arXiv:2602.03037v1 [quant-ph] 3 Feb 2026

界面粗糙度引起的约瑟夫森结器件差异

Yu Zhu，[1] Félix Beaudoin，[1] 和 Hong Guo[2]1)*NanoacademicTechnologies Inc.，Suite 802，666 rue Sherbrooke Ouest*，蒙特利尔，魁北克 *H3A 1E7*，加拿大2)麦吉尔大学物理系，蒙特利尔，魁北克，*H3A 2T8*，加拿大

（*电子邮箱：eric@nanoacademic.com）

（日期：2026年2月4日）

随着量子处理器扩展至拥有大量量子比特，器件间差异已成为一项关键挑战。超导量子比特通常采用工作于隧穿区的铝/AlO_x/铝约瑟夫森结实现，即使器件几何结构发生微小变化，也可能导致性能显著波动。在本研究中，我们建立了一个定量模型，用于描述由Al/AlO_x 界面粗糙度引起的约瑟夫森能E_J 差异。我们将粗糙度建模为高斯随机场，并用两个参数进行表征：均方根粗糙度幅度 σ 和横向相关长度 ξ。这些参数取自文献和分子动力学模拟。量子输运采用Ambegaokar–Baratoff关系结合局部厚度近似进行处理。对5,000个约瑟夫森结进行数值模拟后发现，E_J服从对数正态分布。E_J 的均值随 σ 增大而增加，随 ξ增大而略微降低；而E_J 的方差则随 σ 和 ξ增大而增加。这些结果直观且定量地描绘了表面粗糙度引起的约瑟夫森能差异，对于约瑟夫森结设计具有直接参考价值。

I. 引言

超导电路是最有望实现可扩展量子计算的平台之一，它将光刻制造的可行性与约瑟夫森效应带来的强非线性和低损耗特性结合起来[1]。广泛使用的 Transmon 型器件的核心是一个由电容并联的 Al/AlO_x/Al 约瑟夫森结，它构成一个弱非谐量子振子，其最低的两个本征态 $|0\rangle$和 $|1\rangle$构成计算基[2]。在这一图景中，量子比特的跃迁频率主要由约瑟夫森能 E_J和充电能E_C决定，因此，任何依赖于工艺过程的结临界电流变化（进而影响E_J）都会直接改变量子比特能谱和工作点。当前最先进的超导量子处理器已包含约 10^2至 10^3 个量子比特，IBM 的 1,121 量子比特“Condor”超导处理器便是其中一例[3]。然而，要实现适用于社会重要任务的容错量子计算，所需规模仍远超这一水平。例如，针对 Shor 算法的详细资源估算表明，在快速运行场景下，对一个 2048 位 RSA 整数进行因数分解需要数千万个含噪声物理量子比特（例如，在表面码假设下，进行一次 8 小时攻击需要 ~ 20 百万个含噪声量子比特）[4]。这一巨大差距促使我们在超导平台扩展到更大规模系统的过程中，认真关注器件成品率和均匀性。

约瑟夫森结的可变性在规模化生产中成为一项核心挑战，因为约瑟夫森结工作于隧穿区，此时临界电流I_c 对微观势垒细节呈指数依赖；微小扰动——例如局部 Al/AlO_x 厚度波动、有效势垒高度变化或污染原子——都可能导致E_J、量子比特频率和量子门保真度发生显著偏移。过去二十年来，实验研究投入了大量精力来提升结的可重复性并理解变化的微观来源，包括晶圆和芯片尺度的电阻/临界电流均匀性研究[5,6]，、工艺优化、阴影蒸发/氧化[6,7]，、降低临界电流波动的策略[8]，、交变偏置辅助退火[9]，，以及对 Al/AlO_x 势垒微观结构和厚度分布的直接显微观测[10,11]。本研究聚焦于由 Al/AlO_x 界面粗糙度引起的E_J 变化，并提出一种量子力学建模框架，将量子输运理论、高斯随机场模型和分子动力学模拟结合起来，从而建立微观结构无序与结级约瑟夫森能统计之间的联系。

II. 界面粗糙度模型

铝（Al）引线与氧化铝（AlO_x）层之间的粗糙界面被建模为具有特定功率谱密度的高斯随机场。将界面高度记为$h(x,y)$，其中x和y为横向坐标。假定

$$\langle h(x,y)\rangle = 0, \tag{1}$$

and

$$\langle h(x,y)\,h(0,0)\rangle = \sigma^2 e^{-\frac{x^2+y^2}{\xi^2}}, \tag{2}$$

其中 σ 为沿输运方向的界面高度均方根，ξ 为横向相关长度。给定 σ 和 ξ，可通过在傅里叶空间中利用相应的功率谱密度对白噪声进行滤波，再进行傅里叶逆变换，从而生成粗糙界面。图3（a）和（b）展示了两个生成的粗糙界面。

横向相关长度 ξ 由铝引线中微观结构特征的典型横向尺度决定，最显著的是铝晶粒尺寸，它会在 AlO_x 势垒上形成厚度变化。在经透射电子显微镜表征的 Al/AlO_x/Al 隧道结堆叠结构中，通常观察到铝电极呈多晶结构，具有柱状晶粒，其尺寸约为数十纳米。

例如，Liu 等报告称，量子比特约瑟夫森结电极中的晶态柱状晶粒尺寸约为 ~ 20 nm $\times 30$ nm[11]。Nik 等开展的系统性透射电子显微镜研究进一步表明，平均横向晶粒尺寸强烈依赖于铝膜厚度：在氧化硅上制备的厚度为 15 nm 和 60 nm 的铝膜，其平均晶粒尺寸据报道分别约为 ~ 38 nm 和~ 92 nm，这说明较厚的铝膜往往会形成较大的晶粒[12]。在其他沉积条件下，Fritz 等报告称，较下方的铝层可能具有较宽的晶粒尺寸分布，其中包括小于 ~ 50 nm 的晶粒、许多尺寸处于 ~ 50 nm-150 范围内的晶粒，以及横向尺寸达数百纳米（~ 900 nm）、甚至达到 $\sim 1\ \mu$m 的晶粒[11]。这些实验观察结果表明，对于结的制备中所采用的特定铝生长工艺，应选择与典型横向晶粒尺寸相当的 ξ。

均方根高度 σ 由厚度／高度起伏的垂直振幅决定，主要受铝表面粗糙度和氧化／生长不均匀性控制。Zeng 等使用原子分辨率扫描透射电子显微镜直接测量了 Al/AlO_x /Al 结中的局部 AlO_x厚度，并用高斯分布拟合厚度直方图。他们报告了三个样品中的平均厚度为 1.66–1.88 nm，标准差为 0.326–0.372 nm[10]。Fritz 等报告称，AlO_x 厚度变化值随生长条件不同而变化，范围为 0.29 nm 至 0.11 nm[11]。这些实验表明，对于高质量的 AlO_x 隧穿势垒，$\sigma \sim 0.1$–0.3 nm 是一个具有代表性的范围。

由于 σ 远小于 ξ 且更难通过实验表征，我们还开展了分子动力学（MD）模拟，以估算 σ。初始模拟晶胞包含一个铝表面、O_2 分子和一个真空区域。该系统总计包含 4,380 个原子，包括 2,880 个铝原子和 750 个 O_2 分子，如图 1(a) 所示。铝表面建模为由 20 个原子层组成的面心立方（100）晶面板，每层包含 144 个原子，并设有 40 Å 的真空区域。O_2 分子以随机位置和随机取向放置在铝表面与真空之间厚度为 10 Å 的区域内。分子动力学模拟在正则系综中进行，温度固定为 300 K，体积固定为 34.17 Å $\times$ 34.17 Å $\times$ 78.26 Å，并在横向采用周期性边界条件。使用 CHGNet（在 Materials Project Trajectory 数据集上预训练的电荷感知图神经网络机器学习原子间势）计算原子间作用力和能量[13]。

分子动力学模拟进行 3 ps，时间步长为 1 fs。在最初的 $\sim$2 ps 内，O_2 分子与铝表面发生反应，形成厚度约为 1 nm 的非晶态 AlO_x 层，如图 (b) 所示。随后，氧化物生长达到饱和，剩余的 O_2 分子扩散进入真空区域。生成 Al/AlO_x 界面后，我们从体系中移除铝电极原子和 O_2 分子，以暴露 AlO_x 表面，如图 1 (c) 所示。为提取平滑的高度剖面，我们采用滚球法：在铝一侧使用半径为 $R = 3$ Å 的探针球沿 AlO_x 表面滚动，以定义连续的表面包络。三次独立分子动力学模拟所得表面 σ的均方根分别为 0.97 Å、0.76 Å 和 0.81 Å。我们注意到，σ提取的数值

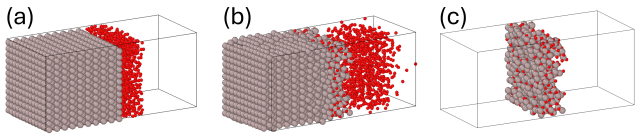

图 1. AlO_x 生长的 MD 模拟。(a) 在$t = 0$时，fcc(100) 铝表面和 O_2 分子。(b) 在$t = 3$ ps 时，氧化后的铝表面和 O_2 分子。(c) 从 (b) 中提取的 AlO_x 层。

来自分子动力学模拟的数值小于实验报告值。这种差异可能源于模拟中采用的理想化几何结构：铝表面被假设为原子级平坦，而真实器件通常具有额外的铝表面粗糙度，从而增加整体高度起伏。

III. 量子输运模型

在约瑟夫森结中，约瑟夫森能E_J 与临界电流I_c 之间的关系为

$$E_J = \frac{\hbar}{2e} I_c, \tag{3}$$

其中，$\hbar$ 是约化普朗克常数，e是元电荷。临界电流可通过求解 Bogoliubov–de Gennes（BdG）方程计算：

$$\begin{pmatrix} H_0(\mathbf{r}) - E_F & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -(H_0(\mathbf{r}) - E_F) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \tag{4}$$

其中

$$H_0(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

是单粒子哈密顿量，E_F 是费米能，$\Delta(\mathbf{r})$ 是超导配对势，$u(\mathbf{r})$ 和 $v(\mathbf{r})$ 分别是准粒子波函数的电子分量和类空穴分量。根据式 (4) 中的模型计算超电流，有两种等效的理论方法。第一种方法是散射波函数法[14], , 它能清晰地呈现安德烈夫反射和安德烈夫束缚态等物理过程。第二种方法是格林函数法[15], , 它为一般情形提供了统一的形式体系，并能通过有效的计算优化处理安德烈夫束缚态[16]。然而，直接将这些方法应用于现实的约瑟夫森结在计算上难以承受，因为输运区域的尺寸高达 100 nm $\times$ 100 nm $\times$ 1 nm。另一方面，铝的费米波长约为 3.6 Å，根据 11.6 eV 的费米能估算得出。因此，实空间分辨率应约为 1 Å，由此产生的 $10^3 \times 10^3 \times 10$ 实空间网格过大，无法进行数值模拟。

为应对计算挑战，我们采用两种近似方法来简化输运模型。第一种近

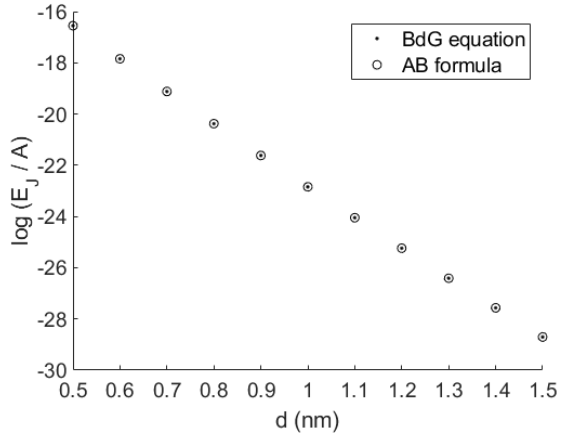

图 2. 约瑟夫森能（对数刻度）随隧道势垒宽度的变化关系，该结果通过求解 BdG 方程并使用 AB 关系计算得出。

似方法是使用 Ambegaokar–Baratoff (AB) 关系

$$I_c = \frac{\pi\Delta}{2eR_N}, \tag{5}$$

该关系将临界电流I_c 与正常电阻R_N联系起来。计算R_N 比 I_c 简单得多，因为前者只需计算费米能处的透射系数，而无需对整个能量范围积分。此外，由于只需考虑类电子准粒子，系统尺寸也减半。为评估 AB 关系对约瑟夫森结的准确性，我们比较了通过求解式 (4) 得到的临界电流与利用 AB 关系计算的临界电流；后者对应势垒高度为 1.1 eV 的方形隧道势垒约瑟夫森结。如图 2 所示，在很宽的结厚度范围内，两种方法的结果都高度吻合，这证明本研究采用 AB 关系是合理的。此外，E_J 对隧道势垒厚度d呈指数依赖，证实输运处于隧穿区。

第二个近似是将输运方向与横向分开。由于结工作在隧穿区，输运主要由沿输运方向的局域势垒分布决定，而横向耦合可以忽略。因此，我们将结划分为横向平面上的许多独立子系统，并将总正常态电导近似为这些子系统电导之和。在连续极限下，这个和变为电导密度在横向坐标上的积分。这里，电导密度定义为横向截面均匀的三维结中单位面积的电导。通过比较系统中相关的长度尺度，可以证明这种局域厚度近似是合理的。这里涉及四个特征长度：（1）铝引线中的费米波长

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{2mE_F}{\hbar^2}}} \approx 3.6\ \text{Å},$$

其中$E_F = 11.6$ eV为块体铝的费米能。（2）隧道势垒中的波函数衰减长度

$$\lambda_D = \frac{1}{\varkappa} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2mU_{\text{barrier}}}{\hbar^2}}} = 1.9\ \text{Å},$$

其中，$U_{\text{barrier}} = 1.1$ eV 为 Al/AlOx 界面的有效隧穿势垒高度。(3) 沿输运方向的界面粗糙度均方根： $\sigma \sim 0.1$ nm。(4) 横向界面粗糙度的相关长度：$\xi \sim 10$ nm。隧穿势垒厚度在横向距离 λ_F 上的变化估计为 $\lambda_F\xi$ σ。由于 —

$$\frac{\lambda_F}{\xi}\sigma \ll \lambda_D.$$

隧穿势垒可以视为由局部均匀的隧穿势垒组成的系综，因此采用局部厚度近似是合理的。

IV. 结果

我们结合界面粗糙度模型与量子输运框架，研究 Al/AlOx/Al 约瑟夫森结中约瑟夫森能量E_J 的变化。该结被建模为由三维隧穿势垒隔开的两个自由电子金属引线。隧穿势垒的特征参数为高度$U \sim 1$ eV、宽度 $d \sim 1$ nm，以及截面$L_x \times L_y = 200\ \text{nm} \times 200\ \text{nm}$，与 Al/AlOx 界面相符。引线的特征参数为费米能$E_F = 11.7$eV 和超导能隙 $\Delta = 0.2$ meV，与块体铝相符。两个引线与隧穿势垒之间的界面粗糙度，采用式 (1,2) 中的高斯随机场模型描述，其参数为均方根振幅 σ 和横向相关长度 ξ。为简化起见，假设约瑟夫森结中两个 Al/AlOx 界面的 σ 和 ξ 相同。将两个界面高度轮廓叠加到标称厚度d上，即可得到局部势垒厚度，从而定义输运计算中使用的空间变化隧穿势垒轮廓。

更具体地说，我们选取隧道势垒参数为$d = 1.0$ nm和$U = 1.1$ eV，并将界面粗糙度参数设为 $\sigma = 0.85$ Å和 $\xi = 10$ nm。图3（a）和（b）是所得界面粗糙度的色图，显示了横向相关长度 ξ尺度上的涨落。图3（c）是对5,000个具有不同隧道势垒轮廓的约瑟夫森结计算得到的E_J 的归一化直方图。非常有趣的是，E_J 的分布并非高斯分布，而是向较大值偏斜。这一特征可以理解为隧穿物理的结果。假设有效隧道势垒宽度呈正态分布，并且由于E_J 对隧道势垒宽度具有指数依赖，E_J 的分布必然遵循对数正态分布，相应的概率密度函数为

$$p(E_J > 0) = \frac{1}{E_J\sigma_J\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\log E_J - \mu_J)^2}{2\sigma_J^2}\right], \tag{6}$$

其中 μ_J 和 σ_J 是logE_J的均值和标准差。因此，E_J 的均值和方差为

$$\mathbb{E}[E_J] = e^{\mu_J+\sigma_J^2/2},$$

and

$$\mathrm{Var}(E_J) = \left(e^{\sigma_J^2}-1\right)e^{2\mu_J+\sigma_J^2},$$

分别如此。这些表达式说明，随着底层涨落增大，约瑟夫森结系综中E_J 的分布为何会变得越来越偏斜、越来越宽。使用式（6）拟合直方图，得到

$$E_J/h = 20.447 \pm 2.326\ \mathrm{GHz}. \tag{7}$$

对于传输子，量子比特跃迁频率由E_C 和E_J 决定，如下所示：[2]

$$\frac{\omega_{01}}{2\pi} = \frac{1}{h}(E_1 - E_0) \approx \frac{1}{h}(\sqrt{8E_C E_J} - E_C).$$

因此，$\frac{\omega_{01}}{2\pi}$ 的标准差与E_J 的标准差之间的关系为

$$\Delta\frac{\omega_{01}}{2\pi} = \frac{1}{h}\sqrt{\frac{2E_C}{E_J}}\Delta E_J.$$

利用式（7）中E_J 的均值和标准差，并假设$E_C/h = 0.25$ GHz，可得 $\omega_{01}/2\pi$ 的均值和标准差：

$$\omega_{01}/2\pi = 6.145 \pm 0.364\ \mathrm{GHz}. \tag{8}$$

接下来，我们研究 E_J 的变化对粗糙度参数 σ 和 ξ 的依赖关系。表 I 列出了 E_J 的计算均值和标准差随 σ和 ξ变化的情况，同时将其他器件参数固定为 U = 1.1 eV、d = 1.0 nm、$\Delta = 0.2$ meV、$E_F = 11.7$ eV。我们观察到两个主要趋势。(1) 随着 σ增大，$\mathbb{E}[E_J]$和 Var (E_J) 均增大。Var(E_J)增大，是因为厚度涨落的幅度随 σ增大，导致 E_J的样本间变化更大。$\mathbb{E}[E_J]$ 的上升反映了隧穿对局部势垒厚度的指数敏感性：总电导由罕见的异常薄区域主导，而随着σ增大，这些区域会变得更薄、影响更大。(2) 随着 ξ增大，$\mathbb{E}[E_J]$略微减小，而 Var(E_J)显著增大；当 ξ 变得与结的横向尺寸相当时，这两种趋势都会趋于饱和。Var(E_J)的增大可以理解为自平均减弱的结果。该结可以视为由许多并联隧穿通道构成，每个通道的关联面积约为 ξ^2。较大的 ξ 意味着统计独立的通道更少，进而导致样本间涨落增强、方差增大。同时，$\mathbb{E}[E_J]$ 略微减小与有限尺寸效应有关。对于横截面有限的结，增大 ξ 会减少界面上彼此独立的区段数。因此，

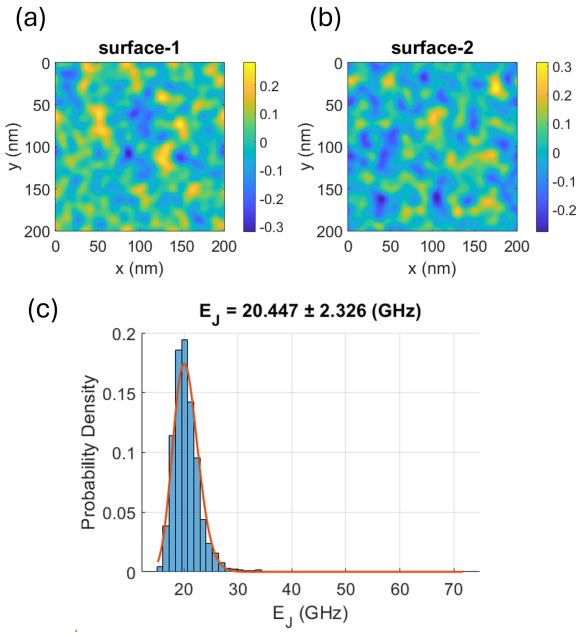

图 3. (a) 和 (b)：Al/AlOx 界面粗糙度的色彩图。(c)：5，000 个约瑟夫森结的E_J 直方图。橙色曲线为对方程 6 的拟合。

表 I. 约瑟夫森能E_J/h (GHz) 随均方根粗糙度 σ和横向相关长度 ξ的变化。数值以均值 ± 标准差的形式给出。

ξ (nm)	$\sigma = 0.08$ nm	$\sigma = 0.09$ nm	$\sigma = 0.10$ nm
10	17.92 ± 1.70	23.57 ± 3.20	32.32 ± 6.15
20	17.86 ± 3.05	23.39 ± 5.45	31.81 ± 9.82
30	17.72 ± 3.99	23.05 ± 6.87	31.06 ± 11.94
40	17.54 ± 4.70	22.67 ± 7.89	30.27 ± 13.35
50	17.37 ± 5.24	22.32 ± 8.64	29.56 ± 14.35

实现罕见且异常薄的势垒区域——否则它们会主导隧穿贡献——的概率降低，从而使 $\mathbb{E}[E_J]$略微减小。当 ξ接近结尺寸时，有效独立区段数变为$O(1)$，而E_J 的均值和方差对 ξ的进一步增加均不再敏感，因而呈现饱和行为。

V. 总结

总而言之，我们研究了界面粗糙度引起的 Al/AlOx/Al 约瑟夫森结中约瑟夫森能E_J 的变异性。我们使用高斯随机场对粗糙度进行建模，该随机场由均方根振幅 σ 和横向相关长度 ξ表征。这些参数的取值取自实验文献，并从我们的原子级分子动力学模拟中提取。量子输运模型基于 Ambegaokar–Baratoff 关系，并结合局部厚度近似；这两种处理方法均有充分依据，并已针对约瑟夫森结进行数值验证。

对包含 5,000 个样本的系综进行数值模拟后发现，E_J 服从对数正态分布。E_J 的均值随 σ 增大而增大，并随 ξ 略微减小；而E_J 的方差则随σ 和 ξ的增大而增大。在本研究中，我们假设 σ 和 ξ 是相互独立的结构参数，并且在 Al/AlOx/Al 约瑟夫森结的两个界面上取值相同。尽管这些假设是合理的，但仍需在不同的生长和工艺条件下通过实验进行仔细验证。未来的重要研究方向包括将我们的模型与已制备约瑟夫森结的实验表征相结合，并将本文采用的超导求解器与计算微波工程软件[17] 结合起来，从而为约瑟夫森结及其相邻超导电路元件的协同设计开辟道路。

VI. 致谢

我们感谢加拿大数字研究联盟提供计算设施，使本研究得以完成。H.G. 感谢加拿大自然科学与工程研究理事会提供部分经费支持。作者感谢 RaphaëlPrentki 博士、Pericles Philip- popoulos 博士和 Igor Benek-Lins 就界面粗糙度模型、传输子和超导量子比特所进行的有益讨论。

[1]M. H. Devoret 和 R. J. Schoelkopf, 《用于量子信息的超导电路：展望》, 《科学》**339**, 1169–1174（2013）。[2]J. Koch、T. M. Yu、J. Gambetta、A. A. Houck、D. I. Schuster、J. Majer、A. Blais、M. H. Devoret、S. M. Girvin 和 R. J. Schoelkopf, 《源自库珀对盒的电荷不敏感量子比特设计》, 《物理评论A》**76**, 042319（2007）。[3]J. Gambetta, 《量子效用时代所需的硬件和软件已就绪》（2023）。[4]C. Gidney 和 M. Ekerå, 《如何利用两千万个含噪声量子比特在8小时内分解2048位RSA整数》, Quantum **5**, 433（2021）, 1905.09749。[5]J. M. Kreikebaum、K. P. O'Brien、A. Morvan 和 I. Siddiqi, 《改善超导量子相干电路中晶圆级约瑟夫森结电阻变化》, 《超导科学与技术》**33**, 06 02 2020 1909 09165 LT ( ), . . [6]A. A. Pishchimova、N. S. S mirnov、D. A. Ezenkova、E. A. Krivko、E. V. Zikiy、D. O. Moskalev、A. I. Ivanov、N. D. Korshakov 和 I. A. Rodionov, 《提高超导量子电路中约瑟夫森结的可重复性：结面积涨落》, Scientific Reports **13**, 6772（2023）, 10.1038/s41598-023-34051-9。[7]D. O. Moskalev、E. V. Zikiy、A. A. Pishchimova、D. A. Ezenkova、N. S. Smirnov、A. I. Ivanov、N. D. Korshakov 和 I. A. Rodionov, 《优化阴影蒸发与氧化，以实现可重复的量子约瑟夫森结电路》, Scientific Reports **13**, 4174（2023）, 10.1038/s41598-023-31003-1。[8]S. Song、Y. Sun、J. Xu、Z. Han、X. Yang、X. Wang、S. Li、D. Lan、J. Zhao、X. Tan 和 Y. Yu, 《减轻超导量子电路中约瑟夫森结的临界电流涨落》, Applied Physics Letters **118**, 244004（2021）, 10.1063/5.0049637。[9]D. P. Pappas、M. Field、C. J. Kopas、J. A. Howard、X. Wang、E. Lachman、J. Oh、L. Zhou、A. Gold、G. M. Stiehl、等, 《交变偏压辅助退火非晶氧化物隧道结》, Communications Materials **5**, 150（2024）。[10]L. J. Zeng、S. Nik、T. Greibe、C. M. Wilson、P. Delsing 和 E. Olsson, 《直接观测 Al/AlO$_x$ 势垒在Al/AlO$_x$/Al约瑟夫森结中的厚度分布》, Journal of Physics D: Applied Physics **48**, 395308（2015）, 1407.0173。[11] S. Fritz、L. Radtke、R. Schneider、M. Weides 和 D. Gerthsen, 《从微观结构角度优化用于约瑟夫森结的Al/AlO$_x$/Al层系统》, Journal of Applied Physics **125**, 165301（2019）, 1901.09625。[12] S. Nik、P. Krantz、L. Zeng、T. Greibe、H. Pettersson、S. Gustafsson、P. Delsing 和 E. Olsson, 《通过透射电子显微术研究Al晶粒尺寸、晶界沟槽与Al/AlO$_x$/Al隧道结中氧化物势垒厚度局部变化之间的相关性》, SpringerPlus **5**, 1067（2016）。[13]B. Deng、P. Zhong、K. Jun、J. Riebesell、K. Han、C. J. Bartel 和 G. Ceder, 《CHGNet：用于电荷信息原子建模的预训练通用神经网络势》, Nature Machine Intelligence **5**, 1031–1041（2023）。[14]G. E. Blonder、M. Tinkham 和 T. M. Klapwijk, 《超导微收缩中从金属区到隧穿区的转变：过剩电流、电荷不平衡与超电流转换》, 《物理评论B》**25**, 4515–4532（1982）。[15]Q. F. Sun、B. Wang、J. Wang 和 T. H. Lin, 《介观混合多端共振隧穿系统中的电子输运》, 《物理评论B》**61**, 4754–4761（2000）。[16]Y. Zhu、Q. Sun 和 T. Lin, 《通过直流约瑟夫森电流探测耦合量子点的自旋态》, 《物理评论B》**66**, 085306（2002）。[17]Nanoacademic Technologies Inc., 《QTCAD：超导体——理论》, https://docs.nanoacademic.com/qtcad/theory_sc/theory_sc/（2026）。[18]L. Zeng、D. T. Tran、C.-W. Tai、G. Svensson 和 E. Olsson, 《Al/AlO$_x$/Al约瑟夫森结中超薄氧化铝势垒的原子结构和氧缺陷》, Scientific Reports **6**, 29679（2016）。[19]X. Liu、K. Pan、Z. Zhang 和 Z. Feng, 《揭示量子比特中Al/AlOx/Al约瑟夫森结的原子结构和化学成分》, Applied Surface Science**640**, 158337（2023）。