot \Delta_W/2 = S_F \Delta_W$, 即 $S_c = 2S_F = 8k_B T b$ 。

5. **频率噪声**。 $\delta\omega$ 的单边谱为 $S_c/(2m\omega_0 A)^2 = 2k_B T b/(m^2 \omega_0^2 A^2)$, 在 $B \ll \Delta_W/2$ 范围内是白的。频率计输出经单边 (噪声等效) 带宽为 B 的低通滤波 (相当于平均时间 $T_{\text{avg}} \approx 1/2B$), 方差 $\langle \delta\omega^2 \rangle = 2k_B T b B/(m^2 \omega_0^2 A^2)$ 。用 $b = m\omega_0/Q, m\omega_0^2 = k: \langle \delta\omega^2 \rangle = 2k_B T \omega_0 B/(QkA^2)$, 于是

$$\frac{\delta f}{f_0} = \frac{\sqrt{\langle \delta\omega^2 \rangle}}{\omega_0} = \sqrt{\frac{2k_B T B}{QkA^2 \omega_0}} = \sqrt{\frac{k_B T B}{\pi k A^2 f_0 Q}},$$

即式 (8.12)。(verify_sympy.py 核对了代数化简。)

E 光杠杆检测下的多模修正

推导

1. 光杠杆读数正比于端部倾角 $u'(L) = \sum_n q_n \phi'_n(L)$ 。标定时悬臂处于静挠度形状, $u'(L) = \frac{3}{2L} u(L)$, 因此仪器报告的“虚拟挠度”是 $\delta^* = \frac{2L}{3} u'(L)$ 。
2. 第 n 阶模的贡献 $\delta_n^* = \frac{2}{3} L \phi'_n(L) q_n$ 。用式 (5.8) 求导并取 $x = L$, 得表 7 最后一列, $L \phi'_1(L) = 1.3765$ 。于是 $\langle \delta_1^{*2} \rangle = (\frac{2}{3} \times 1.3765)^2 k_B T / k_1 = 0.8422 \times 0.9707 k_B T / k = 0.8174 k_B T / k$ 。
3. **所有模之和**。类比附录 A 的柔度求和规则: 在端部施加力偶 M_t , 外力偶做功 $M_t u'(L) = M_t \sum a_n \phi'_n(L)$, 极小化给出 $a_n = M_t \phi'_n(L) / k_n$, 端部转角 $\sum a_n \phi'_n(L) = M_t \sum \phi_n'^2(L) / k_n$; 而静力学 ($EI u'' = M_t$ 为常数) 给出端部转角 $M_t L / EI$ 。所以 $\sum_n \phi_n'^2(L) / k_n = L / EI = 3/(kL^2)$,

$$\langle \delta^{*2} \rangle = \frac{4L^2}{9} k_B T \sum_n \frac{\phi_n'^2(L)}{k_n} = \frac{4L^2}{9} \cdot \frac{3k_B T}{kL^2} = \frac{4k_B T}{3k},$$

这就是 Butt 与 Jaschke 的结果 [30]。由于 $L\phi'_n(L) \approx \lambda_n$ ，各项 $\propto \lambda_n^{-2}$ ，收敛很慢（前 6 项之和仅 1.24，而极限为 4/3）：高阶模对倾角信号的贡献比对位移大得多，这也是只取一阶峰的原因之一。

F 名词解释

表 9 术语中英对照与一句话定义

术语	英文	定义
悬臂	cantilever	一端固定、一端自由的梁，AFM 的力传感器
中性层	neutral surface	弯曲时长度不变的纤维层，过截面形心
惯性矩	second moment of area	$I = \int y^2 dA$ ，矩形截面 $wh^3/12$
抗弯刚度	flexural rigidity	EI ，弯矩与曲率之比
剪力、弯矩	shear force, bending moment	截面一侧对另一侧的横向力与力偶
欧拉-伯努利梁	Euler-Bernoulli beam	忽略剪切与转动惯性的细长梁模型
振型、模态	mode shape, normal mode	各点同频同相振动的空间形状
有效质量	effective mass	使 $k/m_{\text{eff}} = \omega_1^2$ 的等效质点质量
瑞利法	Rayleigh method	用试探形状的能量比估计最低频率（上界）
Hamaker 常数	Hamaker constant	$H = \pi^2 C n_1 n_2$ ，宏观范德瓦尔斯力的强度
DMT 模型	DMT model	赫兹接触 + 接触区外粘附力的接触模型
跳触、脱离	snap-in, jump-off	平衡点因 $k < F'$ 而消失导致的突跳
品质因数	quality factor	$Q = m\omega_0/b$ ， $2\pi \times$ 储能/每周周期耗能
调频/调幅检测	FM / AM detection	读频移 / 读固定频率下的振幅变化
功率谱密度	power spectral density	单位频宽内的均方涨落
涨落-耗散关系	fluctuation-dissipation	随机力谱 $S_F = 4k_B T b$ 由阻尼定
热噪声标定	thermal-noise calibration	由热振动均方值与能量均分求 k