

看见原子：量子隧穿与扫描隧道显微镜

第 43 届决赛短训讲义组

2026 年 10 月

目录

1 导读	2
2 名词与符号	4
3 前置模块：量子力学最低限度	5
3.1 物质波与波函数	5
3.2 定态薛定谔方程	6
3.3 概率流密度	7
3.4 边界条件	8
3.5 金属中电子的最简模型：费米能级与功函数	9
4 方势垒：隧穿的基本事实	11
4.1 问题与透射系数的定义	11
4.2 精确解与厚势垒近似	12
4.3 一埃一个数量级	13
5 STM 的隧道电流	14
5.1 从一维透射到三维电流密度	14
5.2 针尖的几何与电导的量级	17
5.3 表观势垒高度	18
5.4 横向分辨率	18
5.5 恒流模式与恒高模式	21
5.6 振动隔离	21
5.7 压电扫描器（定性）	22
6 WKB 近似：缓变势垒、场致发射与 α 衰变	23

1 导读	2
6.1 缓变势中的波函数	23
6.2 透射系数的 WKB 公式	24
6.3 应用一：场致发射与 Fowler–Nordheim 公式	25
6.4 应用二： α 衰变与 Geiger–Nuttall 定律	27
7 隧穿谱与量子围栏	29
7.1 局域态密度与 dI/dV	29
7.2 铜 (111) 面的表面态：二维电子气	30
7.3 圆形量子围栏	31
8 决赛风格例题	34
9 实验与数据处理：由 I – z 谱求表观势垒高度	41
10 小结	45
A 方势垒透射系数的精确推导	48
B 数值核对方法	49
C Gamow 积分与离心修正	49
D 极坐标下的拉普拉斯算符与贝塞尔函数	50
E 名词解释	50

1 导读

背景：从 1928 年的两道难题到“看见原子”

1928 年，量子力学诞生不到三年，两个看似毫不相干的老问题同时被“隧穿”解决。其一是金属在强电场下的冷发射：不加热的金属针尖在每纳米几伏的电场下就能放出电子，经典理论无法解释，R. H. Fowler 与 L. Nordheim 把它归结为电子穿过表面的三角形势垒 [1]。其二是 α 衰变：1911 年 H. Geiger 与 J. M. Nuttall 发现，放射性核的 α 粒子能量稍大一点，寿命就短得多，可以相差许多个数量级 [2]；G. Gamow[3] 以及 R. W. Gurney 与 E. U. Condon[4] 独立地指出， α 粒子是穿过核外的库仑势垒逃出来的，寿命对能量的极端敏感正是隧穿概率指数依赖的体现。

半个世纪后，IBM 苏黎世实验室的 G. Binnig、H. Rohrer、Ch. Gerber 与 E. Weibel 让一根钨针尖与铂表面隔着可调的真空隙通过电流。1981 年 3 月 16 日夜里，他们第一次得到了电流随间隙指数变化的清晰曲线 [5]，并以“可控真空隙中的隧穿”为题发表 [6]。有趣的是，最初由斜率算出的势垒高度只勉强达到约 1 eV，远低于金属功函数；重新标定压电陶瓷后发现其实

际灵敏度只有厂家标称值的一半，修正后得到大于 4 eV 的势垒高度，这才确认了真空隧穿 [5] (第 9 节的实验题正是这一问题的翻版)。第一台装置的隔振靠把整个隧道单元用超导磁悬浮托在铅碗上，每小时耗液氮约 20 L，后改为带涡流阻尼的两级弹簧 [5]。

1982 年他们用这台“扫描隧道显微镜”(STM)看到了 CaIrSn_4 (110) 表面上单原子高的台阶和 $\text{Au}(110)$ 表面零点几埃到两埃高的起伏 [7]; 1983 年在实空间分辨了硅 (111) 面的 7×7 重构，支持“每个原胞 12 个吸附原子”的模型 [8]^a。1986 年诺贝尔物理学奖一半授予电子显微镜的发明者 E. Ruska，另一半由 Binnig 与 Rohrer 分享，“以表彰他们设计了扫描隧道显微镜” [9]。1990 年 D. M. Eigler 与 E. K. Schweizer 在 4 K 下用 STM 针尖把氩原子在镍单晶表面上逐个推动，排出了“IBM”三个字母 [10]; 1993 年 M. F. Crommie、C. P. Lutz 与 Eigler 用 48 个铁原子在铜 (111) 面上围成半径 71.3 Å 的圆环——“量子围栏”——并在其中看到了二维电子的驻波与分立能级 [11, 12]。

^a晶体学记号： (hkl) 表示一族晶面（密勒指数，与该晶面在三个晶轴上截距的倒数成比例）， $[hkl]$ 表示晶体中的一个方向。**原胞**是晶体中按周期重复的最小单元。表面原子常会离开体内的位置重新排列，使表面的周期变大，称为**表面重构**；“ 7×7 ”指表面周期是体内对应周期的 7 倍。**吸附原子**是附着在表面之上的额外原子。

这些成就背后的物理，核心只有三件事：

1. **经典禁区中的波函数按指数衰减**：穿过宽 d 的势垒，透射概率约为 $e^{-2\kappa d}$ ，对金属中的电子 $\kappa \approx 1 \text{ Å}^{-1}$ ，间隙每变 1 Å，电流约变一个数量级——这是 STM 纵向灵敏度和横向分辨率的共同来源；
2. **势垒形状不同，指数不同**：WKB 近似 $T \approx \exp(-2 \int \kappa dx)$ 把方势垒、三角形势垒（场致发射）与库仑势垒（ α 衰变）统一起来；
3. **隧穿电流测的是“电子态”而不只是“高度”**：微分电导 dI/dV 正比于样品在针尖位置的局域态密度，因而能直接“看见”量子围栏中电子的驻波。

本讲目标 学完后你应当能够：(1) 由定态薛定谔方程、概率流与边界条件求方势垒的透射系数，并由厚势垒近似估计“每埃一个数量级”；(2) 由自由电子模型推出小偏压下 STM 的隧道电流 $I \propto V e^{-2\kappa d}$ ，理解表观势垒高度、横向分辨率与恒流反馈；(3) 由谐振子传递函数估计 STM 的隔振要求；(4) 掌握 WKB 近似的适用条件，推出 Fowler–Nordheim 公式与 Gamow 因子，解释 Geiger–Nuttall 定律；(5) 理解局域态密度与 dI/dV 谱，用贝塞尔函数求圆形量子围栏的能级与图样；(6) 完成一道由 $I-z$ 谱求表观势垒高度的数据处理题。

前置知识 普通物理中的德布罗意物质波、光电效应、简谐振动与受迫振动、静电学，以及微积分、复数。超出这一范围的内容——薛定谔方程、概率流、自由电子气与费米能级、WKB 近似、二维极坐标下的拉普拉斯算符与贝塞尔函数——都会在首次使用前介绍。力学专题“原子力显微镜”可作对照阅读，但本讲自足。

建议学时 2 学时：第 3–4 节约 35 分钟，第 5 节约 30 分钟，第 6 节约 25 分钟，第 7 节约 15 分钟，例题与实验题选讲 15 分钟，其余课后阅读。

推导路线 定态薛定谔方程 → 概率流与边界条件 → 方势垒透射系数 (第 4 节) → 自由电子气中的隧穿电流 (第 5 节); 方势垒的 $e^{-2\kappa d}$ → 缓变势垒的 WKB 公式 → 场致发射、 α 衰变 (第 6 节); 隧穿电流 → 局域态密度 → 量子围栏 (第 7 节)。

2 名词与符号

表 1 本讲主要符号 (量子力学与隧穿部分)

符号	含义	单位
$\Psi(x, t), \psi(x)$	波函数、定态波函数	$\text{m}^{-1/2}$ (一维)
$\rho = \Psi ^2$	概率密度 (一维为单位长度的概率)	m^{-1}
j	概率流密度 (一维为单位时间穿过某点的概率)	s^{-1}
m	电子质量 m_e (α 衰变中为约化质量 μ)	kg
E	粒子能量 (金属中自导带底量起, 导带底见 §3.5)	eV
$U(x)$	势能 (区别于电压 V)	eV
U_0, d	方势垒高度、宽度	eV, Å
$k = \sqrt{2m(E - U)}/\hbar$	经典允许区的波数	Å ⁻¹
$\kappa = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar$	经典禁区的衰减常数	Å ⁻¹
T, R	透射系数、反射系数	1
r, t	反射、透射振幅 (复数)	1
E_F, k_F	费米能、费米波数	eV, Å ⁻¹
n_e	导电电子数密度	m^{-3}
$g(E)$	单位体积的态密度 (含自旋)	$\text{eV}^{-1}\text{m}^{-3}$
$f(E)$	费米-狄拉克占据概率	1
ϕ	功函数; $\bar{\phi}$ 为两电极平均	eV
ϕ_{ap}	表观势垒高度	eV
F	电场强度 (为避免与能量 E 混淆)	V/nm

注：记号提醒

势能一律记 U , 电压记 V ; 电场强度记 F (场发射文献的习惯); Gamow 因子记 G_G , 以免与电导 G 混淆; 电流密度 J 与贝塞尔函数 J_l 由下标与自变量区分; 表面倒格矢记为粗体 $\mathbf{G}$, 其长度 G (或 G_1) 只出现在 $q_G = \sqrt{\kappa_0^2 + G^2}$ 这类组合中, 与电导 G 无关; 其他易混记号: 态密度 $g(E)$ 与贝塞尔径向函数 $\mathcal{R}(r)$; 概率密度与局域态密度 ρ, ρ_s 与围栏墙的反射率 R_w ; 隧穿前因子 P 与留存概率 $\Pi(t)$; 反射系数 R 与针尖半径 R_t (STM 与场发射针尖同用此记号)、核半径 R_N 、围栏半径 R_c ; 反馈时间常数 τ 与能级寿命 τ_L ; α 衰变能 Q 与品质因数 Q_1, Q_2 (总带下标); 隧穿前因子 P 与围栏周长 L_c ; 间隙 d 与压电系数 d_{31} ; α 粒子与精细结构常数 α_f 、线膨胀系数 α_T 。例题与实验题中的局部记号 (如 Θ, W, γ) 在各题中定义。STM、 α 衰变与量子围栏部分的符号见表 2 (排在第 3 节开头)。常用组合: $\hbar^2/(2m_e) = 3.810 \text{ eV Å}^2$, $\hbar c = 1973.3 \text{ eV Å}$, $e^2/(4\pi\epsilon_0) = 14.400 \text{ eV Å} = 1.4400 \text{ MeV fm}$ 。由第一个组合, $\kappa = \sqrt{(U - E)/(3.810 \text{ eV Å}^2)} = 0.5123\sqrt{(U - E)/\text{eV}} \text{ Å}^{-1}$ 。

3 前置模块：量子力学最低限度

本节从普通物理中的“物质波”出发，引入本讲需要的全部量子力学工具：波函数及其概率解释、定态薛定谔方程、概率流、边界条件，以及描述金属中电子的自由电子气模型。

表 2 本讲主要符号 (STM、 α 衰变与量子围栏部分)

符号	含义	单位
V	样品相对针尖的偏压	V
I, J	隧道电流、电流密度	A, A/m ²
$z, \Delta z$	针尖高度、相对位移	Å
R_t	针尖顶端曲率半径	Å
$G = I/V, G_0 = 2e^2/h$	隧道电导、电导量子	S
$E_z, E_{\parallel}$	电子能量中垂直、平行于界面的部分	eV
ε_d	隧穿电子“法向能量”的分布宽度	eV
a, G_1	表面晶格常数、最短倒格矢长度	Å, Å ⁻¹
τ, τ_L	反馈时间常数、能级寿命	s
f_1, f_2	隔振平台、STM 头的固有频率	Hz
b_{FN}	第二 FN 常数 $4\sqrt{2m}/(3e\hbar)$	eV ^{-3/2} V/nm
Z, Q	子核电荷数、 α 衰变能	1, MeV
R_N, b	核半径、库仑势垒外转折点	fm
G_G	Gamow 因子 $2 \int \kappa dr$	1
ν, λ_α	α 粒子撞击势垒的频率、衰变常量	s ⁻¹
$\rho_s(\mathbf{r}, E)$	样品的局域态密度	eV ⁻¹ m ⁻³
m^*, E_0	表面态有效质量、带底能量	m_e , eV
R_c	量子围栏半径	Å
$J_l(x), x_{l,n}$	l 阶贝塞尔函数及其第 n 个零点	1
Γ, Γ_F	能级展宽 (半高全宽)、其在 E_F 处的值	meV
ε_{FN}	场发射电子的能量分布宽度	eV

3.1 物质波与波函数

德布罗意关系把粒子的动量 p 、能量 E 与波的波长 λ 、角频率 ω 联系起来：

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k, \quad E = \hbar \omega, \quad (3.1)$$

其中 $k = 2\pi/\lambda$ 为波数， $\hbar = h/2\pi$ 。动能 7 eV 的电子 (铜中费米能级附近的电子，见第 3.5 节) $k = \sqrt{2mE}/\hbar = 1.36 \text{ Å}^{-1}$ ， $\lambda = 4.6 \text{ Å}$ ，与原子间距 (2–3 Å) 同量级——原子尺度上电子的波动性起决定作用。

定义：波函数与概率解释

描述一个粒子的状态用复函数 $\Psi(x, t)$ ，称为**波函数**。玻恩的概率解释：在 t 时刻于 $[x, x + dx]$ 内发现粒子的概率为 $|\Psi(x, t)|^2 dx$ ， $\rho \equiv |\Psi|^2$ 称为**概率密度**。对束缚在有限区域的粒子，要求 $\int |\Psi|^2 dx = 1$ (归一化)。

自由运动、动量确定为 $\hbar k$ 的粒子用平面波 $\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ 描述。它的概率密度 $|A|^2$ 处处相同，无法归一化。处理散射与隧穿时我们换一种理解：把平面波看作一束粒子流， $|A|^2$ 是束流中单位长度上的平均粒子数。下文所有“透射概率”都是透射粒子数与入射粒子数之比，与 A 的绝对大小无关。

3.2 定态薛定谔方程

第一步：自由粒子满足什么方程？ 对平面波 $\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ ，求导得

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \hbar\omega \Psi = E \Psi, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi. \end{aligned}$$

自由粒子的能量就是动能， $E = p^2/2m$ ，所以每个平面波都满足

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (3.2)$$

这是一个线性方程：不同 k 的平面波的任意叠加（例如一个波包）仍满足它。物质波能干涉、能叠加，所以支配它的方程必须是线性的。

第二步：加上势能。 若粒子处在势能为常数 U_0 的区域，能量关系变为 $E = p^2/2m + U_0$ ，同样的推理给出在式 (3.2) 右边多一项 $U_0\Psi$ 。对于随位置变化的势能 $U(x)$ ，薛定谔把它推广为

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi. \quad (3.3)$$

这一步不是推导，而是假设（量子力学的基本方程）：它在势能缓变处退化为上面的局部平面波关系，而它的全部预言（原子光谱、隧穿……）都已被实验证实。

第三步：能量确定的态。 试探 $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ （时间部分就是 $E = \hbar\omega$ 的振荡），代入式 (3.3)，左边 $i\hbar\partial_t\Psi = E\psi e^{-iEt/\hbar}$ ，两边约去公共因子 $e^{-iEt/\hbar}$ ：

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi} \quad (3.4)$$

这就是定态薛定谔方程。这种态的概率密度 $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ 不随时间变化，故称定态。下文只讨论定态， E 为给定的能量。

第四步：读懂这个方程。 把式 (3.4) 改写为 $\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi$ （撇号表示对 x 求导）：

- 经典允许区 $E > U$ ： $\psi'' = -k^2\psi$ ， $k = \sqrt{2m(E - U)}/\hbar$ 。 U 为常数时解为 $e^{\pm ikx}$ ，即动量 $\pm\hbar k$ 的平面波， $\hbar k = \sqrt{2m(E - U)}$ 正是经典动量。
- 经典禁区 $E < U$ ：经典粒子的动能为负，不可能到达。方程变为

$$\begin{aligned} \psi'' &= \kappa^2\psi, \\ \kappa &\equiv \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

U 为常数时通解为 $\psi = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$ ：一个衰减、一个增长的实指数，**不振荡**。若禁区一直延伸到 $x \rightarrow +\infty$ ，增长解会使概率发散，必须 $D = 0$ ，波函数在禁区内按 $e^{-\kappa x}$ 衰减。粒子能“渗入”经典禁区，这是隧穿的根源。

3.3 概率流密度

隧穿问题关心的是“有多少粒子穿了过去”，需要一个描述概率流动的量。

推导：一维概率流与连续性方程

1. 对 $\rho = \Psi^* \Psi$ 求时间导数： $\partial_t \rho = \Psi^* \partial_t \Psi + \Psi \partial_t \Psi^*$ 。
2. 由式 (3.3) 得 $\partial_t \Psi = \frac{i\hbar}{2m} \Psi'' - \frac{i}{\hbar} U \Psi$ ；取复共轭 (U 为实数) 得 $\partial_t \Psi^* = -\frac{i\hbar}{2m} \Psi^{*''} + \frac{i}{\hbar} U \Psi^*$ 。
3. 代入第 1 步，含 U 的两项 $-\frac{i}{\hbar} U |\Psi|^2 + \frac{i}{\hbar} U |\Psi|^2$ 相消：

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \Psi'' - \Psi \Psi^{*''}) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \partial_x (\Psi^* \Psi' - \Psi \Psi^{*'}) , \end{aligned}$$

最后一步用了 $\partial_x (\Psi^* \Psi' - \Psi \Psi^{*'}) = \Psi^* \Psi'' - \Psi \Psi^{*''}$ (交叉项 $\Psi^{*'} \Psi'$ 相消)。

4. 定义**概率流密度**

$$\begin{aligned} j &\equiv -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \Psi' - \Psi \Psi^{*'}) \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \Psi') , \end{aligned} \quad (3.6)$$

(第二个等号： $\Psi^* \Psi' - \Psi \Psi^{*'} = w - w^* = 2i \text{Im } w$, $w \equiv \Psi^* \Psi'$)，于是

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0. \quad (3.7)$$

式 (3.7) 与电荷守恒的连续性方程同形：对 $[a, b]$ 积分得 $\frac{d}{dt} \int_a^b \rho dx = j(a) - j(b)$ ，区间内概率的增加等于从左端流入减去从右端流出，所以 j 就是单位时间流过某点的概率 ($j > 0$ 表示向 $+x$ 流动)。

检验：三个检验

- **平面波**： $\Psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$, $\Psi^* \Psi' = ik|A|^2$, $j = |A|^2 \hbar k / m = |A|^2 v$ 。“线密度 $\times$ 速度 = 流量”，与经典粒子流一致。
- **定态中 j 处处相同**：定态的 ρ 不随时间变，由式 (3.7), $\partial_x j = 0$ 。这一性质给出“入射流 = 反射流 + 透射流”。
- **禁区中的流**： U 为常数的禁区内 $\psi = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}$, $\psi' = -\kappa Ce^{-\kappa x} + \kappa De^{\kappa x}$ 。展开 $\psi^* \psi'$, $|C|^2$ 、 $|D|^2$ 项是实数，只有交叉项 $\kappa(C^* D - D^* C) = 2i\kappa \text{Im}(C^* D)$ 贡献虚部：

$$j = \frac{2\hbar\kappa}{m} \text{Im}(C^* D). \quad (3.8)$$

j 与 x 无关，符合上一条。单独一个衰减指数 ($D = 0$) 不携带任何概率流；隧穿流来自衰减分量与增长分量的干涉。

3.4 边界条件

势能在某点 $x = a$ 突变（有限跳跃）时，两侧的解如何衔接？

推导： ψ 与 ψ' 连续

把式 (3.4) 写成 $\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E)\psi$ ，在 $[a - \epsilon, a + \epsilon]$ 上积分：

$$\psi'(a + \epsilon) - \psi'(a - \epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} (U - E)\psi \, dx.$$

U 有限、 ψ 有界时，右边的被积函数有界，积分区间长 $2\epsilon \rightarrow 0$ ，右边 $\rightarrow 0$ 。所以 ψ' 在 $x = a$ 连续。 ψ' 有限意味着 ψ 不会跳跃， ψ 也连续。

注：无限高势壁

若 $x > a$ 处 $U \rightarrow \infty$ ，禁区内 $\kappa \rightarrow \infty$ ，波函数在壁内的衰减长度 $1/\kappa \rightarrow 0$ ，于是 $\psi(a) = 0$ ，而 ψ' 可以跳变。第 7.3 节的“硬壁”量子围栏用的就是这一条件。

例题：热身：台阶势与电子的“外溢”

金属表面最粗略的模型： $x < 0$ 处 $U = 0$ （金属内）， $x > 0$ 处 $U = U_0$ （真空），电子能量 $E < U_0$ 从左入射。求反射系数与电子在真空中的渗透深度。

解答

1. 两区的解： $\psi = e^{ikx} + re^{-ikx}$ ($x < 0$ ，入射 + 反射)， $\psi = ce^{-\kappa x}$ ($x > 0$ ，禁区延伸到无穷，只留衰减解)。
2. $x = 0$ 处 ψ 连续： $1 + r = c$ ； ψ' 连续： $ik(1 - r) = -\kappa c$ 。
3. 消去 c ： $ik - ikr = -\kappa - \kappa r$ ，得 $r = -\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}$ 。分子分母互为（相差符号的）复共轭， $|r| = 1$ ：全反射。这与式 (3.8) 一致：禁区里只有衰减分量，概率流为零，入射流只能全部反射回去。
4. 真空中 $|\psi|^2 = |c|^2 e^{-2\kappa x}$ ，概率密度降到 $1/e$ 的距离为 $1/(2\kappa)$ 。取 $U_0 - E = \phi = 4.5 \text{ eV}$ （费米能级处的电子， ϕ 为功函数，见第 3.5 节）， $\kappa = 0.5123\sqrt{4.5} = 1.087 \text{ \AA}^{-1}$ ， $1/(2\kappa) = 0.46 \text{ \AA}$ 。

金属表面外大约半埃内仍有电子的“概率云”。当另一块金属（针尖）靠近到几埃时，两侧的指数尾巴开始交叠——电子就能从一侧穿到另一侧。

3.5 金属中电子的最简模型：费米能级与功函数

假设：自由电子气模型

1. 金属中的导电电子彼此独立，在由离子实“抹平”后的均匀势能中自由运动（取这个势能为能量零点，即“导带底”）；
2. 金属表面外是真空，电子势能突然升高（台阶势）；
3. 电子服从泡利不相容原理：每个空间态最多容纳自旋相反的两个电子。

这一模型忽略了离子实周期势造成的能带结构与电子间的相互作用，但对碱金属、贵金属的导电电子给出正确的量级。

推导：费米能与态密度

1. **数态**。把电子放在边长 L 的立方体中，采用周期性边界条件 $\psi(x+L) = \psi(x)$ (y, z 同理)。 L 很大时，体内的态数与边界条件的具体形式无关（边界只影响靠近表面的一层），周期条件只是计数最方便的一种选择。平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 满足它要求 $k_x L = 2\pi n_x$ (n_x 为整数)， k_y, k_z 同理。于是允许的 $\mathbf{k}$ 在“ k 空间”中排成边长 $2\pi/L$ 的立方点阵，每个点占体积 $(2\pi/L)^3$ 。
2. **填充**。绝对零度下 N 个电子从能量最低的态填起，每个 $\mathbf{k}$ 填两个（自旋向上、向下）。 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ 只依赖于 $|\mathbf{k}|$ ，所以被占据的态构成半径 k_F 的球（费米球）：

$$N = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3 k_F^3}{3\pi^2},$$

$$n_e = \frac{N}{L^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}.$$

3. **费米能**。最高占据态的能量

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3}. \quad (3.9)$$

4. **态密度**。把第 2 步中的 k_F 换成任意 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ，单位体积内能量低于 E 的态数为 $k^3/(3\pi^2) = (2mE/\hbar^2)^{3/2}/(3\pi^2)$ 。对 E 求导得单位体积、单位能量间隔内的态数：

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (3.10)$$

检验：铜的数值

铜每个原子贡献一个导电电子， $n_e = 8.47 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ [13]： $k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3} = 1.36 \text{ \AA}^{-1}$ ， $E_F = 3.810 \times 1.36^2 = 7.0 \text{ eV}$ ，费米速度 $v_F = \hbar k_F / m = 1.57 \times 10^6 \text{ m/s}$ ，与 Ashcroft–Mermin 的表值 ($E_F = 7.00 \text{ eV}$ ， $v_F = 1.57 \times 10^6 \text{ m/s}$) 一致 [13]。金的 $E_F = 5.53 \text{ eV}$ [13]。

定义：费米-狄拉克分布

温度 $T > 0$ 时，能量为 E 的态被电子占据的概率为

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}. \quad (3.11)$$

它是一个在 E_F 处被“磨圆”的台阶： E_F 以下几个 $k_B T$ 处 $f \approx 1$ ，以上几个 $k_B T$ 处 $f \approx 0$ 。本讲只用到这个形状（其推导属于统计物理）。室温下 $k_B T = 26 \text{ meV}$ ，液氮温度下仅 0.34 meV ，都远小于 E_F ，所以 $T = 0$ 的“填满到 E_F ”图像是很好的近似。

定义：功函数

把一个电子从金属内的费米能级移到金属外、静止于表面附近真空中（“真空能级”）所需的最小能量，称为**功函数** ϕ 。它就是光电效应中的逸出功：频率低于 ϕ/h 的光不能打出电子。在自由电子气模型中，表面台阶的高度为 $U_0 = E_F + \phi$ （图 1a）。

表 3 几种金属多晶样品的功函数（eV，光电法；括号内为接触电势法）[14]。数值还与晶面、表面清洁程度有关，可相差零点几电子伏。

W	Cu	Ag	Au	Ni	Pt
4.55	4.65 (4.51)	4.26 (4.29)	5.10 (5.28)	5.24 (5.15)	5.36 (5.63)

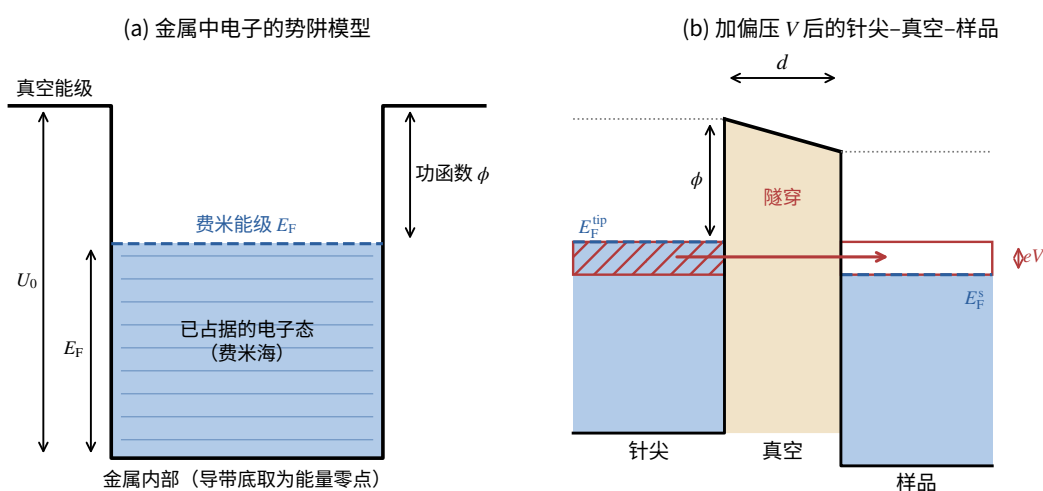


图 1 (a) 自由电子气的势阱模型：导带底为能量零点，电子填到费米能级 E_F ，真空能级比 E_F 高出功函数 ϕ （图中取铜的量级 $E_F = 7 \text{ eV}$ 、 $\phi = 4.5 \text{ eV}$ ）。(b) 针尖与样品之间隔着宽 d 的真空，样品相对针尖加正偏压 V ：样品中电子的能量整体降低 eV ，真空中电势线性变化，势垒成为梯形。针尖中能量在 $[E_F^s, E_F^{\text{tip}}]$ 内的电子（斜线）面对样品一侧的空态（白框），可以隧穿过去。

两块金属之间的费米能级 两块金属用导线连通时，电子从费米能级高的一侧流向低的一侧，直到两侧费米能级相等——这是电子的“平衡条件”（类似两个连通水箱的水面相平）。若在两块金属之间接入电压 V 的电源，使样品的电势比针尖高 V ，则样品中电子（电荷 $-e$ ）的势能整体降低 eV ，两侧费米能级相差 eV （图 1b）。两种金属功函数不同（ $\phi_t \neq \phi_s$ ）时，即使 $V = 0$ ，费米能级对齐后两侧的真空中能级也相差 $\phi_t - \phi_s$ ，间隙中的势垒是两端高度为 ϕ_t 、 ϕ_s 的梯形；第 5.1 节的推导框

“为什么用平均势垒”将说明，它与高度为平均值 $\bar{\phi} = (\phi_t + \phi_s)/2$ 的方势垒等效（例题 2 推广到二阶）。

4 方势垒：隧穿的基本事实

4.1 问题与透射系数的定义

考虑一维方势垒： $0 < x < d$ 内 $U = U_0$ ，其余处 $U = 0$ ；能量 $E < U_0$ 的电子从左边入射（图 2a）。三个区域的解分别为

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx}, & x < 0, \\ C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x}, & 0 < x < d, \\ t e^{ikx}, & x > d, \end{cases} \quad (4.1)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

入射振幅取 1； $x > d$ 处只有向右的透射波，因为右边没有入射源。 r 、 t 分别称为反射振幅与透射振幅。

定义：透射系数与反射系数

透射系数 $T = \text{透射概率流} / \text{入射概率流}$ ，反射系数 $R = \text{反射概率流（取正值）} / \text{入射概率流}$ 。由式 (3.6)，入射波 e^{ikx} 的流为 $\hbar k/m$ ，透射波的流为 $|t|^2 \hbar k/m$ ，所以 $T = |t|^2$ ，同理 $R = |r|^2$ （两侧 k 相同时）。

检验： $R + T = 1$

在 $x < 0$ 处计算总流：

$$\begin{aligned} \psi^* \psi' &= ik \left(e^{-ikx} + r^* e^{ikx} \right) \left(e^{ikx} - r e^{-ikx} \right) \\ &= ik \left(1 - |r|^2 + r^* e^{2ikx} - r e^{-2ikx} \right). \end{aligned}$$

括号中后两项互为相反数的共轭（ $w^* - w$ 型），是纯虚数，乘以 ik 后变成实数，不贡献虚部。所以 $j_{x<0} = \frac{\hbar k}{m}(1 - |r|^2)$ 。定态中 j 处处相同，等于 $x > d$ 处的 $\frac{\hbar k}{m}|t|^2$ ，得 $R + T = 1$ ：入射流 = 反射流 + 透射流。

四个未知数 r, C, D, t 由 $x = 0$ 与 $x = d$ 两处 ψ, ψ' 连续的四个方程确定：

$$\begin{aligned} x = 0: \quad 1 + r &= C + D, \\ ik(1 - r) &= -\kappa C + \kappa D, \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} x = d: \quad C e^{-\kappa d} + D e^{\kappa d} &= t e^{ikd}, \\ -\kappa C e^{-\kappa d} + \kappa D e^{\kappa d} &= ik t e^{ikd}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

4.2 精确解与厚势垒近似

解这个线性方程组只需代数（附录 A），结果为

$$T = \left[1 + \frac{U_0^2 \sinh^2(\kappa d)}{4E(U_0 - E)} \right]^{-1} \quad (4.4)$$

其中 $\sinh y = (e^y - e^{-y})/2$ 。STM 中的情形是 $\kappa d \sim 5-10$ 的“厚”势垒，此时有一条更有物理意义的近似推导。

推导：厚势垒近似

1. 由出口条件求势垒内的两个分量。把式 (4.3) 第一式乘以 κ 再分别加、减第二式：

$$\begin{aligned} D e^{\kappa d} &= \frac{\kappa + ik}{2\kappa} t e^{ikd}, \\ C e^{-\kappa d} &= \frac{\kappa - ik}{2\kappa} t e^{ikd}. \end{aligned}$$

两式相除： $D/C = e^{-2\kappa d}(\kappa + ik)/(\kappa - ik)$ ， $|D/C| = e^{-2\kappa d}$ 。势垒内主要是从左界面开始衰减的分量 $C e^{-\kappa x}$ ；增长分量 $D e^{\kappa x}$ 在左界面处只有 C 的 $e^{-2\kappa d}$ 倍，只在右界面附近才与衰减分量可比。按式 (3.8)，正是这两个分量的干涉携带了透射流。

2. 近似。小参量 $e^{-2\kappa d}$ ：在 $x = 0$ 的条件式 (4.2) 中略去 D （相对误差 $\mathcal{O}(e^{-2\kappa d})$ ），得 $1 + r = C$ 、 $ik(1 - r) = -\kappa C$ ，消去 r ：

$$C = \frac{2ik}{ik - \kappa} = \frac{2k}{k + i\kappa}.$$

这正是台阶势中的透射振幅（热身例题中的 c ）：左界面上的波函数与势垒无限厚时相同。

3. 透射振幅。由第 1 步的 C 式解出 $t e^{ikd} = \frac{2\kappa}{\kappa - ik} C e^{-\kappa d}$ ，取模：

$$|t| = \frac{2\kappa}{\sqrt{\kappa^2 + k^2}} \cdot \frac{2k}{\sqrt{k^2 + \kappa^2}} e^{-\kappa d}.$$

4. 平方，并用 $\hbar^2 k^2/2m = E$ 、 $\hbar^2 \kappa^2/2m = U_0 - E$ 、 $\hbar^2(k^2 + \kappa^2)/2m = U_0$ ：

$$\begin{aligned} T &\approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa d} \\ &= \left[16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right) e^{-2\kappa d} \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

检验：与精确解比较、量纲与极限

- 在式 (4.4) 中令 $\kappa d \gg 1$ ： $\sinh^2(\kappa d) \approx e^{2\kappa d}/4$ ，且 1 相对于第二项可略去， $T \approx \frac{16E(U_0-E)}{U_0^2} e^{-2\kappa d}$ ，与式 (4.5) 相同。脚本数值比较： $E = 7 \text{ eV}$ 、 $U_0 = 11.5 \text{ eV}$ 时， $d = 2 \text{ \AA}$ 处近似式偏高 2.4%， $d = 5 \text{ \AA}$ 处偏高 4×10^{-5} （图 2b）。
- 量纲： κd 、 E/U_0 无量纲， T 无量纲。
- 极限： $d \rightarrow 0$ 时式 (4.4) 给出 $T \rightarrow 1$ （没有势垒）； $E \rightarrow U_0$ 时 $\sinh^2(\kappa d)/(U_0 - E) \rightarrow$

$\kappa^2 d^2 / (U_0 - E) = 2md^2 / \hbar^2$, $T \rightarrow [1 + mU_0 d^2 / (2\hbar^2)]^{-1}$, 有限且连续。 $E > U_0$ 时把 κ 换成 ik' ($k' = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar$), $\sinh^2 \rightarrow -\sin^2$, 在 $k'd = n\pi$ 处 $T = 1$ (共振透射)。

- 前因子 $16(E/U_0)(1-E/U_0)$ 最大为 4 ($E = U_0/2$ 时), 对铜型参数 $E = 7\text{ eV}$ 、 $U_0 = 11.5\text{ eV}$ 为 3.8。它可以大于 1, 但只要 $e^{-2\kappa d}$ 足够小, $T \ll 1$, 与 $T \leq 1$ 不矛盾。

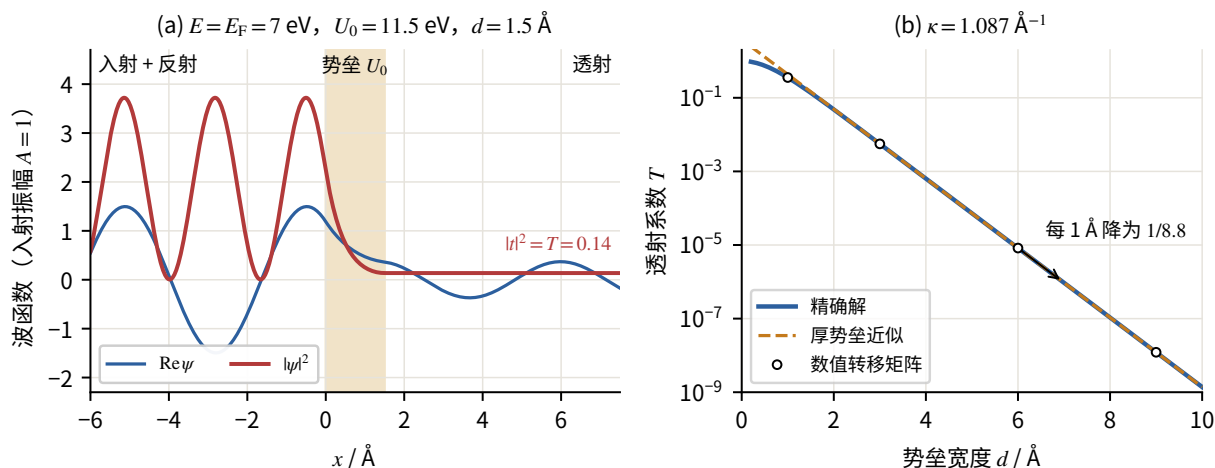


图 2 (a) 方势垒中的定态波函数 (精确解, $E = E_F = 7\text{ eV}$, $U_0 = 11.5\text{ eV}$, 为能看清透射部分取很薄的 $d = 1.5\text{ Å}$): 左侧入射波与反射波干涉成部分驻波, 势垒内近似指数衰减, 右侧为振幅 $|t|$ 的行波, $|\psi|^2$ 为常数 $T = 0.14$ 。(b) 透射系数随宽度的变化: 式 (4.4) (实线)、式 (4.5) (虚线) 与独立的数值转移矩阵解 (圆点, 附录 B)。

4.3 一埃一个数量级

对金属中费米能级处的电子, $U_0 - E$ 就是功函数 ϕ (图 1a), 于是

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m\phi}}{\hbar} = 0.5123\sqrt{\phi/\text{eV}}\text{ Å}^{-1},$$

$$\frac{T(d)}{T(d+1\text{ Å})} = e^{2\kappa \times 1\text{ Å}}. \quad (4.6)$$

$\phi = 4\text{ eV}$ 时 $\kappa = 1.02\text{ Å}^{-1}$, $e^{2\kappa \cdot 1\text{ Å}} = 7.8$; $\phi = 5\text{ eV}$ 时 $\kappa = 1.15\text{ Å}^{-1}$, 比值为 9.9。间隙每增大 1 Å , 透射系数约减小一个数量级——Binnig 与 Rohrer 在诺贝尔演讲中称之为真空中“每埃约 10 倍”[5]。原子的直径约 $2\text{--}3\text{ Å}$, 所以针尖越过一个原子台阶时电流可变两三个数量级 [7]。

要点

隧穿概率 $\propto e^{-2\kappa d}$: 指数中的 κd 是“势垒宽度 / 波函数衰减长度”。前因子只依赖于能量比, 变化缓慢; 所有灵敏度都来自指数。这是本讲后面所有结论的出发点。

交互演示: 改变能量 E 、势垒高度 U_0 与宽度 d , 观察波函数在势垒中的衰减、反射波与入射波形成的驻波, 以及精确透射系数与厚势垒近似的比较 ($E > U_0$ 时还可看到共振透射)。

网页版中此处为可调参数的交互动画 (演示编号 `stm-barrier`)。

注：电子“在势垒中”时能量守恒吗？

定态的能量 E 是确定的，没有“借能量”。若想在势垒中找到电子，需要把它定位在衰减长度 $1/\kappa$ 以内，由不确定关系这会给它 $\Delta p \gtrsim \hbar\kappa$ 的动量涨落，对应的动能 $\hbar^2\kappa^2/2m = U_0 - E$ 恰好补足经典禁区的“能量亏空”。所以“在禁区中观测到粒子”与能量守恒并不矛盾。

5 STM 的隧道电流

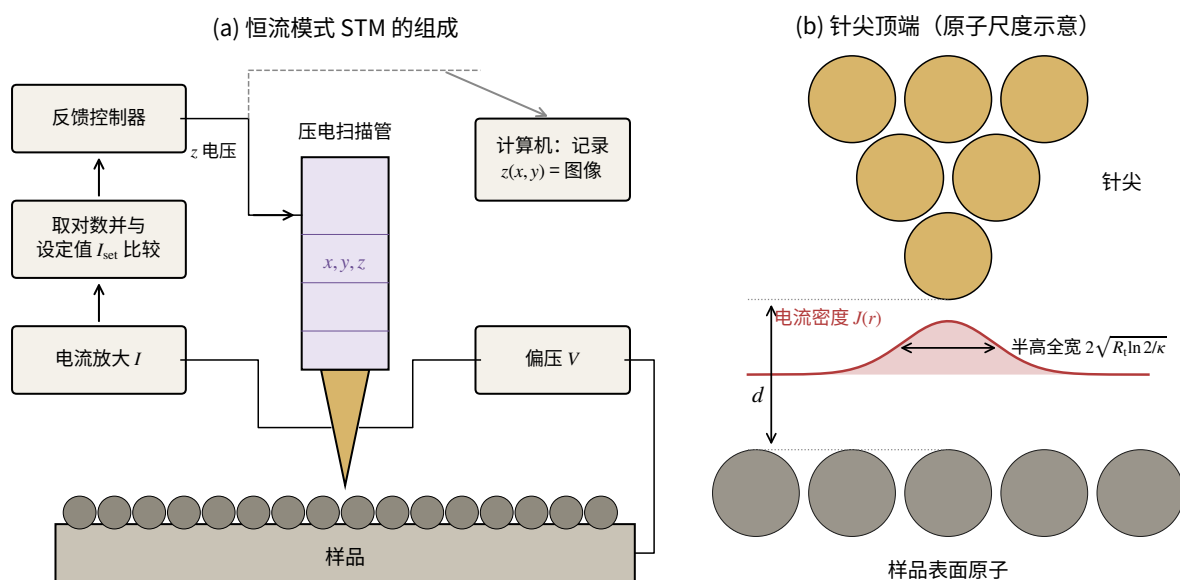


图 3 (a) 恒流模式 STM 的组成：针尖装在压电扫描管上，样品加偏压 V ，隧道电流经放大、取对数后与设定值比较，反馈控制器调节针尖高度使电流恒定，记录下的 $z(x, y)$ 即为图像。(b) 针尖顶端的原子尺度示意：电流集中在最前端原子下方，电流密度 $J(r)$ 的分布按第 5.4 节的式 (5.3) 计算 ($R_t = 4 \text{ \AA}$, $\kappa = 1.1 \text{ \AA}^{-1}$)。

图 3 是 STM 的工作原理。针尖与样品之间的真空隙通常为几埃到十埃，偏压从毫伏到几伏，电流在纳安量级 [7, 15]。本节由第 3-4 节的工具推出隧道电流的表达式，再讨论它对间隙、横向位置与振动的依赖。

5.1 从一维透射到三维电流密度

假设：平面电极模型

1. 针尖与样品近似为两块平行的半无限金属（局部平面近似，曲率的影响见第 5.2 节），都用自由电子气描述；
2. 间隙中的势能只依赖于垂直于表面的坐标 z ，小偏压下取为高度 $E_F + \bar{\phi}$ 的方势垒 ($\bar{\phi}$ 为两电极功函数的平均，理由见下面的推导框)；忽略镜像势（第 5.3 节讨论)；
3. 隧穿是弹性的：电子穿过势垒时能量不变；
4. 温度足够低， $k_B T$ 远小于下文的能量宽度 ε_d (约 0.8 eV)。线性区内 $J \propto V$ 对任意温度都成立（见第 5 步），所以不需要 $k_B T \ll eV$ ；后者只在讨论能谱分辨率（第 7.1 节）时

才需要。

推导：为什么用平均势垒 $\bar{\phi}$

针尖与样品功函数不同时，费米能级对齐后真空中的电势线性变化（第 3.5 节），费米能级处的电子面对的势垒高度 $W(z)$ 从 ϕ_t 线性变到 ϕ_s 。把势垒切成许多薄层，每层内高度近似不变，波函数振幅衰减 $e^{-\kappa\Delta z}$ ；各层相乘，透射指数为 $\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^d \sqrt{W} dz$ （方势垒时就是 $2\kappa d$ ；这一“WKB”结果的推导与适用条件见第 6 节）。

1. 记 $\bar{W} = (\phi_t + \phi_s)/2$, $W = \bar{W} + w(z)$, w 在 $[-\Delta/2, \Delta/2]$ 内线性变化, $\Delta = \phi_s - \phi_t$ 。
2. 在 $\bar{W}$ 处展开: $\sqrt{W} = \sqrt{\bar{W}} \left[1 + \frac{w}{2\bar{W}} - \frac{w^2}{8\bar{W}^2} + \cdots \right]$ 。
3. 积分: w 关于间隙中点反对称, 一阶项积分为零; 二阶项平均值为 $\Delta^2/12$ 。于是

$$\begin{aligned} \int_0^d \sqrt{W} dz \\ = d\sqrt{\bar{W}} \left[1 - \frac{1}{96} \left(\frac{\Delta}{\bar{W}} \right)^2 + \cdots \right]. \end{aligned}$$

$\Delta = 1\text{eV}$ 、 $\bar{W} = 4.5\text{eV}$ 时修正仅 5×10^{-4} : 线性变化的势垒与高度为平均值的方势垒等效。同理, 小偏压使势垒从 ϕ 线性降到 $\phi - eV$, 等效高度为 $\phi - eV/2$ (例题 2)。

推导：电流密度

1. **能量分成两部分。** 势能只依赖 z 时, 试探 $\psi = e^{i(k_x x + k_y y)} \chi(z)$, 代入三维定态方程 $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(z)\psi = E\psi$ (一维方程中的 $\partial^2/\partial x^2$ 在三维推广为 $\nabla^2 \equiv \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$, 即动能 $p^2/2m$ 中的 $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$), $\partial_x^2, \partial_y^2$ 各给出 $-k_x^2, -k_y^2$, 约去公共因子得

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \chi'' + U(z)\chi &= E_z \chi, \\ E_z \equiv E - E_{\parallel}, \quad E_{\parallel} &\equiv \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m}. \end{aligned}$$

平行于表面的运动是自由的, 平行动量守恒; 垂直方向是能量为 E_z 的一维隧穿问题, 透射系数为 $T(E_z)$ 。

2. **数入射电子。** 由第 3.5 节, 单位体积中波矢在 d^3k 内的电子数为 $2f(E) d^3k/(2\pi)^3$ (因子 2 来自自旋)。其中 $k_z > 0$ 的电子以速度 $v_z = \hbar k_z/m$ 奔向势垒, 单位时间穿过单位面积的数目为 $v_z \times$ 数密度, 其中比例 $T(E_z)$ 穿过势垒。
3. **净电流。** 设针尖在左、样品在右, 能量从针尖的导带底量起; 样品电势高 V , 其费米能级低 eV 。从左到右的电子流减去从右到左的电子流 (同一能量 E 的态, 透射系数相同):

$$\begin{aligned} J &= e \int_{k_z > 0} \frac{2 d^3k}{(2\pi)^3} v_z T(E_z) \\ &\quad \times [f_t(E) - f_s(E)], \end{aligned}$$

f_t 、 f_s 为针尖、样品中的占据概率。 $J > 0$ 表示电子由针尖流向样品，即电流由样品流向针尖。(严格说两个方向的电子流都要乘以“对面的态是空的”概率 $1 - f$ ，但 $f_t(1 - f_s) - f_s(1 - f_t) = f_t - f_s$ ，结果不变。)

4. **换成能量积分。** $v_z dk_z = (\hbar k_z/m)dk_z = dE_z/\hbar$ ；平行方向用极坐标 $dk_x dk_y = 2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel} = (2\pi m/\hbar^2)dE_{\parallel}$ 。代入：

$$J = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \int dE_z T(E_z) \times \int dE_{\parallel} \times [f_t(E_z + E_{\parallel}) - f_s(E_z + E_{\parallel})]. \quad (5.1)$$

5. **小偏压。**记 $f(E)$ 为针尖的占据概率，样品的能级低 eV ，故 $f_s(E) = f(E + eV)$ 。内层积分换元 $E = E_z + E_{\parallel}$ ：

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty [f(E_z + E_{\parallel}) - f(E_z + E_{\parallel} + eV)] dE_{\parallel} \\ &= \int_{E_z}^{E_z + eV} f(E) dE \approx eV f(E_z), \end{aligned}$$

最后一步对 eV 取一阶（线性响应），对任意温度成立；但第 6 步还要用到 $T(E_z)$ 在宽 eV 的窗口内变化不大，即 $eV \ll \varepsilon_d$ （相对误差约 $eV/2\varepsilon_d$ ）。绝对零度下 $f(E_z) = 1$ ($E_z < E_F$)。图像上：针尖中 $[E_F - eV, E_F]$ 内的电子面对样品一侧的空态（图 1b）。于是

$$J \approx \frac{e^2 m V}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} T(E_z) dE_z.$$

6. **哪些电子在隧穿？**由式 (4.5)， $T(E_z) \approx P e^{-2\kappa(E_z)d}$ ， $\kappa(E_z) = \sqrt{2m(E_F + \bar{\phi} - E_z)}/\hbar$ 。前因子 $P = 16E_z(U_0 - E_z)/U_0^2$ 随 E_z 缓变，取 $E_z = E_F$ 处的值。指数在 $E_z = E_F$ 附近展开到一阶： $d\kappa/dE_z = -m/(\hbar^2\kappa)$ ，记 $\kappa_0 = \kappa(E_F) = \sqrt{2m\bar{\phi}}/\hbar$ ，

$$\begin{aligned} 2\kappa(E_z)d &\approx 2\kappa_0d + \frac{E_F - E_z}{\varepsilon_d}, \\ \varepsilon_d &\equiv \frac{\hbar^2\kappa_0}{2md}. \end{aligned}$$

法向能量每比 E_F 低 ε_d ，透射系数就降为 $1/e$ ：只有“几乎正对势垒”的电子 (E_z 在 E_F 下 ε_d 以内) 有实质贡献。

7. **积分。** $\int_0^{E_F} e^{-(E_F - E_z)/\varepsilon_d} dE_z = \varepsilon_d (1 - e^{-E_F/\varepsilon_d}) \approx \varepsilon_d$ ($\varepsilon_d \ll E_F$)。代入第 5 步：

$$\boxed{J \approx \frac{e^2 V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \frac{P\kappa_0}{d} e^{-2\kappa_0 d}} \quad (5.2)$$

$$P = \frac{16E_F\bar{\phi}}{(E_F + \bar{\phi})^2}$$

检验：适用条件、量纲与数值

- **小参量**: $d = 5 \text{ \AA}$ 、 $\bar{\phi} = 4.5 \text{ eV}$ 时 $\kappa_0 = 1.087 \text{ \AA}^{-1}$, $\varepsilon_d = 3.810 \times 1.087/5 = 0.83 \text{ eV}$, 比 $E_F = 7 \text{ eV}$ 小一个量级。第 6 步指数展开的下一项为 $-(E_F - E_z)^2/(4\kappa_0 d \varepsilon_d^2)$, 在 $E_F - E_z \approx \varepsilon_d$ 处与一阶项之比约 $1/(4\kappa_0 d) \approx 5\%$; 对 e^{-x} 加权积分后 ($\int x^2 e^{-x} dx = 2$) 使 J 增大约 $1/(2\kappa_0 d) \approx 9\%$ 。这一修正随 d 缓变, 对 $d \ln J/dd$ 只改变 $\mathcal{O}(1/(2\kappa_0 d^2))$, 按此估计相对 $2\kappa_0$ 约 1%; 数值上因与 P 的变化部分相消, 实际只有约 0.3%。“小偏压”要求 $eV \ll \varepsilon_d$ (第 5 步) 且 $eV \ll \bar{\phi}$ (否则势垒形状变化, 见例题 2); “低温”要求 $k_B T \ll \varepsilon_d$, 室温 (26 meV) 也满足。
- **量纲**: $e^2/\hbar$ 的单位为 $\text{C}^2/(\text{J} \cdot \text{s}) = \text{A}/\text{V}$ (电导), 乘以 $V\kappa_0/d$ 得 A/m^2 。
- **数值核对**: 把精确的方势垒 $T(E_z)$ 代入式 (5.1) 直接数值积分 ($V = 10 \text{ mV}$), $d = 4, 6, 8 \text{ \AA}$ 时比式 (5.2) 大 10%、9%、7%, 主要来自上一条所说的指数二阶项 (约 $1/(2\kappa_0 d) = 11\%、8\%、6\%$), P 随 E_z 的变化只贡献 0.2%–2% (线性响应下两者相乘, $d = 8 \text{ \AA}$ 时为 $1.058 \times 1.024 \approx 1.08$, 与 7% 之差来自 10 mV 的有限偏压); 由数值结果求得的 $d \ln J/dd$ 与下文式 (5.6) 相差 0.6% (脚本 `verify_numeric.py`)。
- **结构**: $J \propto V$, 即小偏压下隧道结是一个欧姆电阻; $J \propto (1/d)e^{-2\kappa_0 d}$ 。Binnig 与 Rohrer 1982 年的综述也写作 $J \propto (V/s)e^{-A\phi^{1/2}s}$, $A = 1.025 \text{ eV}^{-1/2} \text{ \AA}^{-1}$ (即 $2\sqrt{2m}/\hbar$) [16]。Simmons 用更细致的平均势垒处理得到同样的结构, 前因子的数值系数略有不同 [17]——前因子依赖于模型, 指数则是稳健的。

5.2 针尖的几何与电导的量级

真实针尖顶端近似为半径 R_t 的球面。在离针尖轴线 r 处, 间隙为 $d + R_t - \sqrt{R_t^2 - r^2} \approx d + r^2/(2R_t)$ ($r \ll R_t$)。把式 (5.2) 逐点用于每一小块面积 (“局部平面近似”, 要求间隙在横向一个 $1/\kappa_0$ 的距离内变化不大), 并忽略前因子中 $1/d$ 的缓慢变化:

$$\begin{aligned} J(r) &\approx J(0) e^{-2\kappa_0 r^2/(2R_t)} \\ &= J(0) e^{-\kappa_0 r^2/R_t}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

电流密度在横向是高斯分布, 总电流 $I = \int_0^\infty J(r) 2\pi r dr = J(0) \cdot \pi R_t/\kappa_0$, 即有效面积 $A_{\text{eff}} = \pi R_t/\kappa_0$ 。用电导量子 $G_0 \equiv 2e^2/h = e^2/(\pi\hbar) = 7.748 \times 10^{-5} \text{ S}$ (约 $1/12.9 \text{ k}\Omega$) [18] 作单位:

$$\frac{G}{G_0} = \frac{I/V}{G_0} = \frac{P R_t}{4d} e^{-2\kappa_0 d}. \quad (5.4)$$

例题：典型工作点的间隙

STM 常用 $V = 0.1 \text{ V}$ 、 $I = 1 \text{ nA}$ 。估计间隙 d (取 $\bar{\phi} = 4.5 \text{ eV}$, $R_t \approx d$, $P \approx 3.8$)。

解答

$G = 1 \times 10^{-8} \text{ S}$, $G/G_0 = 1.29 \times 10^{-4}$ 。由式 (5.4), $P R_t/(4d) \approx 1$, 故 $e^{-2\kappa_0 d} \approx 1.29 \times 10^{-4}$, $2\kappa_0 d = 8.96$, $d \approx 4.1 \text{ \AA}$ 。前因子即使差 2 倍, d 也只变 $\ln 2/(2\kappa_0) = 0.32 \text{ \AA}$ ——对数把一切不确定都压缩了。这与“间隙几埃”的经验一致; Limot 等人在 Cu(111) 上测得针尖继续逼近时

电导跃变到约 G_0 (原子接触) [19], 相当于再靠近 3–4 Å。

5.3 表观势垒高度

实验上最直接的量是电流对间隙的对数导数。定义

$$\begin{aligned}\phi_{\text{ap}} &\equiv \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{d \ln I}{dd} \right)^2 \\ &= 0.952 \left(\frac{d \ln I}{dd} / \text{\AA}^{-1} \right)^2 \text{ eV},\end{aligned}\quad (5.5)$$

称为**表观势垒高度** ($\hbar^2/8m = 0.952 \text{ eV \AA}^2$)。若 $I \propto e^{-2\kappa_0 d}$ 严格成立, $d \ln I/dd = -2\kappa_0$, $\phi_{\text{ap}} = \hbar^2 \kappa_0^2 / 2m = \bar{\phi}$ 。由式 (5.2), 实际上 $\ln I = \text{常数} - \ln d - 2\kappa_0 d$,

$$\begin{aligned}\frac{d \ln I}{dd} &= -2\kappa_0 - \frac{1}{d}, \\ \phi_{\text{ap}} &= \bar{\phi} \left(1 + \frac{1}{2\kappa_0 d} \right)^2.\end{aligned}\quad (5.6)$$

$\kappa_0 d = 5$ 时 ϕ_{ap} 比 $\bar{\phi}$ 高 21%。这一修正依赖于前因子的模型 (球形针尖、三维效应都会改变它), 是表观势垒的系统误差之一。

注：镜像势

电子离开金属表面距离 x 时, 金属表面感应电荷对它的吸引可用“镜像电荷”描述, 势能为 $-e^2/(16\pi\epsilon_0 x)$; 两块平行金属之间要对无穷多个镜像求和。这会把势垒的中部压低、四角磨圆。按这一经典模型做 WKB 积分 (第 6 节; 脚本 `verify_numeric.py`), $\bar{\phi} = 4.5 \text{ eV}$ 时 ϕ_{ap} 在 $d = 5 \text{ \AA}$ 处降为约 3.1 eV , 在 $d = 10 \text{ \AA}$ 处为 3.8 eV 。但经典镜像势在原子尺度上的形式本身并不可靠, 实测的表观势垒常接近功函数: Limot 等人在 Cu(111) 与 Ag(111) 上测得 $\phi_{\text{ap}} = 4.7 \text{ eV}$ 与 4.0 eV [19]。表观势垒是一个“有效”量, 不能简单等同于功函数。

5.4 横向分辨率

STM 为什么能分辨单个原子? 有两个层次的回答。

几何层次：电流只流过针尖最前端 由式 (5.3), 电流密度的半高全宽为 $2\sqrt{R_t \ln 2 / \kappa_0}$; 90% 的电流集中在半径 $r_{90} = \sqrt{R_t \ln 10 / \kappa_0}$ 内。 $R_t = 10 \text{ \AA}$ 、 $\kappa_0 = 1.1 \text{ \AA}^{-1}$ 时 $r_{90} = 4.6 \text{ \AA}$; 而宏观上磨尖的针尖 $R_t \sim 1000 \text{ \AA}$, $r_{90} \approx 46 \text{ \AA}$ 。Binnig 等人 1982 年给出的横向分辨估计 $\delta \approx 3\sqrt{R_t}$ (以 Å 为单位) [7] 与此同量级。原子分辨之所以可能, 是因为真实针尖的顶端往往恰好有一个原子突出: 若它比相邻原子突出 $\Delta \approx 1 \text{ \AA}$ 到 $2 \text{ \AA}$, 相邻原子的电流就被压低 $e^{-2\kappa_0 \Delta} \approx 1/9$ 到 $1/80$ ——一个原子承担了绝大部分电流 (图 3b)。

波动层次：表面起伏随高度指数衰减 即使针尖是理想的单原子, 样品表面的原子起伏在真空中也会被“抹平”。先给出将要用到的理论结论。

定义：局域态密度（操作定义）

设样品的定态（归一化）为 ψ_n ，能量为 E_n 。在位置 $\mathbf{r}$ 、能量 E 附近宽 ΔE 的能量区间内，把每个态在 $\mathbf{r}$ 处的概率密度相加再除以 ΔE ： $\rho_s(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{\Delta E} \sum_{E \leq E_n < E + \Delta E} |\psi_n(\mathbf{r})|^2$ ，称为**局域态密度** (LDOS)。它表示“在 $\mathbf{r}$ 处、能量 E 附近有多少电子态可供电子进出”。第 7.1 节再作推广与讨论。

要点： Tersoff–Hamann 结论

J. Bardeen 1961 年的隧穿理论 [20] 把隧穿速率写成“隧穿矩阵元”的平方：它度量针尖的一个电子态与样品的一个电子态在势垒中的波函数交叠，交叠越大，电子越容易从一边跳到另一边。Tersoff 与 Hamann 用这一理论证明：若针尖顶端的电子态是球对称的（“s 波”针尖，即像氢原子基态那样球对称的电子云），小偏压下隧道电流正比于**样品在针尖曲率中心处、费米能级附近的局域态密度** [21, 22]，即正比于样品在该点的 $\sum |\psi_n|^2$ 。有效横向分辨率约为 $[(2 \text{ \AA})(R_t + d)]^{1/2}$ [22]。式中的 $2 \text{ \AA}$ 就是 $2/\kappa_0$ ，与式 (5.3) 的 $\sqrt{R_t/\kappa_0}$ 同源；“ $R_t + d$ ”说明起伏要在针尖的**曲率中心**处计算，钝针尖相当于把探测点抬高了 R_t 。下面的推导说明起伏为何随高度指数衰减。

推导：真空中波函数的傅里叶分量

1. 真空中 $U = E_F + \bar{\phi}$ 为常数，能量 E_F 的样品波函数满足 $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (E_F + \bar{\phi})\psi = E_F \psi$ ，即

$$\nabla^2 \psi = \kappa_0^2 \psi.$$

2. 表面在 x, y 方向是周期的。周期函数可以写成一系列具有该周期的正弦（复指数）波之和——傅里叶级数。把 ψ 在给定高度 z 上展开成二维傅里叶级数 $\psi = \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}}(z) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}$ ， $\mathbf{G}$ 取遍表面晶格的**倒格矢**——使平面波 $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}$ 在平移任一晶格矢量后不变的波矢。最短的倒格矢长度记为 G_1 。对最近邻距离为 a 的六角晶格，原子排成间距为 $\sqrt{3}a/2$ 的平行原子列，垂直于原子列、波长恰为列间距的平面波就是最短的一个： $G_1 = 2\pi/(\sqrt{3}a/2) = 4\pi/(\sqrt{3}a)$ ；三组原子列方向互成 60° ，给出 6 个长度为 G_1 的倒格矢（ $\pm$ 各一）。
3. 代入第 1 步， $\partial_x^2 + \partial_y^2$ 作用在 $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}$ 上给出 $-G^2$ ，各分量独立： $a''_{\mathbf{G}} = (\kappa_0^2 + G^2)a_{\mathbf{G}}$ 。取向外衰减的解：

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{G}}(z) &\propto e^{-q_{\mathbf{G}} z}, \\ q_{\mathbf{G}} &= \sqrt{\kappa_0^2 + G^2}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

4. 记 $\alpha_{\mathbf{G}} \equiv a_{\mathbf{G}}(0)/a_0(0)$ ，则 $\psi = a_0(0) e^{-\kappa_0 z} [1 + \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \alpha_{\mathbf{G}} e^{-(q_{\mathbf{G}} - \kappa_0)z} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}]$ ：平均分量 ($G = 0$) 以 $e^{-\kappa_0 z}$ 衰减，起伏分量的**相对大小**按 $e^{-(q_{\mathbf{G}} - \kappa_0)z}$ 衰减。由于 $q_{\mathbf{G}} > \kappa_0$ ，离表面越远，波函数越“平”。
5. **换成恒流高度**。只保留最短的一组倒格矢（六角晶格有 6 个，长度均为 G_1 ），并设各 $\alpha_{\mathbf{G}}$ 等于同一实数 α_1 （原子处于高对称位置时成立）。方括号中的起伏部分为 $\epsilon \equiv \alpha_1 e^{-(q_1 - \kappa_0)z} S(\mathbf{r}_{\parallel})$ ， $S = \sum \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\parallel})$ ；在原子顶位所有相位为零， $S = 6$ ；在三个原子之间的空位，6 个相位 $\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}$ 都是 $\pm 2\pi/3$ ， $S = 6 \cos(2\pi/3) = -3$ 。 $\epsilon \ll 1$ 时

$\ln |\psi|^2 \approx \text{常数} - 2\kappa_0 z + 2\epsilon$ 。恒流意味着针尖处的 $|\psi|^2$ 恒定（上面的 Tersoff–Hamann 结论），故高度需改变 $\delta z = \epsilon/\kappa_0$ 。顶位与空位之差

$$\begin{aligned}\Delta z &\approx \frac{9\alpha_1}{\kappa_0} e^{-(q_1 - \kappa_0)z}, \\ q_1 &= \sqrt{\kappa_0^2 + G_1^2}; \\ \Delta z_{\text{点源}} &\approx \frac{9}{q_1} e^{-(q_1 - \kappa_0)z}.\end{aligned}\quad (5.8)$$

最后一式 ($\Delta z_{\text{点源}}$) 取每个表面原子在真空中贡献 $e^{-\kappa_0 \varrho}/\varrho$ (ϱ 为到原子中心的距离，它满足 $\nabla^2 \psi = \kappa_0^2 \psi$) 的“点源模型”，其傅里叶分量 $a_{\mathbf{G}} \propto e^{-q_{\mathbf{G}} z}/q_{\mathbf{G}}$ ，于是 $\alpha_1 = \kappa_0/q_1$ （脚本 `corrugation.py` 用实空间直接求和核对了这一点）。

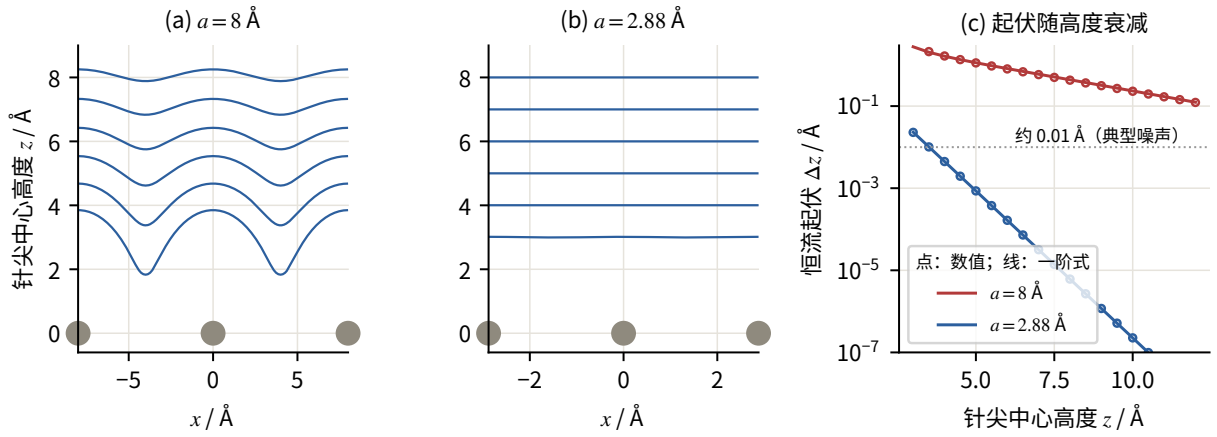


图 4 表面原子起伏随高度的衰减（点源模型，六角晶格， $\kappa_0 = 1.1 \text{ \AA}^{-1}$ ）。(a)(b) 通过原子顶位、沿最近邻方向的竖直接面上的等 $|\psi|^2$ 线（此截面上起伏为顶位与两原子间桥位之差），即恒流模式下针尖中心的轨迹（自下而上 $z = 3, 4, \dots, 8 \text{ \AA}$ ）；晶格常数 $a = 8 \text{ \AA}$ 时起伏清晰， $a = 2.88 \text{ \AA}$ （Au(111) 的最近邻距离）时肉眼已看不出。(c) 恒流起伏 Δz （顶位减空位）随针尖中心高度的变化：圆点为数值求解等值面，实线为只保留第一壳层、但对数非线性化的解析式 $[\ln(1 + 6\epsilon) - \ln(1 - 3\epsilon)]/\kappa_0$ ($\epsilon \ll 1$ 时即式 (5.8))， $z \geq 5 \text{ \AA}$ 处相差小于 3%。

检验：数值

Au(111) 的最近邻距离 $a = 2.88 \text{ \AA}$ [23]： $G_1 = 2.52 \text{ \AA}^{-1}$ ， $q_1 = 2.75 \text{ \AA}^{-1}$ ， $q_1 - \kappa_0 = 1.65 \text{ \AA}^{-1}$ ——针尖每抬高 $1 \text{ \AA}$ ，起伏缩小为 $1/5.2$ ； $z = 6 \text{ \AA}$ 时 $\Delta z \approx 2 \times 10^{-4} \text{ \AA}$ ，远低于约 $0.01 \text{ \AA}$ 的噪声水平。周期 $8 \text{ \AA}$ 的结构 $q_1 - \kappa_0 = 0.33 \text{ \AA}^{-1}$ ，同样高度处顶位的起伏项 $6\epsilon \approx 0.6$ ，已不满足推导第 5 步的 $\epsilon \ll 1$ ，线性式 (5.8) 给出 $0.89 \text{ \AA}$ ；数值求等值面得 $0.7\text{--}0.8 \text{ \AA}$ （依“高度 z ”取在顶位还是空位上方而异），保留对数而不线性化的形式 $[\ln(1 + 6\epsilon) - \ln(1 - 3\epsilon)]/\kappa_0$ 给出 $0.82 \text{ \AA}$ （图 4c 红线）。无论哪种算法，起伏都清晰可见。这解释了为什么 STM 最早成功的原子像是 Si(111)- 7×7 这类大周期结构（原胞边长 $26.9 \text{ \AA}$ ） [8]。

注：金属表面的“反常”原子像

按 s 波模型，Au(111) 这样的密排金属表面几乎不可能显示原子起伏；但 1987 年 Hallmark 等人在 Au(111) 上观测到约 $0.3 \text{ \AA}$ 的原子起伏（针尖偏压 $+30 \text{ mV}$ ，即本讲约定下样品偏压 -30 mV ；电流 3 nA ）[24]。C. J. Chen 指出，金属表面 $2.5\text{--}3 \text{ \AA}$ 的原子间距之所以能被分辨，是因为钨针尖顶端的 d_{z^2} 型电子态（沿针尖轴向伸长、两端突出的电子云，而不是球对称的 s 态）比 s 波“更尖”[25]。这提醒我们：STM 图像是针尖态与样品态的共同产物。

5.5 恒流模式与恒高模式

恒流模式 反馈回路不断调节针尖高度 z ，使电流保持为设定值 I_{set} （图 3a）。由于 $\ln I$ 与间隙呈线性关系，控制器比较的是 $\ln I - \ln I_{\text{set}}$ 。设针尖在 x 处的理想恒流高度为 $z^*(x)$ ，在其附近 $\ln I \approx \ln I_{\text{set}} - 2\kappa_0(z - z^*)$ 。最简单的积分型控制器让针尖速度正比于误差：

$$\frac{dz}{dt} = \frac{1}{2\kappa_0\tau} \ln \frac{I}{I_{\text{set}}} = -\frac{z - z^*(x)}{\tau}, \quad (5.9)$$

（电流偏大说明太近，针尖后撤），这是时间常数 τ 的一阶弛豫。针尖以速度 v 扫过周期 a 的起伏 $z^* = \Delta \cos(2\pi x/a)$ 时，相当于以角频率 $\omega = 2\pi v/a$ 驱动一阶系统，稳态响应的振幅为 $\Delta/\sqrt{1 + \omega^2\tau^2}$ ，相位滞后 $\arctan \omega\tau$ 。要如实记录原子起伏，需要 $2\pi v\tau/a \ll 1$ 。 $\tau = 1 \text{ ms}$ 、 $a = 3 \text{ \AA}$ 时， $v \ll 50 \text{ nm/s}$ 。

记录下的 $z(x, y)$ 是“等电流面”，按 Tersoff–Hamann 结论即样品等局域态密度面，不一定是原子核位置的形貌：吸附物、缺陷、不同元素都可能“看起来”凸起或凹陷。

恒高模式 关掉（或放慢）反馈，针尖在固定高度扫描，直接记录电流。它不受反馈带宽限制，可以快得多，但只适用于很平坦的区域：遇到一个 $2.4 \text{ \AA}$ 的台阶，电流就变化 $e^{2\kappa_0 \times 2.4} \approx 200$ 倍，针尖还可能撞上样品。

交互演示：沿一系列原子扫描，样品中部有一个单原子台阶（高 $2.36 \text{ \AA}$ ）。改变晶格常数、设定间隙、反馈时间常数与扫描速度，比较针尖轨迹与理想恒流轮廓；读数给出数值起伏，并与按式 (5.8) 同样方法得到的沿原子列的一阶式 $(8/q_1)e^{-(q_1 - \kappa_0)z}$ 比较（沿原子列比较的是顶位与桥位， S 从 6 变到 -2 ，故系数为 8 而非 9），同时显示判据 $2\pi v\tau/a$ 。也可切换到恒高模式观察电流。

网页版中此处为可调参数的交互动画（演示编号 stm-scan）。

5.6 振动隔离

需要多稳？ 由 $I \propto e^{-2\kappa_0 d}$ ，间隙变化 δd 引起电流的相对变化 $\delta I/I = 2\kappa_0 \delta d$ 。若要求电流涨落小于 2%，则 $\delta d < 0.02/(2 \times 1.09 \text{ \AA}^{-1}) \approx 0.01 \text{ \AA} = 1 \text{ pm}$ 。而实验室地面的振动位移通常在纳米到微米量级——差了 3 到 6 个数量级。

两级振子模型 把系统看成两个串联的振子（图 5）：

1. **隔振平台：**质量 M 用劲度 K 的软弹簧挂在地基上，固有角频率 $\omega_1 = 2\pi f_1 = \sqrt{K/M}$ 。地基位移 $x_b = X_b \cos \omega t$ ，平台位移 x_p 满足 $M\ddot{x}_p = -K(x_p - x_b)$ 。代入 $x_p = X_p \cos \omega t$ ：

$$(\omega_1^2 - \omega^2)X_p = \omega_1^2 X_b, \quad \left| \frac{X_p}{X_b} \right| = \frac{\omega_1^2}{|\omega_1^2 - \omega^2|}, \quad (5.10)$$

$\omega \gg \omega_1$ 时趋于 $(f_1/f)^2$ 。

2. **STM 头**：针尖相对样品的位移 y 由“针尖–扫描管–支架–样品”这一回路的弹性决定，其最低共振频率记为 f_2 （典型为几 kHz[16]）。在随平台加速运动的参考系中，回路受惯性力 $-m\ddot{x}_p$ (m 为回路的有效质量)，故 $m\ddot{y} = -ky - m\ddot{x}_p$ 。代入简谐解， $(\omega_2^2 - \omega^2)Y = \omega^2 X_p$ ：

$$\left| \frac{Y}{X_p} \right| = \frac{\omega^2}{|\omega_2^2 - \omega^2|}, \quad (5.11)$$

$\omega \ll \omega_2$ 时趋于 $(f/f_2)^2$ 。刚性的头部对低频振动几乎是“整体平动”，针尖与样品一起动，相对位移很小。

3. **串联**：在 $f_1 \ll f \ll f_2$ 的频段，两个渐近式相乘， $(f_1/f)^2(f/f_2)^2$ 中的 f 相消：

$$\left| \frac{Y}{X_b} \right| \approx \left(\frac{f_1}{f_2} \right)^2, \quad (5.12)$$

与频率无关。隔振的原则就是让两个固有频率相差悬殊 [26]： $f_1 = 2\text{ Hz}$ 、 $f_2 = 2\text{ kHz}$ 给出 10^{-6} ，微米级的地面振动变成皮米级的间隙涨落。

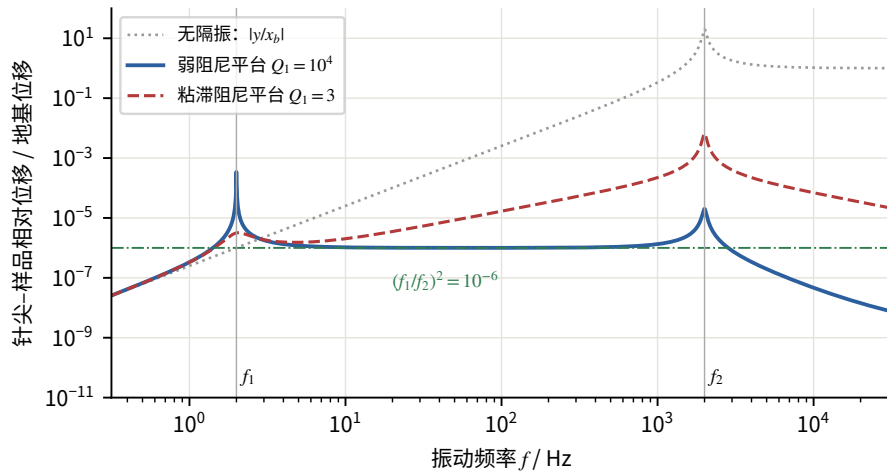


图 5 两级隔振的传递函数 ($f_1 = 2\text{ Hz}$, $f_2 = 2\text{ kHz}$, STM 头 $Q_2 = 20$)。点线：无隔振平台时针尖–样品相对位移与地基位移之比 $(f/f_2)^2$ ；实线：弱阻尼平台，在 $f_1 \ll f \ll f_2$ 内为平台值 $(f_1/f_2)^2$ （式 (5.12)，脚本中在 60 Hz 处核对相差 0.2%）；虚线：平台与地基之间加粘滞阻尼 ($Q_1 = 3$)。

最早的 STM 用超导磁悬浮隔振，后来改用带涡流阻尼的两级弹簧系统 [5, 16]；现代 STM 把头部做得小而刚（提高 f_2 ），再配合软悬挂（降低 f_1 ）。阻尼的利弊、温度漂移见例题 1。

5.7 压电扫描器（定性）

针尖的亚埃级定位靠**压电效应**：某些晶体或陶瓷（如锆钛酸铅 PZT）在电场作用下发生与电场成正比的形变。用压电系数 d_{31} 描述“沿厚度方向加电场、沿长度方向伸缩”：厚 h 、长 L 的压电片加电压 V ，长度变化 $\Delta L = d_{31}VL/h$ 。商用 PZT 陶瓷的 $|d_{31}|$ 约为 $1.7\text{--}2.8 \text{ \AA/V}$ [27]。

Binnig 与 Smith 1986 年提出的**单管扫描器**把一根压电陶瓷管的外电极分成四个象限：在相对的两个象限上加反向电压使管子弯曲，产生 x 、 y 扫描；在内电极上加电压使整根管子伸缩，控制 z [28]。他们的扫描管在三个方向的响应约 5 nm/V，最低机械共振在 8 kHz（弯曲）和 40 kHz（伸缩） [28]。压电陶瓷有迟滞、蠕变，灵敏度随温度变化，**必须用已知尺寸的结构（如单原子台阶）标定**——Binnig 等人的第一次实验就因标称灵敏度偏差一倍而差点错过真空隧穿 [5]。

6 WKB 近似：缓变势垒、场致发射与 α 衰变

方势垒之外，常见的势垒形状各异：加偏压后是梯形，强电场下的金属表面是三角形，原子核外是库仑势。对**缓变**的势垒，有一个普适的近似公式。它以 Wentzel、Kramers、Brillouin 三人命名，简称 WKB 近似。

6.1 缓变势中的波函数

假设：缓变条件

在经典禁区中，局域衰减常数 $\kappa(x) = \sqrt{2m[U(x) - E]}/\hbar$ 在一个衰减长度 $1/\kappa$ 内的相对变化很小：

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\kappa} \right) \right| = \frac{|\kappa'|}{\kappa^2} \ll 1. \quad (6.1)$$

在经典允许区，同样的条件写成 $|d(1/k)/dx| \ll 1$ ，即局域波长 $\lambda = 2\pi/k$ 在一个波长内的变化远小于波长本身 ($|d\lambda/dx| \ll 2\pi$)。在**转折点** ($U = E$, $\kappa = 0$) 附近这一条件必然失效。

推导：WKB 波函数

1. 禁区中的方程为 $\psi'' = \kappa^2(x)\psi$ 。令 $\psi = e^{S(x)}$ ，则 $\psi' = S'\psi$ ， $\psi'' = (S'' + S'^2)\psi$ ，方程化为

$$S'' + S'^2 = \kappa^2.$$

2. 若 κ 为常数，衰减解为 $S' = -\kappa$ 。 κ 缓变时设 $S' = -\kappa + \delta$ ，期望 $|\delta| \ll \kappa$ 。代入：
 $S'' = -\kappa' + \delta'$ ， $S'^2 = \kappa^2 - 2\kappa\delta + \delta^2$ ，得

$$-\kappa' + \delta' - 2\kappa\delta + \delta^2 = 0.$$

3. 首阶：略去 δ' 与 δ^2 ，得 $\delta = -\kappa'/(2\kappa)$ 。检验： $\delta/\kappa = -\kappa'/(2\kappa^2)$ 是式 (6.1) 中的小量；被略去的 δ^2 与保留项 κ' 之比也是同阶小量； $\delta' = -\kappa''/(2\kappa) + \kappa'^2/(2\kappa^2)$ 中还含 κ'' ，要使它也可略去，还需 κ 的二阶导数缓变 ($|\kappa''| \ll \kappa^3$)。在这两个条件下这是一个自洽的展开。

4. 积分： $S = -\int \kappa dx - \frac{1}{2} \ln \kappa + \text{常数}$ ，

$$\psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_{x_1}^x \kappa(x') dx'}. \quad (6.2)$$

注：振幅因子 $1/\sqrt{k}$ 的意义

同样的推导用于经典允许区，得 $\psi \approx (C/\sqrt{k}) \exp(\pm i \int k dx)$ 。代入式 (3.6)，概率流 $j = |C|^2 \hbar/m$ 与 x 无关；概率密度 $|\psi|^2 \propto 1/k \propto 1/v$ ——粒子在跑得慢的地方停留得久，与经典图像一致。式 (6.2) 中的 $1/\sqrt{\kappa}$ 是其禁区类比。

6.2 透射系数的 WKB 公式

设势垒位于两个转折点 $x_1 < x_2$ 之间。把它切成许多薄层，每层内 κ 近似为常数；穿过厚 Δx_i 的一层，波函数振幅衰减 $e^{-\kappa_i \Delta x_i}$ 。只要 κ 缓变，相邻薄层之间几乎没有反射，总振幅衰减为各层之积 $\exp(-\sum \kappa_i \Delta x_i)$ ，概率衰减为其平方。这就是式 (6.2) 中的指数。

读者也许会问：第 3.3 节说过，单独一个衰减指数不携带概率流，为什么只用衰减分量就能算透射？回顾厚势垒推导第 1–3 步：势垒中还有一个增长分量，其振幅由出口的匹配条件确定，在入口处只有衰减分量的 $e^{-2 \int \kappa dx}$ 倍；透射振幅 t 等于入口处衰减分量的振幅乘以 $\exp(-\int \kappa dx)$ ，再乘以两个界面上 $\mathcal{O}(1)$ 的匹配因子。所以“流”确实来自两个分量的干涉（式 (3.8)），而它的大小由衰减分量穿过势垒后剩下的振幅决定，两种说法并不矛盾。于是透射系数为

$$T \approx \left[\exp\left(-2 \int_{x_1}^{x_2} \kappa(x) dx\right) \right] = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx\right) \quad (6.3)$$

检验：“指数精度”的含义

- **方势垒**： κ 为常数， $2 \int \kappa dx = 2\kappa d$ ，式 (6.3) 给出 $e^{-2\kappa d}$ ，与精确的厚势垒结果式 (4.5) 相差前因子 $16E(U_0 - E)/U_0^2$ 。方势垒的边缘是突变的，严重违反缓变条件，前因子来自两个界面的匹配。
- **三角形势垒**（下一小节）：势能线性时，定态方程经变量代换化为 $\psi''(s) = s\psi(s)$ ，其解称为**艾里函数**（附录 B），因而可以精确求解。对 $E_F = 7 \text{ eV}$ 、 $\phi = 4.5 \text{ eV}$ ，在 $F = 2\text{--}10 \text{ V/nm}$ 内精确值与 WKB 值之比稳定在 1.95，即 $4\sqrt{E_F \phi}/(E_F + \phi)$ （图 6b；附录 B）。
- **两端都缓变的势垒**：在转折点附近 WKB 解失效，需要把转折点两侧的 WKB 解用一个局部精确解（同样是艾里函数）衔接起来，所得的匹配规则称为“连接公式”；它表明前因子趋于 1[29]。数值核对：对高 9 eV 、宽度参数 $3 \text{ \AA}$ 的高斯形势垒 $U = 9e^{-x^2/(18 \text{ \AA}^2)} \text{ eV}$ ，在 $E = 3\text{--}7 \text{ eV}$ 下转移矩阵数值解与 $\exp(-2 \int \kappa dx)$ 之比为 1.09–1.15，而 T 本身跨越五个数量级（脚本 `verify_numeric.py`）。

所以 WKB 公式的指数是准确的，前因子则是 1 的量级、取决于势垒边缘的细节。指数本身常达几十到上百， $\ln T$ 的相对误差只有百分之几——这就是“指数精度”。转折点附近 WKB 失效，但那里 $\kappa \rightarrow 0$ ，对积分的贡献很小。

6.3 应用一：场致发射与 Fowler–Nordheim 公式

在金属表面外加强电场 F （指向金属，使电子受力指向真空），真空中电子的势能在 $E_F + \phi$ 的基础上随距离线性下降。以费米能级为能量零点，

$$U(x) - E_F = \phi - eFx, \quad x > 0, \quad (6.4)$$

势垒成为三角形（图 6a）。费米能级处电子的外转折点在 $x_c = \phi/(eF)$ ： $F = 5 \text{ V/nm}$ 、 $\phi = 4.5 \text{ eV}$ 时 $x_c = 0.9 \text{ nm}$ ，势垒足够薄，电子可以不经加热直接穿出——这就是**场致发射**（冷发射）。

推导：三角形势垒的 WKB 指数

对法向能量为 E_z 的电子，势垒高出 $W \equiv E_F + \phi - E_z$ （费米能级处 $W = \phi$ ），转折点 $x_c = W/(eF)$ 。

$$\begin{aligned} & 2 \int_0^{x_c} \frac{\sqrt{2m(W - eFx)}}{\hbar} dx \\ &= \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \left[-\frac{2}{3eF} (W - eFx)^{3/2} \right]_0^{x_c} \\ &= \frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eF} W^{3/2}. \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} T(E_z) &\approx \exp\left(-\frac{b_{\text{FN}} W^{3/2}}{F}\right), \\ b_{\text{FN}} &\equiv \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} \\ &= 6.8309 \text{ eV}^{-3/2} \text{ V/nm}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

推导：发射电流密度

1. **起点。**式 (5.1) 对任意 $T(E_z)$ 成立。场发射时真空一侧没有电子射回，方括号中只有金属一侧的 f 。绝对零度下 $f = 1$ ($E < E_F$)，内层积分 $\int dE_{\parallel}$ 的上限为 $E_F - E_z$ ：

$$J = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{E_F} (E_F - E_z) T(E_z) dE_z.$$

2. **展开指数。**记 $\varepsilon = E_F - E_z \geq 0$ ， $W = \phi + \varepsilon$ 。在 $\varepsilon = 0$ 附近展开到一阶： $W^{3/2} \approx \phi^{3/2} + \frac{3}{2}\phi^{1/2}\varepsilon$,

$$\begin{aligned} T &\approx e^{-b_{\text{FN}}\phi^{3/2}/F} e^{-\varepsilon/\varepsilon_{\text{FN}}}, \\ \varepsilon_{\text{FN}} &\equiv \frac{2F}{3b_{\text{FN}}\phi^{1/2}} = \frac{e\hbar F}{2\sqrt{2m\phi}}. \end{aligned}$$

$F = 5 \text{ V/nm}$ 、 $\phi = 4.5 \text{ eV}$ 时 $\varepsilon_{\text{FN}} = 0.23 \text{ eV} \ll E_F$ ：发射电子集中在费米能级以下零点几电子伏内。

3. **积分**。上限 $E_F/\varepsilon_{\text{FN}} \gg 1$ 可推到无穷， $\int_0^\infty \varepsilon e^{-\varepsilon/\varepsilon_{\text{FN}}} d\varepsilon = \varepsilon_{\text{FN}}^2$ ：

$$\begin{aligned} J &= \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \cdot \frac{e^2\hbar^2 F^2}{8m\phi} e^{-b_{\text{FN}}\phi^{3/2}/F} \\ &= \frac{e^3 F^2}{16\pi^2\hbar\phi} e^{-b_{\text{FN}}\phi^{3/2}/F}. \end{aligned}$$

用 $16\pi^2\hbar = 8\pi h$ ，得**初等 Fowler–Nordheim 公式**：

$$\boxed{J = \frac{a_{\text{FN}} F^2}{\phi} \exp\left(-\frac{b_{\text{FN}}\phi^{3/2}}{F}\right)} \quad (6.6)$$

$$a_{\text{FN}} = \frac{e^3}{8\pi h} = 1.5414 \mu\text{A eV V}^{-2}$$

检验：量纲、数值与独立核对

- 量纲： $a_{\text{FN}} F^2/\phi$ 中 $\text{A} \cdot \text{eV} \cdot \text{V}^{-2} \cdot (\text{V/m})^2/\text{eV} = \text{A/m}^2$ ； $b_{\text{FN}}\phi^{3/2}/F$ 无量纲。两个常数与 Forbes 等人给出的“第一、第二 FN 常数”一致 [30]。
- 钨 ($\phi = 4.5 \text{ eV}$) 在 $F = 5 \text{ V/nm}$ 下：指数 $b\phi^{3/2}/F = 6.83 \times 9.55/5 = 13.0$ ， $e^{-13.0} = 2.2 \times 10^{-6}$ ；前因子 $1.54 \times 10^{-6} \times (5 \times 10^9 \text{ V/m})^2/4.5 = 8.6 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$ ； $J \approx 1.9 \times 10^7 \text{ A/m}^2 = 1.9 \times 10^3 \text{ A/cm}^2$ 。
- 灵敏度： $d \ln J / d \ln F = 2 + b\phi^{3/2}/F = 15$ ，电场增大 1%，电流增大约 15%。
- 独立核对（图 6c；脚本 `fig_fn.py`）：把艾里函数精确解得到的 $T(E_z)$ 代入第 1 步的积分直接数值计算，所得 FN 图的斜率与 $-b\phi^{3/2}$ 相差 0.3%；电流本身约大 1.9 倍，正是前述前因子 1.95。用 WKB 的 $T(E_z)$ 做同样的数值积分，与式 (6.6) 相差 4%–10%（第 2 步线性化舍去的高阶项）。

Fowler–Nordheim 图 对式 (6.6) 取对数：

$$\ln \frac{J}{F^2} = \ln \frac{a_{\text{FN}}}{\phi} - \frac{b_{\text{FN}}\phi^{3/2}}{F}. \quad (6.7)$$

以 $1/F$ 为横轴、 $\ln(J/F^2)$ 为纵轴应得直线，斜率 $-b_{\text{FN}}\phi^{3/2}$ 。实验中测的是电流 I 与电压 V 。针尖表面的电场正比于电压， $F = \beta V$ ；对半径 R_t 的孤立导体球 $F = V/R_t$ ，带柄的真实针尖受到屏蔽，写作 $F = V/(k_f R_t)$ ， k_f 为几何因子。于是 $\ln(I/V^2)$ 对 $1/V$ 也是直线，斜率为 $-b_{\text{FN}}\phi^{3/2}/\beta$ ：**只有知道 β ，才能由斜率求出 ϕ** （例题 2）。

注：镜像力的修正

电子离开表面后受到镜像电荷的吸引，势能多一项 $-e^2/(16\pi\varepsilon_0 x)$ （Schottky–Nordheim 势垒，图 6a 虚线），势垒顶降低 $\sqrt{e^3 F/(4\pi\varepsilon_0)}$ ——在 5 V/nm 下达 2.7 eV 。Murphy 与 Good 给出了含这一修正的标准理论 [31]，其效果是把式 (6.6) 指数中的 $\phi^{3/2}$ 乘以函数 $v(f)$ ， $f = (e^3/4\pi\varepsilon_0)F/\phi^2$ ；Forbes 给出的简单近似 $v(f) \approx 1 - f + \frac{1}{6}f \ln f$ 误差小于 0.33% [32]。我们用数值 WKB 积分核对： $F = 5 \text{ V/nm}$ 时 $v = 0.581$ （近似式 0.583），电流增大约 200 倍；但 FN

图的斜率只乘以 $s(f) = v - f dv/df \approx 1 - f/6$ ，约 0.94。截距对模型极敏感，斜率相当稳健——这是用 FN 图斜率而不是截距分析数据的原因。

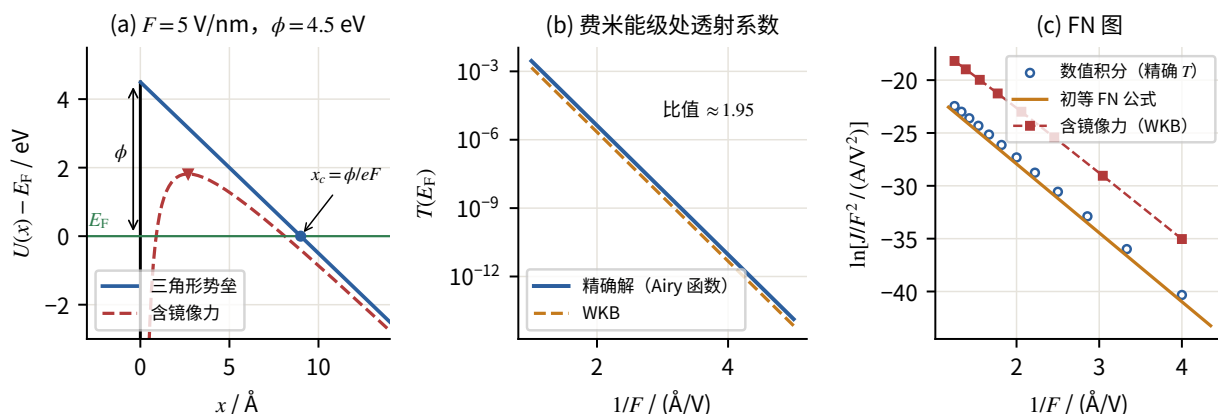


图 6 场致发射 ($E_F = 7 \text{ eV}$, $\phi = 4.5 \text{ eV}$)。 (a) 三角形势垒 (实线) 与含镜像力的 Schottky–Nordheim 势垒 (虚线，三角为势垒顶)； $x_c = \phi/eF$ 为费米能级电子的外转折点。 (b) 费米能级处的透射系数：艾里函数精确解与 WKB 式 (6.5) 平行，比值约 1.95。 (c) FN 图：对能量数值积分 (圆点，精确 T)、初等 FN 公式 (6.6) (实线)、含镜像力的 WKB 数值积分 (方块)。三者斜率相近，截距相差悬殊。

交互演示：调节功函数 ϕ 与表面电场 F ，观察三角形势垒的宽度、FN 图上的工作点与电流密度；切换到“含镜像力”可比较 Schottky–Nordheim 修正对电流与斜率的不同影响。

网页版中此处为可调参数的交互动画（演示编号 stm-fn）。

6.4 应用二： α 衰变与 Geiger–Nuttall 定律

假设：Gamow 模型

1. α 粒子在母核中预先形成，在半径 R_N 的核内势阱中来回运动；
2. $r > R_N$ 处核力为零（核力是短程力）， α 粒子（电荷 $2e$ ）与子核（电荷 Ze ）之间只有库仑排斥 $U(r) = 2Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ ；
3. 衰变释放的能量 Q 全部是 α 与子核的相对运动动能（质心系），用约化质量 $\mu = m_\alpha M_d/(m_\alpha + M_d)$ ；
4. α 粒子的轨道角动量为零（偶偶核基态到基态的衰变）。此时三维问题化为一维：球对称的 $\psi(r)$ 满足 $\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{d^2(r\psi)}{dr^2}$ （直接求导可验证），令 $u = r\psi$ ， u 满足与式 (3.4) 同形的一维方程。

在核内， α 粒子每秒撞击势垒 $\nu \approx v/(2R_N)$ 次 ($v = \sqrt{2Q/\mu}$ 为其速度的量级)，每次以概率 $T = e^{-G_G}$ 穿出。衰变常量与半衰期为

$$\lambda_\alpha = \nu e^{-G_G}, \quad T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda_\alpha}, \quad (6.8)$$

其中 Gamow 因子 G_G 就是 WKB 指数。外转折点 b 由 $U(b) = Q$ 给出： $b = 2Ze^2/(4\pi\epsilon_0 Q)$ (图 7a)。

推导：Gamow 因子

1. 由式 (6.3), $U(r) - Q = Q(b/r - 1)$:

$$\begin{aligned} G_G &= \frac{2}{\hbar} \int_{R_N}^b \sqrt{2\mu Q \left(\frac{b}{r} - 1 \right)} dr \\ &= \frac{2\sqrt{2\mu Q}}{\hbar} \int_{R_N}^b \sqrt{\frac{b}{r} - 1} dr. \end{aligned}$$

2. 积分 (附录 C, 代换 $r = b \cos^2 \theta$):

$$\begin{aligned} G_G &= \frac{2\sqrt{2\mu Q}}{\hbar} b \\ &\quad \times \left[\arccos \sqrt{\frac{R_N}{b}} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{R_N}{b} \left(1 - \frac{R_N}{b} \right)} \right]. \end{aligned} \quad (6.9)$$

3. 厚势垒 $R_N \ll b$ (铀核 $R_N/b \approx 0.15$) 时展开到 $\sqrt{R_N/b}$ 的一阶: $\arccos \sqrt{x} \approx \pi/2 - \sqrt{x}$, $\sqrt{x(1-x)} \approx \sqrt{x}$, 方括号 $\approx \pi/2 - 2\sqrt{R_N/b}$. 代入 b :

$$\begin{aligned} G_G &\approx \underbrace{\frac{2\pi \cdot 2Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar v}}_{2\pi\eta} \\ &\quad - \frac{4}{\hbar} \sqrt{\frac{2\mu \cdot 2Ze^2 R_N}{4\pi\epsilon_0}}, \end{aligned} \quad (6.10)$$

其中 $v = \sqrt{2Q/\mu}$; 第一项用了 $\pi b\sqrt{2\mu Q}/\hbar = \pi \cdot \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 Q} \cdot \frac{\mu v}{\hbar} = \frac{2\pi \cdot 2Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar v}$ ($2\mu Q = \mu^2 v^2$). $\eta = 2Ze^2/(4\pi\epsilon_0\hbar v)$ 称为索末菲参量, 是库仑势能与“量子动能尺度”之比。

检验： ^{238}U 与 ^{212}Po

用 $e^2/4\pi\epsilon_0 = 1.440 \text{ MeV fm}$, $\hbar c = 197.33 \text{ MeV fm}$, $R_N = 1.2(A_d^{1/3} + 4^{1/3}) \text{ fm}$ (子核与 α 粒子半径之和, $r_0 = 1.2 \text{ fm}$ 为模型参数), Q 由 NUBASE2020 质量表算出 [33]:

- $^{238}\text{U} \rightarrow ^{234}\text{Th} + \alpha$: $Z = 90$, $Q = 4.270 \text{ MeV}$, $\mu c^2 = 3664 \text{ MeV}$. $b = 60.7 \text{ fm}$, $R_N = 9.30 \text{ fm}$, $U(R_N) = 27.9 \text{ MeV}$ ——势垒比 Q 高 6 倍多。式 (6.9) 给出 $G_G = 88.0$ (式 (6.10) 两项分别为 171.0 与 -85.2 , 和为 85.8), $e^{-G_G} = 6 \times 10^{-39}$; $v = 0.048c$, $\nu = 7.8 \times 10^{20} \text{ s}^{-1}$; $T_{1/2} = 1.5 \times 10^{17} \text{ s} = 4.6 \times 10^9 \text{ 年}$ 。实测 $4.463 \times 10^9 \text{ 年}$ [33]。
- $^{212}\text{Po} \rightarrow ^{208}\text{Pb} + \alpha$: $Z = 82$, $Q = 8.954 \text{ MeV}$. $b = 26.4 \text{ fm}$, $G_G = 32.3$, $T_{1/2} = 6.3 \times 10^{-8} \text{ s}$; 实测 $2.94 \times 10^{-7} \text{ s}$ [33]。

Q 只差一倍, 半衰期相差 10^{24} 倍, 模型对两者都给出了正确的量级。 ^{238}U 处的“几乎完全吻合”有一定巧合成分: ν 只是量级估计, r_0 取 1.3 fm 时预言值就缩短为约 $1/20$ 。

Geiger–Nuttall 定律 由式 (6.8) 与式 (6.10),

$$\begin{aligned}\log_{10} T_{1/2} &= \frac{G_G}{\ln 10} - \log_{10} \frac{\nu}{\ln 2} \\ &\approx a_{\text{GN}} \frac{Z}{\sqrt{Q}} + c(Z, R_N), \\ a_{\text{GN}} &= \frac{2\pi \cdot 2\alpha_f}{\ln 10} \sqrt{\frac{\mu c^2}{2}},\end{aligned}\quad (6.11)$$

$\alpha_f = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \approx 1/137$ 为精细结构常数。代入 $\mu c^2 \approx 3664 \text{ MeV}$, $a_{\text{GN}} = 1.70 \text{ MeV}^{1/2}$ (Q 以 MeV 为单位)。 $c(Z, R_N)$ 来自式 (6.10) 第二项与 ν , 只随 Z 、 A 缓慢变化。所以对同一元素的不同位素, $\log_{10} T_{1/2}$ 与 $Z/\sqrt{Q}$ 成直线——这就是 Geiger 与 Nuttall 在 1911 年由经验发现的规律 [2] (他们用的是 α 粒子射程与衰变常量的关系; 射程随能量单调增加)。

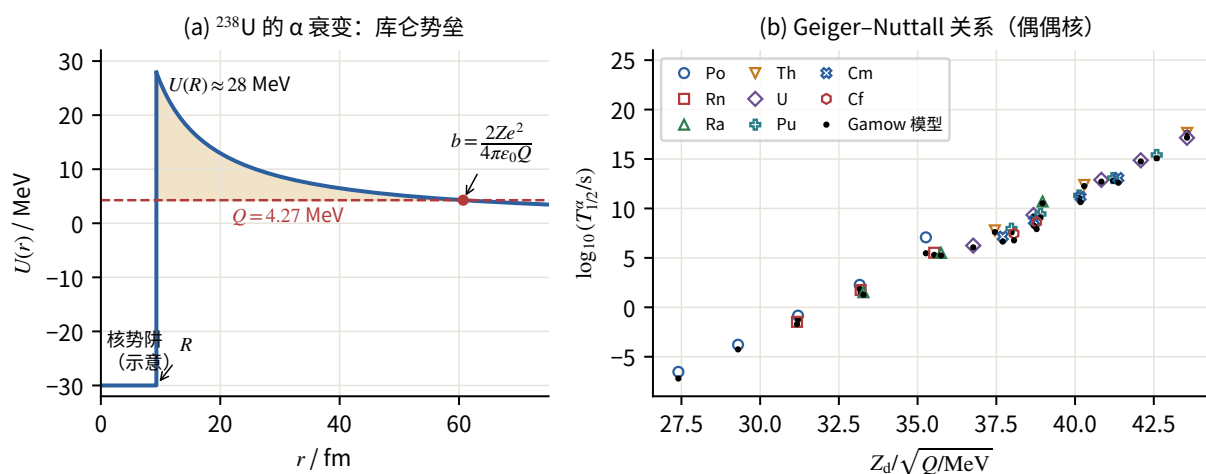


图 7 (a) ^{238}U 的 α 衰变: $r < R_N$ 为核势阱 (示意), $r > R_N$ 为库仑势, 阴影为经典禁区。(b) 30 个偶偶 α 放射性核的半衰期 (空心符号, 按母核元素区分; NUBASE2020[33], Q 由质量过剩计算, 已按 α 分支比换算为 α 分半衰期) 与 Gamow 模型计算值 (黑点, 同一组参数 $r_0 = 1.2 \text{ fm}$, 无任何拟合)。模型与实验的 $\log_{10}$ 之差平均为 -0.36 、标准差 0.30 , 最大偏差为 ^{210}Po (-1.6 , 见例题 3)。

交互演示: 选择核素或自行调节子核电荷数 Z 、衰变能 Q 、半径参数 r_0 , 观察库仑势垒、Gamow 因子与半衰期的变化, 并与 30 个偶偶核的实验数据比较。

网页版中此处为可调参数的交互动画 (演示编号 `stm-gamow`)。

7 隧穿谱与量子围栏

7.1 局域态密度与 dI/dV

定义: 局域态密度 (回顾)

第 5.4 节已给出操作定义: 设系统的定态 (已归一化) 为 ψ_n , 能量为 E_n 。在位置 $\mathbf{r}$ 、能量 E 附近 ΔE 内, 把每个态在 $\mathbf{r}$ 处的概率密度加起来, 再除以 ΔE :

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{\Delta E} \sum_{E \leq E_n < E + \Delta E} |\psi_n(\mathbf{r})|^2, \quad (7.1)$$

称为**局域态密度** (LDOS)，单位为“每单位能量每单位体积”。它回答的是：“在 $\mathbf{r}$ 处、能量 E 附近有多少电子态可供电子进出？”

检验：与态密度的关系

对体积 L^3 中的自由电子，每个平面波态归一化后 $|\psi_n|^2 = 1/L^3$ 处处相同，式 (7.1) 给出（单位能量内的态数）/ $L^3 = g(E)$ ，即式 (3.10)：均匀体系的局域态密度就是态密度。在表面附近、缺陷周围或围栏里， $|\psi_n|^2$ 随位置起伏，LDOS 才真正“局域”。

能级若有有限寿命（例如电子会漏出围栏），每个 ψ_n 的贡献就不是能量上的一根线，而是有一定宽度。这与普通物理中受迫阻尼振子的共振曲线相同：能量衰减时间为 τ_L 的振子，其吸收功率随驱动频率 ω 的变化在共振附近为 $\propto 1/[(\omega - \omega_0)^2 + (1/2\tau_L)^2]$ ，称为**洛伦兹线形**，半高全宽 $\Delta\omega = 1/\tau_L$ 。量子态的能量 $E = \hbar\omega$ ，寿命为 τ_L 的能级相应地展宽成半高全宽 $\Gamma = \hbar/\tau_L$ 的洛伦兹线形 $L_\Gamma(E - E_n) = \frac{\Gamma/2\pi}{(E - E_n)^2 + (\Gamma/2)^2}$ （对 E 积分为 1）。用它代替式 (7.1) 中的“计数”： $\rho(\mathbf{r}, E) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{r})|^2 L_\Gamma(E - E_n)$ 。

从电流到 LDOS 式 (5.2) 的推导中，样品被当作自由电子气，所有能量的态“一样多”。若样品的局域态密度随能量变化， Tersoff–Hamann 理论给出：小偏压下电流正比于样品在针尖位置的 LDOS[22]；推广到有限偏压（假设针尖的态密度平坦、隧穿矩阵元随能量缓变），

$$I(V) \propto \int_{E_F}^{E_F + eV} \rho_s(\mathbf{r}_0, E) dE, \quad (7.2)$$

因而

$$\frac{dI}{dV} \propto \rho_s(\mathbf{r}_0, E_F + eV), \quad (7.3)$$

$\mathbf{r}_0$ 为针尖位置。物理图像：电子只能隧穿进入样品中**在针尖处有振幅的空态** ($V > 0$)，或从这样的满态隧穿出来 ($V < 0$)。 $V > 0$ 测样品费米能级以上的空态， $V < 0$ 测以下的满态。（这里 ρ_s 已包含波函数在真空中按 $e^{-2\kappa z}$ 的衰减；高偏压下势垒形状改变也会给 dI/dV 带来缓变的本底。）

注：锁相测量 dI/dV

在直流偏压 V 上叠加小调制 $V_m \cos \omega t$ 。泰勒展开： $I(V + V_m \cos \omega t) = I(V) + I'(V)V_m \cos \omega t + \frac{1}{2}I''(V)V_m^2 \cos^2 \omega t + \dots$ 。用锁相放大器（只放大与参考信号同频、同相分量的仪器）取出频率 ω 的分量，其振幅为 $I'(V)V_m$ （加上 V_m^3 阶的小修正）——直接得到 dI/dV 。能量分辨率受 V_m 与 $k_B T$ 限制，这是隧穿谱实验常在 4 K ($k_B T = 0.34 \text{ meV}$) 下进行的原因。

7.2 铜 (111) 面的表面态：二维电子气

晶体中离子实的周期势使电子沿某些方向传播时，有一些能量范围是“禁止”的（称为**能隙**：在这些能量上没有能在体内传播的波，类似于周期结构中的布拉格反射）。在 Cu(111) 表面，有一类电子的能量恰好落在体内沿 [111] 方向的能隙中：它们不能向晶体内部传播，又在真空能级以下、无法逸出，只能集中在表面附近几个原子层内，而在平行于表面的方向自由运动。这样的态称为**表面态**，构成一个二维电子气，其能量与平行波矢的关系为

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}, \quad (7.4)$$

E_0 为带底, m^* 为有效质量 (由 $1/m^* = \hbar^{-2} d^2 E / dk^2$ 定义, 它把离子实周期势的效果吸收进“质量”里)。对 Cu(111), $E_0 \approx -0.45 \text{ eV}$ (相对 E_F), $m^* \approx 0.38 m_e$ [34]。

检验：费米波长与二维态密度

- 费米能级处 $k_F = \sqrt{2m^*|E_0|/\hbar} = \sqrt{0.38 \times 0.45/3.810} = 0.212 \text{ \AA}^{-1}$, $\lambda_F = 2\pi/k_F = 29.7 \text{ \AA}$ (Fiete 与 Heller 给出 $29.5 \text{ \AA}$ [34])。表面态电子的波长比体电子长约 6 倍, 因而在 STM 图像中容易看到它的干涉条纹。
- 二维态密度: 面积 L^2 中允许的 $\mathbf{k}_{\parallel}$ 每个占 $(2\pi/L)^2$, $|\mathbf{k}_{\parallel}| < k$ 的态数 (每种自旋) 为 $\pi k^2 L^2 / (2\pi)^2$, 单位面积为 $k^2 / 4\pi = m^*(E - E_0) / (2\pi\hbar^2)$, 对 E 求导得常数 $m^* / (2\pi\hbar^2)$: 二维自由电子的态密度在带底处突然出现, 之后不随能量变化。dI/dV 谱在 $eV = E_0$ 处的台阶就是表面态的“指纹”。

表面上的台阶或吸附原子会反射表面态电子, 入射波与反射波干涉, 在 LDOS 中形成驻波。对一面直的“墙”, 垂直入射的态为 $\sin(kx)$, $|\psi|^2 \propto \sin^2(kx)$, 周期为 $\pi/k = \lambda/2$ 。Crommie、Lutz 与 Eigler 1993 年在 Cu(111) 台阶边与点缺陷附近观测到这样的驻波, 并由它独立地测出了表面态的色散关系 [12]。费米能级附近的驻波周期约为 $\lambda_F/2 \approx 15 \text{ \AA}$ 。

7.3 圆形量子围栏

把吸附原子排成一个闭合的圆环, 表面态电子就被“关”在圆内。最简单的模型是硬壁圆形势阱: $r < R_c$ 内势能为零 (相对 E_0), $r = R_c$ 处 $\psi = 0$ 。

推导：分离变量与贝塞尔方程

1. 圆内二维定态方程: $-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi = (E - E_0) \psi$, 即 $\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0$, $k^2 \equiv 2m^*(E - E_0)/\hbar^2$ 。
2. 极坐标 (r, θ) 下 (附录 D 用二维高斯定理推导)

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2}.$$

3. 试探 $\psi = \mathcal{R}(r)e^{il\theta}$ 。绕一圈回到原处时 ψ 必须单值, $e^{2\pi il} = 1$, l 只能取整数。 ∂_θ^2 给出 $-l^2$, 代入并约去 $e^{il\theta}$:

$$\mathcal{R}'' + \frac{1}{r} \mathcal{R}' + \left(k^2 - \frac{l^2}{r^2} \right) \mathcal{R} = 0. \quad (7.5)$$

4. 令 $s = kr$ (无量纲), 方程变为 $\frac{d^2 \mathcal{R}}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{d\mathcal{R}}{ds} + \left(1 - \frac{l^2}{s^2} \right) \mathcal{R} = 0$, 这是 l 阶贝塞尔方程。它在 $s = 0$ 处有限的解记为 $J_l(s)$, 称为贝塞尔函数 (性质见下框与附录 D)。所以 $\psi_l = J_l(kr)e^{il\theta}$ 。

5. 硬壁条件 $J_l(kR_c) = 0$: kR_c 必须是 J_l 的零点。记 J_l 的第 n 个正零点为 $x_{l,n}$,

$$E_{l,n} = E_0 + \frac{\hbar^2 x_{l,n}^2}{2m^* R_c^2} \quad (7.6)$$

其中 $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $n = 1, 2, \dots$ 。 $\pm l$ 能量相同（二重简并），可组合成实函数 $J_l(kr) \cos l\theta$ 与 $J_l(kr) \sin l\theta$ 。

前置知识：贝塞尔函数的最少知识

- **原点附近**: $J_l(s) \approx (s/2)^l/l!$, 所以 $l \neq 0$ 的态在圆心处为零（离心势垒把它们推离中心），只有 $l = 0$ 的态在圆心有振幅， $J_0(0) = 1$ 。
- **远离原点** ($s \gg l$): $J_l(s) \approx \sqrt{2/(\pi s)} \cos(s - l\pi/2 - \pi/4)$ 。振荡的波数就是 k ，相邻零点间距趋于 π ；振幅按 $s^{-1/2}$ 减小，因为二维中向外传播的波把概率摊在周长 $2\pi r$ 上 ($|\psi|^2 \propto 1/r$, 与 WKB 中的 $1/\sqrt{k}$ 因子同理)。
- **零点**: $x_{0,n} = 2.405, 5.520, 8.654, 11.792, 14.931$; $x_{1,1} = 3.832, x_{2,1} = 5.136, x_{3,1} = 6.380, x_{3,2} = 9.761, x_{7,2} = 14.821$ 。更多见附录 D。 $J_l(kr)$ 在圆内有 $n - 1$ 个节圈； $\cos l\theta$ 有 $2l$ 个角向波腹。

检验：Crommie 围栏的数值

$R_c = 71.3 \text{ \AA}$ (48 个 Fe 原子 [11]), $m^* = 0.38m_e$, $E_0 = -0.45 \text{ eV}$: 能量尺度 $\hbar^2/(2m^*R_c^2) = 3.810/(0.38 \times 71.3^2) = 1.97 \text{ meV}$ 。

- 基态 $(0, 1)$: $E_{0,1} - E_0 = 1.97 \times 2.405^2 = 11.4 \text{ meV}$, 即 $E_{0,1} = -439 \text{ meV}$ 。远大于 4 K 下的 $k_B T$, 能级是分立的。
- 费米能级附近: $E_F - E_0 = 450 \text{ meV}$ 对应 $x = \sqrt{450/1.97} = 15.1$, 即费米能级附近是零点约为 15 的那些态 (有多个 l)。
- 只有 $l = 0$ 的态在圆心有振幅, 所以圆心处的 dI/dV 谱只在 $l = 0$ 能级处出峰 (图 8f)。

与实验对照 Crommie 等人在围栏内做隧穿谱, 观测到一系列分立的共振, 并指出围栏内部的局域态密度“由一个被困在圆形二维盒子中的电子所预期的本征态密度所主导” [11]; 在费米能级附近的图像中看到同心圆环状的驻波。硬壁模型的不足在于“墙”并不硬: Heller 等人的散射理论把 Fe 原子当作最大限度吸收入射电子波的“黑点” [35], 与实验谱的符合很好; Fiete 与 Heller 的评述指出, 由共振线宽看, 围栏的“品质因数”只有约 2, 即电子在漏出之前只经历约两次反射; 盒子模型可以定性给出共振能量, 却不能预言共振的宽度 [34]。例题 4 用一个“每次撞墙保留概率”的模型估计了能级宽度; 2000 年 Manoharan 等人在椭圆围栏的一个焦点放一个钴原子, 在另一个焦点看到了它的“幻影” (量子海市蜃楼) [36]。

交互演示: 选择本征态 (l, n) 观察 $|\psi_{l,n}|^2$ 的节圈与角向波腹, 或切换到“能量 E 处的局域态密度”并调节费米能级处的展宽 Γ_F (默认 40 meV , 即例题 4 中墙的反射率取 0.25 的模型假设; 可选 $\Gamma \propto k$ 或常数), 比较费米能级附近的图样; 下方为围栏中心的 LDOS 谱。

网页版中此处为可调参数的交互动画 (演示编号 `stm-corral`)。

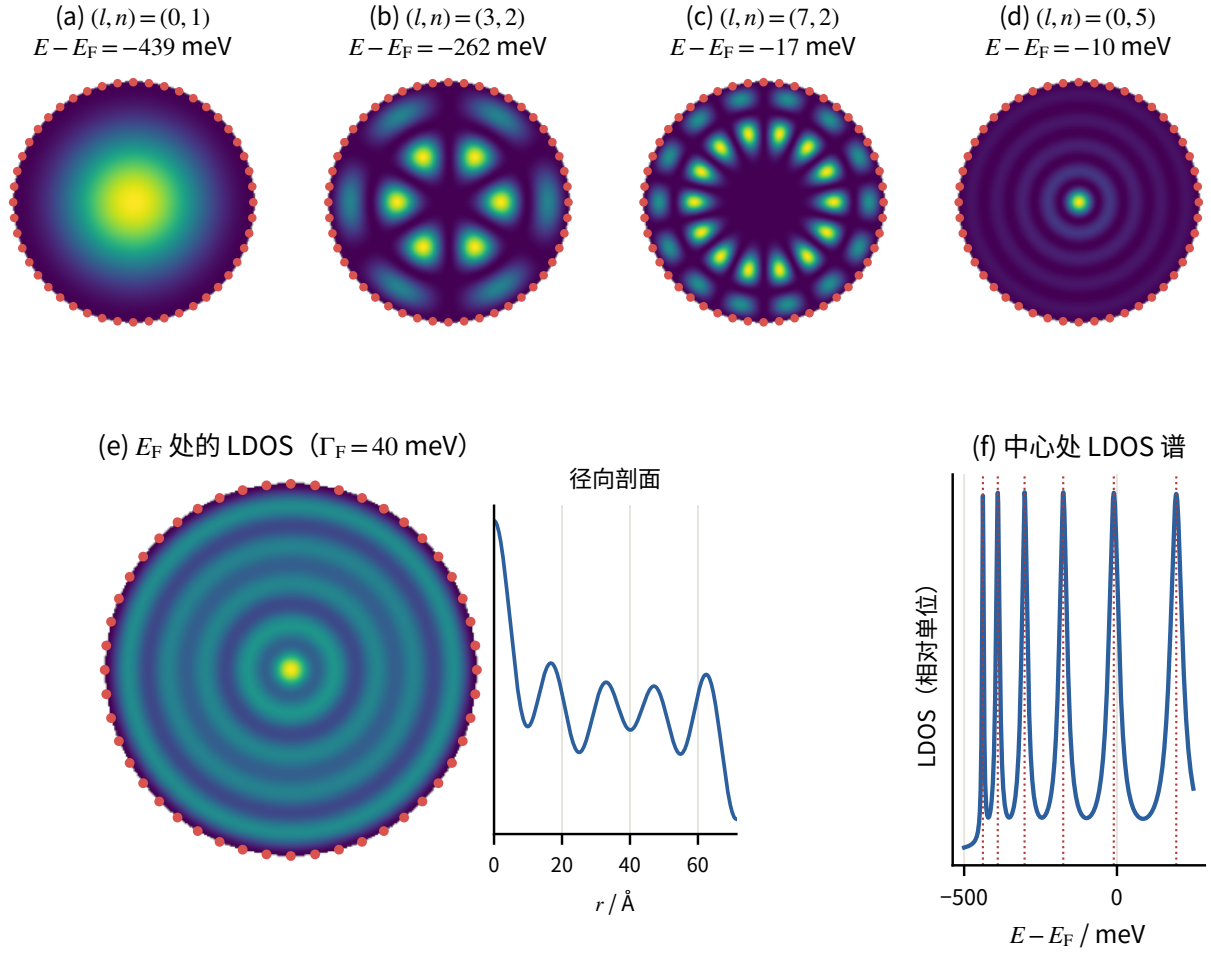


图 8 硬壁圆形量子围栏模型 ($R_c = 71.3 \text{ \AA}$, $m^* = 0.38m_e$, $E_0 = -0.45 \text{ eV}$; 红点表示 48 个 Fe 原子的位置)。(a)–(d) 几个本征态的 $|\psi|^2$ ($l > 0$ 取 $\cos l\theta$ 组合): $n - 1$ 个节圈、 $2l$ 个角向波腹。(e) 费米能级处的局域态密度, 各能级按洛伦兹线形展宽, 宽度取 $\Gamma(E) = \Gamma_F k(E)/k_F$, $\Gamma_F = 40 \text{ meV}$ (即例题 4 中墙的反射率取 0.25 这一模型假设, 并忽略 Γ 对 l 的依赖); 右侧为径向剖面, 相邻峰间距 14–16 $\text{\AA}$, 与 $\lambda_F/2 = 14.8 \text{ \AA}$ 一致 (脚本核对)。(f) 围栏中心的 LDOS 谱 (同样的 $\Gamma(E)$, 低能峰较窄), 竖虚线为 $l = 0$ 能级。

8 决赛风格例题

例题 1: 两级弹簧加涡流阻尼——STM 隔振的设计

一台 STM 在 $V = 0.1 \text{ V}$ 、 $I_{\text{set}} = 1 \text{ nA}$ 下工作, 有效势垒 $\bar{\phi} = 4.5 \text{ eV}$ 。STM 头 (“针尖–扫描管–支架–样品” 回路) 的最低共振频率 $f_2 = 2 \text{ kHz}$ 、品质因数 $Q_2 = 20$, 其传递函数用式 (5.11) 的有阻尼形式 $|Y/X_p| = \omega^2 / \sqrt{(\omega_2^2 - \omega^2)^2 + (\omega\omega_2/Q_2)^2}$ 。设实验室地面在 $5\text{--}100 \text{ Hz}$ 内的振动位移振幅约 $0.3 \mu\text{m}$, 在 2 Hz 附近约 $0.1 \mu\text{m}$ (本题假设值)。

1. 要求电流的相对涨落小于 2%, 针尖–样品间隙振动的振幅 δd 应小于多少? 前因子 $1/d$ 的贡献可否略去?
2. 平台 (质量 M) 用弹簧挂在地基上, 并通过粘滞阻尼器 (阻力正比于平台**相对地基**的速度) 与地基相连 (涡流阻尼就是这样一种阻尼器: 导体在磁场中运动时感生涡流, 所受阻力正比于相对速度), 固有频率 f_1 , 品质因数 Q_1 。求 $|X_p/X_b|$, 并比较 $Q_1 \rightarrow \infty$ 与有限 Q_1 两种情形在 $f \gg f_1$ 时的渐近行为。
3. 先用弱阻尼平台 ($Q_1 \rightarrow \infty$)。正文式 (5.12) 的平台值 $(f_1/f_2)^2$ 给出 f_1 的上限约为多少? 这个估计为什么偏松? 用完整的传递函数求出正确的上限及对应的弹簧静伸长。
4. 取 $f_1 = 2 \text{ Hz}$ 。分别估计 $Q_1 = 10^4$ 与 $Q_1 = 2$ 时, 地面 2 Hz 振动引起的针尖–样品相对振幅, 以及 $Q_1 = 2$ 时 $5\text{--}100 \text{ Hz}$ 频带内的最坏情形。单级平台能否同时满足 (1) 的要求?
5. Binnig 等人的第二代方案是 “两级弹簧加涡流阻尼” [5]。设两级相同 (每级 $f_s = 2 \text{ Hz}$, $Q = 2$), 上级质量远小于下级, 可把两级看作独立串联。估计共振附近与 $5\text{--}100 \text{ Hz}$ 频带内的最坏相对振幅, 说明两级为什么能 “两全”。
6. 慢漂移: 针尖一侧与样品一侧的支撑结构在 z 方向的长度差约 $L = 1 \text{ cm}$, 线膨胀系数 $\alpha_T = 1 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ 。温度变化 1 mK 时间隙变化多少? 若一幅图像需 100 s 、要求漂移小于 $0.1 \text{ \AA}$, 温度变化率应小于多少? 若两侧分别由长 L_1 、 L_2 , 膨胀系数 α_1 、 α_2 的材料构成, 写出 “热补偿” 条件。

解答

1. 由式 (5.2), $\ln I = \text{常数} - \ln d - 2\kappa_0 d$, $\delta I/I = -(2\kappa_0 + 1/d)\delta d$ 。 $\kappa_0 = 0.5123\sqrt{4.5} = 1.087 \text{ \AA}^{-1}$; $d \approx 4 \text{ \AA}$ (第 5.2 节) 时 $1/d = 0.25 \text{ \AA}^{-1}$, 只占 $2\kappa_0$ 的 11%, 可略去 (保留则要求再严约 10%)。 $|\delta d| < 0.02/(2 \times 1.087) = 0.0092 \text{ \AA}$ 。

2. 平台受弹簧力 $-K(x_p - x_b)$ 与阻尼力 $-c(\dot{x}_p - \dot{x}_b)$; 记 $\omega_1^2 = K/M$, $\omega_1/Q_1 = c/M$:

$$\ddot{x}_p + \frac{\omega_1}{Q_1}\dot{x}_p + \omega_1^2 x_p = \omega_1^2 x_b + \frac{\omega_1}{Q_1}\dot{x}_b.$$

代入 $x_{p,b} = X_{p,b}e^{i\omega t}$:

$$\left| \frac{X_p}{X_b} \right| = \frac{\sqrt{\omega_1^4 + (\omega\omega_1/Q_1)^2}}{\sqrt{(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + (\omega\omega_1/Q_1)^2}}.$$

$f \gg f_1$ 时分母 $\approx \omega^2$ 。 $Q_1 \rightarrow \infty$: 分子 $= \omega_1^2$, $|X_p/X_b| \approx (f_1/f)^2$ 。有限 Q_1 : 当 $f \gg Q_1 f_1$ 时分子中的阻尼项占优, $|X_p/X_b| \approx f_1/(Q_1 f)$, 只按 $1/f$ 下降——阻尼器把地基的**速度**

直接传给了平台。

- 平台值: $(f_1/f_2)^2 \times 0.3 \mu\text{m} < 0.0092 \text{ \AA}$ 给出 $f_1 < 3.5 \text{ Hz}$ 。但平台值要求 $f_1 \ll f \ll f_2$, 而频带下端 5 Hz 与 3.5 Hz 相差不大: 在 5 Hz 处平台传递率 $f_1^2/(f^2 - f_1^2) = 0.96$, 而渐近式只给 0.49 , 按 3.5 Hz 设计实际超标约 2 倍。正确做法是在整个频带上用完整的乘积 $|X_p/X_b| \cdot |Y/X_p|$ 求最坏点。 $f \ll f_2$ 时乘积 $\approx f_1^2 f^2 / [(f^2 - f_1^2) f_2^2]$ 随 f 单调减小并趋于平台值, 所以最坏点在频带下端 5 Hz 。令 $\frac{f_1^2}{25 - f_1^2} \cdot \frac{25}{f_2^2} = \frac{0.0092 \text{ \AA}}{0.3 \mu\text{m}} = 3.07 \times 10^{-6}$, 解得 $f_1 < 2.87 \text{ Hz}$ (含 Q_2 的完整式数值求解, 结果相同)。弹簧静伸长 $\Delta l = g/\omega_1^2 = 9.8/(2\pi \times 2.87)^2 = 3.0 \text{ cm}$ 。
- $f = f_1$ 处 $|X_p/X_b| = \sqrt{1 + Q_1^2}$, 头部因子 $(f_1/f_2)^2 = 10^{-6}$ 。 $Q_1 = 10^4$: $Y \approx 10^4 \times 10^{-6} \times 0.1 \mu\text{m} = 10 \text{ \AA}$, 比要求大三个数量级, 无法工作。 $Q_1 = 2$: 共振峰 (数值求最大值) 约 2.3 倍, $Y \approx 0.0023 \text{ \AA}$, 满足要求; 但在频带内, 由 (2) 平台传递率按 $f_1/(Q_1 f) \propto 1/f$ 只缓慢下降, 乘以按 $(f/f_2)^2 \propto f^2$ 上升的头部因子后, 乘积随 f 线性增大, 最坏点移到频带上端 100 Hz : $Y \approx 0.075 \text{ \AA}$, 超标约 8 倍 (5 Hz 处只有 $0.006 \text{ \AA}$)。单级平台顾此失彼: 弱阻尼时共振无法忍受, 强阻尼时高频隔振不够。
- 两级串联时总传递率为两个单级之积 (再乘头部因子)。共振附近每级放大约 $\sqrt{1 + Q^2}$, 数值求得两级的峰值放大约 5.2 倍, $Y_{\max} \approx 5.2 \times 10^{-6} \times 0.1 \mu\text{m} \approx 0.005 \text{ \AA}$; 频带内每级按 $f_s/(Qf)$ 下降, 两级合起来又回到 $\propto 1/f^2$, 与头部因子 $\propto f^2$ 相乘后在高频趋于常数, 最坏点回到频带下端 5 Hz 处 $Y \approx 0.0016 \text{ \AA}$ 。两项都满足 (1) 的要求: 阻尼负责压低共振, 而第二级把阻尼损失的高频隔振 “补回来”。
- $\delta d = \alpha_T L \delta T = 10^{-5} \times 10^{-2} \times 10^{-3} = 1 \times 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA}$ ——一毫开的温度变化就是一埃! 要求 $\alpha_T L (dT/dt) \times 100 \text{ s} < 0.1 \text{ \AA}$, 即 $dT/dt < 1 \times 10^{-6} \text{ K/s}$ 。两侧总长度变化相等时间隙不变, 热补偿条件为 $\alpha_1 L_1 = \alpha_2 L_2$ (对称结构 $L_1 = L_2$ 、同种材料自动满足)。实际 STM 要么做成对称结构, 要么在液氮温度下工作 (那里固体的膨胀系数小得多, 温度也稳定)。

评分要点: (1) 对数导数与 $1/d$ 项的量级; (2) 阻尼力含 $\dot{x}_b$ 、两种高频渐近; (3) 指出平台值的适用条件、在频带下端用完整式求解 (2.87 Hz , 3.0 cm); (4) 共振放大 $\approx Q_1$ 与强阻尼的高频代价 (指出最坏点移到频带高端, 数值); (5) 两级串联的乘积与 “两全” 的解释; (6) 热膨胀与补偿条件。

例题 2: 偏压增大——从直接隧穿到场致发射

针尖与样品为同种金属 ($\phi = 4.5 \text{ eV}$), 间隙 d , 样品加正偏压 V 。忽略镜像势, 真空中电势线性变化, 费米能级处电子面对的势垒为 $U(x) - E_F^{\text{tip}} = \phi - eVx/d$ ($0 < x < d$)。

- $eV < \phi$ 时, 用 WKB 求针尖费米能级处电子的指数 $\Theta(V, d) \equiv 2 \int \kappa dx$ 。
- 证明 $eV \ll \phi$ 时 $\Theta \approx 2d\sqrt{2m(\phi - eV/2)}/\hbar$ (等效于高度为平均值的方势垒), 并求下一阶修正: 偏压使恒流下的间隙变化多少 (以 $V = 1 \text{ V}$ 为例)?
- $eV > \phi$ 时势垒变成什么形状? 证明 Θ 化为 FN 指数 ($F = V/d$), 并说明此时电子在何

处“进入”样品前方的真空。

4. 反馈保持电流恒定（只考虑指数，近似为 Θ 恒定）。设小偏压 ($eV \ll \phi$) 下间隙 $d_0 = 5 \text{ \AA}$ ，即 $\Theta_0 = 2\kappa_0 d_0$ 。求 $V = 1, 3, 4.5, 10 \text{ V}$ 时的间隙；证明 $eV > \phi$ 后针尖-样品间的电场保持不变，并求其值。
5. 一根孤立的钨场发射针尖 ($\phi = 4.5 \text{ eV}$)，顶端半径 $R_t = 50 \text{ nm}$ ，表面电场 $F = V/(k_f R_t)$ ， $k_f = 5$ ；有效发射面积取 $A_e = 2 \times 10^{-15} \text{ m}^2$ 。用初等 FN 公式求 $V = 1000 \text{ V}$ 时的电流、得到 $1 \mu\text{A}$ 所需的电压，以及电压增加 10% 时电流增大的倍数。
6. 实验者由 $\ln(I/V^2)$ 对 $1/V$ 的斜率反推 ϕ ，但 k_f 只知道在 $\pm 20\%$ 以内。 ϕ 的不确定度是多少？若改用两根已知 R_t 之比同种金属针尖，能否消去 k_f ？

解答

1. 记 $W(x) = \phi - eVx/d$ ， $dW = -(eV/d)dx$ ：

$$\begin{aligned}\Theta &= \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^d \sqrt{W} dx \\ &= \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \frac{d}{eV} \int_{\phi-eV}^{\phi} \sqrt{W} dW \\ &= \frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \frac{d}{eV} \left[\phi^{3/2} - (\phi - eV)^{3/2} \right].\end{aligned}$$

2. 记 $u = eV/\phi < 1$ 。 $(1-u)^{3/2} = 1 - \frac{3}{2}u + \frac{3}{8}u^2 - \frac{1}{16}u^3 + \dots$ ，方括号 $= \phi^{3/2} (\frac{3}{2}u - \frac{3}{8}u^2 - \frac{1}{16}u^3 - \dots)$ ，

$$\Theta = \frac{2d\sqrt{2m\phi}}{\hbar} \left(1 - \frac{u}{4} - \frac{u^2}{24} - \dots \right).$$

而 $2d\sqrt{2m(\phi - eV/2)}/\hbar = \frac{2d\sqrt{2m\phi}}{\hbar} \left(1 - \frac{u}{4} - \frac{u^2}{32} - \dots \right)$ ：一阶相同，即等效于平均高度 $\phi - eV/2$ 的方势垒（与第 5.1 节推导框的结论一致）；二者之差为 $-u^2/96$ ，也与该框的 $(\Delta/\bar{W})^2/96$ 相符。恒流 (Θ 不变) 时 $d = d_0/(1 - u/4 - u^2/24)$ ； $V = 1 \text{ V}$ 时 $u = 0.222$ ， $d = 5.31 \text{ \AA}$ ，针尖后撤 $0.31 \text{ \AA}$ （约 6%），其中平均势垒近似给出 $5.30 \text{ \AA}$ ，二阶项只差 $0.002 \text{ \AA}$ 。

3. $eV > \phi$ 时 W 在 $x_c = \phi d/(eV) < d$ 处降为零，势垒成为三角形； $x > x_c$ 处电子已在经典允许区（能量高于真空中的势能），在到达样品前就“出射”到真空中。积分上限改为 x_c ： $\Theta = \frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \frac{d}{eV} \phi^{3/2} = \frac{b_{\text{FN}} \phi^{3/2}}{F}$ ， $F = V/d$ ——正是式 (6.5)。

4. $\Theta_0 = 2\kappa_0 d_0 = 2 \times 1.087 \times 5 = 10.87$ 。由 (1)， Θ 正比于 d ，故 $d = \Theta_0/[\Theta(V, d)/d]$ ：

- $V = 1 \text{ V}$ ： $\frac{4}{3} \times 0.5123 \times (4.5^{3/2} - 3.5^{3/2}) = 2.048 \text{ \AA}^{-1}$ ， $d = 5.31 \text{ \AA}$ ；
- $V = 3 \text{ V}$ ： $d = 6.19 \text{ \AA}$ ； $V = 4.5 \text{ V}$ ： $d = 7.50 \text{ \AA}$ ； $V = 10 \text{ V}$ ： $d = 16.7 \text{ \AA}$ 。

$eV \geq \phi$ 时 $\Theta = b\phi^{3/2}d/V$ ， Θ 恒定即 V/d 恒定： $F = b_{\text{FN}}\phi^{3/2}/\Theta_0 = 6.831 \times 9.546/10.87 = 6.0 \text{ V/nm}$ 。针尖随偏压线性后撤，电场保持在约 6 V/nm ——场发射的特征电场。（实际上前因子与镜像势会使数值略有改变。）

5. $F = V/(5 \times 50 \text{ nm}) = V/250 \text{ nm}$ 。 $V = 1000 \text{ V}$: $F = 4 \text{ V/nm}$, 式 (6.6) 中指数 $6.831 \times 9.546/4 = 16.30$, $e^{-16.30} = 8.3 \times 10^{-8}$, 前因子 $1.541 \times 10^{-6} \times (4 \times 10^9 \text{ V/m})^2/4.5 = 5.48 \times 10^{12} \text{ A/m}^2$, $J = 4.6 \times 10^5 \text{ A/m}^2$, $I = JA_e = 0.91 \text{ nA}$ 。数值求解 $I = 1 \mu\text{A}$ 得 $V = 1593 \text{ V}$ ($F = 6.4 \text{ V/nm}$)。 $V = 1000 \text{ V}$ 时 $d \ln I/d \ln V = 2 + b\phi^{3/2}/F = 18.3$; 电压增加 10%, 直接计算得电流增大 5.3 倍 (线性估计 $e^{18.3 \times 0.095} \approx 5.7$)。场发射源的电流对电压与针尖形状都极其敏感。
6. 斜率 $S = -b_{\text{FN}}\phi^{3/2}k_f R_t$ (以伏特为单位, 此处 $S = -1.63 \times 10^4 \text{ V}$)。由 S 解出 $\phi = [|S|/(b_{\text{FN}}k_f R_t)]^{2/3}$, k_f 偏大 20% 时 ϕ 偏小为 $1.2^{-2/3} = 0.886$ 倍, 偏小 20% 时偏大为 1.16 倍: ϕ 的不确定度约 $\pm 13\%$ ($\pm 0.6 \text{ eV}$)。两根针尖的斜率之比为 $k_f^{(1)} R_t^{(1)}/(k_f^{(2)} R_t^{(2)})$, ϕ 相同而被消去——比较两根针尖只能检验几何因子, 不能消去 k_f 来求 ϕ ; 要求 ϕ 必须独立地知道电场 (例如用已知功函数的同一针尖做标定, 或在 STM 中利用已知间隙 d 使 $F = V/d$)。

评分要点: 梯形积分; 小偏压展开到二阶并与平均势垒比较; 三角形势垒的转折点; 恒流条件 $\Rightarrow$ 恒电场; FN 数值与灵敏度; 斜率-几何因子的耦合。

例题 3: 由 α 衰变寿命反推核半径, 以及数据中的“反常”

用第 6.4 节的 Gamow 模型。已知 (NUBASE2020[33]) ^{238}U : $Q = 4.270 \text{ MeV}$, $T_{1/2} = 4.463 \times 10^9$ 年; ^{212}Po : $Q = 8.954 \text{ MeV}$, $T_{1/2} = 294 \text{ ns}$; ^{210}Po : $Q = 5.407 \text{ MeV}$, $T_{1/2} = 138.4 \text{ d}$ 。

1. 由式 (6.10) 的第一项求 $d \ln T_{1/2}/d \ln Q$, 并估计 Q 有 1% 的误差时 ^{238}U 半衰期的预言误差。
2. **反推核半径。** 证明 $dG_G/dR_N = -2\kappa(R_N)$ ($\kappa(R_N) = \sqrt{2\mu[U(R_N) - Q]}/\hbar$), 从而 $d \ln T_{1/2}/dR_N = -2\kappa(R_N) + 1/R_N$ 。对 ^{238}U 算出其数值。若要求模型精确给出实测半衰期, r_0 ($R_N = r_0(A_d^{1/3} + 4^{1/3})$) 应取多少? 对 ^{212}Po 重复 (数值求解)。碰壁频率 ν 只知道到 2 倍以内, 这对 r_0 的确定意味着什么? 两核所得 r_0 之差能否用 ν 的不确定来解释?
3. 若 α 粒子带走轨道角动量 $l\hbar$, 径向方程中多出离心势 $\hbar^2 l(l+1)/(2\mu r^2)$ 。把它当作小修正, 求 Gamow 因子的一阶变化 ΔG_G (给出积分结果), 并计算 ^{238}U 若以 $l=2$ 衰变时半衰期增大的倍数。
4. 对 Th、U、Pu、Cm 四条同位素链分别拟合 $\log_{10} T_{1/2} - Z/\sqrt{Q}$ 的斜率 (数据见图 7b 与演示), 得 1.61–1.62, 略小于式 (6.11) 的 1.70。给出两个可能的原因。
5. **数据诊断。** 对 Po 链的全部五个同位素 (含 ^{210}Po) 拟合, 斜率恰为 1.70; 去掉 ^{210}Po 后为 1.53。哪一个更能代表“穿透”物理? 模型对 30 个偶偶核的 $\log_{10}$ 偏差平均为 -0.36 ; 扣除这一系统偏移后, ^{210}Po 的偏差还剩多少倍? ^{210}Po 的母核有 126 个中子 (“幻数”, 对应满壳层), 模型中哪个假设最可能失效?

解答

1. $G_G \approx 2\pi\eta \propto Q^{-1/2}$, $dG_G/d\ln Q = -\pi\eta$ (即主项 $2\pi\eta$ 的一半)。 $\nu \propto \sqrt{Q}$ 的变化 ($d\ln \nu/d\ln Q = 1/2$) 可以忽略。对 ^{238}U , $2\pi\eta = 171.0$, 故 $d\ln T_{1/2}/d\ln Q \approx -85$ (用精确式 (6.9) 数值求导为 -83)。 Q 偏大 1% 使 $T_{1/2}$ 缩短为 $e^{-0.83} \approx 1/2.3$ 。所以 Q 必须精确到 keV 量级, 这正是用质量表计算 Q 的原因。
2. 由 $G_G = 2 \int_{R_N}^b \kappa dr$ 且外端点 b 处 $\kappa = 0$, 对下限求导得 $dG_G/dR_N = -2\kappa(R_N)$ (b 不依赖 R_N)。又 $\nu \propto 1/R_N$, $T_{1/2} \propto R_N e^{G_G}$, 故 $d\ln T_{1/2}/dR_N = -2\kappa(R_N) + 1/R_N$ 。 ^{238}U : $U(R_N) - Q = 27.9 - 4.27 = 23.6 \text{ MeV}$, $\kappa(R_N) = \sqrt{2 \times 3664 \times 23.6}/197.33 = 2.11 \text{ fm}^{-1}$, $d\ln T_{1/2}/dR_N = -4.21 + 0.11 = -4.1 \text{ fm}^{-1}$; 乘以 $dR_N/dr_0 = A_d^{1/3} + 4^{1/3} = 7.75$, 得 $d\ln T_{1/2}/dr_0 \approx -32 \text{ fm}^{-1}$ 。半径只增大 1% (0.012 fm), 寿命就缩短约 30%。数值求解 $T_{\text{model}} = T_{\text{exp}}$: ^{238}U 得 $r_0 = 1.201 \text{ fm}$, ^{212}Po 得 $r_0 = 1.142 \text{ fm}$ (该核 $d\ln T/dr_0 = -27 \text{ fm}^{-1}$)。 ν 有 2 倍不确定, 相当于 r_0 有 $\ln 2/32 \approx 0.02 \text{ fm}$ 的不确定: r_0 与 ν 是“简并”的, 绝对寿命只能把它们的组合定下来。两核之差 0.06 fm 约为这一简并范围的 3 倍, 对应寿命约 6 倍, 说明除 ν 外还有别的模型误差 (核结构、预形成概率、核表面的弥散等), 不能把拟合出的 r_0 当作“测得的核半径”。
3. 离心势使 $\kappa_l = \sqrt{\kappa^2 + l(l+1)/r^2} \approx \kappa + \frac{l(l+1)}{2\kappa r^2}$ ($l(l+1)/r^2 \ll \kappa^2$)。 $\kappa(r) = k_0 \sqrt{b/r - 1}$, $k_0 = \sqrt{2\mu Q}/\hbar$ 。转折点的移动是二阶小量, 故

$$\begin{aligned} \Delta G_G &= \frac{l(l+1)}{k_0} \int_{R_N}^b \frac{dr}{r^{3/2} \sqrt{b-r}} \\ &= \frac{2l(l+1)}{k_0 b} \sqrt{\frac{b-R_N}{R_N}} \end{aligned}$$

(积分见附录 C)。 ^{238}U : $k_0 = 0.8965 \text{ fm}^{-1}$, $b = 60.70 \text{ fm}$, $R_N = 9.30 \text{ fm}$, $l = 2$: $\Delta G_G = \frac{12}{54.42} \times 2.351 = 0.518$ (直接数值积分 0.517), 半衰期增大 $e^{0.518} = 1.7$ 倍。离心势垒的作用远小于库仑势垒, 但仍可观——这是 α 衰变倾向于 l 小的末态的原因之一。

4. (i) 同一元素中较重的同位素 Q 较小 ($Z/\sqrt{Q}$ 较大), 但核半径 $R_N \propto A^{1/3}$ 也较大; 由 (2), R_N 增大使寿命缩短, 降低了斜率。(ii) 式 (6.10) 只展开到 $\sqrt{R_N/b}$ 一阶, 下一项 $+\frac{2}{3}k_0 b(R_N/b)^{3/2} \propto Q$ 随 Q 增大而增大, 也使曲线变缓; 而 $\nu \propto \sqrt{Q}$ 使大 Q 端寿命略短, 方向相反 (使斜率略增约 0.01), 量小。用精确式 (6.9) 计算的模型点再现了 1.6 左右的斜率 (图 7b)。
5. 1.70 是巧合: ^{210}Po 处在 $Z/\sqrt{Q}$ 最大的一端, 又反常地长寿, 把直线的右端抬高, 恰好把斜率拉回 1.70。代表“穿透”物理的是去掉它后的 1.53 (与其他链的 1.6 同量级)。偏差: 模型对 ^{210}Po 偏短 $10^{1.61} = 41$ 倍; 扣除整体偏移 -0.36 后仍短 $10^{1.25} \approx 18$ 倍, 而其余 29 个核扣除偏移后都在 3 倍以内。最可疑的是“ α 粒子预先形成、每次碰壁都以 e^{-G_G} 的概率逃逸”——即预形成概率取为 1。满壳层附近的核结构使 α 粒子的预形成概率显著降低, 实际衰变率比模型小, 寿命比模型长, 方向与观测一致。Gamow 模型只处理了“穿透”, 没有处理“形成”。这一问也说明: 拟合前要先检查数据点是否属于同一物理机制。

评分要点: Q 灵敏度来自 $Q^{-1/2}$; 对积分下限求导得 $-2\kappa(R_N)$ 、反推 r_0 并认识 $r_0-\nu$ 简并; 离心势的一阶展开与积分; 斜率偏差的原因; 识别 ^{210}Po 对拟合的杠杆作用与预形成问题。

例题 4: 量子围栏——态的计数、“软墙”、能级宽度与量子海市蜃楼

采用第 7.3 节的硬壁模型 ($R_c = 71.3 \text{ \AA}$, $m^* = 0.38m_e$, $E_0 = -0.45 \text{ eV}$) 作为出发点。

- 数态。** 不计自旋, 估计围栏中能量低于 E_F 的态数: (a) 用面积乘以二维态密度; (b) 利用二维硬壁区域态数的边界修正公式 $N(k) \approx \frac{Ak^2}{4\pi} - \frac{L_c k}{4\pi}$ (A 为面积, L_c 为周长) 重新估计; (c) 与逐个贝塞尔零点的结果 51 比较, 并解释边界项的符号。围栏中约有多少个表面态电子?
- 圆心的谱。** 写出圆心处 dI/dV 谱的全部峰位 ($E < 0.25 \text{ eV}$), 指出费米能级附近哪个 $l = 0$ 态最近, 它的 $|\psi|^2$ 在圆内有几个亮环。
- “软墙”。** 真实的墙由 Fe 原子组成, 电子波在离原子中心一定距离处就被反射。设其效果等价于半径缩小 $\Delta R = 2 \text{ \AA}$ 的硬壁 (本题假设)。所有能级 (相对 E_0) 按什么比例移动? 费米能级附近的能级移动约多少? (2) 中那个 $l = 0$ 态还在 E_F 以下吗? 由此说明比较实验图样与模型时围栏有效半径的重要性。
- 能级宽度。** 设电子每撞一次墙, 留在围栏内的概率为 R_w (墙的反射率, 模型参数), 其余被 Fe 原子吸收或散射出去。把 $l = 0$ 态看成沿直径来回运动的波包, 证明能级宽度 $\Gamma = \hbar v \ln(1/R_w)/(2R_c) \propto k$ 。取 $R_w = 0.25$ (本题假设), 求费米能级处的 Γ_F , 以及圆心谱上各 $l = 0$ 峰的宽度。漏出前平均反射几次? 若按 Fiete-Heller “漏出前约两次反射” [34] 的说法取 $R_w = 2/3$, Γ_F 变为多少? 与相邻 $l = 0$ 峰的间距、以及所有能级的平均间距比较: 为什么圆心谱上的峰能分开, 而费米能级处的图样却是多个态的叠加?
- 量子海市蜃楼。** Manoharan 等人把围栏做成椭圆, 在一个焦点 F_1 放一个钴原子, 在另一个焦点 F_2 观测到了它的电子结构“幻影” [36]。用椭圆的定义 (到两焦点距离之和为常数 $2a$, a 为半长轴) 证明: 从 F_1 发出、经椭圆壁反射一次到达 F_2 的所有路径长度都相同。由此说明为什么“幻影”只出现在另一个焦点。

解答

- 能量尺度 $\hbar^2/(2m^*R_c^2) = 1.97 \text{ meV}$, $k_F = 0.2119 \text{ \AA}^{-1}$, $k_F R_c = 15.11$ 。(a) 二维态密度 (每种自旋) $m^*/(2\pi\hbar^2)$ 乘以面积 πR_c^2 与能量范围 $|E_0|$: $N = (k_F R_c)^2/4 = 57.0$ 。(b) 边界项 $-\frac{2\pi R_c k_F}{4\pi} = -\frac{k_F R_c}{2} = -7.6$, $N \approx 49.5$ 。(c) 逐个满足 $E_{l,n} < E_F$ 的态 ($l \neq 0$ 计两次) 得 51。硬壁要求波函数在墙上为零, 相当于“挤掉”了靠墙宽约 $1/k = \lambda/2\pi \approx 4.7 \text{ \AA}$ 的一圈面积 ($L_c k/4\pi = L_c \cdot (1/k) \cdot k^2/4\pi$), 所以边界项为负; (b) 比 (a) 准确得多。计入自旋, 围栏中约有 100 个表面态电子。
- 只有 $l = 0$ 的态在圆心有振幅 ($l \neq 0$ 时 $J_l(0) = 0$), 峰位为 $E_{0,n} = E_0 + 1.97 \text{ meV} \times x_{0,n}^2$: $-439, -390, -302, -176, -10, +194 \text{ meV}$ 。费米能级附近是 (0, 5) 态 (-10 meV): J_0 在圆内有 4 个零点, 加上中心的极大, 共有中心亮点外加 4 个亮环; 靠近边缘处相邻亮环间距趋于 $\pi/k \approx 15 \text{ \AA}$ 。

3. 由式 (7.6), $E - E_0 \propto 1/R^2$, 所有能级 (相对带底) 乘以 $(71.3/69.3)^2 = 1.059$, 即上移 5.9%。费米能级附近 $E - E_0 \approx 450 \text{ meV}$, 上移约 26 meV: $(0, 5)$ 态从 -10 meV 移到 $+15 \text{ meV}$, 跑到了 E_F 以上; E_F 以下的态数从 51 减为 46。费米能级附近能级的平均间距只有几 meV (见 (4)), $2 \text{ \AA}$ 的不确定就足以改变“哪个态主导 E_F 处的图样”。因此与实验定量比较必须用散射理论, 或把有效半径作为拟合参数。
4. 波包以速度 $v = \hbar k/m^*$ 往返, 穿过一次直径用时 $\tau_b = 2R_c/v$, 每次撞墙概率乘以 R_w 。留在围栏中的概率 $\Pi(t) = R_w^{t/\tau_b} = e^{-t/\tau_L}$, $\tau_L = \tau_b/\ln(1/R_w)$, 故 $\Gamma = \hbar/\tau_L = \hbar v \ln(1/R_w)/(2R_c) \propto k$ 。费米能级处 $v = 6.46 \times 10^5 \text{ m/s}$, $\tau_b = 2.21 \times 10^{-14} \text{ s}$, $\hbar/\tau_b = 29.8 \text{ meV}$, $\Gamma_F = 1.386 \times 29.8 = 41 \text{ meV}$ 。(若误用小损耗公式 $\Gamma \approx \hbar(1 - R_w)/\tau_b$ 会得到 22 meV——损耗并不小, 必须用对数。)漏出前的平均反射次数为 $\sum_{n \geq 1} n R_w^n (1 - R_w) = R_w/(1 - R_w) = 1/3$, 即平均存活不到一次穿越。若取 $R_w = 2/3$ (平均两次反射), $\Gamma_F = 29.8 \times \ln 1.5 = 12 \text{ meV}$, 小了约 3 倍: Γ 对 R_w 很敏感, 而盒子模型本身无法给出 R_w , 这正是 Fiete-Heller 所说“盒子模型不能预言宽度”的含义。下面仍取 $R_w = 0.25$ 。 $l = 0$ 峰的宽度 $\Gamma_{0,n} = \Gamma_F x_{0,n}/(k_F R_c)$: 6.6、15、24、32、41、49 meV ($n = 1-6$)。相邻 $l = 0$ 峰的间距为 49、88、127、165、204 meV, 都大于相应的宽度, 所以圆心谱上的峰能分开; 而计入所有 l , 平均能级间距为 $1/[\pi R_c^2 m^*/(2\pi\hbar^2)] = 7.9 \text{ meV} \ll \Gamma_F$, 费米能级处的 LDOS 是 Γ_F 范围内约 5 个态的叠加 (图 8e 正是这样计算的)。(这里把由 $l = 0$ 沿直径往返推出的 $\Gamma \propto k$ 用于所有 l , 忽略了 Γ 对 l 的依赖: 高 l 态对应较短的弦, 撞墙更频繁, 实际宽度更大。)
5. 设壁上任一点 P , 按椭圆的定义 $\overline{F_1 P} + \overline{P F_2} = 2a$, 与 P 无关。再证“焦点反射性质”: 记 $r_1 = \overline{F_1 P}$ 、 $r_2 = \overline{P F_2}$, 椭圆是函数 $r_1 + r_2$ 的一条等值线, 等值线的法向沿梯度 $\nabla(r_1 + r_2) = \hat{\mathbf{u}}_1 + \hat{\mathbf{u}}_2$ (∇r_i 是从焦点 F_i 指向 P 的单位矢量 $\hat{\mathbf{u}}_i$)。两个单位矢量之和平分它们的夹角, 所以 P 点的法线平分 $\angle F_1 P F_2$, 即入射角等于反射角: $F_1 \rightarrow P \rightarrow F_2$ 正是一条满足反射定律的路径。所以从 F_1 向任意方向发出的波, 在壁上镜面反射后都指向 F_2 , 而且走过的路程都是 $2a$ ——到达 F_2 时相位相同, 相干叠加。其他点不具备“所有反射路径等长”的性质, 各路径的相位 $k \times$ 路程各不相同, 叠加时相互抵消。因此 F_1 处原子引起的电子态扰动只在 F_2 处被“重建”出来。若选取的电子能量使围栏某个本征态在两个焦点都有较大振幅, 效果最强。

评分要点: 态数的面积项与边界项及其符号; $l = 0$ 的选择定则与峰位; 能级 $\propto R^{-2}$ 的灵敏度; 由墙的反射率推出 $\Gamma \propto k$ (对数)、 Γ 对 R_w 的敏感性及两种间距的比较; 椭圆定义推出等光程, 梯度法证明焦点反射性质。

9 实验与数据处理：由 I - z 谱求表观势垒高度

例题：实验题（笔试，约 60 分钟）

在超高真空、液氮温度下用钨针尖研究 Au(111) 表面。偏压 $V = 0.10\text{ V}$ ，先在 $I_{\text{set}} = 1.00\text{ nA}$ 下稳定针尖，然后断开反馈，让 z 压电陶瓷把针尖从初始位置后撤 Δz_{nom} ，记录电流（表 4）。 Δz_{nom} 是按厂家标称灵敏度由电压换算的“标称位移”，真实位移为 $\gamma \Delta z_{\text{nom}}$ ， γ 未知。电流测量的不确定度由两部分组成：相对误差 2%（多次平均后的涨落），以及前置放大器的加性噪声 $\sigma_a = 2\text{ pA}$ 。

为标定压电陶瓷，在同一扫描范围内拍摄了跨过 Au(111) 单原子台阶的恒流图像，6 条剖面线给出的台阶高度（标称单位）为 2.58、2.57、2.58、2.49、2.59、2.50 Å。Au 的晶格常数 $a = 4.0786\text{ Å}$ [23]，(111) 面的单原子台阶高度为 $a/\sqrt{3}$ 。

另外，从同一初始位置让针尖缓慢逼近，在 $\Delta z_{\text{nom}} = (-3.8 \pm 0.1)\text{ Å}$ 处电导突然跳到约 G_0 ：此时原子间的吸引力使针尖顶端原子“跳”到与表面接触 [19]，电流不再由隧穿公式决定。设跳触前瞬间的等效势垒宽度为 $d_c = (2.5 \pm 0.5)\text{ Å}$ （约一个原子间距，本题假设）。

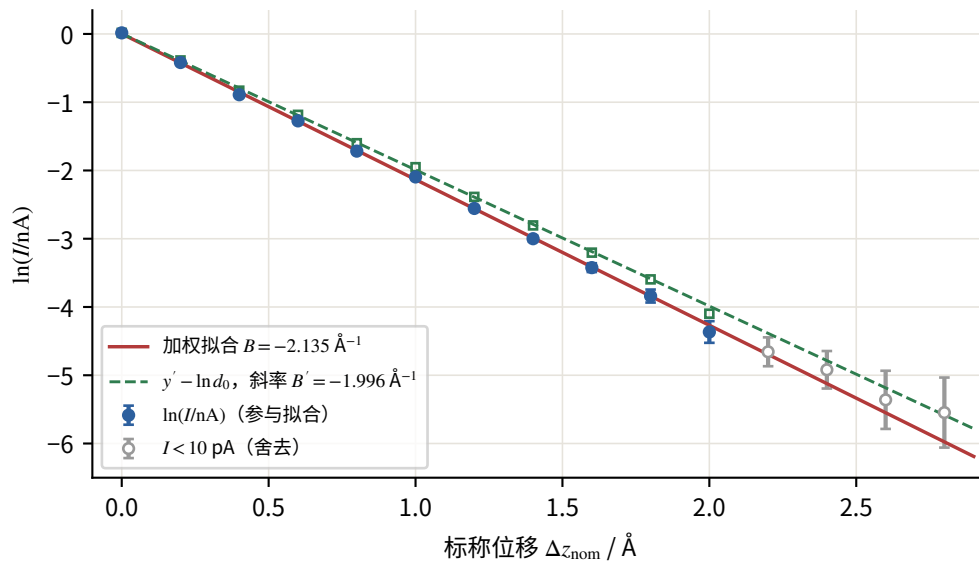
注意：式 (5.4) 的绝对前因子只是量级估计（含 P 、 R_t 与局部平面近似），不能用来由电流的绝对值定出间隙；本题的间隙只由接触点确定。

说明：表中数据为模拟数据，由比本题分析模型更完整的模型生成：平面电流由精确方势垒透射系数对能量数值积分得到，再对半径 5 Å 的球形针尖做面积分（各点取该处的竖直间隙，仍属局部平面近似），然后加噪声；电流的绝对值已按设定点 $I_{\text{set}} = 1.00\text{ nA}$ 归一化，不代表生成模型的绝对预言（生成脚本 `scripts/exp_data.py`，随机种子 20261017，事先固定）。

1. 由式 (5.2) 写出 $\ln I$ 与 Δz_{nom} 的关系（含未知量 κ_0 、 γ 与初始间隙 d_0 ），说明在什么意义下它近似为直线。
2. 由台阶数据求 γ 及其标准不确定度。
3. 写出 $\ln I$ 的不确定度 σ_i ，说明哪些数据点应舍去或降低权重；给出加权最小二乘拟合直线 $y = A + B \Delta z_{\text{nom}}$ 的公式，求斜率 B 及其不确定度，并用 χ^2 检验拟合。
4. 不作任何修正，由 B 直接按式 (5.5) 算出的“表观势垒”是多少？计入 γ 后又是多少（带不确定度）？
5. 利用接触点数据求 d_0 ，再计入前因子 $1/d$ 的影响，求有效势垒高度 $\bar{\phi}$ 及其不确定度。按式 (5.4)， $I_{\text{set}} = 1\text{ nA}$ 对应的间隙约 4.1 Å（第 5.2 节）；与你求得的 d_0 相比，这一差别说明什么？
6. 讨论其余的系统误差与改进方案；特别地，本题的分析能否检验“ $1/d$ 前因子”这一模型本身？

表 4 I - z 谱 (模拟数据): 针尖由 $I_{\text{set}} = 1.00 \text{ nA}$ 的位置后撤的标称位移与电流

$\Delta z_{\text{nom}}/\text{\AA}$	I/nA	$\Delta z_{\text{nom}}/\text{\AA}$	I/nA	$\Delta z_{\text{nom}}/\text{\AA}$	I/nA
0.0	1.0159	1.0	0.1231	2.0	0.0127
0.2	0.6582	1.2	0.0776	2.2	0.0095
0.4	0.4105	1.4	0.0498	2.4	0.0073
0.6	0.2799	1.6	0.0326	2.6	0.0047
0.8	0.1797	1.8	0.0215	2.8	0.0039

图 9 实验题的数据处理 (模拟数据)。圆点: $\ln I$ 及其不确定度 σ_y ; 空心点为 $I < 10 \text{ pA}$ 、被舍去的点。实线: 对 $\ln I$ 的加权拟合 (斜率 B); 虚线: 对精确线性化量 $y' = \ln I + \ln d$ 的加权拟合 (斜率 B' , 纵轴已平移以便比较)。

解答

1. 真实间隙 $d = d_0 + \gamma \Delta z_{\text{nom}}$ ，由式 (5.2)：

$$\ln I = \text{常数} - \ln(d_0 + \gamma \Delta z_{\text{nom}}) \\ - 2\kappa_0 \gamma \Delta z_{\text{nom}}.$$

第三项是直线；第二项是缓变的对数，在 d 从 $6 \text{ \AA}$ 变到 $8 \text{ \AA}$ 的范围内它的斜率 γ/d 只变化约 $0.15 \rightarrow 0.12 \text{ \AA}^{-1}$ ，远小于 $2\kappa_0 \gamma \approx 2$ 。所以 $\ln I$ 对 Δz_{nom} 近似为直线，斜率 $B \approx -\gamma(2\kappa_0 + 1/\bar{d})$ ， $\bar{d}$ 为拟合区间内的平均间隙。

2. 台阶的标称读数平均 $\bar{h} = 2.552 \text{ \AA}$ ，样本标准差 $0.045 \text{ \AA}$ ，平均值的标准误差 $0.045/\sqrt{6} = 0.018 \text{ \AA}$ 。真高 $a/\sqrt{3} = 2.355 \text{ \AA}$ ：

$$\gamma = \frac{2.355}{2.552} = 0.923 \pm 0.007.$$

3. 对 $y = \ln I$ ， $\sigma_y = \sigma_I/I = \sqrt{0.02^2 + (\sigma_a/I)^2}$ 。 $I = 1 \text{ nA}$ 时 $\sigma_y = 0.020$ ； $I = 10 \text{ pA}$ 时 0.20 ； $I = 4 \text{ pA}$ 时 0.50 ——末几个点被前置放大器噪声淹没，且 $\ln$ 的非线性使噪声在对数中不对称、有偏。取 $I \geq 10 \text{ pA}$ 的 11 个点 ($\Delta z_{\text{nom}} \leq 2.0 \text{ \AA}$)，权重 $w_i = 1/\sigma_i^2$ 。记 $S = \sum w_i$ ， $S_x = \sum w_i x_i$ ， $S_y = \sum w_i y_i$ ， $S_{xx} = \sum w_i x_i^2$ ， $S_{xy} = \sum w_i x_i y_i$ ， $\Delta = SS_{xx} - S_x^2$ ：

$$B = \frac{SS_{xy} - S_x S_y}{\Delta}, \\ A = \frac{S_{xx} S_y - S_x S_{xy}}{\Delta}, \\ \sigma_B = \sqrt{\frac{S}{\Delta}}, \\ \chi^2 = \sum w_i (y_i - A - B x_i)^2.$$

结果 $B = (-2.135 \pm 0.019) \text{ \AA}^{-1}$ ， $\chi^2 = 7.0$ ，自由度为 $11 - 2 = 9$ 。若误差估计合理， χ^2 应与自由度相近（其标准差约 $\sqrt{2 \times 9} \approx 4$ ），故与所设误差相容，无需放大不确定度。作为对比：不加权地拟合全部 15 个点得 $B = -2.046 \text{ \AA}^{-1}$ ，被噪声底限拉平，偏差约 5 倍标准误差。

4. 未修正： $\phi = 0.952 \times 2.135^2 = 4.34 \text{ eV}$ 。计入 γ ：真实斜率 $|B|/\gamma = (2.313 \pm 0.026) \text{ \AA}^{-1}$ （ B 与 γ 来自独立数据，相对误差平方和开方： $\sqrt{0.88\%^2 + 0.71\%^2} = 1.13\%$ ）， $\phi_{\text{ap}} = 0.952 \times 2.313^2 = (5.10 \pm 0.12) \text{ eV}$ （相对误差加倍为 2.3% ）。标定使结果变化了 17% ，远大于统计误差——与 Binnig 等人 1981 年的经历如出一辙 [5]。

5. 初始间隙 $d_0 = d_c + \gamma \times 3.8 \text{ \AA} = 2.5 + 3.51 = 6.0 \text{ \AA}$ 。把 $\ln d$ 移到左边精确线性化：

$$y' \equiv \ln I + \ln(d_0 + \gamma \Delta z_{\text{nom}}) \\ = \text{常数} - 2\kappa_0 \gamma \Delta z_{\text{nom}},$$

用同样的权重拟合 y' ，斜率 $B' = (-1.996 \pm 0.019) \text{ \AA}^{-1}$ ， $\kappa_0 = |B'|/(2\gamma) = (1.081 \pm 0.012) \text{ \AA}^{-1}$ ，

$$\bar{\phi} = \frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} = 3.810 \times 1.081^2 \\ = (4.45 \pm 0.11) \text{ eV}.$$

γ 同时出现在 d_0 、 y' 与 κ_0 中；把 γ 改变一个标准差、整条链重算， $\bar{\phi}$ 的变化与只计 $\kappa_0 = |B'|/(2\gamma)$ 一处的结果相差不到 2%，相关性可以忽略（脚本核对）。 d_c 在 $\pm 0.5 \text{ \AA}$ 内变化使 $\bar{\phi}$ 变为 4.40–4.50 eV，即另有 $\pm 0.05 \text{ eV}$ 的系统不确定度；接触点读数的 $\pm 0.1 \text{ \AA}$ 只带来 $\pm 0.01 \text{ eV}$ ，可忽略。（用“平均间隙”近似： $\bar{d} = 6.53 \text{ \AA}$ ， $\kappa_0 = (2.313 - 1/6.53)/2 = 1.080 \text{ \AA}^{-1}$ ， $\bar{\phi} = 4.44 \text{ eV}$ ，相同。）最终 $\bar{\phi} = (4.45 \pm 0.11_{\text{stat}} \pm 0.05_{d_c}) \text{ eV}$ 。三个结果 4.34、5.10、4.45 eV 说明：两项修正方向相反、大小都远超统计误差，任何一项都不能省。

与第 5.2 节的 $4.1 \text{ \AA}$ 相比， d_0 大了约 $1.9 \text{ \AA}$ ：式 (5.4) 在 $6.0 \text{ \AA}$ 处只给出约 20 pA，而实测为 1 nA，即实际的前因子比式 (5.4) 大约 $e^{2\kappa_0 \times 1.9} \approx 60$ 倍。（本题的模拟数据按设定点归一化，生成模型本身在 $6.0 \text{ \AA}$ 处也只给出约 14 pA，与式 (5.4) 的约 20 pA 同量级——这一差别来自本题的平面加球面模型之外的因素。）真实的 STM 中，镜像势使势垒变圆变低、针尖顶端 d 态与多原子针尖增大有效面积，都会使绝对电流比简单模型大很多，而且同时会改变斜率。所以用电流绝对值定间隙误差可达 $1\text{--}2 \text{ \AA}$ ；斜率（指数）相对稳健。这正是题目要用接触点、而不是用设定电流来定间隙的原因。

6. 其余系统误差与改进：

- **前因子模型（本题的分析不能检验它）**：第 (5) 问用 $1/d$ 前因子做了约 -13% 的修正。本题的数据只给出一条 $\ln I$ - z 曲线，它在拟合区间内几乎是直线，“斜率 $2\kappa_0$ 加上前因子的 d 依赖”只以组合形式出现，从数据本身无法把两者分开—— χ^2 合格只说明数据与假设的模型自洽，不能证明模型正确。模型误差的量级可以用“换一个合理的前因子”来估计：本题的模拟数据实际上由更完整的模型生成（球面几何、各点取竖直间隙，加对能量的完整积分），它的有效前因子约为 $d^{-0.96}$ ；把无噪声数据按 $1/d$ 模型分析得 $\bar{\phi} = 4.37 \text{ eV}$ ，而生成所用的势垒高度为 4.40 eV ，即模型误差约 -0.03 eV 。若前因子的模型更粗糙（例如镜像势使势垒变圆，第 5.3 节），误差可以大得多。所以应报告“在 $1/d$ 前因子模型下的有效势垒”，并注明模型。（作为对照，本题数据给出的 4.45 eV 与 4.40 eV 相差 0.5 倍标准不确定度。）
- **热漂移**：若间隙以 $0.02 \text{ \AA/s}$ 漂移，2 s 的扫描在 $2 \text{ \AA}$ 的范围上引入约 2% 的斜率误差， ϕ 误差约 4%。可比较“后撤”与“逼近”两条曲线，或缩短扫描时间、多次平均；液氮温度下漂移很小。
- **压电非线性与迟滞**：标定应在与 I - z 谱相同的电压范围和方向上进行；可用多个台阶、晶格常数等多个已知尺寸交叉标定。
- **针尖状态**：针尖顶端原子的改变会同时改变 ϕ_{ap} 与 d_c ；应在测量前后检查图像质量与 I - z 的可重复性。
- **改进测量方法**：在 z 上叠加小幅调制 $\delta z \cos \omega t$ ，用锁相放大器直接测 $d \ln I / dz$ ，可逐点给出表观势垒；在更大的间隙范围内测量，前因子的 d 依赖（ $-1/d$ 随 d 变化）才有可能从数据中分辨出来。

评分要点：模型与线性化；独立标定 γ ；识别噪声底限并加权；最小二乘公式与 χ^2 ；误差传递（独立量平方和，相关性检查）；接触点给出绝对间隙并做精确线性化；认识绝对电流定间隙的不可靠；区分“自洽”与“检验模型”。

10 小结

本讲的推导链如下：

1. **定态薛定谔方程** (式 (3.4)) $\rightarrow$ 经典禁区中的指数解 (式 (3.5)); **概率流** (式 (3.6)) 在定态中守恒 $\rightarrow$ 透射系数的定义与 $R + T = 1$; ψ 、 ψ' 连续 $\rightarrow$ 匹配条件。
2. **方势垒**: 精确解式 (4.4); 厚势垒近似式 (4.5), $T \propto e^{-2\kappa d}$; $\kappa \approx 1 \text{ \AA}^{-1} \Rightarrow$ 每埃约一个数量级。
3. **自由电子气** (费米能式 (3.9)、功函数) + 平行动量守恒 + 弹性隧穿 $\rightarrow$ 一般电流公式式 (5.1) $\rightarrow$ 小偏压 STM 电流式 (5.2), $I \propto (V/d)e^{-2\kappa_0 d} \rightarrow$ 电导量级式 (5.4)、表观势垒式 (5.5)–(5.6)。
4. 局部平面近似 $\rightarrow$ 横向高斯分布式 (5.3); 真空中 $\nabla^2 \psi = \kappa_0^2 \psi \rightarrow$ 起伏按 $e^{-(q_G - \kappa_0)z}$ 衰减 (式 (5.8)) $\rightarrow$ Tersoff–Hamann 分辨率; 反馈一阶弛豫式 (5.9); 两级振子 $\rightarrow$ 隔振判据式 (5.12)。
5. 缓变条件式 (6.1) $\rightarrow$ **WKB**: $T \approx \exp(-2 \int \kappa dx)$ (式 (6.3)) $\rightarrow$ 三角形势垒 (式 (6.5)) + 电流公式 $\rightarrow$ **FN 公式**式 (6.6) 与 FN 图; 库仑势垒 $\rightarrow$ **Gamow 因子**式 (6.9)–(6.10) $\rightarrow$ Geiger–Nuttall 定律式 (6.11)。
6. 电流公式推广到能量依赖的样品 $\rightarrow dI/dV \propto$ **局域态密度** (式 (7.3)); 表面态二维电子气 + 硬壁圆形势阱 $\rightarrow$ 贝塞尔函数与能级式 (7.6) $\rightarrow$ 量子围栏的图样与谱。

贯穿始终的一个事实是：**指数中的量决定一切，前因子只是“1 的量级”**。它使 STM 拥有皮米级的纵向灵敏度和原子级的横向分辨率，使 α 衰变寿命跨越 24 个数量级，也使实验数据处理必须关注那些看似微小、却会被指数放大的系统误差。

参考文献

- [1] R. H. Fowler and L. Nordheim. Electron emission in intense electric fields. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 119:173–181, 1928. doi: 10.1098/rspa.1928.0091.
- [2] H. Geiger and J. M. Nuttall. The ranges of the α particles from various radioactive substances and a relation between range and period of transformation. *Philosophical Magazine (Series 6)*, 22:613–621, 1911. doi: 10.1080/14786441008637156.
- [3] G. Gamow. Zur quantentheorie des atomkernes. *Zeitschrift für Physik*, 51:204–212, 1928. doi: 10.1007/BF01343196.
- [4] R. W. Gurney and E. U. Condon. Wave mechanics and radioactive disintegration. *Nature*, 122:439, 1928. doi: 10.1038/122439a0.
- [5] G. Binnig and H. Rohrer. Scanning tunneling microscopy—from birth to adolescence. *Reviews of Modern Physics*, 59:615–625, 1987. doi: 10.1103/RevModPhys.59.615. Nobel lecture.
- [6] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel. Tunneling through a controllable vacuum gap. *Applied Physics Letters*, 40:178–180, 1982. doi: 10.1063/1.92999.

- [7] 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.
- [8] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel. 7×7 reconstruction on Si(111) resolved in real space. *Physical Review Letters*, 50:120–123, 1983. doi: 10.1103/PhysRevLett.50.120.
- [9] Nobel Prize Outreach. The nobel prize in physics 1986. <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1986/summary/>, 1986.
- [10] D. M. Eigler and E. K. Schweizer. Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope. *Nature*, 344:524–526, 1990. doi: 10.1038/344524a0.
- [11] M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface. *Science*, 262:218–220, 1993. doi: 10.1126/science.262.5131.218.
- [12] M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Imaging standing waves in a two-dimensional electron gas. *Nature*, 363:524–527, 1993. doi: 10.1038/363524a0.
- [13] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976. Table 2.1.
- [14] National Physical Laboratory. Kaye & laby tables of physical and chemical constants, section 4.3: Work functions. Archived online edition; values compiled from Rivière (1969) and Hölzl & Schulte (1979), 2005.
- [15] C. Julian Chen. *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*. Oxford University Press, Oxford, 2nd edition, 2008. doi: 10.1093/acprof:oso/9780199211500.001.0001.
- [16] G. Binnig and H. Rohrer. Scanning tunneling microscopy. *Helvetica Physica Acta*, 55:726–735, 1982.
- [17] J. G. Simmons. Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film. *Journal of Applied Physics*, 34:1793–1803, 1963. doi: 10.1063/1.1702682.
- [18] P. J. Mohr, D. B. Newell, B. N. Taylor, and E. Tiesinga. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2022. <https://physics.nist.gov/cuu/Constants/>, 2024.
- [19] L. Limot, J. Kröger, R. Berndt, A. Garcia-Lekue, and W. A. Hofer. Atom transfer and single-adatom contacts. *Physical Review Letters*, 94:126102, 2005. doi: 10.1103/PhysRevLett.94.126102.
- [20] J. Bardeen. Tunnelling from a many-particle point of view. *Physical Review Letters*, 6:57–59, 1961. doi: 10.1103/PhysRevLett.6.57.
- [21] J. Tersoff and D. R. Hamann. Theory and application for the scanning tunneling microscope. *Physical Review Letters*, 50:1998–2001, 1983. doi: 10.1103/PhysRevLett.50.1998.

- [22] J. Tersoff and D. R. Hamann. Theory of the scanning tunneling microscope. *Physical Review B*, 31:805–813, 1985. doi: 10.1103/PhysRevB.31.805.
- [23] J. W. Arblaster. *Selected Values of the Crystallographic Properties of Elements*. ASM International, Materials Park, OH, 2018.
- [24] V. M. Hallmark, S. Chiang, J. F. Rabolt, J. D. Swalen, and R. J. Wilson. Observation of atomic corrugation on Au(111) by scanning tunneling microscopy. *Physical Review Letters*, 59:2879–2882, 1987. doi: 10.1103/PhysRevLett.59.2879.
- [25] C. J. Chen. Origin of atomic resolution on metal surfaces in scanning tunneling microscopy. *Physical Review Letters*, 65:448–451, 1990. doi: 10.1103/PhysRevLett.65.448.
- [26] M. Okano, K. Kajimura, S. Wakiyama, F. Sakai, W. Mizutani, and M. Ono. Vibration isolation for scanning tunneling microscopy. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 5: 3313–3320, 1987. doi: 10.1116/1.574189.
- [27] APC International. Physical and piezoelectric properties of APC materials. <https://www.americanpiezo.com/apc-materials/physical-piezoelectric-properties/>, 2025. APC 850 ($-d_{31} = 175$ pm/V) to APC 855 (276 pm/V).
- [28] G. Binnig and D. P. E. Smith. Single-tube three-dimensional scanner for scanning tunneling microscopy. *Review of Scientific Instruments*, 57:1688–1689, 1986. doi: 10.1063/1.1139196.
- [29] D. J. Griffiths and D. F. Schroeter. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 3rd edition, 2018. Chapter 9 (the WKB approximation).
- [30] R. G. Forbes and J. H. B. Deane. Reformulation of the standard theory of Fowler–Nordheim tunnelling and cold field electron emission. *Proceedings of the Royal Society A*, 463:2907–2927, 2007. doi: 10.1098/rspa.2007.0030.
- [31] E. L. Murphy and R. H. Good. Thermionic emission, field emission, and the transition region. *Physical Review*, 102:1464–1473, 1956. doi: 10.1103/PhysRev.102.1464.
- [32] R. G. Forbes. Simple good approximations for the special elliptic functions in standard Fowler–Nordheim tunneling theory for a Schottky–Nordheim barrier. *Applied Physics Letters*, 89:113122, 2006. doi: 10.1063/1.2354582.
- [33] F. G. Kondev, M. Wang, W. J. Huang, S. Naimi, and G. Audi. The NUBASE2020 evaluation of nuclear physics properties. *Chinese Physics C*, 45:030001, 2021. doi: 10.1088/1674-1137/abddae.
- [34] G. A. Fiete and E. J. Heller. Colloquium: Theory of quantum corrals and quantum mirages. *Reviews of Modern Physics*, 75:933–948, 2003. doi: 10.1103/RevModPhys.75.933. arXiv:cond-mat/0211607.
- [35] E. J. Heller, M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Scattering and absorption of surface electron waves in quantum corrals. *Nature*, 369:464–466, 1994. doi: 10.1038/369464a0.

- [36] H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure. *Nature*, 403:512–515, 2000. doi: 10.1038/35000508.

A 方势垒透射系数的精确推导

从式 (4.2)–(4.3) 出发。

1. 由 $x = d$ 的两式 (正文厚势垒推导第 1 步): $C = \frac{\kappa - ik}{2\kappa} t e^{ikd} e^{\kappa d}$, $D = \frac{\kappa + ik}{2\kappa} t e^{ikd} e^{-\kappa d}$ 。
2. 由 $x = 0$ 的两式消去 r : 第一式乘以 ik 与第二式相加, $2ik = ik(C + D) + \kappa(D - C) = (ik - \kappa)C + (ik + \kappa)D$ 。
3. 代入第 1 步:

$$\begin{aligned} 2ik &= \frac{t e^{ikd}}{2\kappa} [(ik - \kappa)(\kappa - ik)e^{\kappa d} \\ &\quad + (ik + \kappa)(\kappa + ik)e^{-\kappa d}] \\ &= \frac{t e^{ikd}}{2\kappa} [-(\kappa - ik)^2 e^{\kappa d} \\ &\quad + (\kappa + ik)^2 e^{-\kappa d}]. \end{aligned}$$

4. 展开 $(\kappa \pm ik)^2 = \kappa^2 - k^2 \pm 2ik\kappa$, 方括号化为

$$\begin{aligned} &-(\kappa^2 - k^2)(e^{\kappa d} - e^{-\kappa d}) \\ &+ 2ik\kappa(e^{\kappa d} + e^{-\kappa d}) \\ &= -2(\kappa^2 - k^2) \sinh \kappa d + 4ik\kappa \cosh \kappa d. \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} t e^{ikd} &= \frac{2ik\kappa}{\mathcal{D}}, \\ \mathcal{D} &\equiv 2ik\kappa \cosh \kappa d \\ &\quad - (\kappa^2 - k^2) \sinh \kappa d. \end{aligned} \tag{A.1}$$

5. 取模平方并用 $\cosh^2 = 1 + \sinh^2$:

$$\begin{aligned} T = |t|^2 &= \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 \cosh^2 \kappa d + (\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2 \kappa d} \\ &= \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa d}. \end{aligned}$$

最后一步用了恒等式 $4k^2\kappa^2 + (\kappa^2 - k^2)^2 = (k^2 + \kappa^2)^2$ 。分子分母同除以 $4k^2\kappa^2$, 并用

$$\frac{(k^2 + \kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2} = \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)},$$

即得式 (4.4)。

`verify_sympy.py` 用 `sympy` 求解四元线性方程组, 核对了式 (A.1) 与式 (4.4)。

B 数值核对方法

分段常数转移矩阵 把任意势垒 $U(x)$ 切成 N 个薄层, 第 i 层内 $U = U_i$ 为常数, 局域波数 $k_i = \sqrt{2m(E - U_i)}/\hbar$ (禁区中为虚数)。层内的解为 $\cos$ 与 $\sin$ 的组合, 可以写成把层左端的 (ψ, ψ') 映到右端的矩阵

$$\begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix}_{\text{右}} = \begin{pmatrix} \cos k_i \Delta x & \sin(k_i \Delta x)/k_i \\ -k_i \sin k_i \Delta x & \cos k_i \Delta x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix}_{\text{左}}.$$

由于 ψ, ψ' 在层间连续, 整个势垒的矩阵就是各层矩阵之积。左侧给定 $e^{ikx} + re^{-ikx}$, 右侧要求只有 te^{ikx} , 解出 r, t 。方势垒只需一层, 结果与式 (4.4) 一致到 10^{-6} (图 2b 的圆点)。

三角形势垒的精确解 势能线性时, 定态方程经变量代换化为艾里方程 $\psi''(s) = s\psi(s)$, 其解为艾里函数 Ai、Bi (数值库中有现成实现); 真空侧取向外传播的组合 $\text{Ai} - i\text{Bi}$, 在金属表面与平面波匹配即得精确透射系数。图 6b、c 中的“精确”曲线即由此计算; 这也是 Fowler 与 Nordheim 1928 年原文的做法 [1]。

镜像势与表观势垒 第 5.3 节注中的数值: 两平行金属间电子的镜像势取无穷镜像级数

$$U_{\text{im}}(x) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{2x} + \sum_{n \geq 1} \left(\frac{nd}{(nd)^2 - x^2} - \frac{1}{nd} \right) \right],$$

与 $\bar{\phi}$ 相加后做 WKB 积分 (只在势垒高于电子能量处积分), 再由 $\ln T$ 对 d 的数值导数按式 (5.5) 求 ϕ_{ap} (脚本 `verify_numeric.py`)。

C Gamow 积分与离心修正

Gamow 积分 求 $I_0 = \int_{R_N}^b \sqrt{b/r - 1} dr$ 。令 $r = b \cos^2 \theta$, $dr = -2b \cos \theta \sin \theta d\theta$, $\sqrt{b/r - 1} = \tan \theta$ 。 $r = b$ 对应 $\theta = 0$, $r = R_N$ 对应 $\theta_0 = \arccos \sqrt{R_N/b}$:

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_{\theta_0}^0 \tan \theta (-2b \cos \theta \sin \theta) d\theta \\ &= 2b \int_0^{\theta_0} \sin^2 \theta d\theta = b(\theta_0 - \sin \theta_0 \cos \theta_0). \end{aligned}$$

$\cos \theta_0 = \sqrt{R_N/b}$, $\sin \theta_0 = \sqrt{1 - R_N/b}$, 即得式 (6.9) 中的方括号。小 $x = R_N/b$ 展开: $\arccos \sqrt{x} = \pi/2 - \arcsin \sqrt{x} = \pi/2 - \sqrt{x} - x^{3/2}/6 - \dots$, $\sqrt{x(1-x)} = \sqrt{x} - x^{3/2}/2 - \dots$, 方括号 $= \pi/2 - 2\sqrt{x} + x^{3/2}/3 + \mathcal{O}(x^{5/2})$ 。

离心修正的积分 例题 3 需要 $I_1 = \int_{R_N}^b \frac{dr}{r^{3/2}\sqrt{b-r}}$ 。令 $r = bu$, $I_1 = \frac{1}{b} \int_x^1 \frac{du}{u^{3/2}\sqrt{1-u}}$ 。注意到

$$\frac{d}{du} \left[-2\sqrt{\frac{1-u}{u}} \right] = \frac{1}{u^2} \sqrt{\frac{u}{1-u}} = \frac{1}{u^{3/2}\sqrt{1-u}},$$

故 $I_1 = \frac{2}{b} \sqrt{\frac{1-x}{x}} = \frac{2}{b} \sqrt{\frac{b-R_N}{R_N}}$ 。

D 极坐标下的拉普拉斯算符与贝塞尔函数

二维拉普拉斯算符 用二维的高斯定理： $\nabla^2\psi = \nabla \cdot (\nabla\psi)$ 等于矢量场 $\nabla\psi$ 从单位面积流出的净通量。取极坐标中的小面元 $[r, r+dr] \times [\theta, \theta+d\theta]$ ，面积 $r dr d\theta$ 。 $\nabla\psi$ 的径向分量为 $\partial_r\psi$ ，角向分量为 $\frac{1}{r}\partial_\theta\psi$ 。

- 穿过两条弧边（长 $r d\theta$ 与 $(r+dr)d\theta$ ）的净通量： $[r\partial_r\psi]_r^{r+dr} d\theta = \partial_r(r\partial_r\psi) dr d\theta$ ；
- 穿过两条径向边（长 dr ）的净通量： $[\frac{1}{r}\partial_\theta\psi]_\theta^{\theta+d\theta} dr = \frac{1}{r}\partial_\theta^2\psi d\theta dr$ 。

除以面积 $r dr d\theta$ ： $\nabla^2\psi = \frac{1}{r}\partial_r(r\partial_r\psi) + \frac{1}{r^2}\partial_\theta^2\psi$ ，即正文所用的形式。

贝塞尔函数的级数 在 $s^2\mathcal{R}'' + s\mathcal{R}' + (s^2 - l^2)\mathcal{R} = 0$ 中试探 $\mathcal{R} = \sum_{j \geq 0} c_j s^{j+l}$ ($l \geq 0$)。 s^{j+l} 项的系数： $[(j+l)^2 - l^2]c_j + c_{j-2} = 0$ ，即 $c_j = -c_{j-2}/[j(j+2l)]$ ； $j=1$ 时 $c_1(1+2l) = 0$ ，所以只有偶数项。取 $c_0 = 1/(2^l l!)$ ，得

$$J_l(s) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!(p+l)!} \left(\frac{s}{2}\right)^{2p+l}.$$

另一个线性无关解在 $s=0$ 处发散，物理上不允许（圆心处波函数必须有限）。大 s 渐近形式 $J_l(s) \approx \sqrt{2/(\pi s)} \cos(s - l\pi/2 - \pi/4)$ 的推导需要更多数学，这里只作说明：令 $\mathcal{R} = u/\sqrt{s}$ 可把方程化为 $u'' + [1 - (l^2 - \frac{1}{4})/s^2]u = 0$ ， $s \gg l$ 时 u 近似为简谐函数，振幅不变， $\mathcal{R} \propto s^{-1/2}$ ；相位常数 $-l\pi/2 - \pi/4$ 要由与级数解的匹配确定。

表 5 贝塞尔函数 J_l 的前几个正零点 $x_{l,n}$ (`scipy.special.jn_zeros` 计算)

l	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$
0	2.405	5.520	8.654	11.792	14.931
1	3.832	7.016	10.173	13.324	16.471
2	5.136	8.417	11.620	14.796	17.960
3	6.380	9.761	13.015	16.223	19.409
4	7.588	11.065	14.373	17.616	20.827
7	11.086	14.821	18.288	21.642	24.935

E 名词解释

- **隧穿** (tunneling)：粒子以非零概率穿过能量低于势垒高度的经典禁区。
- **透射系数** T ：透射概率流与入射概率流之比。
- **概率流密度** (probability current)：单位时间流过某点（三维为单位面积）的概率，式 (3.6)。
- **费米能级** (Fermi level)：绝对零度下电子所占据的最高能级；两导体电接触达到平衡时费米能级相等。

- **功函数** (work function): 把费米能级处的电子移到真空中所需的最小能量。
- **态密度 / 局域态密度** (DOS / LDOS): 单位能量 (与单位体积) 内的电子态数; LDOS 以各态在某点的概率密度加权。
- **表观势垒高度** (apparent barrier height): 由 $d \ln I / dd$ 按式 (5.5) 定义的有效势垒。
- **恒流模式 / 恒高模式** (constant-current / constant-height mode): 反馈保持电流恒定而记录高度 / 固定高度而记录电流。
- **电导量子** (conductance quantum) $G_0 = 2e^2/h$: 本讲中作为电导的自然单位。
- **WKB 近似**: 缓变势中把波函数写成 $\kappa^{-1/2} \exp(-\int \kappa dx)$ 的近似, 给出 $T \approx \exp(-2 \int \kappa dx)$ 。
- **转折点** (turning point): $U(x) = E$ 的点, 经典粒子在此反向。
- **场致发射** (field emission): 强电场下电子隧穿出金属表面的冷发射; **FN 图**: $\ln(J/F^2)$ 对 $1/F$ 的图。
- **Gamow 因子**: α 粒子穿过库仑势垒的 WKB 指数 $2 \int \kappa dr$ 。
- **Geiger-Nuttall 定律**: α 衰变半衰期的对数与 $Z/\sqrt{Q}$ 近似成直线。
- **表面态** (surface state): 束缚在晶体表面、平行于表面自由运动的电子态。
- **有效质量** m^* : 由色散关系曲率定义的“质量”, $1/m^* = \hbar^{-2} d^2 E / dk^2$ 。
- **量子围栏** (quantum corral): 用 STM 操纵吸附原子排成的封闭结构, 将表面态电子限制在其中。
- **贝塞尔函数** J_l : 二维圆对称问题中径向方程 (贝塞尔方程) 在原点有限的解。
- **压电效应** (piezoelectric effect): 电场引起与之成正比的机械形变 (及其逆效应)。