

清华大学

综合论文训练

题目：微纳尺度低维电子输运的水动力学研究

系 别：航天航空学院

专 业：工程力学（钱学森力学班）

姓 名：黄云帆

指导教师：王沫然 教授

2019年6月24日

中文摘要

随着集成电路工业的发展，低维电子元件的几何尺寸已与电子平均自由程的量级相当，边界散射对电子运输的影响不可忽略；近期实验还发现，石墨烯等二维材料在低温条件下，其电子之间的相互作用显著增强，电子流体将具有水动力学的粘性特征。在粘性相区内，材料电导率将显著增强并突破弹道电导极限，为热电材料的发展提供了新的契机；同时在外加磁场影响下，流向电阻率会显著降低并在展向上呈现出 Hall 粘性，由此有望实现低维电子的整流运输。由于低温微纳尺度低维电子的运输机制与电子-声子散射主导的常温体材料运输存在巨大差异，因此对于其中水动力学运输机理的研究兼具重要的理论与应用价值。

本文基于介观尺度的二维电子玻尔兹曼方程，发展建立了介观的离散坐标数值算法和低温扩散相区的宏观电子水动力学模型，细致研究了微纳尺度低维材料中弹道-扩散效应和磁阻效应两类典型的水动力学现象背后的运输机理，为后续的理论工作以及工业应用奠定了基础。本文的主要成果与结论如下：

(1) 发展了数值求解二维电子玻尔兹曼方程的离散坐标法，它直接对介观方程进行数值离散，能够精确地捕捉强非平衡的弹道效应以及中等强度外场的磁阻效应，这是介观理论方法所无法实现的。本文算法的数值格式具有较好的稳定性，且计算过程能够更为真实地模拟实际的实验条件。在数值验证的基础上，通过对弹道-扩散效应以及磁阻效应的模拟，分析了边界散射、电子粘性和外加磁场对电子输运行为的影响，并基于介观散射的物理图像讨论了其运输机理。

(2) 采用升尺度方法得到了低温扩散相区内的宏观流体力学方程，该方程具有形式简洁、物理意义清晰的优势，与介观方法相比求解效率更高。本文弥补了前人研究中对各类散射机制考虑不完整、方程适用条件不清晰等问题，并提出了双弛豫近似的拟平衡分布的概念，为介观升尺度提供了新的方法和思路。基于宏观方程的讨论，归纳得到了电子流体的弛豫效应、Hall 粘性效应、非平衡效应以及非局域效应等四类典型效应。最后通过二维定常平行剪切流宏观理论求解的求解验证了小 Kn 数的高阶项截断条件。

关键词：微纳尺度电运输；低维材料；电子水动力学；离散坐标法；升尺度方法

ABSTRACT

Recent experiments have found that in two-dimensional materials such as graphene, the interaction between electrons will be significantly enhanced at low temperatures, and the electrons will form some quantum fluid with hydrodynamic viscosity. There is a great difference of the transport mechanism between the micro-nanoscale low-dimensional electrons at low temperatures and the body materials dominated by electron-phonon scattering at room temperatures, and the research on the mechanism of electron hydrodynamic transport has both important theoretical and applied value.

Based on the mesoscopic Boltzmann equation of two-dimensional electrons, we develop both a new numerical algorithm named Discrete Ordinate Method (DOM) to solve the mesoscopic equation and a new macroscopic hydrodynamic model for electron transport in the diffusive regime at low temperatures. It lays a foundation for the follow-up theoretical work as well as industrial application. The main results and conclusions of this thesis are as follows:

(1) The discrete ordinate method for the numerical solution of the two-dimensional electron Boltzmann equation is developed. The numerical scheme of the algorithm has good stability, and the calculation process can simulate the actual experimental conditions more realistically. Based on verification, the influence of boundary scattering and electron viscosity on electron transport behaviors is thoroughly analyzed through the simulation of ballistic-diffusive effect and magnetoresistive effect.

(2) The macroscopic hydrodynamic equation in the diffusive regime at low temperatures is obtained using the new upscaling method. We make up for the problems in previous studies, and put forward the new concept of the quasi-equilibrium distribution of double-relaxation-time approximation. Based on the discussion of macroscopic equations, four kinds of typical effects are summarized. Finally, the high-order item truncation condition, i.e. the small Kn number condition, is verified.

Keywords: micro-nanoscale electron transport; low-dimensional materials; electron hydrodynamics; discrete ordinate method; upscaling methods

目 录

第 1 章 引言	1
1.1 研究背景及意义	1
1.2 研究现状与挑战	4
1.2.1 微纳尺度低维电子输运的研究现状	4
1.2.2 电子水动力学现象的研究历史	5
1.2.3 电子水动力学研究现状及其局限	10
1.3 本文研究内容及安排	11
第 2 章 电子输运的介观玻尔兹曼方法	13
2.1 电子玻尔兹曼方程的微观基础	13
2.1.1 固体电子状态的微观量子描述	14
2.1.2 固体电子输运的介观统计描述	18
2.1.3 电子玻尔兹曼方程的适用条件	20
2.2 双弛豫近似电子玻尔兹曼方程的定解问题	20
2.2.1 典型二维材料的物理模型	20
2.2.2 二维电子玻尔兹曼方程	22
2.2.3 体相散射模型与边界散射条件	24
2.3 本章小结	27
第 3 章 电子玻尔兹曼方程的离散坐标法	28
3.1 理论基础与算法描述	28
3.1.1 电子玻尔兹曼方程的无量纲化	28
3.1.2 算法基本思想与坐标离散	29
3.1.3 内建电场计算与宏观量统计	32
3.1.4 离散坐标法的流程简述	33
3.2 离散坐标算法的数值验证	34
3.2.1 弹道-扩散效应简介	34
3.2.2 算例的问题描述	35
3.2.3 算例结果与分析	36

3.3 离散坐标算法的应用	38
3.3.1 磁阻效应简介	39
3.3.2 算例的问题描述	40
3.3.3 算例结果与分析	41
3.4 本章小结	42
第 4 章 扩散相区的宏观流体力学方程	43
4.1 求解电子玻尔兹曼方程的升尺度方法	43
4.1.1 基于 Chapman-Enskog 展开的摄动方法	43
4.1.2 基于 Fourier 谱的 Grad 矩方法	48
4.2 电子流体力学方程的特点及应用	52
4.2.1 电子流体力学方程的特点	52
4.2.2 二维定常平行剪切流的理论解	54
4.2.3 电子流体流动的特征量	57
4.3 本章小结	57
第 5 章 结论	58
5.1 研究总结	58
5.2 工作展望	59
插图索引	60
表格索引	64
公式索引	65
参考文献	70
致 谢	80
声 明	81
附录 A 外文资料的书面翻译	82
附录 B 已(可)发表论文或发明专利	108

主要符号对照表

d_ϵ	绝对介电常数为 ϵ 的介质的厚度
e	元电荷绝对值, 约为 1.60×10^{-19} C
\hbar	约化 Planck 常数, 约为 1.05×10^{-23} J·s
$f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$	位矢 \mathbf{r} 处波矢为 \mathbf{k} 的电子态的平均占据数 (未计入自旋贡献)
$f_{\text{MR}}^{\text{eq}}$	背景参考系中的 Fermi-Dirac 平衡分布
$f_{\text{MC}}^{\text{eq}}$	具有宏观漂移速度的运动参考系中的 Fermi-Dirac 平衡分布
\mathbf{j}	电流面密度
k_B	玻尔兹曼常数, 约为 1.38×10^{-23} J·K ⁻¹
k_F	电子的费米波矢
l_0	宏观过程的特征长度尺度
l_b	电子流体在边界处的滑移长度
l_{ee}	电子-电子散射平均自由程
l_{eff}	电子的有效平均自由程
$l_{\text{eff}}^{\text{M}}$	以长度为量纲的电子微团漂移速度
l_{ep}	电子的电子-声子散射平均自由程
l_{pe}	声子的电子-声子散射平均自由程
l_{MC}	电子的准动量守恒散射平均自由程
l_{MR}	电子的准动量弛豫散射平均自由程
m	自由电子的静止质量, 约为 9.11×10^{-31} kg
m^*	电子的能带有效质量
m_B	电子的回旋有效质量
n	电子数面密度
\bar{n}	平均电子数面密度
\tilde{n}	电子数体密度
$n_{\mathbf{k}, \alpha}$	波矢为 \mathbf{k} 且自旋为 α 的电子态的占据数
n_δ	电子数面密度相对平均值的偏移量
p_s	电子在边界散射的镜面反射系数
p_F	电子的费米动量, 满足 $p_F = \hbar k_F = m^* v_F$
\mathbf{r}	实空间坐标 (x, y, z) 或 (x, y)

r_C	电子的回旋半径，又称 Larmor 半径，即 $m_B v_F / (eB)$
t_0	宏观过程的特征时间尺度
\mathbf{u}	电子态非平衡分布对应的宏观漂移速度
\mathbf{u}_{eff}	电子态拟平衡分布对应的宏观漂移速度
v_F	电子的费米速度
\mathbf{B}	磁感应强度
C	厚度为 d_ϵ 的介电晶体 ϵ 在单位面积上的电容，等于 $\epsilon / (4\pi d_\epsilon)$
$C(f)$	原始分布形式玻尔兹曼方程的散射项
$C_\delta(\chi)$	偏移分布形式玻尔兹曼方程的散射项
D	二维电子态密度（已计入自旋贡献），等于 $m / (\pi \hbar^2)$
E_{band}	周期性离子实势场内的能带电子相对能量
E_g	Hartree-Fock 近似中以基态为试探态的系统总能量
$E_{\mathbf{k},\alpha}$	Hartree-Fock 近似中激发态 (\mathbf{k}, α) 的系统总能量
E_F	费米能级
E_{Fock}	Hartree-Fock 近似中的 Fock 项
E_{Hartree}	Hartree-Fock 近似中的 Hartree 项
\mathbf{E}	总电场强度
\mathbf{E}_{ext}	给定的外加电场强度
\mathbf{E}_{int}	电子之间相互作用引起的内建电场强度
\mathbf{H}	磁场强度
Kn	Knudsen 数
L_{eff}^M	以长度为量纲的电导率
\mathbf{P}	电子动量面密度
$P_0 (P_{\pm 1})$	波矢空间的投影算子
S	Seebeck 系数，又称热电系数
T	绝对温度
\mathbf{T}	电子动量通量面密度
T_δ	电子动量通量面密度相对平衡态的偏移量
W	二维直通道的展向宽度
X_{nd}	物理量 X 的无量纲形式
X_ω	物理量 $X(t)$ 在频域中的对应值
ZT	优值系数，即 $TS^2\sigma/\kappa$
α_{bd}	Fuchs-Soffer 边界的边界散射参数，等于 $4\pi\delta_{\text{bd}}/\lambda_F$

δ_{bd}	边界壁面的方均根粗糙度
ϵ	介质的绝对介电常数
ϵ_0	真空介电常数, 约为 $8.85 \times 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$
ϵ_r	介质的相对介电常数
$\epsilon_n(\mathbf{k})$	位于能带 n 上且波矢为 \mathbf{k} 的电子态的能量
κ	材料的总热导率
κ_e	电子贡献的热导率
λ_F	电子的费米波长, 即 $2\pi/k_F$
μ	单粒子化学势
ν	电子的正常粘度系数, 零频下等于 $(v_F^2 \tau_{\text{eff}})/4$
ν_H	电子的 Hall 粘度系数
ρ	电阻率
σ	电导率
σ'	电子流体的粘性应力
τ_{ee}	电子-电子散射平均自由时
τ_{eff}	电子的有效散射平均自由时
τ_{ep}	电子的电子-声子散射平均自由时
τ_{pe}	声子的电子-声子散射平均自由时
τ_{MC}	电子的准动量守恒散射平均自由时
τ_{MR}	电子的准动量弛豫散射平均自由时
ϕ	静电势
φ	二维波矢空间的方向角
ω_C	电子的磁致回旋频率, 等于 eB/m_B
$\omega_E(\omega_E)$	电子的电致回旋频率, 分别等于 $(-e)E/p_F$ ($\omega_E \cdot e_\varphi$)
Θ	德拜温度
Σ_{self}	电子的自能
\mathcal{E}	单粒子电化学势的负梯度
H	系统的哈密顿量
\mathcal{L}	洛伦兹因子, 即 $\kappa_e/\sigma T$
\mathcal{L}_0	洛伦兹常数, 等于 $(\pi^2/3)(k_B/e)^2$
\mathcal{P}	电子气的简并压强
\mathcal{R}_k	波矢空间 $\{(k_x, k_y, k_z)\}$ 或 $\{(k_x, k_y)\}$
\mathcal{R}_r	物理空间 (实空间) $\{(x, y, z)\}$ 或 $\{(x, y)\}$

第 1 章 引言

1.1 研究背景及意义

随着集成电路的发展，电子元器件的整体尺寸逐渐缩小到了微纳尺度的量级；同时，元器件在某些方向的几何尺寸也将远小于其他方向，即呈现出一定的低维特征。此时，一方面，由于整体几何尺寸的不断减小，元器件的边界约束（confinement）对电子运输的影响逐渐增强，从而导致通常体材料中电子运输的宏观性质可能不再成立；另一方面，某些具有低维属性的材料在特定温度范围内将表现出与众不同的电输运性质，这也为现有电子元件性能的提升以及新型功能元件的设计提供了重要的契机。

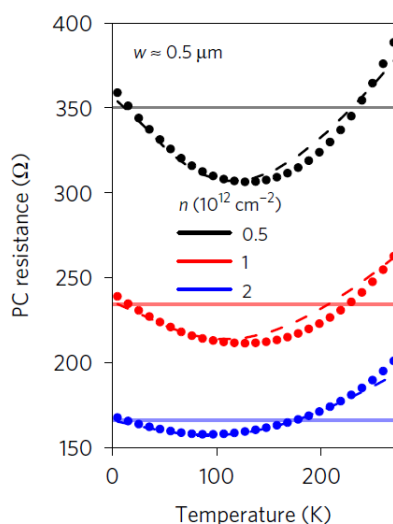


图 1.1 石墨烯电阻突破弹道极限^[1]。图中实线为弹道输运值，散点为实验结果。

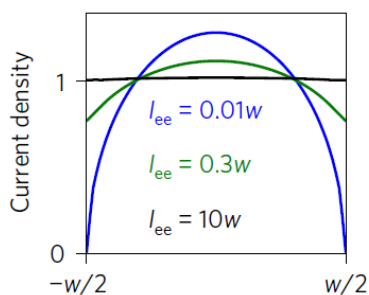


图 1.2 不同尺度下电子流动的速度剖面^[1]。图中蓝线（黑线）对应粘性（弹道）输运。

热电效应是能够实现温度差与电势差相互转换的一类现象的总称，它为余热的利用提供了一种新的可能性，对能量利用率的提高乃至全球能源问题的缓解都具有重要的意义。热电领域中衡量热电材料能量转换效率的参数为优值系数 $ZT = TS^2\sigma/\kappa$ ，其中 σ 和 κ 分别为电导率和热导率， T 为温度， S 为 Seebeck 系数。优值系数越大，材料的热电转换效率就越高^[2]。在通常的体相材料中，电导率由电子与弹性杂质的弹道散射与电子与声子的体弛豫散射决定，其在体弛豫散射强度可以忽略时达到极大值，称为所谓的弹道极限；同时，电导率 σ 与电子贡献的热导率 κ_e 一般满足线性关联式

$$\mathcal{L} := \frac{\kappa_e}{\sigma T} \equiv \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 =: \mathcal{L}_0, \quad (1-1)$$

这就是 Wiedemann-Franz 定律（简称 W-F 定律），其中 \mathcal{L} 称为 Lorenz 比。当材料中的电子充当主要的热载子时，由上述 W-F 定律可知优值系数 $ZT = S^2\mathcal{L}^{-1} \equiv S^2\mathcal{L}_0^{-1}$ ，即在经典理论中只能通过增大 Seebeck 系数来提高热电转换效率。近期实验发现，在纯净的石墨烯中，电子由于具有 Dirac 流体的属性，由其贡献的电导率和热导率不再满足经典的 W-F 定律 (1-1)^[3]，这表明或可以采用提高 Seebeck 系数以外的其他途径来提高优值系数。与此同时，在 100 K 左右的温度条件下，电子由于拥有较强的粘性而导致其迁移率有显著增强，在狭缝中的电子输运能够突破通常的弹道电导极限（如图 1.1 和图 1.2）^[1,4]，这对于优值系数的提高是非常有利的。由此可见，低维材料中上述反常的热电输运性质为热电材料的发展提供了新的契机。

磁阻效应是指外加磁场能够改变材料电阻率的现象。例如，层状磁性薄膜结构的电阻率在较弱外磁场作用下会产生剧烈的变化，这被称为巨磁阻效应，由于其能够大幅缩小存储单元的尺寸，因而在硬盘读写领域有着重要的应用。近期实验发现，在 Ga[Al]As 异质结、石墨烯等二维材料中，通过施加法向磁场，材料的流向电阻率会有显著的降低^[5-9]（如图 1.3）。在展向上，除了会发生通常的 Hall 效应外^[10]，还会呈现出无耗散的 Hall 粘性^[11]^①（如图 1.4）。从物理本质上讲，Hall 粘性来源于外加磁场引发的电子流动的时间反演对称性破缺，它与通常的正规粘性的重要差别在于对壁面附加应力的影响：后者能够提供切向应力，而前者则提供法向应力^[12]。应用上述在低维材料中新发现的磁阻效应，有望实现低维电子输运的整流调控，同时相关研究也具有重要的理论价值^[11]。

① 这里，法向是指垂直于二维材料所在平面的方向，流向是指局部电子微团流动的方向，展向则是指二维材料所在平面内垂直于流向的方向。

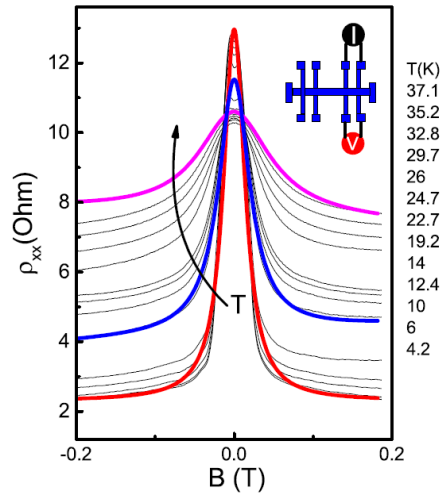


图 1.3 不同温度下 Ga[Al]As 异质结中电子运输的负磁阻效应^[9]

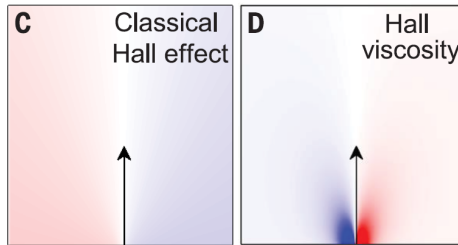


图 1.4 石墨烯电子运输的 Hall 粘性效应与经典 Hall 效应的电势云图对比^[11]

值得注意的是，以上两类与传统的电子体相输运行为迥异的现象均与电子输运时表现出的粘性性质密切相关，这本质来源于材料中强烈的电子-电子相互作用^[12-13]。从微观机制上讲，对于处于特定温度范围内的低维材料，电子经受的各类散射的平均自由程处于微纳尺度从而与材料的尺寸可比，并且电子-电子散射与其他类型的散射相比处于优势地位^①，这与经典流体力学的微观机制中流体分子之间的散射占据优势的情形是类似的。从宏观表现上讲，这体现为电子在以流体微团为单位进行输运时呈现出一定的粘性，这又包括与经典流体类似的流向正规粘性以及电子流体独有的由磁场诱导的展向 Hall 粘性，一方面有望复现经典粘性流体力学中的涡动力学、波动行为甚至是层流向湍流的转捩等现象^[14-27]，另一方面由于 Hall 粘性的存在使得壁面的应力边界条件发生改变从而可能引起新的边界流动行为^[28-32]。我们将电子流体的这种与经典流体在微观机制以及宏观表现上相类似的输运行为称为电子的水动力学现象，研究这类现象的学科则称为电子水动力学（electron hydrodynamics）。

① 需要指出的是，介观动力学意义上的电子-电子散射包括两类，一个是保持电子总准动量守恒的正规散射，另一个是使得电子总准动量改变一个倒格矢的倒逆散射。此处所言的电子-电子散射仅限于前者。

由此可见，对微纳尺度下低维电子输运的水动力学现象的研究，具有重要而广泛的理论和应用价值。本文将着重于研究低维材料中典型电子输运现象背后的水动力学机理，为其进一步的理论研究以及后续潜在应用奠定基础。

1.2 研究现状与挑战

1.2.1 微纳尺度低维电子输运的研究现状

微纳尺度低维电子的输运问题早在半导体领域兴起前后便已经聚集了大量的研究工作，这些工作着眼于电子的量子本性，广泛应用第一性原理以及半经典方法进行研究，由此形成了量子输运（quantum transport）这一研究领域^[33-36]。近年来，由于电子水动力学现象的相继发现，介观和宏观尺度的方法逐渐得到重视并被广泛采用；与此同时，众多新现象的发现离不开实验技术的涌现发展，这主要包括用于制备微纳尺度实验样品的材料蚀刻与沉积等技术^[37-41]以及用于直接观测实空间内电子流动的电子流场显微技术^[10,42]。在本小节中，将着重介绍目前研究微纳尺度低维电子输运问题的理论方法，并由此勾勒出电子水动力学方法的轮廓。

理论方法主要包括微观方法、介观方法和宏观方法。微观方法即基于电子的量子本性从微观尺度的第一性原理出发进行研究，主要包括基于路径积分的格林函数方法^[33,36,43]等。介观方法主要包括接触-通道模型方法、玻尔兹曼动理学方法等。接触-通道模型方法^[34-36]基于平衡格林函数或透射率模型，认为系统的电阻源于接触处的电子透射损失以及通道内的非相干散射，主要用于分析半导体元件电路中的稳态输运过程；玻尔兹曼动理学方法^[40,44-47]则采用基于微观粒子散射图像的玻尔兹曼方程，根据理论基础的不同可进一步细分为基于唯象类比的准经典方法^[48-49]和基于 Wigner 函数的半经典方法^[33,36]等：前者将处于准经典极限下的电子类比气体分子直接写出电子分布函数满足的玻尔兹曼方程，因此具有一定的唯象特征；而后者则严格基于量子刘维尔方程以及非平衡格林函数工具来构造所谓 Wigner 函数满足的玻尔兹曼方程，该函数可以类比经典意义下的电子分布函数来理解。宏观方法主要包括漂移-扩散方程、流体力学方法等。漂移-扩散方程基于弹性散射假设，通过对玻尔兹曼方程取一阶矩得到电流密度满足的漂移-扩散方程^[35]，进而可以电导率 σ 、热导率 κ 等宏观输运参数的经典表达式；流体力学方法则是以电子的各阶矩作为宏观量，通过求解少数宏观量满足的流体力学方程获得电子的输运性质。

对于电子水动力学现象，目前主流的研究手段是将介观方法与宏观方法相结合，不妨将其称之为电子水动力学方法。该方法一方面强调介观基础，将电子-电子散射纳入玻尔兹曼方程，从而能够精确刻画各类散射主导的不同流动相区内的电子流动行为；另一方面强调宏观描述，即基于介观尺度粒子散射的物理图像，通过升尺度方法在特定流动相区内实现由高维相空间中的介观玻尔兹曼方程到低维相空间中的宏观流体力学方程的简化。其中，介观方法具有普适性但较为复杂，因而适于理论定性与数值定量求解，但数值求解的计算量较大；而宏观方法牺牲了普适性但更为简洁直观，从而适于在理论上进行定量求解，并且在计算量上要小得多^[50-51]。由此可见，二者具有互为补充、相得益彰的特点，这也是电子水动力学方法的优势所在。

本文将重点关注将介观与宏观方法相结合的电子水动力学方法，旨在对众多的水动力学现象进行描述与解释（见图 1.10）。在接下来的两节，我们将分别具体介绍电子水动力学现象的研究历史和电子水动力学的研究现状及其局限性，为本文主要研究内容的引入作以铺垫。

1.2.2 电子水动力学现象的研究历史

从物理本质上讲，电子水动力学现象是固体材料中电子经历的各类散射相互制衡的结果。为了衡量各类散射的强度，通常采用电子在某种散射过程中的平均自由程^①作为其长度及强度尺度，因此电子水动力学现象可以看作尺度效应的一种。具体而言，这一方面要求材料在某些方向的几何尺寸足够小，即与各类体散射的平均自由程处于类似量级，使得边界散射带来的约束效应（称为尺寸效应）的影响不可忽略，这时一般要求材料在某些方向上处于微纳尺度；另一方面则要求电子-电子散射在各类散射中占据重要地位，这强烈依赖于各类散射的温度依赖特性，本质上与材料的声子频谱特性、电子能带结构及缺陷杂质分布密切相关，因此只有某些纯净低维材料在特定温度范围内才有可能满足这一要求。本小节将以此为脉络，总结电子水动力学现象的研究历史，重点关注新现象的发现以及重要理论方法的提出，由此归纳本文将要研究的具体物理问题。

单/双层石墨烯、砷化铝镓半导体、过渡金属氧化物、拓扑金属等材料在低温条件下才有可能表现出水动力学电子输运。

1.2.2.1 萌芽阶段（1930-1960）

对低维材料电子输运过程中的尺寸效应的早期研究集中在金属薄膜或金属细线上。Fuchs 在 1938 年最早研究了金属薄膜的尺寸效应^[52]，通过在理论上求解介观尺度的玻尔兹曼方程，发现薄膜的面内电阻率随着薄膜厚度的减小而

① 所谓粒子在某种散射过程中的平均自由程，是指其在经历相邻两次该种散射之间运动的平均距离。

增加。MacDonald 等在 1950 年通过实验测量发现了钠金属薄膜面内电阻率的尺寸效应^[53]，并且采用介观动理学方法对实验曲线进行了理论解释，同时还率先获得了电阻率随外加展向磁场的变化曲线。此后，陆续有许多学者采用类似的理论或实验方法研究金属薄膜或细线内电子输运的尺寸效应以及外加磁场的影响^[54-59]，相关的早期研究具体可以参考 Sondeimer 于 1952 年作的综述^[60]。值得注意的是，Chambers 和 Sondeimer 几乎同时引入了电子的有效平均自由程的概念^[55-56]，一方面该物理量与材料的电阻率成正比，具有鲜明的物理意义，另一方面这一概念的提出又为介观玻尔兹曼方程的理论求解提供了方便，为后续的特征线法等理论工具的提出奠定了基础^[44,61]。

对于材料中电子-电子散射影响的早期研究主要局限于理论工作，主要集中在其对宏观输运参数即电阻率的影响等方面。Baber 于 1936 年考虑了电子-电子散射对过渡金属体电阻率的贡献，发现其与温度的平方成正比^[62]。Steinberg 于 1958 年基于对低温条件下电子-电子散射重要性的推断，第一次提出了电子粘性的概念^[63]。尽管这一设想并未充分考虑到金属内部各类散射相互制衡的实际情况，在当时也缺乏足够的实验证据，但其思想的前瞻性是不可否认的，后人的实验也最终证实了电子粘性的存在性及其重要性。值得关注的是，Steinberg 开创性地将电子-电子散射以动量守恒散射项的形式纳入了介观玻尔兹曼方法的框架，该方法在后来的研究中被广泛使用^[24,27,45,47,61,64-65]。

1.2.2.2 奠基阶段（1960-1995）

前苏联物理学家 Gurzhi 是电子水动力学理论的开创者与集大成者。他早年关注金属电子的体相输运^[66-68]，从 20 世纪 60 年代起逐渐转向对低维材料中电子输运的研究。1963 年，Gurzhi 通过物理估计做出预言，由于粘性扩散机制的存在，纯净导体薄膜的电阻率随温度升高将存在极小值（如图 1.5）^[69-70]。该现象被后人称为 Gurzhi 效应，并在后续实验中得到了验证^[37]。这一先驱性工作也正式宣告了电子水动力学理论的诞生。1968 年，Gurzhi 通过物理估计以及玻尔兹曼方程求解预言了负磁阻效应，即金属薄膜的电阻率随面内磁场的增加而减小并最终收敛至体电阻率（如图 1.6）^[71]。此后，Gurzhi 系统地研究了电子-电子散射对金属电阻率的影响即水动力学效应^[72-75]，相关研究可参考其综述文章^[76]。

与 Gurzhi 几乎同一时期，也有许多学者对低维金属材料中电子-电子散射引起的水动力学效应进行了细致的理论研究^[18,77-82]，并将相关结果从不同角度进行了综述^[83-87]。值得关注的是，Kaveh 在其综述中类比气体流动提出了电子流

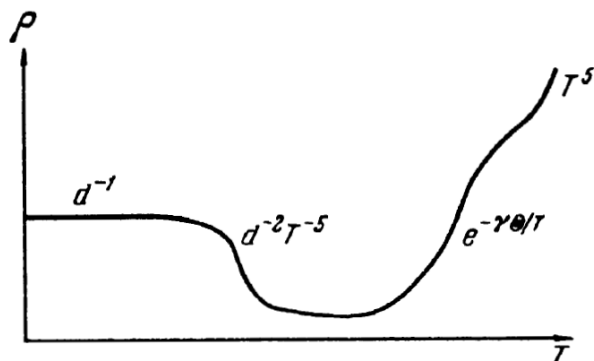


图 1.5 纯净导体薄膜的电阻率 ρ 随温度 T 变化的示意图^[70]。图中， d 为薄膜厚度， γ 为常参数， Θ 为体材料的德拜温度。当温度很低时，边界散射占据主导，电子输运呈现出弹性弹道散射的特征，电阻率仅依赖于样品尺寸，因此与温度几乎无关；当温度逐渐增加时，电子-电子散射逐渐占据主导，电子输运最终进入粘性扩散相区，由 Poiseuille 流性质结合费米液体理论可以得到，电导率与温度的五次方成正比，从而最终超越弹道电导率；随着温度的进一步升高，电子-声子散射将逐渐占据主导，电子输运进入经典的欧姆相区，电阻率将按照经典理论随温度的升高迅速增加^[69]。

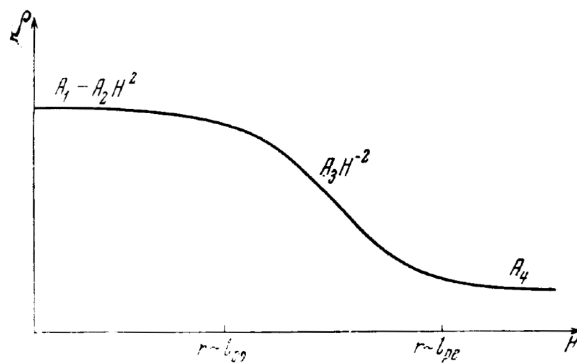


图 1.6 金属薄膜的面内电阻率 ρ 随外加面内磁场强度 H 变化的示意图^[71]。图中， l_{ep} 为电子的电子-声子散射平均自由程， l_{pe} 为声子的电子-声子散射平均自由程， A_i 为与温度相关的参数。沿横轴正方向 H 逐渐增加，从而回旋半径 $r \equiv r_C := mv_F/(eB) \sim H^{-1}$ 逐渐减小。当 $r \ll l_{ep} \ll d$ 时（ d 为薄膜厚度），磁场作用下的电子输运仍处于粘性扩散相区，电子可看作在声子气体中作布朗运动，由 Poiseuille 流性质结合布朗运动相关结论可知，电阻率与电子在同声子的单次散射过程中运动距离 $l = \min\{r, l_{pe}\}$ 的平方成反比。上述分析与介观动力学方程的结果 $\rho \sim \nu \sim 1/(a^2 + H^2)$ （ a 是与 H 无关的常数）是定性一致的，由此可见，负磁阻效应本质来源于磁场对电子粘性的影响。

动的 Knudsen 效应，即在漫反射边界散射占主导时电阻随电子-电子散射的增强而增加（如图 1.7）^[83,88]。另外，Avron 率先从时间反演对称性的角度预言了外加磁场将为低维电子的粘性输运贡献一个额外的无耗散粘性项（后被称作 Hall 粘性），并讨论了这种反常粘性对粘性流体波等现象的影响^[77]。

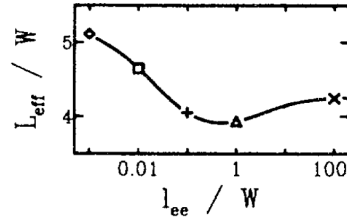


图 1.7 低维样品的无量纲电导率 L_{eff}^M/W 随无量纲的电子-电子散射平均自由程 l_{ee}/W 的变化曲线^[44]。沿横轴的负方向考察，起初通道宽度 W 远小于电子-电子散射平均自由程 l_{ee} ，漫反射边界散射占据主导，电导率主要由沿通道方向运动的电子贡献。当电子-电子散射逐渐增强（即 l_{ee} 逐渐减小）时，电子与边界发生散射的几率增加，沿通道方向运动的电子的数量减小，从而使得电导率降低，此即 Knudsen 效应。当电子-电子散射进一步增强时，电子将由弹道输运转变为粘性扩散主导的 Poiseuille 流动，由电子粘性的估计式 $\nu \sim v_F l_{ee}$ 可知，电导率将随电子-电子散射的平均自由程的减小而增加，此即 Gurzhi 效应。

为了验证有关电子水动力学现象的理论预言，先后有学者进行相关的实验尝试^[89]。1994 年，de Jong 和 Molenkamp 在实验中发现，在 Ga[Al]As 异质结的二维电子气中，电子输运在不同温度下呈现出了鲜明的 Knudsen 效应和 Gurzhi 效应^[37]。作为对电子水动力学现象首次成功的实验观测，这一发现证实了前人预言的正确性^[70,83]，堪称电子水动力学发展过程中的一个里程碑。在其随后发表的长文中，作者基于介观动理学方法，采用经典的特征线方法得到了电子玻尔兹曼方程的精确解，与实验结果符合得很好^[44]。值得注意的是，文章中的双弛豫时间近似形式的体散射项模型以及具有入射角依赖的边界散射模型在后续的理论研究中得到了广泛的应用^[61,65]。

1.2.2.3 复兴阶段（2015-）

如第 1.2.2 节引文所述，电子水动力学现象的发生强烈依赖于散射性质足够好的样品材料以及足够小的样品尺寸。由于候选实验材料的缺乏以及实验制备技术的限制，在 Molenkamp 等里程碑式的实验发现随后的二十年间，电子水动力学领域陷入了沉寂。随着新材料的发现以及实验技术的发展^[10,37,39,42,90]，近年来在单层/双层石墨烯、Ga[Al]As、PdCoO₂ 等强关联低维材料中相继发现了众多电子水动力学现象^[1,9,11,14-15,38]，由此也极大地促进了电子水动力学理论的发

展。《Science》在 2016 年和 2019 年分别同时刊发了以电子水动力学为专题的多篇实验文章^[3,11,14,38,41]，引发了凝聚态物理领域众多学者的关注与进一步研究，这也标志着电子水动力学的发展进入了新的阶段。

一方面，众多的实验发现有力地证实了前人的理论预言。例如，Bandurin 等人和 Moll 等人分别在石墨烯和 PdCoO₂ 中确认了电子-电子散射对宏观电阻率的重要贡献^[38,40]。Kumar 等人在石墨烯中发现了电子输运的弹道-扩散效应^①，并证实了电子的粘性扩散与弹道输运机制相比能够显著增加材料的电导率（如图 1.1 和图 1.2）^[1]。Gusev 等人在 Ga[Al]As 异质结中观察到了显著的负磁阻效应^[5-9]，从而验证了 Gurzhi 的理论预言^[71]。

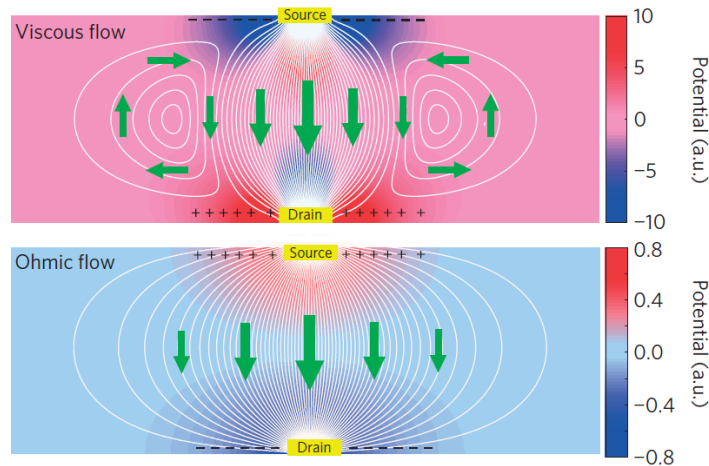


图 1.8 电子粘性输运（实验发现）与欧姆输运（经典观点）的流场对比^[15]

另一方面，新的实验现象也揭示了低维电子新的输运特性。Levitov 等人考察了对侧点电源作用下石墨烯条带内的电子输运，通过局域电阻为负值推断出电子流动应呈现典型的粘性涡结构特征（如图 1.8）^[14-15]；Braem 等人则利用扫描栅极显微技术（Scanning Gate Microscopy），直接捕捉到了实空间中的电子局部回流现象（如图 1.9）^[90-91]。Berdyugin 等人采用边界单点电源，考察了外加法向磁场对电子局域流动特性的影响，并首次在实验中捕捉到了 Hall 粘性效应^[11]。Crossno 等人测量了不同温度下纯净石墨烯的热电输运特性，发现材料的热导率有显著改变，刻画材料热导率和电导率关系的经典 W-F 定律 (1-1) 不再成立^[3]。Gallagher 等人考察了光辐射对纯净石墨烯中电子输运的影响，发现电子-电子散射对光致电导率有重要贡献^[41]。

① Knudsen 效应与 Gurzhi 效应合称弹道-扩散效应，为边界散射与体相扩散散射相互制衡的结果。

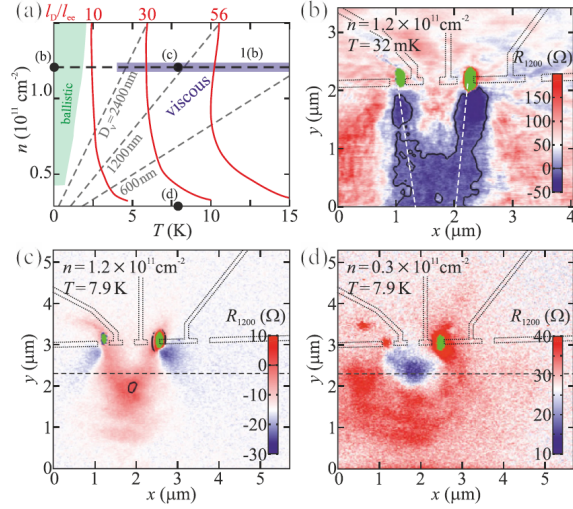


图 1.9 边界单点电源附近电子局部回流现象的电势云图^[91]

本文将重点关注弹道-扩散效应、磁阻效应这两类典型的电子水动力学现象，同时兼顾对电子宏观流动细节的讨论（见图 1.10）。需要指出的是，出于研究的确切性与重要性的考虑，本文的研究对象局限于导带底附近电子的能量色散关系近似为抛物形式的低维材料，如碱金属^[84-85]、双层石墨烯^[14,92-93]、Ga[Al]As^[44]、PdCoO₂^[38,94] 等。

1.2.3 电子水动力学的研究现状及其局限

如第 1.2.1 节所述，当前研究电子水动力学的主流方法是将介观的玻尔兹曼动理学方法与宏观的流体力学方法相结合^[45-46,61,65,93,95-99]，下面将对二者分别加以介绍。

介观的玻尔兹曼动理学方法即通过求解电子玻尔兹曼方程获得电子的非平衡分布函数，由此积分得到电子数密度、流动速度等宏观输运参量。求解玻尔兹曼方程的理论方法包括正交基函数展开方法^[100]、微扰方法^[46]、特征线方法^[44,61]等。由于玻尔兹曼方程本身的复杂性，上述方法只能处理低维简单几何、少物理及弱外场等简单情形，并且大多数情况下只能得到定性结果。相比之下，数值方法兼具灵活性与精确性的优势，但目前鲜有对电子水动力学输运的数值研究^[17,27]。一般而言，求解介观输运问题的数值方法包括蒙特卡洛方法（Monte-Carlo Method，简称 MC）、格子玻尔兹曼方法（Lattice Boltzmann Method，简称 LBM）、离散坐标方法（Discrete Ordinate Method，简称 DOM）等。其中，MC 方法基于微观过程的随机性，与分子动力学方法（MD）相比效率更高，且能够模拟更大尺度的物理问题，但与其他方法相比效率仍然较低；LBM 方法基于玻尔兹曼

方程的离散格子模型，具有方便处理复杂几何、易并行效率高的优势，被广泛应用于多孔介质的渗流模拟，但仍鲜有刻画电子输运的格子玻尔兹曼模型^[101-102]；DOM 方法将玻尔兹曼方程在相空间中直接进行数值离散，能够实现对介观输运行为的精确捕捉，但难于处理复杂几何、高维流动等情形。考虑到当前的实验研究大部分局限于简单几何，因此 DOM 方法是上述方法中有力的候选者。

宏观的流体力学方法即通过求解电子宏观流动满足的流体力学方程，直接获得电子数密度、流动速度等宏观输运参量。推导宏观流体力学方程的核心步骤是动量通量项的封闭，据此可细分为基于物理直觉的唯象方法和基于介观动理学方程的升尺度方法。唯象方法即通过基于直觉上的物理模型，利用对称性条件获得带有唯象参数的动量通量表达式，但唯象参数只能通过实验方法得到^[77,99,103-107]。升尺度方法是从介观玻尔兹曼动理学方程出发进行严格推导，不仅能够得到动量通量项的唯象形式，还可以给出唯象参数与微观参数的关系^[65,108-112]。由此可见，升尺度方法在数学上更具严谨性，同时可以实现介观与宏观尺度的连接。当前的升尺度方法主要有 Fourier 矩方法^[65] 以及最大熵矩方法^[109] 等。然而，前人采用矩方法得到的宏观方程的适用条件仍不甚清晰，而摄动方法通过设置小参数的方式将非平衡分布在平衡分布附近作渐近展开，具有更为清晰的物理意义；同时前人在矩方法的理论推导中并未考虑电场对分布函数的角度偏导数的影响，也需要进行更为细致地考察。

1.3 本文研究内容及安排

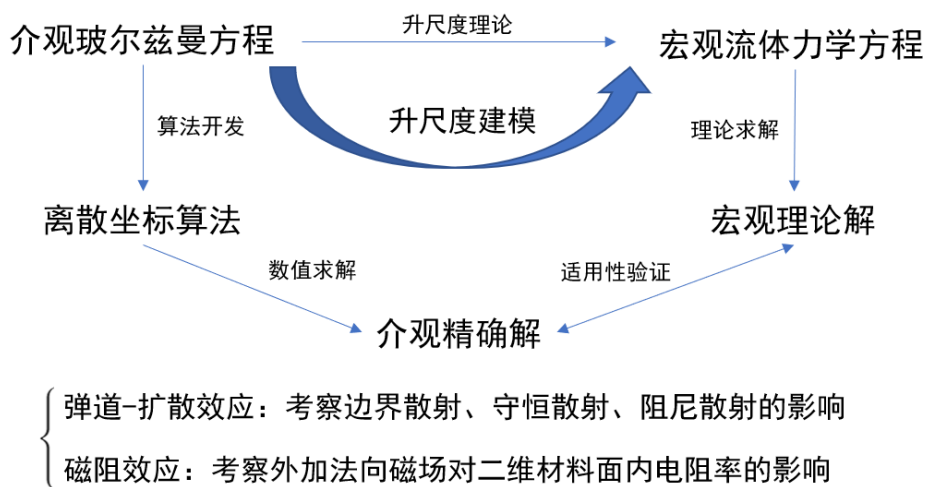


图 1.10 本课题的研究方案

基于上述研究现状，本文主要从介观数值算法和扩散相区的宏观电子水动力学模型两个方面开展研究，研究方案如图 1.10 所示。一方面，将发展求解介观电子玻尔兹曼方程的 DOM 方法，实现对电子水动力学输运行为的精确刻画；另一方面，将给出宏观电子流体力学方程的一种新的推导方法，即适用于扩散相区的 Chapman-Enskog 摄动方法，同时对前人的 Fourier 矩方法进行角度偏导项的修正。本文研究的安排如下：第 2 章叙述介观玻尔兹曼方法的物理图像与数学描述，这构成了本文工作的基础；第 3 章介绍数值求解电子玻尔兹曼方程的离散坐标方法，并给出其数值验证与应用；第 4 章建立扩散相区内的宏观电子水动力学模型，并讨论方程的特点与应用；第 5 章对本文的研究工作作以总结，并对此后的工作进行展望。

第 2 章 电子输运的介观玻尔兹曼方法

本章前半部分将介绍固体电子状态的微观物理图像，即能带理论和朗道费米液体理论，由此引入描述固体电子输运的介观玻尔兹曼方程并强调其适用条件。后半部分则将给出应用玻尔兹曼方法处理实际低维材料的电子输运问题时的具体数学表述，即双弛豫近似电子玻尔兹曼方程的定解问题，为本文的后续工作奠定介观的理论基础。

2.1 电子玻尔兹曼方程的微观基础

从粒子属性上看，电子属于费米子，满足 Pauli 不相容原理，具有鲜明的量子特征。在准经典近似下，每一个电子状态（简称电子态）对应于由实空间 \mathcal{R}_r^n 与波矢空间 \mathcal{R}_k^n 构成的相空间 $\mathcal{R}_r^n \times \mathcal{R}_k^n$ 中的一点 (\mathbf{r}, \mathbf{k}) 。某电子态的平均占据数（又称电子态的分布函数） $f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ 定义为相体积元 $\prod_{i=1}^n [r_i, r_i + dr_i] \times \prod_{i=1}^n [k_i, k_i + dk_i]$ 内的平均电子数（这里未计及电子自旋的贡献）。对于处于局部平衡状态的电子系统，其电子态的分布函数服从局部的 Fermi-Dirac 平衡分布^[113]

$$f_{\text{F-D}}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{r})}{k_B T(\mathbf{r})}} + 1}. \quad (2-1)$$

式中， $\varepsilon(\mathbf{k})$ 为波矢为 \mathbf{k} 的电子态的能量， $\mu(\mathbf{r})$ 和 $T(\mathbf{r})$ 分别为系统的局部化学势和温度， k_B 为玻尔兹曼常数。当电子系统中存在不平衡势差——如电势梯度 $\nabla_r \phi$ 、温度梯度 $\nabla_r T$ 、化学势梯度 $\nabla_r \mu$ 等——时，电子态分布函数将偏离平衡分布 (2-1)，从而导致实空间中的电子输运过程^[114]。

对于经典粒子的输运过程，可采用介观尺度的玻尔兹曼方程进行统一描述

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = C(f). \quad (2-2)$$

该方程的物理意义为：粒子经历的散射 $C(f)$ 是引起当地粒子分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ 变化的原因。其中，粒子分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ 描述了相体积元 $\prod_{i=1}^n [r_i, r_i + dr_i] \times \prod_{i=1}^n [v_i, v_i + dv_i]$ 内的平均粒子数。由此可见，散射项 $C(f)$ 是决定粒子输运行为的关键，可以基于自底向上的微观模型或直接采用某种唯象形式进行封闭。例如，对于经典系统，一种典型的封闭方法是从经典 Liouville 方程出发，基于二

体相互作用假设、稀薄气体假设以及统计独立性假设推导获得碰撞项的微观表达式，这就是所谓的二体碰撞模型^[115-116]。除二体碰撞模型外，目前应用较为广泛的散射项模型还有单弛豫模型^[63,117-118]、双弛豫模型^[50,119-120]等，它们通常都具有局域性的特征。前人曾类比经典粒子的玻尔兹曼方程，将相应的散射模型唯象地推广至电子输运的情形^[49]。然而，电子与经典粒子在本质属性上存在着巨大的差异：一方面，由于电子是一种携带电荷的费米子，这既导致粒子间的相互作用为长程的库仑力，又将引起非局域的自旋交换关联效应，从而违反了经典粒子的众多散射项模型背后的局域性假设；另一方面，电子的动量本征态用波矢 \mathbf{k} 描述，同时在实空间 \mathcal{R}_r^n 中表现为本征 Bloch 波函数的形式，这与经典粒子用 (\mathbf{r}, \mathbf{v}) 描述状态的方式十分不同。因此严格地讲，直接应用现有的玻尔兹曼方程模型来刻画电子输运的唯象处理方式是值得商榷的。

本节将从固体理论对电子状态的微观量子描述出发，考察电子的库仑长程相互作用以及自旋交换关联效应对能带特征的影响，说明相互作用的电子系统在行为上与无相互作用的准电子系统的相似性，表明晶体电子输运的局域性假设的合理性。然后引入波包及其准经典运动的描述，给出基于介观统计描述的电子玻尔兹曼方程，讨论电子之间的相互作用等因素对电子输运行为的影响，强调电子在描述方式和外场响应行为上与经典粒子的相似性。最后基于前面的讨论，说明电子玻尔兹曼方程的适用条件。

2.1.1 固体电子状态的微观量子描述

固体属于凝聚态物质的一种，传统的凝聚态理论主要包括能带理论和微扰理论^[121-124]，上述理论的物理图像则是基于朗道的费米液体理论^[125-126]。

2.1.1.1 能带理论

能带理论是凝聚态物理的基础理论，它成功地解释了导体和非导体的区别，为半导体问题的分析提供了基础，并极大地推动了半导体工业的发展。由于晶体材料中的电子会受到离子实晶格的影响，自由电子模型 $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m)$ 将不再适用，这时就需要应用能带理论得到其在离子势场中的能量色散关系 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 。

能带理论有三个基本假设，即静态近似假设、单电子近似假设以及周期性平均场假设^[121-122]。其中，静态近似是指在求解电子本征态时假定离子实固定在平衡位置不动，如要考虑晶格振动的影响则需在能带理论的基础上应用微扰理论进行求解；单电子近似是指将电子之间的库仑相互作用以及自旋交换关联效应用一个平均场近似刻画，这被称为 Hartree-Fock 近似；周期性平均场假设则

假定由离子实库仑势以及电子相互作用平均场叠加形成的势场具有空间周期性，这种平移对称性是电子本征态即 Bloch 波存在的基础。由此可见，Hartree-Fock 近似是能带理论中处理电子之间复杂的相互作用的核心。

将周期性离子实势场内的无相互作用电子系统的基态作为试探波函数，可以得到试探态的总能量为^[125]

$$E_g = E_{\text{band}} + E_{\text{Hartree}} + E_{\text{Fock}}. \quad (2-3)$$

其中， E_{band} 为周期性离子实势场内的能带电子能量（以化学势 μ 为基准）

$$E_{\text{band}} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} n_{\mathbf{k}, \alpha} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \quad (2-4)$$

E_{Hartree} 称为 Hartree 项，它描述了电子之间的经典库仑势能

$$E_{\text{Hartree}} = \frac{1}{2N_s} V_0 \left(\sum_{\mathbf{k}, \alpha} n_{\mathbf{k}, \alpha} \right)^2, \quad (2-5)$$

E_{Fock} 称为 Fock 项，它描述了平行自旋之间的有效相互吸引作用

$$E_{\text{Fock}} = -\frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \alpha} V_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}, \alpha} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \alpha} + \frac{1}{2} V(0) \sum_{\mathbf{k}, \alpha} n_{\mathbf{k}, \alpha}. \quad (2-6)$$

其中， $n_{\mathbf{k}, \alpha}$ 为波矢为 \mathbf{k} 、自旋为 α 的电子态的占据数，由 Pauli 不相容原理可知该值只能取 0 或 1； N_s 为晶体的格点数； $V_{\mathbf{q}} := \int d\mathbf{x} V(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}$ 为电子之间相互作用势向波矢空间的 Fourier 变换。由此可整理得到

$$E_g = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} n_{\mathbf{k}, \alpha} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \frac{V(0)}{2} \right) + \frac{V_0}{2N_s} \left(\sum_{\mathbf{k}, \alpha} n_{\mathbf{k}, \alpha} \right)^2 - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \alpha} \frac{V_{\mathbf{q}}}{2} n_{\mathbf{k}, \alpha} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \alpha}. \quad (2-7)$$

对系统各电子态 $n_{\mathbf{k}, \alpha}$ 作一微扰 $\delta n_{\mathbf{k}, \alpha}$ ，可以得到一阶近似下系统能量改变为

$$\delta E = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \delta n_{\mathbf{k}, \alpha} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu' + \Sigma_{\text{self}}). \quad (2-8)$$

其中， $\mu' := \mu - \rho_0 V_0 - \frac{1}{2} V(0)$ ， $\Sigma_{\text{self}} := -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \alpha} V_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \alpha}$ 。为了使试探态的总能量最低，应要求 $\forall \delta n_{\mathbf{k}, \alpha}$ ，有 $\delta E > 0$ ，因此使得相互作用电子系统能量最小的基态占据数 $n_{\mathbf{k}, \alpha}$ 应满足

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{k}, \alpha} &= 1, & \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu' + \Sigma_{\text{self}} &< 0 \\ n_{\mathbf{k}, \alpha} &= 0, & \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu' + \Sigma_{\text{self}} &> 0 \end{aligned} \quad (2-9)$$

因此，满足 $\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu' + \Sigma_{\text{self}} = 0$ 的态构成了相互作用电子系统的费米面。

一旦由式 (2-9) 求得了相互作用系统的基态占据数 $n_{\mathbf{k},\alpha}$ ，则可由式 (2-8) 立即得到其激发态 $n_{\mathbf{k},\alpha} + \delta n_{\mathbf{k},\alpha}$ 的平均能量。由此可见，在 Hartree-Fock 近似下，相互作用电子系统的低能激发可以用一个由准粒子构成的自由费米系统描述。其中，准粒子的每一个动量态的能量为 $\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu' + \Sigma_{\text{self}}$ ，它被电子之间的相互作用所修正。其中，单粒子化学势 μ' 相对于无相互作用系统的 μ 只作了均匀势修正，这来源于试探波函数描述均匀密度态；电子的自能 Σ_{self} 则来源于描述电子自旋作用的 Fock 项，这是能量修正的主要来源。准粒子描述强调，相互作用费米系统的低能激发仍可由占据数标记，而低能激发的数目与（周期性离子实势场内的）无相互作用费米系统中的 Bloch 电子数相同，并且多体本征态的能量是各个占据态能量的代数和。

2.1.1.2 费米液体理论

在上述基于 Hartree-Fock 近似的能带理论框架下，我们采用了周期性离子实势场内无相互作用电子系统的基态作为试探波函数。然而，由式 (2-8) 可以计算得到，在三维库仑作用 $V(\mathbf{x}) \sim x^{-1}$ （对应于 $V_{\mathbf{q}} \sim q^{-2}$ ）下，费米面附近电子的自能具有奇异性，这将导致准粒子具有无穷大的费米速度。这个奇异性本质上来自库仑作用的长程部分（对应于 $q \rightarrow 0$ ）。如果电子之间只有短程相互作用，则不会导致这种奇异。为了对上述现象作出修正，需要仔细考察准粒子之间的相互作用。与无相互作用费米系统被称作费米气体相对应地，对于有相互作用的费米系统，我们称之为费米液体。

费米液体理论由前苏联著名物理学家朗道所创立，因此也被称为“朗道费米液体理论”^[125-126]。该理论有两个基本假设：

1. 对于由基态和低能激发组成的低能本征态，可以由一组量子数 $n_{\mathbf{k},\alpha} = 0, 1$ 标记，这些数称为“占据数”。
2. 当关闭准粒子间的相互作用时，低能本征态绝热地改变为自由费米系统相应的本征态，该自由费米系统由相同占据数 $n_{\mathbf{k},\alpha}$ 标记。

基于上述假设，可以利用自由费米系统的描述方式来刻画朗道费米液体的激发，这种激发被称为准粒子激发。将本征态能量在基态占据数附近展开，可以得到其激发态能谱（基态能量 E_g 由式 (2-7) 给出）

$$E_{\mathbf{k},\alpha} = E_g + \sum_{\mathbf{k},\alpha} \delta n_{\mathbf{k},\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^* + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}\alpha, \mathbf{k}'\beta} f(\mathbf{k}, \alpha; \mathbf{k}', \beta) \delta n_{\mathbf{k},\alpha} \delta n_{\mathbf{k}',\beta}. \quad (2-10)$$

其中, $\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^*$ 为准粒子能量; $f(\mathbf{k}, \alpha; \mathbf{k}', \beta)$ 代表准粒子之间的相互作用, 称为费米液体函数。由此可见, 激发态能谱由准粒子能量与费米液体函数完全确定, 其后续处理方式与自由费米系统是完全类似的, 只是增加了费米液体函数对低能激发性质的修正。这里指出, 费米液体理论的精髓在于良定义的准粒子概念及其存在性, 这也是导致相互作用费米系统与自由费米系统的行为十分相似的原因。

为了得到费米液体函数的具体形式, 注意到费米液体的激发态能谱 (2-11) 与 Hartree-Fock 近似下的试探态能谱 (2-7) 的相似性, 仿照 Hartree-Fock 近似中激发谱 (2-8) 的处理方式, 在占据数的微扰中保留至 $\delta n_{\mathbf{k},\alpha}$ 的二阶项, 可以得到

$$\delta E = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \delta n_{\mathbf{k},\alpha} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu' + \Sigma_{\text{self}}) + \frac{1}{2V} V_0 \left(\sum_{\mathbf{k},\alpha} \delta n_{\mathbf{k},\alpha} \right)^2 - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\alpha} V_{\mathbf{q}} \delta n_{\mathbf{k},\alpha} \delta n_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\alpha}. \quad (2-11)$$

对比式 (2-10) 和式 (2-11) 可得

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^* &= \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu' + \Sigma_{\text{self}} \\ f(\mathbf{k}, \alpha; \mathbf{k}', \beta) &= V_0 - V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (2-12)$$

从而可以得到空间非均匀的集体激发态下准粒子的能量为

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^* + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'\beta} f(\mathbf{k}, \alpha; \mathbf{k}', \beta) \delta n_{\mathbf{k}'\beta}(\mathbf{r}). \quad (2-13)$$

由此可见, 费米液体函数为准电子的基态能量 $\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^*$ 增加了一项平均场的贡献。

为了消除势能函数 $V_{\mathbf{q}}$ 在 $\mathbf{q} \rightarrow 0$ 时的奇异性, 可以采用随机相近似 (Random Phase Approximation, 简称 RPA) 的方法, 在微扰频率 $\nu_p \ll \nu_F q$ 的极限下得到具有屏蔽效应的有效势模型 (也被称为 Thomas-Fermi 模型)^[125]

$$V_{\mathbf{q}}^{\text{eff}} = \frac{V_{\mathbf{q},\nu_p}}{1 + V_{\mathbf{q},\nu_p} N(E_F)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + 4\pi e^2 N(E_F)}. \quad (2-14)$$

该有效势代表了电子之间由于屏蔽效应导致的短程势; 费米面上的态密度 $N(E_F)$ 越大, 屏蔽效应越强。显然, 该屏蔽势在 $\mathbf{q} \rightarrow 0$ 时并不具有奇异性。实际上, 该模型也可以通过宏观上经典的等效库仑平均场计算得到^[121-122]。

结合式 (2-14) 和式 (2-12) 可知, 当屏蔽效应较强时, 具有短程的屏蔽势的准粒子在行为上与 Hartree-Fock 近似框架下的能带理论中的无相互作用电子 (即相互正交的 Bloch 波) 完全相似, 即其散射行为在波矢空间 $\mathcal{R}_{\mathbf{k}}^n$ 内具有局域特征, 因此将经典粒子的介观散射图像向电子进行推广是合理的。

2.1.2 固体电子输运的介观统计描述

首先介绍描述晶体中电子运动的准经典近似。由上一小节可知，当屏蔽效应较强时，相互作用电子系统可看作无相互作用准电子系统与一个平均场的叠加。为了简洁而又不失明确起见，在之后的章节中仍将准电子简称为电子，将准电子的能量 $\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha}^*$ 和化学势 μ' 简记为 $\varepsilon(\mathbf{k})$ 和 $\mu(\mathbf{r})$ （分别由式 (2-12) 和式 (2-8) 定义）。根据不确定性关系，电子的状态实际上由 \mathbf{k}_0 附近 $\Delta\mathbf{k}$ 范围内的一系列 Bloch 波叠加构成，由此可引入电子波包的概念（如图 2.1 所示）：其在波矢空间 \mathcal{R}_k^n 内局域，即波包具有近似确定的能量；而在实空间 \mathcal{R}_r^n 内扩展，即波包能够在物理空间的一定范围内运动^[122]。

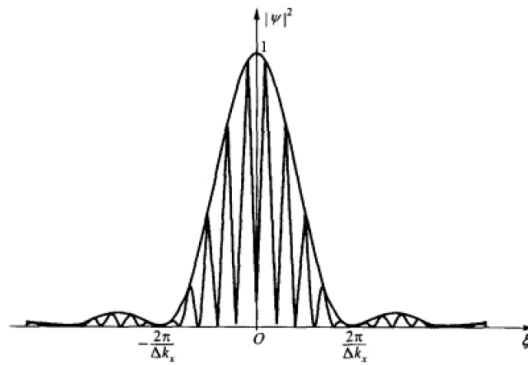


图 2.1 Bloch 波包示意图^[122]

可以得到，波包的速度等于波矢为 \mathbf{k} 、能量为 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 的 Bloch 电子的群速度

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}). \quad (2-15)$$

其中，下标 n 用于标记特定的能带。同时，Bloch 电子在外场 \mathbf{F} 中的运动满足

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F} = (-e)(\mathbf{E} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}). \quad (2-16)$$

利用以上两式可以得到

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \left(\mathbf{F} \cdot \frac{1}{\hbar^2} \nabla_{\mathbf{k}} \right) \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}).$$

类比经典力学中的牛顿第二定律，可以定义能带电子的能带有效质量张量

$$\mathbf{m}^{*-1} = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}). \quad (2-17)$$

以上三式 (2-15)、(2-16) 和 (2-17) 构成了对晶体中电子运动的准经典描述，它直

接利用了能带理论的结果即能带结构 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ ，对周期性离子实势场及电子相互作用平均场做了量子处理；而在处理外场时采用了经典观点，由此描述了晶体中电子的外场响应^[122]。实际上，利用费米液体中的准粒子满足的哈密顿方程

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \\ \frac{d\mathbf{k}}{dt} &= \frac{1}{\hbar} (\mathbf{F} - \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \mathbf{r})).\end{aligned}$$

也可以得到与式 (2-15) 和式 (2-16) 类似的结果^[125]。由此可见，式 (2-16) 中所谓的外场 \mathbf{F} 还包含有电子之间相互作用即内建平均场的成分。

写电子玻尔兹曼方程的原始形式^[127-128]

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = C(f). \quad (2-18)$$

代入式 (2-15) 和式 (2-16)，即可得到电子玻尔兹曼方程的最终形式^[48,125]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = C(f). \quad (2-19)$$

本文只关注晶体导带底附近的电子输运，因此在之后的章节中将能带标记 n 略去不写；同时，本文只考虑各向同性的能带有效质量张量，这时由式 (2-17) 定义的 m^{*-1} 退化为一常数 m^{*-1} ，导带底附近的电子态能量可近似表达为

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = E_{\text{bottom}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}. \quad (2-20)$$

结合式 (2-15) 与式 (2-16) 可知，此时电子玻尔兹曼方程 (2-19) 在形式上与经典粒子的玻尔兹曼方程 (2-2) 完全相同，只是将粒子的质量替换为了由能带结构决定的电子的能带有效质量 m^* ，其中已考虑了电子之间相互作用的贡献。

最后应用电子玻尔兹曼方程 (2-19) 简要讨论不平衡势差对电子输运的影响。将非平衡分布函数 f 在 Fermi-Dirac 平衡分布 (2-1) 附近作分解 $f =: f_{\text{F-D}}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{f}(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ ，并假定散射项为单弛豫时间近似形式 $C(f) = -(f - f_{\text{F-D}}^{\text{eq}})/\tau$ （其中 $\tau = \tau(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ 称为弛豫时间），则可由线性化的 (2-19) 解出（另见式 (2-26)）^[33]

$$\mathbf{f}(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{\tau}{m^*} \left(-\frac{\partial f_{\text{F-D}}^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon} \right) \left((-e)\mathcal{E} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T \right). \quad (2-21)$$

其中， $\mathcal{E} = \mathbf{E} + \nabla_{\mathbf{r}} \mu/e$ 为电化学势的负梯度， e 为元电荷绝对值。上式表明，电子态分布的非平衡部分 $\mathbf{f}(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ 来源于空间中的不平衡势差，由电化学势梯度与温度梯度两部分贡献组成，这与第 2.1 节首段末尾的叙述是一致的。

2.1.3 电子玻尔兹曼方程的适用条件

根据前面的讨论，我们可以归纳得到电子玻尔兹曼方程如下的适用条件。可以验证，在本文涉及的实验范围内，这些适用性条件均可得到满足。

- 电子之间的屏蔽效应足够强，使得电子以 Bloch 波函数形式处于实空间的扩展态而非强关联的局域态，以保证基于无相互作用准电子图像的单电子近似假设成立，如对于三维情形一般要求电子浓度不能太低（否则会导致由导体向绝缘体转变的 Mott 相变）^[93,122]；
- 电子所处势场的空间变化较为缓慢，不破坏周期性平均场假设，使得电子运动的平均自由程远大于晶格常数，以保证基于的准经典描述成立，如局域杂质势导致的系统势能背景的无序性不能太高（否则会导致由导体向绝缘体转变的 Anderson 相变）^[121-122]；
- 温度带来电子能量的热涨落 $k_B T$ 以及外场引起的能量变化 $\hbar\omega$ 足够弱，使得电子从外场吸收能量小于带宽，防止发生带间跃迁破坏能带图像^[122]；与此同时，在粒子经历散射的过程期间，外场随时间的改变足够慢，以保证散射模型的有效性^[121-122]。

2.2 双弛豫近似电子玻尔兹曼方程的定解问题

本节首先讨论不同类型的二维材料在物理模型及处理方式上的异同，写出相应的二维电子玻尔兹曼方程并推导其偏移形式。然后基于固体电子的介观散射图像，给出玻尔兹曼方程散射项 $C(f)$ 的双弛豫近似形式，并提出相应的边界散射模型，由此建立双弛豫近似电子玻尔兹曼方程的定解问题。

2.2.1 典型二维材料的物理模型

为了应用电子玻尔兹曼方程刻画二维材料中的输运过程，需要首先了解实验中采用的各类典型二维材料的物理模型。图 2.2 展示了典型二维材料在实验中的典型外场作用下的物理模型。其中，粗蓝线定义了（等效）二维直通道的边界（confinement）， W 为通道宽度， \mathbf{E} 与 \mathbf{B} 分别为电场强度和磁感应强度的方向， d 为图 2.2(b) 中准二维材料的厚度。

下面将分别针对图 2.2 中的各种情形进行说明。这里约定，法向是指垂直于二维材料所在平面的方向，流向是指外加电场的方向，展向则是指二维材料所在平面内垂直于流向的方向。

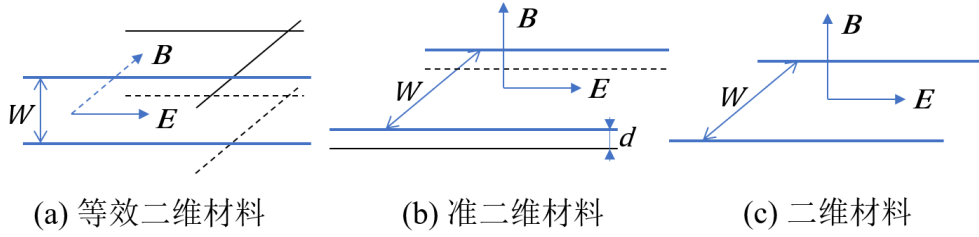


图 2.2 外场作用下典型二维材料的几何示意图

(1) 图 2.2(a) 又称 MacDonalld 几何模型, 其典型代表是金属薄膜, 它曾在 20 世纪 30 到 60 年代被作为模型材料广泛研究^[53,57]。由于实验技术的限制, 其薄膜厚度 W 只能达到微米量级, 与电子经历各类散射的平均自由程相当。系统具有沿展向的平移对称性, 因此材料的稳态输运具有二维特征; 但由于电子仍拥有展向的速度分量, 故这种二维特征仅为宏观层次的现象。本文将这类由于系统具有平移对称性而导致宏观上呈现二维电子输运的三维材料称为等效二维材料。

(2) 图 2.2(b) 的典型代表材料包括 Ga[Al]As 异质结、PdCoO₂ 等, 这些是目前实验研究较多的模型材料^[9,38-39,91]。具体而言, 由于实验材料制备技术的发展, Ga[Al]As 异质结的厚度 d 可以做到纳米量级, 这将导致电子能带衍生出二维子带; 而 PdCoO₂ 材料本身便具有层状的晶体结构, 导致其法向电阻率远远高于层内电阻率。本文将这类由于各维度尺寸差异导致二维子带的三维材料称为准二维材料。

(3) 图 2.2(c) 的典型代表材料包括单层或双层石墨烯等, 这是当前电子水动力学理论与实验研究最为集中的模型材料^[1,3,11-12,14-15,17,19-20,22,40-41,107,110-111]。石墨烯本身即为一种二维材料, 由排列为蜂巢六角形晶格的共面碳原子组成, 在法向仅有原子级的厚度 (忽略屈曲效应)。对于有掺杂的情形, 单层石墨烯的能带结构具有 Dirac 锥的形状, 无法直接应用导带底的能带电子有效质量近似; 而双层石墨烯则具有抛物形式的能带^[14]。因此本文的能带模型仅适用于后者。

目前, 关于电子水动力学的实验研究主要集中在后两种材料, 而第一种材料即金属薄膜内的电子水动力学效应则鲜有报道。考虑到与研究课题的相关性, 本文将着重关注后两种材料在图 2.2 所示的二维直通道内的输运问题。注意到, 准二维材料与二维材料中的电子仅具有面内的速度分量, 并且前者的每一个二维子带上的电子可近似认为处在同一个平面内从而可用面密度 (而非体密度) 刻画, 因此可以在统一的框架下对二者进行描述与分析。

2.2.2 二维电子玻尔兹曼方程

由导带底附近的能带电子有效质量近似 (2-20)，可以得到电子群速度 \mathbf{v} 与波矢 \mathbf{k} 满足 $m^*\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k} \equiv \mathbf{p}$ 。代入式 (2-19)，可得

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = C(f). \quad (2-22)$$

其中，外场作用 $\mathbf{F} = (-e)(\mathbf{E}_{\text{ext}} + \mathbf{E}_{\text{int}} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ ， e 为元电荷绝对值。这里 \mathbf{E}_{ext} 为给定的外加电场， \mathbf{E}_{int} 为由高斯定律确定的内建电场。由此可见，只要给出了方程 (2-22) 中散射项 $C(f)$ 的形式以及图 2.2(b) (或 (c)) 相应的边界条件，便可建立二维电子玻尔兹曼方程的定解问题，这部分内容将在第 2.2.3 节进行叙述。需要注意的是，由于准二维材料 (图 2.2(b)) 和二维材料 (图 2.2(c)) 的电荷分布具有法向的奇异性，因此需要结合具体的实验条件进行较为细致地处理，这部分内容将在第 3.1.3 节进行叙述。

原始形式的电子玻尔兹曼方程 (2-22) 在封闭散射项 $C(f)$ 后可直接用于推导宏观流体力学方程，进而结合相应的边界条件建立宏观尺度的定解问题，这也正是本文第 4.1.1 节工作的出发点。对于介观尺度的研究，通常先从原始方程 (2-22) 出发推导含有源项的偏移形式方程，然后再发展相应的线性响应理论或各类数值算法进行求解。下面，将严格推导偏移形式的二维电子玻尔兹曼方程的完整形式，进而导出用于本文第 3 章数值求解的近似形式。由于本小节的推导过程不依赖于维度，因此结论也适用于三维情形。

写 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) =: f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ ，其中 $f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}}) = 1/[e^{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/(k_B T)} + 1]$ 为局部的 Fermi-Dirac 平衡分布函数 (下同)。将上述分解式代入原始方程，有

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} = C_\delta(\delta f) + S(f_0). \quad (2-23)$$

其中，关于偏移量的散射项 $C_\delta(\delta f)$ 由原始散射项 $C(f)$ 计算得到，由后面第 2.2.3.2 节的讨论可知，对于双弛豫近似形式的 $C(f)$ ，该项在一阶近似下为关于 δf 的线性齐次式； $S(f_0)$ 为方程 (2-23) 的源项，其具体形式可类似式 (2-21) 得到

$$\begin{aligned} S(f_0) &= - \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \right) \\ &= \left(\mathbf{F} - \nabla_{\mathbf{r}} \mu - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T \right) \cdot \mathbf{v} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \\ &\equiv \left((-e)\mathcal{E} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T \right) \cdot \mathbf{v} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \end{aligned} \quad (2-24)$$

这里强调, e 为元电荷绝对值, $\mathcal{E} = \mathbf{E} + \nabla_r \mu / e$ 为单电子电化学势的负梯度, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{ext}} + \mathbf{E}_{\text{int}}$ 为外加电场与内建电场的叠加。结合源项的上述形式, 可将陡变因子 $-(\partial f_0 / \partial \epsilon) > 0$ 从 δf 中分离出来, 即写 $\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) =: -(\partial f_0 / \partial \epsilon) \chi(\mathbf{r}, \mathbf{k})$, 于是

$$\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} = \left(-\frac{\partial^2 f_0}{\partial \epsilon^2} \right) \mathbf{v} \chi + \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{p}}. \quad (2-25)$$

将式 (2-24) 和式 (2-25) 代入方程 (2-23), 并在方程两端同除以 $-(\partial f_0 / \partial \epsilon)$, 即可得到偏移形式的电子玻尔兹曼方程的完整形式

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{p}} = C_\delta(\chi) + S_{\mathcal{E}, T} + S_\epsilon. \quad (2-26)$$

其中, 源项 $S_{\mathcal{E}, T}$ 来自宏观电化学势梯度和温度梯度, 源项 S_ϵ 来自平衡分布关于能量的高阶效应, 二者具体的表达式为

$$\begin{aligned} S_{\mathcal{E}, T} &= \left((-e)\mathcal{E} - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \nabla_r T \right) \cdot \mathbf{v}, \\ S_\epsilon &= (-e)\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \Delta. \end{aligned} \quad (2-27)$$

定义电子以局部化学势为基准的相对能量 $\chi_1 := \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu \simeq \epsilon_{\mathbf{k}} - E_F$ ^① 以及电子能量的 Lagrange 乘数 $\beta \equiv 1/(k_B T)$, 则源项 $S_{\mathcal{E}, T}$ 中的 Δ 可表达为

$$\Delta = \frac{\partial^2 f_0 / \partial \epsilon^2}{\partial f_0 / \partial \epsilon} \chi = -\beta(1 - 2f_0)\chi = -\beta\chi \tanh \frac{\beta\chi_1}{2}. \quad (2-28)$$

对于二维情形, 参考前人的理论或数值研究进行如下简化^[37,61,65]: (1) 只保留宏观不平衡势贡献的源项 $S_{\mathcal{E}, T}$ 中的电场部分, 即只考虑空间分布均匀的化学势与温度场的情形; (2) 忽略平衡分布高阶效应贡献的源项 S_ϵ , 即认为电子相对费米面的能量偏差可以忽略; (3) 在偏移形式方程 (2-26) 的动量偏导项 $\partial \chi / \partial \mathbf{p}$ 中, 忽略 χ 随 ϵ 的变化而只考虑其在费米面上的方向依赖性, 即写 $\mathbf{v} =: v_F(\cos \varphi, \sin \varphi)$ (φ 为速度全局坐标系中的方向角)。此时, 偏移形式的电子玻尔兹曼方程可以简化为

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + v_F \mathbf{e}_\rho \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_\varphi}{p_F} \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} + e v_F \mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_\rho = C_\delta(\chi). \quad (2-29)$$

其中, $\mathbf{e}_\rho = (\cos \varphi, \sin \varphi)$, $\mathbf{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi)$ 。上式即构成了本文第 3 章和第 4.1.2 节工作的出发点。

① 这里忽略了化学势随温度的变化, 因此 $\mu = \mu(T = 0 \text{ K}) \equiv E_F$; 同时由于已假定导带底的能带为各向同性, 因此费米能级 $E_F(\mathbf{k}) \equiv E_F$ 。

2.2.3 体相散射模型与边界散射条件

上一小节提到，为了使原始形式（或偏移形式）的玻尔兹曼方程 (2-22)（或 (2-26)）定解，需要封闭散射项 $C(f)$ ($C_\delta(\chi)$) 并提出合理的边界条件。从介观物理图像的角度考虑，二者分别对应于固体电子经历的体相散射以及边界散射。本节将介绍固体电子经历各类散射机制，归纳各类机制的本质特征，进而给出相应的体相散射模型与边界散射条件。

2.2.3.1 固体电子的介观散射图像

固体材料中的电子在材料内部经历的散射过程称为体相散射，如电子-杂质散射 (electron-impurity scattering)、电子-声子散射 (electron-phonon scattering)、电子-电子散射 (electron-electron scattering) 等。电子的散射行为可以用其特征长度——散射平均自由程 (mean free path) l_i 进行刻画，定义为电子在连续经历两次同种散射之间运动过的平均距离，其中下标 i 用于标记散射类型，如“ei”、“ep”、“ee”等。由于固体材料的输运性质主要由费米面附近的电子决定，因此可以定义电子的平均自由时 (mean free time) 为 $\tau_i = l_i/v_F$ ，它代表电子在连续经历两次同种散射之间的平均时间间隔，有时也称作弛豫时间 (relaxation time)。

电子在未经任何散射前，将保持在某一个动量本征态上不变，此时电子自然也保持在相应的能量本征态上。一旦发生散射，电子的动量本征态将发生改变，但并非所有的散射都会改变电子的能量。由此，可以根据散射是否改变电子的能量本征态而将其分为弹性散射和非弹性散射。前者包括电子-杂质散射、电子-声学声子散射、电子-电子散射等，而后者则主要包括电子-光学声子散射等。一般而言，少量的弹性散射不会破坏电子的相干性，即电子具有一定的相位“记忆”，这种记忆具有时间反演对称性；而非弹性散射或大量的弹性散射将显著改变电子的相位，从而破坏其相干性。可以看到，第 2.2.3.3 节中将要提到的镜面反射边界模型与漫反射边界模型（又称热化边界模型）即分别对应于弹性散射与非弹性散射的范畴。

在处理电子水动力学问题时，需要关注散射是否会改变电子的总准动量，由此可将各类散射区分为保持准动量守恒的散射 (momentum-conserving scattering, 简称动量守恒散射，下标“MC”) 和使得准动量发生改变的散射 (momentum-relaxing scattering, 简称动量弛豫散射，下标“MR”)。前者主要指电子-电子正规散射^①，而后者则包括电子-杂质散射、电子-声子散射、电子-电子倒逆散射等。

^① 这里涉及电子-电子正规散射与倒逆散射的区分，见第 1.1 节脚注。

2.2.3.2 体相散射模型

借鉴 Steinberg 的动量守恒形式单弛豫时间近似模型^[63] 以及 Callaway-BGK 的声子水动力学双弛豫时间近似模型^[117-120], 本文提出二维电子玻尔兹曼方程原始形式 (2-22) 的散射项 $C(f)$ 的如下双弛豫时间近似模型 (简称双弛豫近似)

$$C(f) = C_{\text{MR}}(f) + C_{\text{MC}}(f) := -\frac{f - f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}})}{\tau_{\text{MR}}} - \frac{f - f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{p})}{\tau_{\text{MC}}}. \quad (2-30)$$

其中, $C_{\text{MR}}(f)$ 为动量弛豫散射项, 满足局部电子数密度守恒条件

$$\int C_{\text{MR}}(f) \frac{2 \, d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} = 0, \quad (2-31)$$

而 $C_{\text{MC}}(f)$ 则为动量守恒散射项, 满足局部电子数密度与动量密度守恒条件

$$\int C_{\text{MC}}(f) \frac{2 \, d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} = \int \mathbf{p} C_{\text{MC}}(f) \frac{2 \, d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} = 0. \quad (2-32)$$

这里, 分子 2 为电子自旋的贡献, 分母 2π 为波矢空间的单位格子长度; 积分在费米面 $p = p_{\text{F}}$ 上进行; \mathbf{u} 为电子微团宏观漂移速度; 弛豫时间 τ_{Mi} 的物理意义见第 4.1.2 节叙述。定义局部电子数密度 $n(\mathbf{r}, t)$ 与电子微团动量密度 $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ 如下

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &:= \int f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{2 \, d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \\ \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &:= \int \mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{2 \, d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \end{aligned} \quad (2-33)$$

则将式 (2-32) 的动量密度守恒条件 Taylor 展开至一阶可得 (见第 4.1.1 节)

$$\mathbf{P} = m^* n \mathbf{u}. \quad (2-34)$$

此即 \mathbf{u} 的定义式且表明了其物理含义。式 (2-30) 将用于第 4.1.1 节的理论推导。

利用 χ 的定义式, 可从上述 $C(f)$ 的模型 (2-30) 中推得偏移形式方程 (2-26) 的散射项^[24,44-45,65] (已将动量守恒散射项 Taylor 展开至一阶)

$$C_{\delta}(\chi) = C_{\delta, \text{MR}}(\chi) + C_{\delta, \text{MC}}(\chi) := -\frac{\chi - P_0[\chi]}{\tau_{\text{MR}}} - \frac{\chi - P_{0, \pm 1}[\chi]}{\tau_{\text{MC}}}. \quad (2-35)$$

其中 P_0 和 $P_{0, \pm 1}$ 分别为将函数 $\chi(\mathbf{r}, \varphi)$ 向函数空间 $\{1\}$ 与 $\{1, \cos \varphi, \sin \varphi\}$ 投影的算子 (定义式见 (3-4))。注意, 由局部电子数密度守恒条件 (2-31) 和 (2-32) 本应给出 $P_0[\chi] \equiv 0$, 这里放松了这一条件, 即允许有局部电子数密度净偏差 n_{δ} (定义式见 (3-13))。式 (2-35) 将用于第 3 章的数值计算以及第 4.1.2 节的理论推导。

2.2.3.3 边界散射模型

固体中的电子在边界处的反射主要包括两类基本模型，即镜面反射模型（specular boundary）与漫反射模型（diffusive boundary）。前者是指反射前后电子的切向速度分量保持不变，而法向速度分量反向，即服从几何光学中的反射定律；而后者则是指边界某处的所有入射电子，反射时以同一速度大小沿各个方向均匀出射，又称为热化反射。

对于实际的固体边界而言，一般兼具上述两类边界散射模型的性质，Fuchs模型能够较为准确地描述这类实际情况^[52]。具体而言，Fuchs认为在边界某处所有的入射电子中，有比例为 p_s 的电子将经历镜面反射，而其余的电子将以漫反射形式出射。其中，常数 p_s 称为电子的边界镜面反射系数。此后的Soffer散射模型考虑了电子的波动性对边界散射的影响，得到镜面反射系数与切向角 φ_i 间的依赖关系^[59]

$$p_s(\varphi_i) = e^{-(\alpha_{bd} \sin \varphi_i)^2}, \quad \alpha_{bd} = \frac{4\pi\delta_{bd}}{\lambda_F}.$$

其中， δ_{bd} 为壁面的方均根粗糙度， $\lambda_F = 2\pi/k_F$ 为电子的费米波长。

下面针对偏移形式的方程(2-26)，引入相应的边界散射模型的数学描述^[65]。设 \mathbf{e}_n 与 \mathbf{e}_t 分别为边界外法向和切向的单位矢量，且 $(\mathbf{e}_t, \mathbf{e}_n)$ 构成平面右手系。不妨假定 \mathbf{e}_t 与 x 轴同向， θ 为局部坐标系 $(\mathbf{e}_t, \mathbf{e}_n)$ 的方向角，则任一边界散射模型均可表示为

$$\chi(\mathbf{r}_0, \theta) = \int_0^\pi d\theta' r(\theta, \theta') \chi(\mathbf{r}_0, \theta'). \quad (2-36)$$

其中， $r(\theta, \theta')$ 称为散射核，代表由角度 $\theta' \in (0, \pi)$ 入射的电子从角度 $\theta \in (-\pi, 0)$ 出射的概率。由边界散射前后局部电子数守恒，可得散射核需满足的必要条件

$$\int_{-\pi}^0 r(\theta, \theta') d\theta = 1, \quad a.e. \quad (2-37)$$

由此，常镜面反射系数Fuchs边界与变镜面反射系数Fuchs-Soffer边界的散射核可分别写为

$$r_{\text{Fuchs}} = p_s \delta(\theta + \theta') + \frac{1 - p_s}{\pi}, \quad r_{\text{F-S}} = p_s(\theta') \delta(\theta + \theta') + \frac{1 - p_s(\theta')}{\pi}. \quad (2-38)$$

2.3 本章小结

本章基于固体电子的微观量子理论，引入了介观尺度上描述固体电子输运的玻尔兹曼方程。然后针对实际低维材料的电子输运问题，给出了玻尔兹曼方法的具体数学表述，即双弛豫近似电子玻尔兹曼方程的定解问题，为本文的后续工作奠定了介观层次的理论基础。

前半部分从能带理论与朗道费米液体理论出发，考察了电子之间的相互作用即库仑长程相互作用与自旋交换关联效应对其能带特征的影响，表明在 Hartree-Fock 基态近似的能带理论框架下，当由于准粒子之间的相互作用对局部电势的影响导致的屏蔽效应较强时，相互作用电子系统可以用一个无相互作用的准电子系统叠加上一个平均场进行描述。由此说明了单电子近似的合理性，因而介观散射图像的基础即散射的局域性得以成立，并且可以由此建立电子波包运动的准经典描述，并写出电子满足的玻尔兹曼方程。在各向同性能带有效质量近似下，其形式与经典粒子服从的玻尔兹曼方程类似。

后半部分从典型二维材料的物理模型出发，建立了适用于描述二维材料电子输运的介观玻尔兹曼方法。首先严格推导了偏移形式的二维电子玻尔兹曼方程，并在忽略温度与化学势梯度的影响、平衡分布的高阶效应以及偏移量沿能量方向的分布的条件下，导出了其简化形式。然后介绍了固体电子的介观散射图像，通过归纳各类散射机制的特征，分别提出了针对原始形式与偏移形式方程的双弛豫时间近似体相散射模型，并给出了 Fuchs 型与 Fuchs-Soffer 型边界散射模型。由此，建立了二维电子玻尔兹曼方程的定解问题，为后面章节的数值工作与理论研究奠定了基础。

第 3 章 电子玻尔兹曼方程的离散坐标法

本章将建立数值求解二维电子玻尔兹曼方程的离散坐标算法。首先叙述离散坐标法的理论基础与关键步骤，即玻尔兹曼方程的无量纲化、算法思想与坐标离散、内建电场计算与宏观量统计，由此给出离散坐标算法的基本流程。然后通过求解弹道-扩散效应的算例，验证离散坐标算法的正确性。作为离散坐标算法的应用，最后将研究二维电子流动的磁阻效应。

3.1 理论基础与算法描述

3.1.1 电子玻尔兹曼方程的无量纲化

本章的数值计算采用无限长二维直通道模型（如图 2.2(c) 所示），以通道下边界上任一点 O 为原点，沿流向和展向为 x 轴和 y 轴建立右手的平面直角坐标系 Oxy 。由于系统具有沿流向的对称性，因此 $\chi(\mathbf{r}, \varphi)$ 可简化为 $\chi(y, \varphi)$ 。为数值计算的方便，利用四个基本变量即元电荷绝对值 e 、费米能级 E_F 、费米速度 v_F 以及二维直通道宽度 W ，对偏移形式的电子玻尔兹曼方程 (2-29) 进行无量纲化（仍以原变量的符号标记相应的无量纲量，仅限第 3.1.1 节和第 3.1.2 节）

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{e}_\rho \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{r}} - \alpha_{\text{mod}}(\mathbf{E} + \mathbf{e}_\rho \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_\rho = C_\delta(\chi). \quad (3-1)$$

体相散射 $C_\delta(\chi)$ 的形式为

$$C_\delta(\chi) = -\frac{\chi(\mathbf{r}, \varphi) - P_0[\chi]}{l_{\text{eff}}} + \frac{1}{l_{\text{MC}}} P_{\pm 1}[\chi]. \quad (3-2)$$

边界散射采用 Fuchs 模型（ p_s 为常数或取为 Soffer 形式 (2-38)）

$$\begin{cases} \chi(0, \varphi) = p_s(\varphi)\chi(0, 2\pi - \varphi) + \int_{\pi}^{2\pi} \frac{d\varphi'}{\pi} [1 - p_s(\varphi')]\chi(0, \varphi'), \varphi \in (0, \pi), \\ \chi(1, \varphi) = p_s(\varphi)\chi(1, 2\pi - \varphi) + \int_0^{\pi} \frac{d\varphi'}{\pi} [1 - p_s(\varphi')]\chi(1, \varphi'), \varphi \in (\pi, 2\pi). \end{cases} \quad (3-3)$$

这里, $\alpha_{\text{mod}} = E_{\text{F}}/(m^* v_{\text{F}}^2) \equiv 1/2$ 为无量纲系数, $l_{\text{eff}} = (l_{\text{MR}}^{-1} + l_{\text{MC}}^{-1})^{-1}$ 为无量纲的有效散射平均自由程, 投影算子 $P_0[\chi]$ 和 $P_{\pm 1}[\chi]$ 的具体表达式为

$$P_0[\chi] = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \chi, \quad P_1[\chi] = \cos \varphi \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\pi} \chi \cos \varphi, \quad P_{-1}[\chi] = \sin \varphi \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\pi} \chi \sin \varphi. \quad (3-4)$$

观察配有体散射项 (3-2) 与边界条件 (3-3) 的偏移形式电子玻尔兹曼方程 (3-1) 的定解问题, 由于源项 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_\rho$ 的存在使得该问题不存在零解。而反观配有体散射项 (2-30) 的原始形式电子玻尔兹曼方程 (2-22), 如利用局部电子数密度守恒条件 (2-31) 和 (2-32), 则容易推出 $C(f)$ 为关于 f 的线性函数; 即使放松这一守恒条件, 即利用 (2-35) 从偏移形式散射项 $C_\delta(\chi)$ 反推 $C(f)$, 不难得到 $C(f)$ 同样为关于 f 的线性函数。再结合由 (3-3) 反推出的关于 f 为线性的边界条件可知, 原始形式的电子玻尔兹曼方程允许零解。由于这类齐次方程在迭代求解时可能引发程序收敛到零解, 因此对于数值格式的耗散特性以及迭代初值条件的选取要求较高, 尤其是在理论精确解未知的条件下初值的选择更为困难。由此可见, 利用含有源项的偏移形式电子玻尔兹曼方程进行数值计算在防止数值解分叉上具有更为优良的性质, 有利于求解电子输运对外场的响应特征。

3.1.2 算法基本思想与坐标离散

3.1.2.1 离散坐标法的基本思路

玻尔兹曼方程从数学上讲属于微分积分方程的一种, 由于其体散射项包含对角度坐标的积分项, 因此需要对空间坐标与角度坐标同时进行离散, 这正是所谓离散坐标算法 (Discrete Ordinate Method, 简称 DOM) 的基本策略。与声子玻尔兹曼方程相比^[129], 电子玻尔兹曼方程 (3-1) 中增加了一项角度偏导项。因此, 这时离散的角度坐标不但将用于数值积分, 还将用于数值微分。

由此可见, 应用离散坐标法求解电子玻尔兹曼方程面临两个紧密相关的问题, 即空间和角度坐标的离散与数值微分积分方法的选择。

坐标离散 由于空间坐标只用于数值微分, 因此可以进行均匀离散; 考虑到数值积分的精度与效率, 角度坐标可采用均匀离散或 Gauss 点离散两种方式, 分别对应于矩形积分与 Gauss 积分。

数值微分 测试表明, 对角度偏导项直接采用中心差分无法保证系数较大时格式的收敛性。因此, 这里采用空间偏导项与角度偏导项的“双迎风”格式, 保证格式的稳定型与收敛性。

本文主要关注二维电子水动力学输运的稳态情形。对于稳态方程，常见方法包括显式迭代、隐式迭代、化为非定常方程进行时间推进等方法。通过对 Callaway-BGK 双弛豫近似下电子玻尔兹曼方程 (3-1) 形式的考察，可利用方程散射项 $C_\delta(\chi)$ 的无量纲弛豫时间作为迎风格式中的等效时间步长进行迭代（或称“伪时间推进”）。容易写出无量纲方程 (3-1) 如下的稳态形式

$$\sin \varphi \frac{\partial \chi}{\partial y} + F_{\text{ext}} \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_\rho = C_\delta(\chi). \quad (3-5)$$

其中， $F_{\text{ext}} = -\alpha_{\text{mod}}(\mathbf{E} + \mathbf{e}_\rho \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{e}_\rho$ ，并假定外场均匀定常。

3.1.2.2 方程与边界条件的离散格式

对求解域 $[0, 1]_y \times [0, 2\pi]_\varphi$ 的离散如下：对于空间坐标，采用均匀网格 $[y_i, y_{i+1}]$ ($i = 1, \dots, N_y$)，其中 $y_i = (i-1)/N_y$ ($i = 1, \dots, N_y+1$) 为网格点， N_y 为网格数。对于角度坐标，有均匀网格点或 Gauss 点两种离散方式。测试表明，二者在数值微分上的精度类似，考虑到数值积分时后者的精度更高，因此将采用 Gauss 点进行角度离散。另外，由于边界散射项 (3-3) 中的角度坐标被分为了两个子区间 $([0, \pi], [\pi, 2\pi])$ ，因此这里分别对其进行离散，离散格点记为 φ_j ($j = 1, \dots, N_\varphi$)，其中 $N_\varphi =: 2N_{\varphi_0}$ ， N_{φ_0} 为每个子区间的积分区间数。

对于 $\partial \chi / \partial y$ 项，可以采用迎风格式离散为

$$\sin \varphi \frac{\partial \chi}{\partial y} \Big|_{\text{ctr}} \simeq: \frac{|\sin \varphi|}{dy} \left(\chi_{\text{ctr}} + \frac{\text{sign}(\sin \varphi) - 1}{2} \chi_{\text{up}} - \frac{\text{sign}(\sin \varphi) + 1}{2} \chi_{\text{down}} \right). \quad (3-6)$$

其中下角标 ctr 代表格点 (i, j) ，up 代表 $(i+1, j)$ ，down 代表 $(i-1, j)$ ($i = 2, \dots, N_y$)。

对于 $\partial \chi / \partial \varphi$ 项，可类似地离散为

$$F_{\text{ext}} \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} \Big|_{\text{ctr}} \simeq: |F_{\text{ext}}| \left(\frac{\text{sign}(F_{\text{ext}}) - 1}{2} \frac{\chi_{\text{a.w.}} - \chi_{\text{ctr}}}{\Delta_+} + \frac{\text{sign}(F_{\text{ext}}) + 1}{2} \frac{\chi_{\text{ctr}} - \chi_{\text{c.w.}}}{\Delta_-} \right). \quad (3-7)$$

其中下角标 ctr 代表格点 (i, j) ，a.w. 代表 $(i, j+1)$ ，c.w. 代表 $(i, j-1)$ ($j = 1, \dots, N_\varphi$)；网格长度 Δ_\pm 定义为 $\Delta_\pm = \pm(\varphi_{j\pm 1} - \varphi_j)$ 。注意，这里格式是一阶的，截断误差为 $\mathcal{O}(\Delta^2)$ ，其中 $\Delta := \max_j \{|\varphi_{j+1} - \varphi_j|\}$ 。

对于投影算子 $P_0[\chi]$ 和 $P_{0,\pm 1}[\chi]$ （式 (3-4)）与边界散射条件（式 (3-3)），其数值积分较为直接

$$I_F = \int_0^{2\pi} F(\varphi) d\varphi =: \int_0^\pi F(\varphi) d\varphi + \int_\pi^{2\pi} F(\varphi) d\varphi. \quad (3-8)$$

右端两项可分别离散如下

$$\int_0^{\pi} F(\varphi) d\varphi =: \frac{\pi}{2} \int_{-1}^1 \tilde{F}(\tilde{\varphi}) d\tilde{\varphi} \simeq: \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^{N_{\varphi_0}} W_k \tilde{F}(\tilde{\varphi}_k) =: \sum_{k=1}^{N_{\varphi_0}} \tilde{W}_k \tilde{F}(\tilde{\varphi}_k),$$

这里 $\varphi =: (\pi/2)\tilde{\varphi} + \pi/2$, $\tilde{W}_k =: (\pi/2)W_k$; 以及

$$\int_{\pi}^{2\pi} F(\varphi) d\varphi =: \frac{\pi}{2} \int_{-1}^1 \bar{F}(\bar{\varphi}) d\bar{\varphi} \simeq: \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^{N_{\varphi_0}} \bar{W}_k \bar{F}(\bar{\varphi}_{k+N_{\varphi_0}}) =: \sum_{k=1}^{N_{\varphi_0}} \bar{W}_k \bar{F}(\bar{\varphi}_{k+N_{\varphi_0}}),$$

这里 $\varphi =: (\pi/2)\bar{\varphi} + 3\pi/2$ 及 $\bar{W}_k =: (\pi/2)W_k$ 。 W_k 是 N_{φ_0} 点 Gauss 积分的权重。

至此, 电子玻尔兹曼方程 (3-5) 的数值格式可总结如下:

$$\chi_{\text{ctr}}^{\text{new}} = \frac{1}{1 + \alpha_n + \beta_n} \left(-I_{\alpha_n} - I_{\beta_n} - l_{\text{eff}} \mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_{\rho} + I_{\text{scat}} \right). \quad (3-9)$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha_n &:= \frac{l_{\text{eff}} |\sin \varphi|}{dy}, \\ \beta_n &:= l_{\text{eff}} |F_{\text{ext}}| \left(-\frac{\text{sign}(F_{\text{ext}}) - 1}{2} \frac{1}{\Delta_+} + \frac{\text{sign}(F_{\text{ext}}) + 1}{2} \frac{1}{\Delta_-} \right), \\ I_{\alpha_n} &:= \alpha_n \left(\frac{\text{sign}(\sin \varphi) - 1}{2} \chi_{\text{up}} - \frac{\text{sign}(\sin \varphi) + 1}{2} \chi_{\text{down}} \right), \\ I_{\beta_n} &:= \beta_n \left(\frac{\text{sign}(F_{\text{ext}}) - 1}{2} \chi_{\text{a.w.}} - \frac{\text{sign}(F_{\text{ext}}) + 1}{2} \chi_{\text{c.w.}} \right), \\ I_{\text{scat}} &:= l_{\text{eff}} \left(\frac{1}{l_{\text{eff}}} P_0[\chi] + \frac{1}{l_{\text{MC}}} P_{\pm 1}[\chi] \right). \end{aligned}$$

其中的数值积分格式采用式 (3-8)。关于边界散射条件, χ 在 $y = 0, \varphi \in (0, \pi)$ 以及 $y = 1, \varphi \in (\pi, 2\pi)$ 处的值可利用边界散射条件 (3-3) 获得; 其在 $y = 0, \varphi \in (\pi, 2\pi)$ 以及 $y = 1, \varphi \in (0, \pi)$ 处的值可应用玻尔兹曼方程迭代公式 (3-9) 获得。

对于上述数值格式的稳定性, 可以看到迭代参数 α_n, β_n 充当了时间推进中迎风格式的 CFL 数; 而无量纲 l_{eff} 则相当于相应的时间步长, 即算法以接近系统最小平均散射自由时的时间间隔作为时间步长进行迭代。 l_{eff} 越小, 迭代的速度越慢, 但数值格式越稳定。

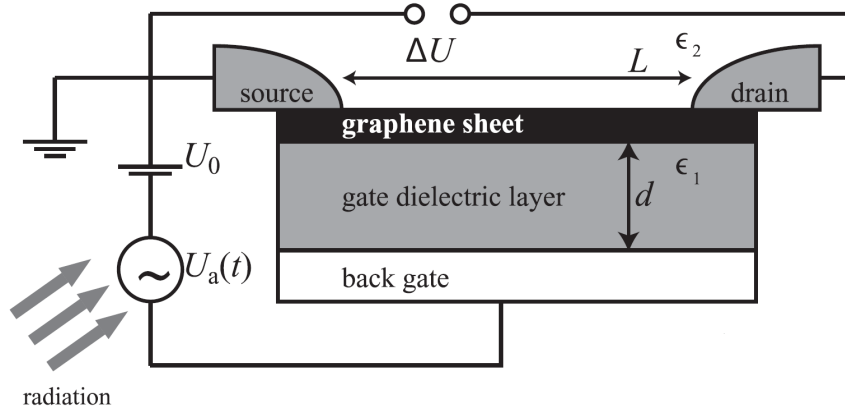


图 3.1 用于光信号检测的单层石墨烯场效应晶体管示意图^[19]

3.1.3 内建电场计算与宏观量统计

3.1.3.1 内建电场的计算与电中性条件

对于二维材料而言，电子数的体密度具有法向的奇异性，具体而言可以表示为 $n(\mathbf{r}, t)\delta(z)$ ，其中 $n(\mathbf{r}, t)$ 为电子数的面密度（定义式见 (2-33)）。相关典型实验装置的模型如图 3.1 所示，二维材料与背栅电源间由绝对介电常数为 ϵ_1 的介电晶体填充，二维材料上方介质的绝对介电常数为 ϵ_2 。通过 Fourier 变换求解三维空间中的 Poisson 方程，并在 $kd_{\epsilon_1} \rightarrow 0$ 的极限下可得（ k 为电子的波矢大小）

$$n(\mathbf{r}, t) = \frac{C}{e}U(\mathbf{r}, t). \quad (3-10)$$

其中， $C = \epsilon_1/(4\pi d_{\epsilon_1})$ 为单位面积上的电容， $U(\mathbf{r}, t) = U_0 - \phi(\mathbf{r}, t)$ （ U_0 为背栅电压， $\phi(\mathbf{r}, t)$ 为二维材料平面内电势）。上述极限近似又称缓变沟道近似（Gradual Channel Approximation，简称 GCA），是实验上获得二维材料电子数密度分布的一种常用方法^[19]，这里利用该近似来反求内建电场（其中偏差电子数面密度 n_δ 的定义见式 (3-13)）

$$E_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = -\nabla_r \phi(\mathbf{r}, t) = \nabla_r U(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi ed_{\epsilon_1}}{\epsilon_1} \nabla_r n(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{4\pi ed_{\epsilon_1}}{\epsilon_1} \nabla_r n_\delta(\mathbf{r}, t). \quad (3-11)$$

另外，由于数值求解玻尔兹曼方程的过程中可能出现累积误差，因此在实际计算中还要施加如下的电中性条件对总电荷量作实时数值修正

$$\int_0^w n_\delta(y) dy = 0. \quad (3-12)$$

3.1.3.2 宏观量的统计表达式

一旦由数值计算获得了 $\chi(y, \varphi)$ 的分布, 即可依次统计出相应的宏观量^[44,65]

$$\begin{aligned} n_\delta(\mathbf{r}, t) &:= \int (f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}}, t)) \frac{2 d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} = DP_0[\chi], \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &:= \int (-e)\mathbf{v}(f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}}, t)) \frac{2 d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} = (-e) \frac{Dv_F}{2} (P_1[\chi], P_{-1}[\chi])^T. \end{aligned} \quad (3-13)$$

其中, $n_\delta(\mathbf{r}, t)$ 为局部的电子数面密度相对平均值 \bar{n} 的偏移量, $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ 为局部的电流面密度; $D = m/(\pi\hbar^2)$ 为计入了自旋贡献的二维电子态密度, $P_0[\chi]$ 、 $P_1[\chi]$ 与 $P_{-1}[\chi]$ 分别为将函数 $\chi(y, \varphi)$ 向子空间 $\{1\}$ 、 $\{\cos \varphi\}$ 和 $\{\sin \varphi\}$ 投影的算子。

结合定义式 (2-34) 和式 (2-33)、(3-13), 可得到宏观漂移速度 \mathbf{u} 的表达式为

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{m^*n(\mathbf{r}, t)} = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{(-e)n(\mathbf{r}, t)} = v_F \frac{(P_1[\chi/E_F], P_{-1}[\chi/E_F])^T}{2}. \quad (3-14)$$

其中已经利用了 $\tilde{f}_0(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}})$ 的波矢空间各向同性条件, 电子数面密度 $n \simeq \bar{n} = D\mu(\mathbf{r}, t) \simeq DE_F$ 的表达式以及 $P_{0,\pm 1}[\chi] \ll E_F$ 的能量偏差条件。

对于二维材料的流向电阻率 ρ_{xx} 和 Hall 电阻率 ρ_{xy} , 定义并计算如下

$$\begin{aligned} \rho_{2,xx} &:= R_{2,xx} \frac{W}{l_x} = \frac{E_x l_x}{j_x W} \frac{W}{l_x} = \frac{E_x}{j_x}, \\ \rho_{2,xy} &:= \bar{R}_{2,xy} \frac{W}{l_y} = \frac{1}{j_x W} \int_0^W E_y(y) dy = \rho_{2,xx} \frac{\bar{E}_y}{E_x}. \end{aligned} \quad (3-15)$$

其中, 二维材料的电阻率 $\rho_{2,xi}$ 的单位为 Ω , 而其电阻 $R_{2,xi}$ 的单位仍为 Ω ; $l_y \equiv W$ 为展向特征长度, $\bar{E}_y = (1/W) \int_0^W E_y(y) dy$ 为展向内建电场平均值。

3.1.4 离散坐标法的流程简述

综合前文对理论基础与关键步骤的叙述, 可总结出离散坐标法的流程如下:

1. 设置算例的实验条件, 初始化偏移函数 $\chi(y, \varphi)$;
2. 利用式 (3-13) 由 χ^n 计算迭代前宏观变量, 并利用 GCA 近似 (3-10) 得到当前内建电场 \mathbf{E}_{int} ;
3. 利用迭代公式 (3-9) 和边界条件 (3-3) 进行迭代, 得到 χ^{n+1} ;
4. 利用式 (3-13) 由 χ^{n+1} 计算迭代后宏观变量, 若其残差达到了给定精度, 继续; 否则返回第 2 步;
5. 利用式 (3-13)、(3-14)、(3-15) 等计算宏观输运参数并输出, 结束。

3.2 离散坐标算法的数值验证

本节将基于弹道-扩散效应的研究，通过离散坐标法数值解与文献理论解的对比^[44]，验证离散坐标算法的正确性，为后续的应用奠定基础。

3.2.1 弹道-扩散效应简介

弹道-扩散效应是指材料边界在粒子运输的过程中起重要作用时产生的现象，往往发生在材料在某些方向的尺寸小到与粒子运动的平均自由程相当条件下。此时，粒子的宏观运输规律不再满足体材料中的扩散定律，如电子运输的欧姆定律、声子^①运输的傅里叶定律等，因此需要采用介观尺度的玻尔兹曼方程进行精确描述^[57,130]。

电子运输的弹道-扩散效应实际上正是第 1 章中提到的 Knudsen-Gurzhi 效应，具体是指在材料尺寸与体相电子散射平均自由程在量级上相当时，材料中的电子在外加电场的驱动下，表现出微观机制与传统欧姆定律不同的运输特性。从物理本质上来讲，电子运输的弹道-扩散效应的产生是三类效应相互竞争制衡的结果，即弹道效应、欧姆扩散效应、粘性扩散效应；当某种效应占据主导地位时，称电子运输处于相应的相区。各相区的基本特征见表 3.1。

表 3.1 电子运输的弹道-扩散效应的典型相区及其特征

相区类型	弹道相区	欧姆扩散相区	粘性扩散相区
主导散射	电子-边界散射	电子-声子/缺陷/杂质散射	电子-电子正规散射
特征尺度	W	l_{MR}	l_{MC}
典型特征	非平衡、非局域	经典热耗散	粘性

电子运输的弹道效应即 Knudsen 效应，此时由于材料尺寸极小，电子与边界的散射将占据主导，材料内部的电子处于强烈的非平衡状态，运输呈现出典型的非局域特征，即某一点处的运输性质不仅与当地的物理量有关，还与附近位置的物理量有关；欧姆扩散效应是高温区 Gurzhi 效应的来源，也是室温下晶体内部导电的经典热耗散机制，此时电子与声子或缺陷/杂质的散射占据主导，电子在这一过程中将损失能量，并将这部分能量通过声子/缺陷/杂质传递给晶格并最终热耗散的形式释放到环境中；粘性扩散效应是低温区 Gurzhi 效应的来源，

① 所谓声子是一种准粒子，代表了晶体中由于格点集体振动带来的能量激发，每一种声子代表了晶格格点的一种集体振动模态。

也是目前的研究热点之一，此时电子之间的正规散射占据主导，其总动量在这一过程中保持守恒，从而将在宏观上表现出与经典粘性流体类似的粘性行为。

3.2.2 算例的问题描述

算例选自 Molenkamp 与 de Jong 在 1995 年发表的里程碑式论文^[44]。文章在 Ga[Al]As 异质结内二维电子气的切线电阻率测量实验的基础上，推导了偏移形式的二维电子玻尔兹曼方程 (2-29) 的理论解，并且计算结果与实验曲线定性符合得很好。文章建立的介观理论模型能够用于精细地考察 l_{MC} 、 l_{MR} 、 W 等尺度参数对宏观输运性质即电阻率的影响，同时也能够给出各输运相区内的流动速度剖面，从而可以更准确地把握各类效应的微观特征。因此，这里选取其理论解与本文离散坐标算法的数值解进行对比验证。

表 3.2 弹道-扩散效应算例的参数选取及定解条件

算例编号	算例 (1)	算例 (2)	算例 (3)	算例 (4)
边界模型 *	$p_s = 0.0$	p_s 为变量	α_{bd} 为变量	$\alpha_{bd} = 0.7$
散射性质	l_{MR} 为变量	$l_{MR} = 5W$	$l_{MR} = 5.5W$	$l_{MR} = 5W$
	l_{MC} 为基本变量			
材料参数	$m^* = 0.067m$, $v_F \approx 2 \times 10^5$ m/s, $E_F \sim 0.1$ eV			
外电磁场 **	$E = 0.1$ V/m, $B = 0$ T			

*: p_s 形式的条件对应 Fuchs 模型， α_{bd} 形式的条件对应 Fuchs-Soffer 模型。

**：已验证电阻率与电场强度无关，这源于偏移形式方程 (2-29) 的线性响应特征。

这里选取了该文献中的四组算例用于算法的验证，各算例的参数选取及相应的定解条件如表 3.2 所示。图中的材料参数取自 Ga[Al]As^[126]；这里注意，由于文献与本文的离散坐标法均采用无量纲量进行求解，因此材料参数的选取不会对结果有本质的影响。为方便后续讨论，这里参考文献的处理方法，引入电子的有效平均自由程 l_{eff}^M 作为偏移量 χ 的特征尺度（这里上标 M 用以与式 (3-3) 进行区分）^[44]

$$\chi(y, \varphi) =: (-e)E \cos \varphi l_{eff}^M(y, \varphi).$$

定义 $\tilde{l}_{eff}^M(y) := P_1[\cos \varphi l_{eff}^M(y, \varphi)] / \cos \varphi$ （算子的定义见式 (3-13) 后的讨论），则

$$\mathbf{u}(y) = \frac{(-e)E}{m^* v_F} \tilde{l}_{eff}^M(y),$$

进而由 $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ 的电导率定义，可以得到

$$\sigma = \frac{ne^2}{mv_F} \int_0^W \frac{dy}{W} \tilde{l}_{\text{eff}}^M(y) \equiv \frac{ne^2}{mv_F} L_{\text{eff}}^M$$

其中 $L_{\text{eff}}^M := \tilde{l}_{\text{eff}}^M(y) \equiv (1/W) \int_0^W dy \tilde{l}_{\text{eff}}^M(y)$ 。由此可见， $\tilde{l}_{\text{eff}}^M(y)$ 和 L_{eff}^M 分别就是量纲为 [L] 的速度剖面 and 电导率，本节将直接应用这两个有效平均自由程的概念进行分析讨论。

3.2.3 算例结果与分析

图 3.2 ~ 3.5 表明，数值解与理论解符合得很好，从而验证了程序的正确性。下面对各曲线反映的物理机理进行逐一的讨论。

3.2.3.1 动量弛豫散射平均自由程对电导率曲线的影响

由图 3.2 可知，只有当体相弛豫散射的作用可以忽略不计时，才能发生由弹道相区向粘性扩散相区的转变，此时与经典流体由 Knudsen 流向 Poiseuille 流转变的机理类似；否则就会处于欧姆相区，此时电导率几乎不随电子-电子正规散射平均自由程变化。详细的机理分析可参考图 1.7 的说明。

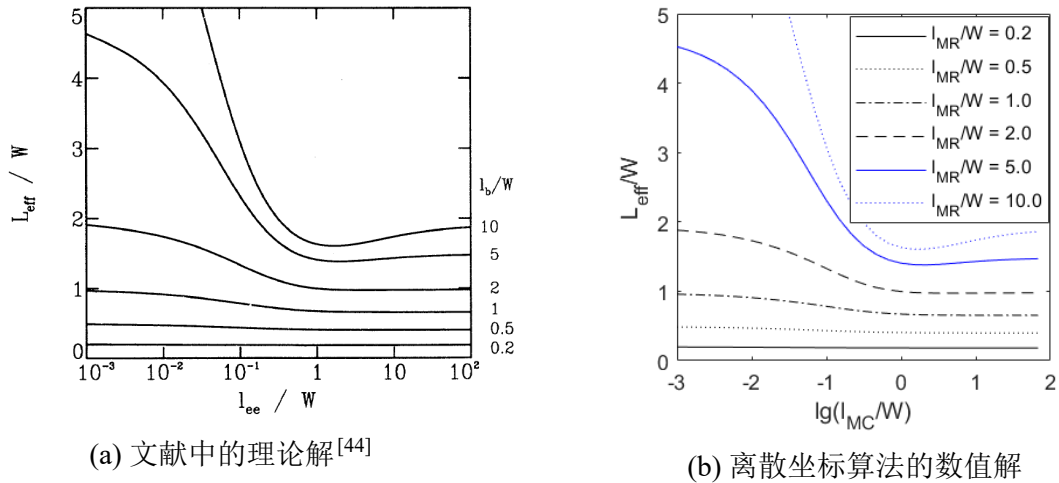
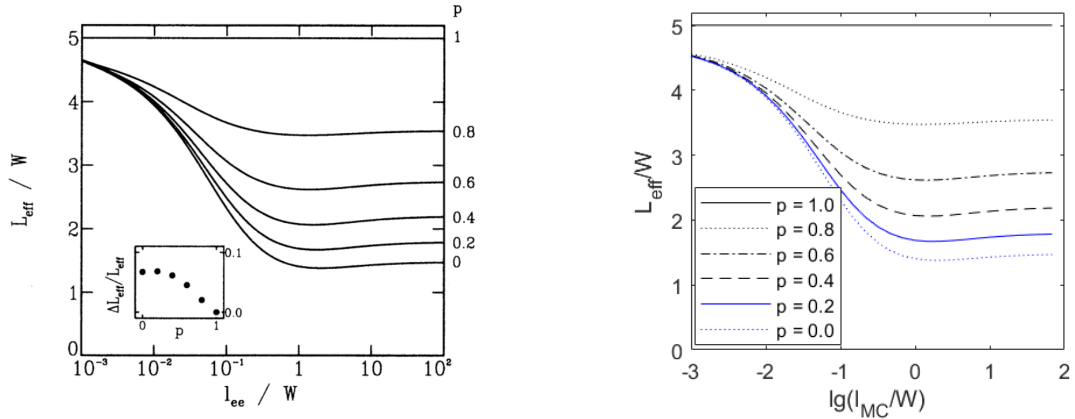


图 3.2 弛豫散射自由程 l_{MR} 的不同取值对电导率曲线的影响

3.2.3.2 Fuchs 模型镜面反射系数对电导率曲线的影响

由图 3.3 可知，只有边界散射具有一定的漫反射成分（或称扩散性质）时，才有可能出现电导率随电子-电子正规散射平均自由程的变化。这是容易理解的，

因为对于完全的镜面反射边界，边界处无法形成部分的局域平衡态，也就无法为电子微团提供阻力，从而无法对电子的输运施加任何有效的影响。



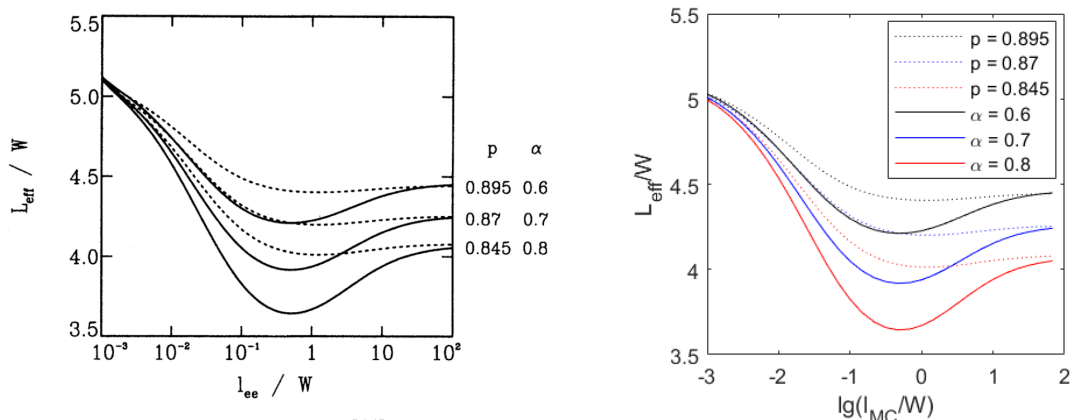
(a) 文献中的理论解^[44]

(b) 离散坐标算法的数值解

图 3.3 Fuchs 模型下镜面反射系数 p_s 的不同取值对电导率曲线的影响

3.2.3.3 Fuchs-Soffer 模型边界散射参数对电导率曲线的影响

由图 3.4 可知，应用 Fuchs-Soffer 模型能够呈现出更明显的 Knudsen 效应和 Gurzhi 效应。这时因为在该模型中，掠入射的电子的镜面反射系数相对更大，即边界对电子运动的表现阻力变小，因此只有要求 Fuchs-Soffer 模型下边界处的大入射角散射具有更强的扩散性，才能保证两类模型能够在弹道相区内获得相同的电导率。由此可见，更强的边界扩散性是 Fuchs-Soffer 模型能够呈现出更明显的 Knudsen 效应的本质原因。



(a) 文献中的理论解^[44]

(b) 离散坐标算法的数值解

图 3.4 Fuchs-Soffer 模型下边界散射参数 α_{bd} 的不同取值对电导率曲线的影响

3.2.3.4 动量守恒散射平均自由程对速度剖面特征的影响

图 3.5 展示了不同输运相区的速度剖面。由图可见，弹道相区呈现流动剖面均匀、边界有明显滑移的特征，这是电子与边界的散射占据主导造成的，且此时边界处以镜面反射为主，无法通过漫反射带来的局部热平衡为电子流体提供足够的阻力；粘性扩散相区的流动类似于有滑移边界的抛物线形状的 Poiseuille 流，这是由于此时电子之间的正规散射占据主导，由此导致的频繁的布朗无规运动使得电子在宏观上表现出粘性特征；欧姆相区呈现出中部均匀、边界无滑移的特征，整体趋于体相电阻率，这是由于电子与声子等之间的体相动量弛豫散射占据主导，提供了沿空间均匀分布的阻力，这时边界处的漫反射也有所增强。

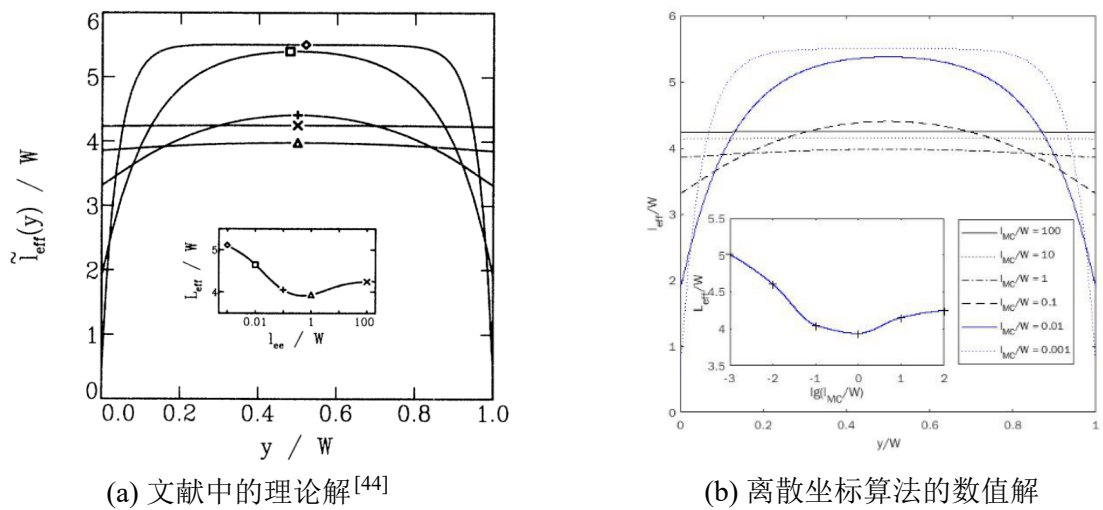


图 3.5 守恒散射自由程 l_{MC} 的不同取值对速度剖面特征的影响

3.3 离散坐标算法的应用

由上一节对弹道-扩散效应的模拟可以看到，离散坐标法直接基于描述介观尺度粒子输运的玻尔兹曼方程，因此能够精细地捕捉到各类因素对其输运行为的影响。与此同时，作为一种典型的数值算法，离散坐标法相比于传统的理论方法还具备定量化的优势。例如，对于中等强度外场的情形，传统方法中的微扰理论或渐近解法都将失效；而对于输运的强非平衡效应，传统方法亦难以对其进行刻画。本节将应用离散坐标算法研究弹道相区以及粘性扩散相区的磁阻效应，从而展现离散坐标法的定量优势。

3.3.1 磁阻效应简介

如引言第 1.1 节所述，磁阻效应是指外加磁场能够改变材料电阻率的现象。磁阻效应的典型外场方向与材料几何模型如图 2.2 所示。尽管由于材料维度的不同，模型 (a) 与模型 (b)(c) 在宏观量统计和 Poisson 方程的具体形式上有所区别，但考虑到模型 (a) 的展向平移对称性，且理论上内建电场的处理并不涉及 Poisson 方程的具体形式而只是将其作为单纯的未知量^[53,57]，由玻尔兹曼方程形式可知，模型 (a) 与模型 (b)(c) 应具有相似的磁场响应特征。

前人对磁阻效应的研究始于金属薄膜中的尺寸效应^[53,57]，其几何模型如图 2.2(a) 所示。由于此时边界的影响十分重要，由上一节的讨论可知，这对应于电子输运的弹道相区。下面将从介观的物理图像上对弹道相区内磁场对材料流向电阻率的影响进行简要分析，同时也为后面小节的分析提供一个直观的视角。

衡量磁场影响强弱的特征尺度是所谓的回旋半径 r_C (cyclotron radius)

$$r_C = \frac{m_B v_F}{eB}, \quad (3-16)$$

它描述了能带电子在外加磁场作用下运动的特征长度，其中 m_B 为电子的回旋有效质量。在弹道相区内，材料的电导率主要由沿通道方向运动的电子贡献。当外加磁场较弱时，回旋半径较大，因此会有部分原来沿通道方向运动的电子撞向边界，从而导致电阻率升高；但当磁场进一步增加时，回旋半径减小，通道中心轴线附近的电子由于磁场的作用在材料内部作回旋运动，并与材料中的声子/缺陷/杂质发生散射损失能量，因此电阻率将降低并无限趋于体相电阻率。图 3.6(a) 展示了前人对二维电子气中磁阻效应的数值模拟结果，与上述讨论定性一致^[61]。

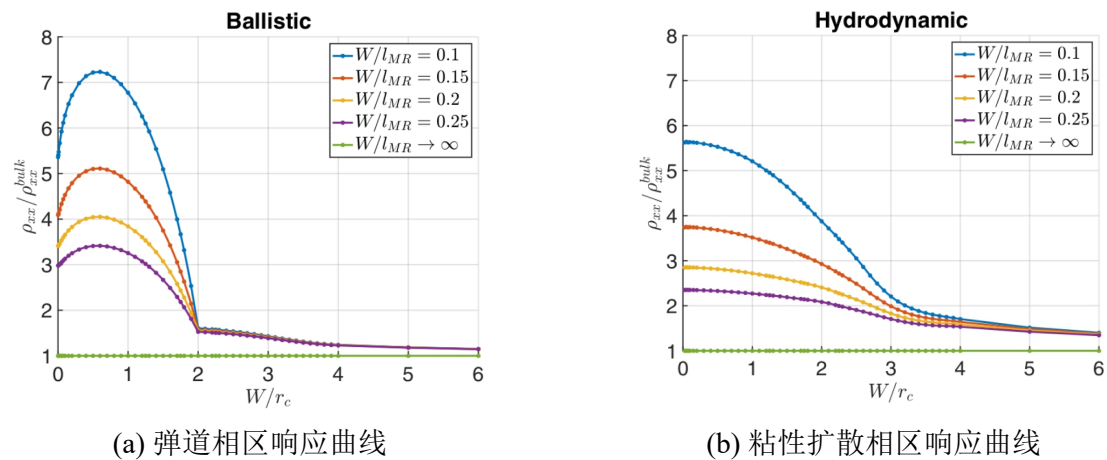


图 3.6 弹道相区与粘性扩散相区的 $\rho_{xx} \sim B$ 响应曲线^[61]

3.3.2 算例的问题描述

算例选自 Scaffidi 等在 2017 年发表的论文^[61]，图 3.6 展示了文中对二维电子气中磁阻效应的数值模拟结果。对比图 3.6(a) 和图 3.6(b) 可以发现：

- 一方面，在弹道相区，在 $W/r_C \simeq 0.55$ 附近存在流向电阻率的极大值点，这一点已经在上一小节中分析过；在 $W/r_C = 2$ 处存在电阻率曲线斜率的突变，这恰对应于通道宽度为回旋半径的二倍。因此可以推断，在突变点左侧，电阻率的降低主要源于边界散射强度的减弱；而在突变点右侧，电阻率的降低则主要源于体相散射强度的增强。由从左至右斜率突然减小可知，边界散射对于材料电阻率的影响很大。
- 另一方面，在粘性扩散相区，流向电阻率随磁场的增加而单调减小。从介观的物理图像上分析，粘性扩散相区内的电子处于相互之间频繁碰撞的状态，刻画其运动的特征量即为粘性。从动理论可知，粘性可近似为速度大小与平均自由程的乘积。当磁场逐渐增强时，电子的速度大小仍将保持费米速度不变，而平均自由程则会随着回旋半径的不断减小而减小，这导致了粘性的降低从而使得电阻率不断减小；当磁场继续增强时，由于体相弛豫散射的作用，电阻率不能无限减小，而是无限趋于体相电阻率。

该论文据此提出，可以通过流向电阻率 ρ_{xx} 随外加磁场 B 变化曲线的特征来识别电子的粘性扩散相区。

本文关于磁阻效应算例的参数选取见表 3.3。注意到，无量纲玻尔兹曼方程 (3-5) 中的角度偏导项系数 F_{ext} 同时包含电场 E 与磁场 B 的影响，因此电场将会对外加磁场有一定的修正作用。这里将考察外加电场 E_{ext} 对磁阻效应的影响，并从速度剖面的角度更精细地考察不同相区的流动特征。

表 3.3 磁阻效应算例的参数选取及定解条件

算例编号	算例 (1)	算例 (2)
边界模型	Fuchs 模型，完全扩散边界 ($p_s = 0.0$)	
散射性质	$W : l_{\text{MR}} : l_{\text{MC}} = 1 : 10 : 1$	$W : l_{\text{MR}} : l_{\text{MC}} = 1 : 10 : 0.5$
材料参数	$m^* = 0.067m$, $n = 2.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $d_e = 100 \text{ nm}$	
外电磁场 *	$E_{\text{ext}} = E_{\text{nd}} E_0$ 为变量 (E_{nd} 为无量纲量) B 为基本变量	

*: $E_0 := E_F/(eW) \simeq 10^2 \text{ V/m}$ 为由四个基本特征量构造的特征电场强度。

3.3.3 算例结果与分析

图 3.7 和图 3.8 分别给出了算例 (1) 和算例 (2) 的计算结果。

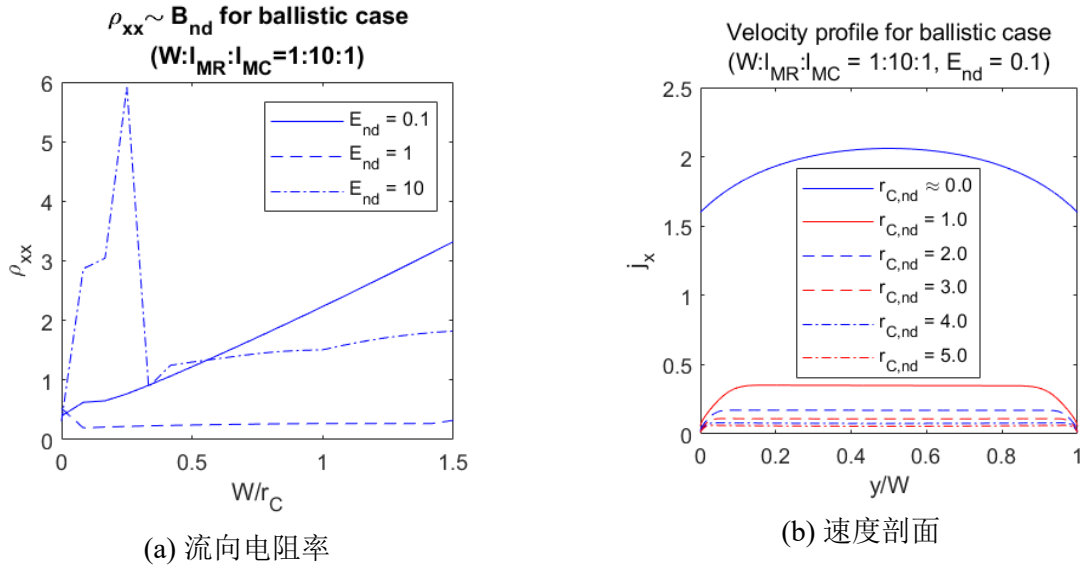


图 3.7 弹道相区内磁阻效应的 DOM 数值结果

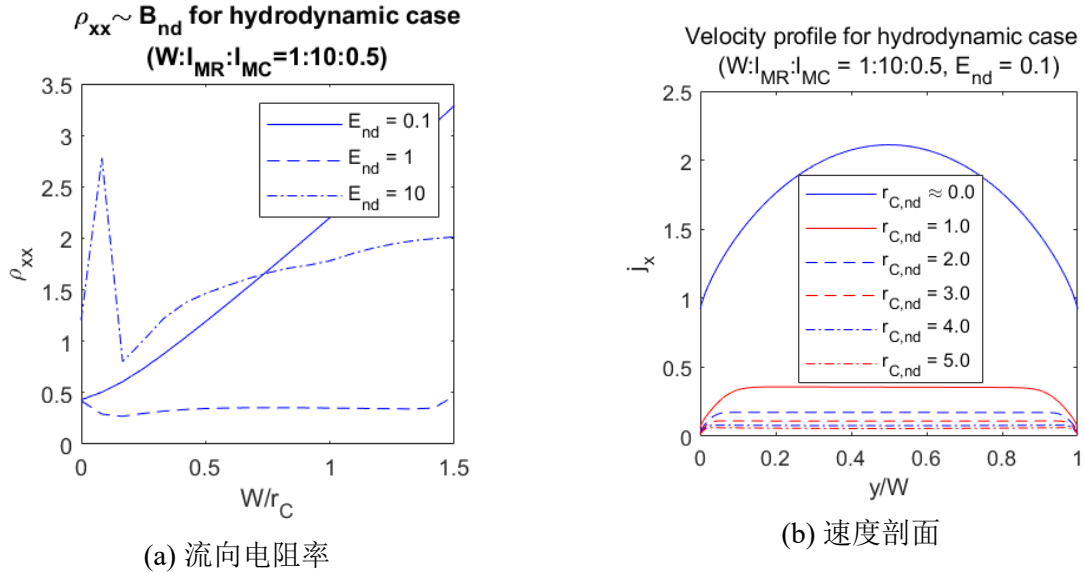


图 3.8 粘性扩散相区内磁阻效应的 DOM 数值结果

图 3.7(a) 和图 3.8(a) 给出了不同外加电场条件下两个相区内材料电阻率对磁场的响应曲线。从中可见，在较强电场下，电阻率-磁场曲线均出现了明显的峰值，这与弹道相区的定性分析是相符的，但与粘性扩散相区的估计有一定差异。而在弱电场下，电阻率-磁场曲线在两个相区均呈单调上升趋势，这一点与

理论估计不完全相符，也反映出外加电场对材料电阻率的磁场响应的影响。经过测试也发现，内建电场模型的选择对响应曲线的定性性质亦有重要的影响。

图 3.7(b) 和图 3.8(b) 给出了外加电场为 $E_{nd} = 0.1$ 时两个相区内在不同磁场条件下的电子流动速度剖面。可以发现，无论是弹道相区还是粘性扩散相区，在弱磁场条件下都呈现出了有边界滑移的类 Poiseuille 流抛物形状的速度剖面，而在强磁场条件下都呈现出了中部均匀、边界处几乎无滑移的类欧姆相区的速度剖面，这表明上一小节对磁场作用机理的定性分析是合理的。

3.4 本章小结

本章发展了二维电子玻尔兹曼方程数值求解的离散坐标算法，它直接对介观尺度的玻尔兹曼方程进行数值离散，从而能够从定量上精确地捕捉弹道效应等强非平衡效应以及中等强度外场作用下电子的输运行为。

前半部分提出了离散坐标法的数值格式与算法流程。首先基于无限长二维直通道模型，采用四个基本特征量对偏移形式电子玻尔兹曼方程进行了无量纲化处理，并指出了含有源项的偏移形式电子玻尔兹曼方程在理论求解与数值计算上的优势。然后针对稳态问题的玻尔兹曼方程，采用对流项的双迎风离散与散射项的 Gauss 积分，得到了数值稳定性较好的离散坐标迭代格式，并分析了其物理意义，即迭代采用以接近系统最小散射平均自由时的时间间隔作为其时间步长。接着根据典型的实验条件，给出了基于缓变沟道近似的内建电场计算方法。最后结合宏观量的统计表达式，简述了离散坐标算法的具体流程。

后半部分进行了离散坐标算法的数值验证并将其应用于电子水动力学现象的研究。数值验证基于在微纳材料中典型的电子弹道-扩散效应，讨论了对各输运相区的特征尺度对电导率的影响。通过在定量上精确复现原始文献中的理论解，说明了本文发展的离散坐标算法的正确性，也表明了其能够捕捉非平衡效应的优势。应用研究则着眼于弹道相区以及粘性扩散相区内的磁阻效应，一方面基于对角度偏导项构成的讨论，考察了外加电场强度对磁阻效应的影响，同时发现了内建电场模型对于磁阻效应的重要影响；另一方面，从速度剖面的角度精细地考察了不同相区的流动特征，验证了此前对磁场作用机理的定性分析。

第 4 章 扩散相区的宏观流体力学方程

室温条件下，晶体材料中的电子以经历电子-声子散射为主；而在极低温条件下，电子以经历电子-杂质/缺陷散射为主。只有在特定的低温范围内，电子之间的正规散射才有可能占据主导，这时电子流体在宏观上将服从与经典流体类似的流体力学方程。本章首先将分别采用两种方法对电子玻尔兹曼方程进行升尺度展开，由此推导相应的电子宏观流体力学方程。其一是基于 Chapman-Enskog 展开的摄动方法，提出双弛豫近似的拟平衡分布的概念，得到同时适用于欧姆扩散相区与粘性扩散相区（合称为扩散相区）的宏观方程；其二是基于 Fourier 谱的 Grad 矩方法，对前人研究中角度偏导项缺少电场贡献的问题作出修正，同时澄清电子宏观流体力学方程的适用条件。接着将利用由矩方法得到的形式更为完整的电子流体力学方程，归纳电子流体的流动特点并将其与经典流体进行对比。最后通过求解二维定常平行剪切流问题，确定宏观电子流体力学方程的适用范围，并对电子流体的流动特征量作初步的分析。

4.1 求解电子玻尔兹曼方程的升尺度方法

目前有关电子玻尔兹曼方程的升尺度方法主要集中在对 Grad 矩方法的研究上^[65,108]。在前人的研究中，或者仅仅考虑了电子之间正规散射的作用，忽略了固体材料中电子-声子散射的弛豫效应^[108]；或者忽略了电场对角度偏导项的贡献，同时高阶方程的截断性条件仍不甚清晰^[65]。因此，对前人的现有理论作出修正，并提出具有更为明确的截断性条件与更为广泛的适用范围的升尺度方法是非常必要的。本节将给出电子玻尔兹曼方程的升尺度方法，主要包括基于 Chapman-Enskog 展开的摄动方法和基于 Fourier 谱的 Grad 矩方法。这里的推导将基于第 2.2.2 节的双弛豫近似电子玻尔兹曼方程展开。

4.1.1 基于 Chapman-Enskog 展开的摄动方法

相比于当前研究采用较多的 Grad 矩方法，基于 Chapman-Enskog 展开的摄动方法具有更为明确的截断条件和更加清晰的物理意义，在高阶 Burnett 方程的推导、声波色散关系的研究等方面都有着重要的应用^[115]。因此，本小节将首先尝试采用摄动方法进行升尺度展开，并给出相应宏观方程的适用条件。

4.1.1.1 Chapman-Enskog 摄动展开简介

Chapman-Enskog 摄动展开方法最初由 Sydney Chapman 和 David Enskog 分别于 1910 年和 1920 年各自独立提出，最早用于导出近局部平衡的多组分气体混合物的宏观流体力学方程。该方法的基本思路是^[128]

1. 对介观玻尔兹曼方程的各项进行量级估计，将数量差距较大的两项的量级之比设置为小参数用于渐近展开；
2. 将非平衡分布函数在局部平衡分布函数附近用该参数作摄动展开，并将各类偏导数算子作类似的摄动分解；
3. 根据不同小参数幂次的系数相互独立得到各级次的近似方程，对各个级次逐级求解并对高级渐近项进行截断；
4. 基于由上述步骤得到的渐近解，由此可以通过计算其各阶矩，获得封闭形式的宏观方程及相应的输运系数。

由上述摄动展开的基本思路可知，小参数的设置是其中的关键一环。对于气体分子输运的玻尔兹曼方程 (2-2)，左端漂移项与右端散射项的量级之比可估计为 $\text{Kn} := l/l_0$ ，其中 l 为气体分子运动的平均自由程， l_0 为宏观过程的特征长度尺度；当 $\text{Kn} \ll 1$ 时，可将其作为小参数进行摄动展开，此时系统处于以气体分子之间频繁碰撞为主的粘性扩散相区^[115]。对于低温条件下声子输运的玻尔兹曼方程，由于这时声子之间的正规散射较为显著，其动量弛豫散射项与动量守恒散射项的量级之比可估计为 $\text{Kn} := \tau_{\text{MC}}/\tau_{\text{MR}} \ll 1$ ，因此可将其作为小参数进行摄动展开，由此可以得到描述非傅里叶导热的声子水动力学方程^[50]。

对于低温条件下的电子玻尔兹曼方程 (2-22)，采用与声子水动力学方程类似的推导方法即可导出相应的电子流体力学方程，但该方程只适用于低温条件下的粘性扩散相区。本小节将引入双弛豫近似的拟平衡分布，并设置新的小参数进行摄动展开，由此得到比上述方案适用范围更广的宏观方程。这里采用原始形式的玻尔兹曼方程 (2-22) 及相应的双弛豫近似散射项 (2-30) 进行推导，即

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = C(f). \quad (4-1)$$

$$C(f) = C_{\text{MR}}(f) + C_{\text{MC}}(f) := -\frac{f - f_{\text{MR}}^{\text{eq}}}{\tau_{\text{MR}}} - \frac{f - f_{\text{MC}}^{\text{eq}}}{\tau_{\text{MC}}}. \quad (4-2)$$

这里， $f_{\text{MR}}^{\text{eq}} := f_0(\mathbf{r}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}})$ 以及 $f_{\text{MC}}^{\text{eq}} \equiv f_0(\mathbf{r}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{p})$ 分别为背景参考系以及宏观漂移速度为 \mathbf{u} 的运动参考系中的 Fermi-Dirac 平衡分布。

4.1.1.2 电子态分布函数各级渐近解的导出

将原始形式的玻尔兹曼方程 (4-1) 两端取速度的零阶矩及一阶矩，结合右端散射项的守恒条件 (2-31) 和 (2-32)，可得

$$\begin{aligned} \partial_t n + \partial_r \cdot \left(\frac{\mathbf{P}}{m^*} \right) &= 0, \\ \partial_t \left(\frac{\mathbf{P}}{m^*} \right) + \partial_r \cdot \left(\frac{\mathbf{T}}{m^*} \right) &= -\frac{(\mathbf{P}/m^*)}{\tau_{MR}} + \mathbf{F}_{\text{macro}}. \end{aligned} \quad (4-3)$$

这里， $\mathbf{F}_{\text{macro}} = (-e)(n\mathbf{E} + (\mathbf{P}/m^*) \times \mathbf{B})$ 为单位面积的二维电子流体所受的面积力， \mathbf{T} 为电子微团的局部动量通量密度

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}, t) := \int \mathbf{p} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{2 d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (4-4)$$

由此可见，只要得到 $\mathbf{T} = \mathbf{T}(n, \mathbf{P})$ 的表达形式，即可封闭上述流体力学方程组，这也是 Chapman-Enskog 摄动展开的主要目标。

区别于前人的研究，这里首先将散射项 (4-2) 等价地改写为

$$C(f) =: -\frac{f - f_{\text{eff}}^{\text{eq}}}{\tau_{\text{eff}}}. \quad (4-5)$$

其中， $\tau_{\text{eff}} := (\tau_{MR}^{-1} + \tau_{MC}^{-1})^{-1}$ 为有效弛豫时间， $f_{\text{eff}}^{\text{eq}}$ 称为拟平衡分布

$$f_{\text{eff}}^{\text{eq}} = \frac{\tau_{MR}^{-1}}{\tau_{MR}^{-1} + \tau_{MC}^{-1}} f_{MR}^{\text{eq}} + \frac{\tau_{MC}^{-1}}{\tau_{MR}^{-1} + \tau_{MC}^{-1}} f_{MC}^{\text{eq}}. \quad (4-6)$$

下面将在拟平衡分布 $f_{\text{eff}}^{\text{eq}}$ 附近作 Chapman-Enskog 摄动展开，通过求解各级近似下的非平衡分布得到上述方程的封闭关系 $\mathbf{T} = \mathbf{T}(n, \mathbf{P})$ 。

首先对原始形式玻尔兹曼方程进行无量纲化，可以得到 (\tilde{X} 表示无量纲量)

$$\frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \tilde{\mathbf{r}}} + \tilde{\mathbf{F}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \tilde{\mathbf{p}}} = -\frac{f - f_{\text{eff}}^{\text{eq}}}{\text{Kn}}. \quad (4-7)$$

由此可知，左端漂移项与右端散射项的量级之比为 $\varepsilon_{\text{Kn}} \equiv \text{Kn} = \tau_{\text{eff}}/t_0$ (暂时忽略动量偏导项的影响)，其中 t_0 为宏观过程的特征时间尺度。在 $\varepsilon_{\text{Kn}} \ll 1$ 的条件下，将电子态分布函数和各类偏导数算子对小参数 ε_{Kn} 作如下的摄动展开

$$\begin{aligned} f &=: f^{(0)} + \varepsilon_{\text{Kn}} f^{(1)} + \varepsilon_{\text{Kn}}^2 f^{(2)} + \dots \\ \partial_t &=: \varepsilon_{\text{Kn}} \partial_t^{(1)} + \varepsilon_{\text{Kn}}^2 \partial_t^{(2)}, \quad \partial_{r,k} =: \varepsilon_{\text{Kn}} \partial_{r,k}^{(1)}. \end{aligned} \quad (4-8)$$

其中，上标 (i) 代表分布函数或偏导数算子关于小参数 ϵ_{Kn} 的 i 级渐近分量。

将上述展开式代入带有拟平衡分布散射项 (4-6) 的原始形式玻尔兹曼方程 (4-1) 中，可得到关于小参数 ϵ_{Kn} 的各级摄动方程，进而解出如下的各级渐近解

$$\begin{aligned}\epsilon_{\text{Kn}}^0 &: f^{(0)} = f_{\text{eff}}^{\text{eq}} \\ \epsilon_{\text{Kn}}^1 &: f^{(1)} = -\tau_{\text{eff}} D^{(1)} f^{(0)} \\ \epsilon_{\text{Kn}}^2 &: f^{(2)} = -\tau_{\text{eff}} [D^{(1)} f^{(1)} + \partial_t^{(2)} f^{(0)}]\end{aligned}$$

其中， $D^{(1)} = \partial_t^{(1)} + \mathbf{v} \cdot \partial_r^{(1)}$ 。这里需要指出， ϵ_{Kn} 实际上是作为无量纲方程 (4-7) 中的无量纲尺度参数定义的，因此在有量纲的表达式如摄动展开式 (4-8) 和 (4-9) 中应取 1，仅具有形式上区分量级大小的意义。

4.1.1.3 各级宏观量计算与宏观方程的封闭

基于电子态分布函数的摄动展开式 (4-8)，由各阶宏观量的定义 (2-33) 和 (4-4)，可以给出相应的摄动展开式

$$\begin{aligned}n &=: n^{(0)} + \epsilon_{\text{Kn}} n^{(1)} + \epsilon_{\text{Kn}}^2 n^{(2)} + \dots \\ \mathbf{P} &=: \mathbf{P}^{(0)} + \epsilon_{\text{Kn}} \mathbf{P}^{(1)} + \epsilon_{\text{Kn}}^2 \mathbf{P}^{(2)} + \dots \\ \mathbf{T} &=: \mathbf{T}^{(0)} + \epsilon_{\text{Kn}} \mathbf{T}^{(1)} + \epsilon_{\text{Kn}}^2 \mathbf{T}^{(2)} + \dots\end{aligned}\quad (4-9)$$

其中，上标 (i) 代表相应宏观量关于小参数 ϵ_{Kn} 的 i 级渐近分量。

由后文的讨论可知， $\mathbf{P}^{(0)}$ 与 \mathbf{P} 成常比例系数的正比关系，这是由于拟平衡分布还包含了部分弛豫效应，使得动量密度 \mathbf{P} 不再是良好的守恒量所致。不过可以证明，这里的处理与在最大熵非平衡分布附近做摄动展开是类似的，由此得到的动量通量张量 \mathbf{T} 仍具有正确的形式（至少在一级近似下）^[51]。

对于零级宏观量的计算，此时被积函数为零级近似分布函数 $f_{\text{eff}}^{\text{eq}}$ ，具体为 $f_{\text{MR}}^{\text{eq}}$ 和 $f_{\text{MC}}^{\text{eq}}$ 的线性组合（见式 (4-6)）。由于直接积分 $f_{\text{eff}}^{\text{eq}}$ 比较复杂，而 $f_{\text{MR}}^{\text{eq}} \equiv f_0(\epsilon_k)$ 的积分计算则较为简单^①，因此将 $f_{\text{eff}}^{\text{eq}}$ 在 $f_0(\epsilon_k)$ 附近作二阶 Taylor 展开

$$f^{(0)} \simeq f_0 + \frac{\tau_{\text{eff}}}{\tau_{\text{MC}}} \left(-m^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} + \frac{1}{2} m^{*2} \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \mathbf{v} \frac{\partial^2 f_0}{\partial \epsilon_k^2} \right). \quad (4-10)$$

① $f_{\text{MR}}^{\text{eq}}$ 的定义依次见式 (4-2)、(2-23) 及 (2-1) 附近的文字说明。

结合 $\mu \simeq E_F \simeq \int_0^\infty \varepsilon_k f_0(\varepsilon_k) D d\varepsilon_k$ (要求 $k_B T \ll E_F \equiv \mu(T = 0 \text{ K})$) 以及 $|\mathbf{u}| \ll v_F$ 的近似条件, 并利用各向同性能带关系的对称性, 可以得到零级宏观量的如下近似表达式

$$\begin{aligned} n^{(0)} &\simeq D\mu, \\ \mathbf{P}^{(0)} &\simeq m^* n^{(0)} \mathbf{u}_{\text{eff}}, \\ \mathbf{T}^{(0)} &\simeq \mathcal{P} \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (4-11)$$

其中, $\mathbf{u}_{\text{eff}} := (\tau_{\text{eff}}/\tau_{\text{MC}}) \mathbf{u}$ 为电子流体在零阶近似下的有效宏观漂移速度, $\mathcal{P} := (D\mu^2)/2 \equiv (\mu n^{(0)})/2$ 为二维电子气的简并压强^[122]。将零级宏观量 $\mathbf{T}^{(0)}$ 的表达式 (4-11) 代入宏观方程 (4-3) 中即可得到电子的 Euler 方程。这里, $\mathcal{P} = (\mu n^{(0)})/2$ 是作为状态方程出现的, 并且由于忽略了动量通量密度中 \mathbf{u} 的贡献, 得到的方程中不含对流项。结合式 (4-11) 和式 (2-34) 可以得到

$$\mathbf{P}^{(0)} = \frac{\tau_{\text{eff}}}{\tau_{\text{MC}}} \mathcal{P}.$$

对于一级宏观量的计算, 充分利用零级宏观量的定义式, 可以得到

$$\begin{aligned} n^{(1)} &= -\tau_{\text{eff}} \left(\partial_t^{(1)} n^{(0)} + \partial_r^{(1)} \cdot \left(\frac{\mathbf{P}^{(0)}}{m^*} \right) \right), \\ \mathbf{P}^{(1)} &= -\tau_{\text{eff}} \left(\partial_t^{(1)} \mathbf{P}^{(0)} + \partial_r^{(1)} \cdot \mathbf{T}^{(0)} - m^* \mathbf{F}_{\text{macro}}^{(0)} \right), \\ \mathbf{T}^{(1)} &= -\tau_{\text{eff}} \left(\partial_t^{(1)} \mathbf{T}^{(0)} + \mathbf{L}^{(1)}(\mathbf{E}, \mathbf{B}) \right) - m^* n^{(0)} \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (4-12)$$

其中, $\mathbf{L}^{(1)}$ 为关于外场的线性算子, $\boldsymbol{\sigma} = \nu[(\nabla \cdot \mathbf{u}_{\text{eff}}) \mathbf{I} + (\nabla \mathbf{u}_{\text{eff}} + \mathbf{u}_{\text{eff}} \nabla)]$ 为粘性应力张量, 这里 $\nu = (v_F^2 \tau_{\text{eff}})/4$ 为电子流体的运动学粘度系数, 形式与前人采用宏观方法得到的结果一致^[99]。动量通量密度 $\mathbf{T}^{(0)}$ 时间偏导项的计算依赖于更高阶矩的宏观方程, 这里暂且保留其形式。由式 (4-12) 可以清晰地看到电子粘性的涌现, 同时外加电磁场以线性方式影响电子流体的流动, 这实际上对应于弱场的情形。

4.1.1.4 截断条件与适用条件

由 Chapman-Enskog 展开的小参数条件可知, 上述截断近似要求 $\text{Kn} = \tau_{\text{eff}}/t_0 \ll 1$ 。由此可见, 该方法既适用于低温时 $\tau_{\text{MC}} \ll t_0, \tau_{\text{MR}}$ 的粘性扩散相区, 又适用于高温条件下 $\tau_{\text{MR}} \ll t_0, \tau_{\text{MC}}$ 的欧姆扩散相区。这实际上要求材料的尺寸充分大, 使得边界散射带来的弹道效应可以忽略。

4.1.2 基于 Fourier 谱的 Grad 矩方法

从上一小节可知，利用摄动方法得到的宏观流体力学方程只能描述外加磁场较弱的情形，从而不能完整地反映外场对电子输运的影响。因此，本小节将采用基于 Fourier 谱的 Grad 矩方法重新推导宏观电子流体力学方程，并就前人研究中忽略的宏观方程适用条件的问题作以细致讨论。

4.1.2.1 Grad 矩方法简介

Grad 型矩方法是将非平衡分布函数在波矢空间中的一组完备正交基上进行谱分解，利用基函数的正交性获得对应于每个基函数的谱系数方程，然后基于介观玻尔兹曼方程在波矢空间的加权积分，通过建立谱系数与宏观量之间的关系进而得到宏观量满足的方程。在实际操作中，往往采用一组非完备但足够接近解子空间的正交基底，这等价于对谱系数方程链采取高阶项的截断近似。由 Grad 矩方法的定义可知，根据研究目的选取合适的基函数非常重要。常见的基底包括各类正交多项式、三角函数等。对于水动力学效应而言，由于保持总动量守恒的散射机制十分关键，考虑到动量投影算子 $P_{\pm 1}[\chi]$ 的表达形式，采用 Fourier 基 $\{1, \cos \varphi, \sin \varphi, \dots\}$ 作为基底对偏移量 $\chi(\mathbf{r}, \varphi)$ 进行谱分解是最为自然的^[65]。

本小节的推导将在频域中进行，以方便对周期性外场激励等非定常问题的研究。将经过简化的偏移形式玻尔兹曼方程 (2-29) 以及相应的双弛豫近似散射项 (2-35) 经 Fourier 变换映射到频域中^①，有

$$-i\omega\chi_\omega(\mathbf{r}, \varphi) + v_F \mathbf{e}_\rho \cdot [\nabla_{\mathbf{r}} \chi_\omega(\mathbf{r}, \varphi) + e\mathbf{E}_\omega] + (\omega_E + \omega_C) \nabla_\varphi \chi_\omega(\mathbf{r}, \varphi) = C_\delta(\chi_\omega). \quad (4-13)$$

以及

$$C_\delta(\chi_\omega) = C_{\delta,MR}(\chi_\omega) + C_{\delta,MC}(\chi_\omega) := -\frac{\chi_\omega - P_0[\chi_\omega]}{\tau_{MR}} - \frac{\chi_\omega - P_{0,\pm 1}[\chi_\omega]}{\tau_{MC}}. \quad (4-14)$$

其中，下标处的 ω 表示频域中的物理量， $\omega_C := eB/m_B$ 为磁场贡献的方向角变化频率（称为回旋频率），这里 m_B 为电子的回旋有效质量并认为其与电子的能带有效质量相等 $m_B = m^*$ ，同时已假定 $\mathbf{B} \equiv B\hat{\mathbf{z}}$ （ $\hat{\mathbf{z}}$ 为法向单位矢量）； $\omega_E := (-e)\mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_\varphi/p_F =: \omega_E \cdot \mathbf{e}_\varphi$ 为电场贡献的波矢方向角变化频率，不妨称之为电致回旋频率。值得指出的是，电致回旋频率在前人的研究中往往被忽略不计^[46,65]，这里将其保留以考察其对电子输运的影响。

① 此处的 Fourier 变换是将方程从时域 t 中变换至频域 ω 的一种函数变换，而在 Grad 矩方法中应用的 Fourier 谱分解则可看作波矢空间中的函数项级数展开。注意两个数学概念的区别。

4.1.2.2 散射项与宏观量的谱系数表达

根据 Grad 矩方法的思路, 将偏移量 $\chi_\omega(\mathbf{r}, \varphi)$ 在波矢空间的 Fourier 基 $\{e^{\pm in\varphi}\}_{n=0, \pm 1, \dots}$ 上作 Fourier 展开

$$\chi_\omega(\mathbf{r}, \varphi) =: \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \chi_{\omega, n}(\mathbf{r}) e^{in\varphi}, \quad (4-15)$$

其中的 Fourier 系数 (也称作 Fourier 谱) 为

$$\chi_{\omega, n}(\mathbf{r}) =: \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} e^{-in\varphi} \chi_\omega(\mathbf{r}, \varphi).$$

由式 (3-8) 可知, 投影算子与时域上的 Fourier 谱的关系为

$$P_0[\chi] = \chi_0, \quad P_1[\chi] = (\chi_{-1} + \chi_1) \cos \varphi, \quad P_{-1}[\chi] = (-i)(\chi_{-1} - \chi_1) \sin \varphi.$$

由此可将频域上的散射项 (4-14) 进一步写为

$$\begin{aligned} C_{\delta, \text{MR}}(\chi_\omega) &= -\frac{\chi_\omega - \chi_{\omega, 0}}{\tau_{\text{MR}}}, \\ C_{\delta, \text{MC}}(\chi_\omega) &= -\frac{\chi_\omega - (\chi_{\omega, 0} + \chi_{\omega, 1} e^{i\varphi} + \chi_{\omega, -1} e^{-i\varphi})}{\tau_{\text{MC}}}. \end{aligned} \quad (4-16)$$

由式 (3-13) 及式 (3-14), 可以得到 Fourier 谱系数与频域上的局部电子数面密度偏移量 n_δ 和局部电子动量密度 \mathbf{P} 等宏观量的关系

$$\begin{aligned} n_{\delta, \omega}(\mathbf{r}) &= D\chi_{\omega, 0}, \\ \mathbf{P}_\omega(\mathbf{r}) &= m^* v_F D \left(\frac{\chi_{\omega, -1} + \chi_{\omega, 1}}{2}, (-i) \frac{\chi_{\omega, -1} - \chi_{\omega, 1}}{2} \right). \end{aligned} \quad (4-17)$$

定义电子微团的局部动量通量密度相对平衡状态的偏移量 T_δ

$$\mathbf{T}_\delta(\mathbf{r}, t) := \int \mathbf{p} \mathbf{v} (f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f_0(\mathbf{r}, \varepsilon_{\mathbf{k}}, t)) \frac{2 d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (4-18)$$

则频域上的局部动量通量密度偏移量 T_δ 可用 Fourier 谱系数表达为

$$\mathbf{T}_{\delta, \omega}(\mathbf{r}) = \frac{m^* v_F^2}{2} D \left[\chi_{\omega, 0} \mathbf{I} + \frac{\chi_{\omega, -2} + \chi_{\omega, 2}}{2} \tau_z + \frac{\chi_{\omega, -2} - \chi_{\omega, 2}}{2i} \tau_x \right]. \quad (4-19)$$

其中, \mathbf{I} 为单位二阶张量, $\tau_i (i = x, y, z)$ 为 Pauli 矩阵在直角坐标系中的投影

$$\tau_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4-20)$$

4.1.2.3 宏观方程的导出与边界条件的构造

将 Fourier 级数展开式 (4-15) 代入偏移形式玻尔兹曼方程 (4-13), 取 $n = 0, \pm 1$ 可分别得到电子流体的连续性方程以及动量方程如下

$$-i\omega n_{\delta,\omega} + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{P}_\omega}{m^*} \right) = 0, \quad (4-21)$$

$$-i\omega \frac{\mathbf{P}_\omega}{m^*} + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{T}_{\delta,\omega}}{m^*} \right) + \frac{v_F^2 D}{2} e \mathbf{E}_\omega + \left(\omega_C \frac{\mathbf{P}_\omega}{m^*} + \boldsymbol{\omega}_E \cdot \frac{\mathbf{T}_{\delta,\omega}}{p_F} \right) \times \hat{z} = -\frac{\mathbf{P}_\omega / m^*}{\tau_{MR}}. \quad (4-22)$$

为了得到上述方程的封闭形式, 还需要利用 $n = \pm 2$ 对应的谱系数方程并忽略 $|n| \geq 3$ 的高阶项以求出本构关系

$$\mathbf{T}_{\delta,\omega}(\mathbf{r}) = n_{\delta,\omega}(\mathbf{r}) \frac{\bar{n}}{D} \mathbf{I} - \boldsymbol{\sigma}'_{v,\omega}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\sigma}_{E,\omega}(\mathbf{r}). \quad (4-23)$$

其中, 粘性应力 $\boldsymbol{\sigma}'_{v,\omega}$ 的表达式为

$$\boldsymbol{\sigma}'_{v,\omega} = (v_\omega + i v_{H,\omega} \tau_y) [(\partial_x P_x - \partial_y P_y) \tau_z + (\partial_x P_y + \partial_y P_x) \tau_x].$$

而 $\boldsymbol{\sigma}_{E,\omega}$ 则为电致回旋应力项

$$\boldsymbol{\sigma}_{E,\omega} = \frac{2}{v_F} [(\alpha_E P_x - \beta_E P_y) \tau_z + (\beta_E P_x - \alpha_E P_y) \tau_x].$$

这里, 正常粘性 v_ω 与 Hall 粘性 $v_{H,\omega}$ 的微观表达式分别为

$$v_\omega = \frac{v_F^2}{4} \frac{\tau_{\text{eff}}^{-1} - i\omega}{(\tau_{\text{eff}}^{-1} - i\omega)^2 + 4\omega_C^2}, \quad v_{H,\omega} = -\frac{v_F^2}{2} \frac{\omega_C}{(\tau_{\text{eff}}^{-1} - i\omega)^2 + 4\omega_C^2}.$$

式中 $\tau_{\text{eff}} := (\tau_{MR}^{-1} + \tau_{MC}^{-1})^{-1}$ 为电子散射的有效弛豫时间。记 $\mathbf{v}_\omega = (v_\omega, v_{H,\omega})$, 则电致回旋应力项中的系数 α_E 和 β_E 可分别表达为

$$\alpha_E = \boldsymbol{\omega}_E \cdot \mathbf{v}_\omega, \quad \beta_E = (\boldsymbol{\omega}_E \times \mathbf{v}_\omega) \cdot \hat{z}.$$

这样, 式 (4-21)、(4-22)、(4-23) 便构成了封闭的电子流体力学方程组。

由方程组的形式, 可以定性分析动量弛豫散射与动量守恒散射对电子流动的影响。具体而言, 从动量方程 (4-22) 与动量通量偏移量的表达式 (4-23) 可知,

动量弛豫散射 (τ_{MR}) 既会造成动量 \mathbf{P} 的弛豫, 也会造成动量通量偏移量 \mathbf{T}_δ 的弛豫; 而动量守恒散射 (τ_{MC}) 只影响动量通量的弛豫从而导致粘性的产生, 而不直接影响动量本身。事实上, 由于动量 \mathbf{P} 与动量通量偏移量 \mathbf{T}_δ 分别来源于偏移分布的一阶和二阶谱系数 (见式 (4-17) 和 (4-19)), 从散射项的形式 (4-16) 可以清晰地看出 τ_{Mi} 对偏移分布各阶谱系数进而对宏观量的弛豫效应。

假定边界处电子的动量密度与粘性应力 $\boldsymbol{\sigma}'$ 的非对角元成正比, 则可将边界滑移条件在第 2.2.3.3 节引入的边界局部坐标系 ($\mathbf{e}_t, \mathbf{e}_n$) 中表达为^[65]

$$\mathbf{e}_t \cdot \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{e}_n + (v/l_b)\mathbf{e}_t \cdot \mathbf{P} = 0. \quad (4-24)$$

忽略 $\mathcal{F}_n(|n| > 2)$ 的贡献, 则有

$$\int_{-\pi}^0 r(\theta, \theta') d\theta = 1 \Rightarrow \mathbf{e}_n \cdot \mathbf{P} = 0. \quad (4-25)$$

利用 Fuchs 边界散射模型, 可求得边界滑移长度 l_b 的介观表达式

$$l_b = \frac{v}{v_F} \frac{24\pi}{9\pi^2 - 32} \frac{1 + p_s}{1 - p_s}. \quad (4-26)$$

这里 p_s 为电子在边界处的镜面反射系数, 且修正了文献中的计算错误。

4.1.2.4 截断条件与适用条件

现考虑电子的宏观流体力学方程组 (4-21)、(4-22)、(4-23) 的截断条件。由分布函数的谱系数与各阶矩即宏观量的对应关系 (4-17) 和 (4-19) 及其推广可知, 在推导过程中截断的高阶项相当于忽略了高阶矩的非平衡效应。利用动量方程 (4-22) 对作为分布函数各阶矩的宏观量的量级估计可知, 相邻高阶矩与低阶矩 (如 \mathbf{T}_δ 和 \mathbf{P}) 相应项的量级之比为 $\mathbf{Kn} = \tau_{\text{eff}}/t_0$, 其中 t_0 为宏观过程对应的时间尺度。因此, 当 \mathbf{Kn} 数满足 $\mathbf{Kn} \ll 1$ 的条件时, 可以忽略高阶矩的影响, 从而将谱系数方程中的高阶项截断。容易看到, 这正对应于电子输运的扩散相区^{[108]①}。

① 扩散相区的定义见本章导语及第 3.2.1 节的讨论。

4.2 电子流体力学方程的特点及应用

4.2.1 电子流体力学方程的特点

应用唯象方法无法给出宏观方程输运参数的微观来源及方程的适用性，因此也不易完整地考虑电子流动的各类效应。下面基于由 Grad 矩方法进行严格升尺度展开得到的电子流体力学方程 (4-21)、(4-22) 和 (4-23)，归纳电子流体的流动特点并将其与经典流体进行对比，由此说明构建电子流体力学方程的介观动理学框架的重要性。

4.2.1.1 弛豫效应

由于固体中存在电子-声子散射，这将导致局部电子动量的衰减，即动量方程 (4-22) 中的右端阻尼项。在介观方程中，需要在散射项中增加一项新的弛豫时间近似（如式 (2-30) 中的 $C_{MR}(f)$ ），它保持局部电子数密度守恒，但不保持电子微团的局部动量密度，这意味着其局部动量密度将呈现衰减到零的趋势；在宏观方程中，可以类比文献中对动量通量中粘性应力张量的封闭方式^[99]①，在动量方程中增加相应的弛豫时间近似项，这将在宏观尺度导致电子微团动量的衰减。由此也可注意到，一种合理且足够有效的弛豫时间表达式是实现跨尺度计算的关键。

由于弛豫效应的存在，电子流体的流动中将存在体相阻尼，这是经典的流体力学所不具有的。电子-声子散射若占据主导则将引起欧姆输运，即使在粘性扩散相区也将使得体相电导率不能无限增加，而是受体相阻尼引起的电阻率即 Drude 电阻率限制。值得指出的是，当经典流体内部存在体相动量源时，可以类比电子流体力学方程在动量方程中增加弛豫阻尼项进行刻画。

4.2.1.2 Hall 粘性效应

电子流体的 Hall 粘性效应本质上来源于外加磁场带来的时间反演对称性破缺，可基于对粘性应力张量 σ' 的对称性分析，通过在粘性应力张量中添加带有 Hall 粘性的无耗散项获得^[77]。

通过分析可知，Hall 粘性效应将在一定程度上减弱 Hall 效应的影响^[11]。基于第 4.2.1 节给出的粘性应力边界的表达式，可知 Hall 粘性将在边界处给流体提供一个附加的法向应力^[12]。目前，在经典流体中尚无类似的对应^[13]。

① 动量通量即分布函数的二阶矩，通过添加对应的弛豫时间近似项将导致宏观粘性的产生。

4.2.1.3 非平衡效应

当边界散射占主导时，电子的平均自由程大于系统的宏观特征尺度，电子输运处于强非平衡状态，对应输运相区称为弹道相区。从升尺度方法的适用性条件上看，由于此时 Kn 较大，摄动方法依赖的小参数条件以及矩方法依赖的截断近似条件将不再成立，因此需要作进一步的修正。考虑介观的物理图像，由于电子在某处的运动状态与其上一次经历边界散射后的运动状态密切相关，这种边界导致的非局域性会使得宏观量的高阶梯度项更为重要，与此同时体相中还需要增加边界散射的贡献。

由弹道相区的介观散射机制可知，这类强非平衡效应与非局域效应不只存在于电子流体中，而且在分子流体和声子流体等中普遍存在，此时粒子微团的流动一般称为 Knudsen 流^[44,88,129]。受此启发，为了在宏观尺度上刻画电子流动的弹道效应，可以借鉴描述微纳尺度声子输运的宏观弹道-扩散模型^[131]。

4.2.1.4 非局域效应

经典的流体力学方程将微团所受的长程力看作外加的体力，并认为流体微团间以短程的面力相互作用。而在电子流体情形下，会由于库仑作用与交换关联效应等因素使得微团间的作用力不再是短程的，每一个电子流体微团的运动将与整个材料中的所有电子相联系，即电子流体的流动具有很强的非局域特征。在经典流体中，离子溶液界面附近双电层中离子之间的静电作用与体积效应也具有类似的特点。

在非局域效应较弱时，即在材料较为纯净即弱无序、并且电子浓度较高的条件下^①，仍可以在每一个时刻利用单电子近似进行处理，将非局域效应通过平均场近似纳入玻尔兹曼方程中，如在外力项中添加电子之间相互作用或杂质势能梯度进行修正^[47,125]；但在非局域效应较强的系统中，如在不有序性较强导致系统呈现强关联特征时，准经典近似以及局域散射的基本物理图像将不再成立，从而无法应用介观玻尔兹曼方程方法，只能采用微观的第一性原理进行计算，这也是当前多体量子力学领域研究的热点问题之一。值得关注的是，即便在弱非局域效应条件下引入内建电场，电场实际上也将进入本构方程 (4-23)，严格来讲这违反了构建本构方程的材料元依赖原则，因此这一点仍存疑。

① 二者分别对应于 Anderson 相变与 Mott 相变的禁止条件，见第 2.1.3 的讨论。

4.2.2 二维定常平行剪切流的理论解

本小节将采用由 Grad 矩方法得到的电子流体力学方程，给出二维定常平行剪切流的宏观理论解（如图 2.2(c) 所示，假定磁场 $\mathbf{B} = 0 \text{ T}$ ）。在前人的研究中，Scaffidi 曾求解粘性扩散相区的流动，但未计及体相的弛豫效应以及边界的速度滑移的影响^[61]；Alekseev 曾类比 Gurzhi 求解了带有体相弛豫效应的宏观方程，但同样没有考虑边界速度滑移的影响^[99]。这里将综合考虑体相弛豫效应与边界速度滑移条件的影响，并通过与介观数值解的对比，给出滑移边界条件下电子宏观流体力学方程适用的 Kn 数范围。

4.2.2.1 宏观理论解的导出与介观精确解的对比

由电子流体的动量方程 (4-22)，忽略电致回旋频率 ω_E 的贡献，可以得到二维定常平行剪切流的控制方程为

$$v_{xx} \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{(-e)}{m^*} E_x - \frac{u}{\tau_{MR}} = 0.$$

由式 (4-24) 可知，介观尺度的 Fuchs 边界散射模型对应的速度滑移边界条件为

$$u|_{y=0} = l_b \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0}, \quad u|_{y=W} = -l_b \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=W}.$$

其中，运动学粘度系数 v_{xx} 与边界滑移长度 l_b 的微观表达式为^[65]

$$v_{xx} = \frac{1}{4} v_F l_{\text{eff}}, \quad l_b = l_{\text{eff}} \frac{A}{3} \frac{1 + p_s}{1 - p_s}. \quad (A \doteq 0.995112 \approx 1)$$

由此不难解得

$$u = V_0 K \left[\lambda + \frac{(e^{\mu \tilde{y}} - 1)(e^{\mu(1-\tilde{y})} - 1)}{e^\mu - 1} \right].$$

其中

$$V_0 = \frac{(-e) E_x \tau_{MR}}{m^*}, \quad K = \frac{e^\mu(1 + \lambda) + e^{-\mu}(1 - \lambda) - 2}{e^\mu(1 + \lambda)^2 - e^{-\mu}(1 - \lambda)^2}.$$

这里，宏观参量 λ , μ 的微观表达式为 ($X_{\text{nd}} := X/W$)

$$\lambda = \frac{l_b}{\sqrt{v_{xx} \tau_{MR}}} = \frac{2A}{3} \frac{1 + p_s}{1 - p_s} \sqrt{\frac{l_{\text{eff,nd}}}{l_{\text{MR,nd}}}}, \quad \mu = \frac{W}{\sqrt{v_{xx} \tau_{MR}}} = \frac{2}{\sqrt{l_{\text{eff,nd}} l_{\text{MR,nd}}}}.$$

可以看到, V_0 代表了动量弛豫散射贡献的 Drude 速度, 由动量弛豫散射对应的弛豫时间 τ_{MR} 决定; λ 代表了边界散射贡献的速度滑移, 与体相散射的无量纲平均自由程 $l_{MC,nd}$, $l_{MR,nd}$ 以及边界镜面反射系数 p_s 均相关; μ 为速度剖面的形状参数, 只与体相散射相关, 且剖面形状在 $\mu \ll 1$ 时接近于抛物线。

下面将上述宏观理论解与文献中的介观理论解进行对比, 并确定宏观电子流体力学方程的适用范围^[44]。这里, 图 4.1 给出了动量弛豫散射平均自由程 $l_{MR,nd} = 5.0$ 时不同镜面反射系数的条件下电导率随动量守恒散射平均自由程 l_{MC} 的变化曲线; 图 4.2 和图 4.3 则给出了弛豫自由程 $l_{MR,nd} = 5.5$ 且边界的镜面反射系数 $p_s = 0.875$ 时不同守恒散射自由程下电子流体的速度剖面。

由图 4.1 可以看到, 当镜面反射系数 p_s 较小且 $l_{MC,nd} < 0.01$ 时, 宏观理论解与介观数值解符合得较好; 从图 4.3 和图 4.3 也可以发现, 当镜面反射系数较大时, 尽管不同 $l_{MC,nd}$ 下宏观理论解与介观数值解的速度剖面形状类似, 但边界滑移速度存在较大差别。当镜面反射系数较大时, 电子输运的非平衡性增强, 边界处的滑移速度将显著增加, 这是造成宏观理论解与介观数值解的电导率曲线出现偏差的主要原因。由对比图容易得到, 宏观理论解与介观精确解吻合较好时对应的 Kn 数范围大致为 $Kn = (l_{MR,nd}^{-1} + l_{MC,nd}^{-1})^{-1} \lesssim 0.01$ 且 $p_s \lesssim 0.5$ 。

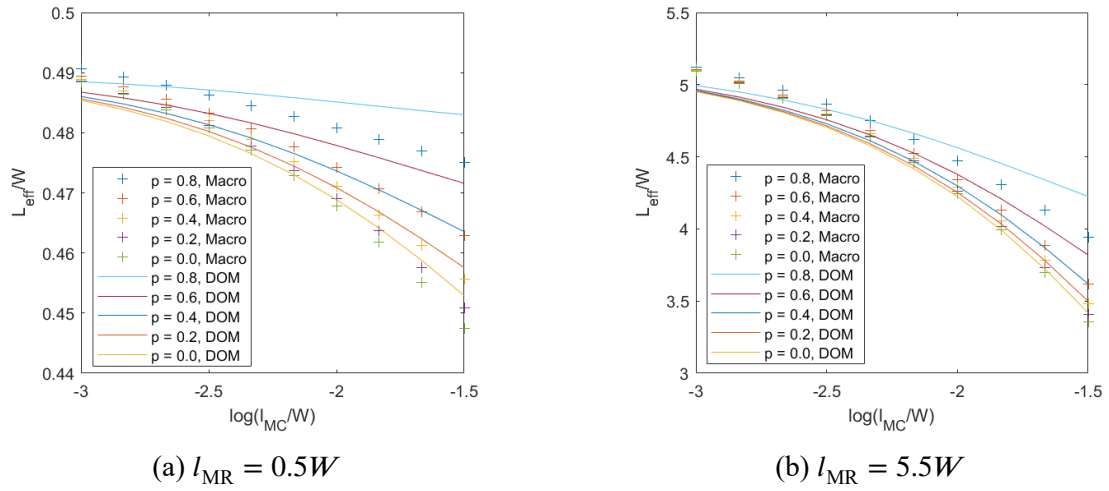
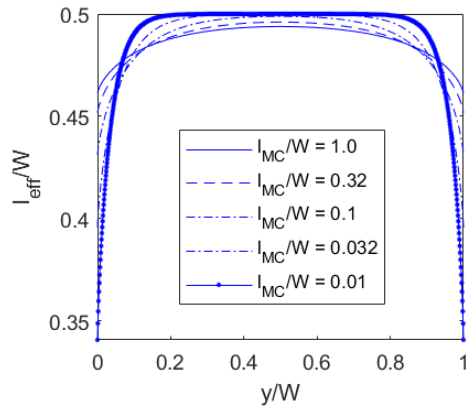
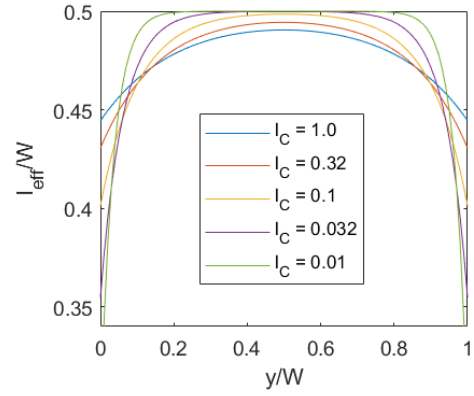


图 4.1 不同相区内宏观理论解与介观数值解电导率曲线的比较

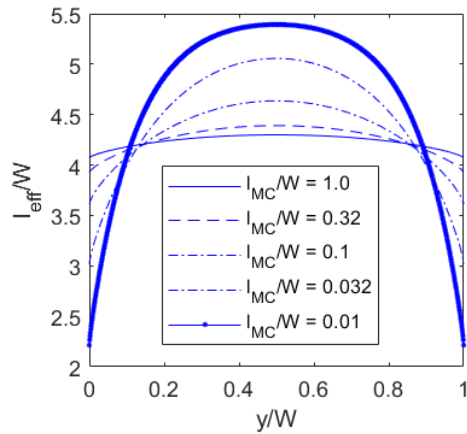


(a) DOM 的介观数值解

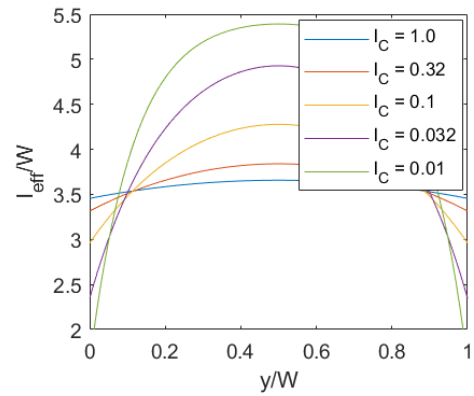


(b) 本文的宏观理论解

图 4.2 $I_{MR} = 0.5W$ 时宏观理论解与介观数值解速度剖面的比较



(a) DOM 的介观数值解



(b) 本文的宏观理论解

图 4.3 $I_{MR} = 5.5W$ 时宏观理论解与介观数值解速度剖面的比较

4.2.3 电子流体流动的特征量

估计电子流体的宏观漂移速度以及 Reynolds 数

$$u = \frac{eEW}{mv_F} \frac{L_{\text{eff}}}{W} \simeq 10^5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}, \quad \nu \simeq 0.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} \Rightarrow \text{Re} = \frac{uW}{\nu} \sim 10.$$

可以推断，此时电子流体有可能呈现边界层流动但不容易出现湍流转捩^[13,28]。通过对电子流体力学方程的无量纲化，也可以定义刻画弛豫项与对流项强弱之比的无量纲量。由于电子-声子散射的弛豫效应，电子流体的动能演化方程中不仅包含粘性耗散，还包括体相阻尼带来的耗散，因此流动应较为稳定。但有数值研究表明，电子流体中仍可能出现预湍流（preturbulence）的现象^[17]。

4.3 本章小结

本章基于介观尺度的电子玻尔兹曼方程，采用升尺度方法得到了扩散相区内宏观尺度的电子流体力学方程。然后在充分讨论电子流体与经典流体的区别与联系的基础上，应用宏观方程求解了二维定常平行剪切流问题，归纳得到了电子输运的扩散相区对应的 Kn 数范围，并通过电子流体流动的特征量分析了电子可能呈现出的宏观流动现象。

前半部分采用基于 Chapman-Enskog 展开的摄动方法和基于 Fourier 谱的 Grad 矩方法，分别从原始形式和偏移形式的玻尔兹曼方程出发，推导了相应的宏观流体力学方程及边界滑移条件，并通过分析高级（阶）项的截断条件给出了各自的适用条件。这一工作弥补了前人研究中对各类散射机制考虑不完整、方程适用条件不清晰等问题，并提出了双弛豫近似的拟平衡分布的概念，为扩散相区内宏观方程的推导提供了新的方法和思路。

后半部分基于由矩方法得到的更为完整的电子流体力学方程，归纳得到了电子流体在流动过程中表现出的四类效应，即弛豫效应、Hall 粘性效应、非平衡效应以及非局域效应。其中，非平衡效应存在经典流体情形的对应即 Knudsen 流，其余效应则为电子流动所特有，但弛豫效应有望向经典流体流动进行推广。然后应用上述宏观方程得到了二维定常平行剪切流的理论解，发现在小 Kn 数的条件下与介观结果定量符合。最后通过宏观方程各项的量级估计，讨论了电子流体呈现经典宏观流动现象的可能性。

第 5 章 结论

5.1 研究总结

本文基于介观尺度的二维电子玻尔兹曼方程，发展建立了介观尺度的离散坐标数值算法和扩散相区的宏观电子水动力学模型，对弹道-扩散效应和磁阻效应两类典型的水动力学现象背后的输运机理进行了细致的研究，为其进一步的理论工作以及后续的潜在应用奠定了基础。主要方法和结论如下：

(1) 发展了二维电子玻尔兹曼方程数值求解的离散坐标算法，它直接对介观尺度的玻尔兹曼方程进行数值离散，从而能够从定量上精确地捕捉弹道效应等强非平衡效应以及中等强度外场作用下电子的输运行为，这在以往的介观理论方法是不易实现的。该算法采用双迎风格式和 Gauss 积分法分别对微分和积分项进行数值离散，数值格式具有较好的稳定性；同时基于缓变沟道近似计算内建电场，能够更为真实地模拟实际的实验条件。

(2) 基于二维电子玻尔兹曼方程的离散坐标算法，研究了微纳材料中典型的电子弹道-扩散效应，发现了电导率随电子-电子散射自由程呈现不同变化趋势的 Knudsen 现象和 Gurzhi 现象，二者分别源于边界散射导致的弹道效应以及电子之间散射导致的粘性扩散效应。另一方面也研究了弹道相区以及粘性扩散相区的磁阻效应，从速度剖面的角度精细地考察了不同相区的流动特征并得到了相应的磁场作用机理，同时发现外加电场强度和内建电场模型对于磁阻效应具有重要的影响。

(3) 采用升尺度方法得到了扩散相区内的宏观流体力学方程，该方程具有形式简洁、物理意义清晰的优势，便于对电子流体的宏观行为进行更为直接的讨论，同时与介观方法相比求解效率更高。采用基于 Chapman-Enskog 展开的摄动方法和基于 Fourier 谱的 Grad 矩方法，推导得到了形式相似的宏观流体力学方程及其边界条件，并通过分析高阶（级）项截断条件给出了各自的适用范围。这一工作弥补了前人研究中对各类散射机制考虑不完整、方程适用条件不清晰等问题，并提出了双弛豫近似的拟平衡分布的概念，为扩散相区内宏观方程的推导提供了新的方法和思路。

(4) 基于扩散相区内的电子流体力学方程，归纳得到了电子流体在流动过程中表现出的四类效应，即弛豫效应、Hall 粘性效应、非平衡效应以及非局域效

应。其中，非平衡效应存在经典流体情形的对应即 Knudsen 流，其余效应则均为电子流动所特有。作为电子宏观流体力学方程的应用，求解了二维定常平行剪切流的理论解，发现在小 Kn 数的条件下宏观结果与介观结果定量符合，与前述的高阶项截断条件一致。最后，通过对宏观方程中各项的量级估计，讨论了电子流体可能呈现出的经典流体力学现象，为此后的研究作出了铺垫。

随着集成电路工业的不断发展，低维电子元件的整体几何尺寸已经与电子平均自由程的量级相当，此时电子在水动力学意义上的粘性性质将显著改变其输运行为。本文研究了微纳尺度低维材料内电子输运的水动力学机理，在介观数值算法与宏观水动力学模型两方面做出了重要的基础性工作，为此后的理论研究以及未来在电子元件设计等方面的潜在应用奠定了基础。

5.2 工作展望

本文的工作在如下几个方面还可以开展进一步的研究：

(1) 本文只关注了晶体导带底附近的电子输运问题，且对材料的有效质量作了各向同性近似。对于费米能级处于禁带的半导体材料以及具有更为复杂能带结构的单层石墨烯等材料，已经无法应用本文的简单玻尔兹曼方程模型进行描述及数值求解，同时也不易建立形式简洁的宏观水动力学模型。对此，需要更仔细地考察载流子的类型，并引入相应的具体能带结构 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ ，在介观数值模拟上进行相应的细致修正。

(2) 本文在发展求解介观玻尔兹曼方程的离散坐标算法时，作了若干关键的简化近似。一是忽略了电子的分布函数对能量的依赖关系，这在室温条件下热激发远低于费米能级的条件下是适用的，而对于高温情况则需要考虑电子能量变化对电子输运行为的影响；二是忽略了偏移形式方程中源项的作用，但在研究电子作为热载子对于材料热导率的贡献，需要考虑温度场非均匀的情况。因此针对上述两类问题，需要对离散坐标算法作进一步的推广。

(3) 本文只发展了适用于求解一维稳态输运问题的离散坐标算法，对于具有更为复杂的几何边界的如方腔流、圆柱绕流等问题求解起来并不简单，同时也无法研究存在周期性外场激励的电子输运行为。由于研究非稳态输运一般至少需要建立二维的数值算法，因此需要建立起能够有效处理具有复杂几何边界的问题的介观数值算法，如格子玻尔兹曼方法。

参考文献

- [1] KRISHNA KUMAR R, BANDURIN D A, PELLEGRINO F M D, et al. Superballistic flow of viscous electron fluid through graphene constrictions[J/OL]. *Nature Physics*, 2017, 13: 1182. <https://doi.org/10.1038/nphys4240>.
- [2] VINEIS C J, SHAKOURI A, MAJUMDAR A, et al. Nanostructured thermoelectrics: Big efficiency gains from small features[J/OL]. *Advanced Materials*, 2010, 22(36):3970-3980. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adma.201000839>.
- [3] CROSSNO J, SHI J K, WANG K, et al. Observation of the dirac fluid and the breakdown of the wiedemann-franz law in graphene[J/OL]. *Science*, 2016, 351(6277):1058-1061. <https://science.sciencemag.org/content/351/6277/1058>. DOI: 10.1126/science.aad0343.
- [4] WHARAM D A, THORNTON T J, NEWBURY R, et al. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance[J/OL]. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1988, 21(8):L209-L214. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/21/8/002>. DOI: 10.1088/0022-3719/21/8/002.
- [5] LI L, PROSKURYAKOV Y Y, SAVCHENKO A K, et al. Magnetoresistance of a 2d electron gas caused by electron interactions in the transition from the diffusive to the ballistic regime [J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 90:076802. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.076802>.
- [6] BOCKHORN L, BARTHOLD P, SCHUH D, et al. Magnetoresistance in a high-mobility two-dimensional electron gas[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2011, 83:113301. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.113301>.
- [7] BOCKHORN L, HODAEI A, SCHUH D, et al. Magnetoresistance in a high mobility two-dimensional electron system as a function of sample geometry[J/OL]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2013, 456:012003. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/456/1/012003>. DOI: 10.1088/1742-6596/456/1/012003.
- [8] HATKE A T, ZUDOV M A, RENO J L, et al. Giant negative magnetoresistance in high-mobility two-dimensional electron systems[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2012, 85:081304. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.081304>.
- [9] GUSEV G M, LEVIN A D, LEVINSON E V, et al. Viscous electron flow in mesoscopic two-dimensional electron gas[J/OL]. *AIP Advances*, 2018, 8(2):025318. <https://doi.org/10.1063/1.5020763>.
- [10] GUERRERO-BECERRA K A, PELLEGRINO F M D, POLINI M. Magnetic hallmarks of viscous electron flow in graphene[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2019, 99:041407. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.041407>.

- [11] BERDYUGIN A I, XU S G, PELLEGRINO F M D, et al. Measuring hall viscosity of graphene's electron fluid[J/OL]. *Science*, 2019, 364(6436):162-165. <https://science.sciencemag.org/content/364/6436/162>. DOI: 10.1126/science.aau0685.
- [12] LUCAS A. An exotic quantum fluid in graphene[J/OL]. *Science*, 2019, 364(6436):125-125. <https://science.sciencemag.org/content/364/6436/125>. DOI: 10.1126/science.aaw9869.
- [13] ZAAANEN J. Electrons go with the flow in exotic material systems[J/OL]. *Science*, 2016, 351(6277):1026-1027. <https://science.sciencemag.org/content/351/6277/1026>. DOI: 10.1126/science.aaf2487.
- [14] BANDURIN D A, TORRE I, KUMAR R K, et al. Negative local resistance caused by viscous electron backflow in graphene[J/OL]. *Science*, 2016, 351(6277):1055-1058. <https://science.sciencemag.org/content/351/6277/1055>. DOI: 10.1126/science.aad0201.
- [15] LEVITOV L, FALKOVICH G. Electron viscosity, current vortices and negative nonlocal resistance in graphene[J/OL]. *Nature Physics*, 2016, 12:672. <https://doi.org/10.1038/nphys3667>.
- [16] TOMADIN A, VIGNALE G, POLINI M. Corbino disk viscometer for 2d quantum electron liquids[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 113:235901. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.235901>.
- [17] GABBANA A, POLINI M, SUCCI S, et al. Prospects for the detection of electronic preturbulence in graphene[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 121:236602. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.236602>.
- [18] DYAKONOV M, SHUR M. Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor: New mechanism of plasma wave generation by dc current[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, 71:2465-2468. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.2465>.
- [19] TOMADIN A, POLINI M. Theory of the plasma-wave photoresponse of a gated graphene sheet[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2013, 88:205426. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.205426>.
- [20] TORRE I, TOMADIN A, GEIM A K, et al. Nonlocal transport and the hydrodynamic shear viscosity in graphene[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2015, 92:165433. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.165433>.
- [21] WAGNER G. Boundary Conditions for Electron Flow in Graphene in the Hydrodynamic Regime[J]. *arXiv e-prints*, 2015.
- [22] ALEKSEEV P S, DMITRIEV A P, GORNYI I V, et al. Counterflows in viscous electron-hole fluid[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2018, 98:125111. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.125111>.
- [23] FALKOVICH G, LEVITOV L. Linking spatial distributions of potential and current in viscous electronics[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119:066601. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.066601>.

- [24] GUO H, ILSEVEN E, FALKOVICH G, et al. Stokes Paradox, Back Reflections and Interaction-Enhanced Conduction[J]. arXiv e-prints, 2016.
- [25] PELLEGRINO F M D, TORRE I, GEIM A K, et al. Electron hydrodynamics dilemma: Whirlpools or no whirlpools[J/OL]. Phys. Rev. B, 2016, 94:155414. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.155414>.
- [26] LUCAS A. Stokes paradox in electronic fermi liquids[J/OL]. Phys. Rev. B, 2017, 95:115425. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.115425>.
- [27] CHANDRA M, KATARIA G, SAHDEV D, et al. Hydrodynamic and ballistic ac transport in two-dimensional fermi liquids[J/OL]. Phys. Rev. B, 2019, 99:165409. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.165409>.
- [28] MOESSNER R, SURÓWKA P, WITKOWSKI P. Pulsating flow and boundary layers in viscous electronic hydrodynamics[J/OL]. Phys. Rev. B, 2018, 97:161112. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.161112>.
- [29] SHERAFATI M, PRINCIPI A, VIGNALE G. Hall viscosity and electromagnetic response of electrons in graphene[J/OL]. Phys. Rev. B, 2016, 94:125427. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.125427>.
- [30] MÜLLER M, SCHMALIAN J, FRITZ L. Graphene: A nearly perfect fluid[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2009, 103:025301. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.025301>.
- [31] DELACRÉTAZ L V, GROMOV A. Transport signatures of the hall viscosity[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2017, 119:226602. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.226602>.
- [32] GANESHAN S, ABANOV A G. Odd viscosity in two-dimensional incompressible fluids [J/OL]. Phys. Rev. Fluids, 2017, 2:094101. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevFluids.2.094101>.
- [33] RAMMER J. Quantum transport theory[M/OL]. Perseus Books, 1998. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=DA5FB6ED8003EE631101765F19469C14>.
- [34] DATTA S. Quantum transport: Atom to transistor[M/OL]. 2nd ed. Cambridge University Press, 2005. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=F3D69E2C70BC61C136337F786AE4042B>.
- [35] NAZAROV Y V, BLANTER Y M. Quantum transport: introduction to nanoscience[M/OL]. 1st ed. Cambridge University Press, 2009. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=51ABE58F11B54671EC4EAF66CCC1A1>.
- [36] FERRY D K. An introduction to quantum transport in semiconductors[M/OL]. 1st ed. Pan Stanford Publishing, 2018. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=c0c7593dc7dd9d483fa223f1aa0dc952>.
- [37] MOLENKAMP L W, DE JONG M J M. Electron-electron-scattering-induced size effects in a two-dimensional wire[J/OL]. Phys. Rev. B, 1994, 49:5038-5041. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.5038>.

- [38] MOLL P J W, KUSHWAHA P, NANDI N, et al. Evidence for hydrodynamic electron flow in pdcoo2[J/OL]. *Science*, 2016, 351(6277):1061-1064. <https://science.sciencemag.org/content/351/6277/1061>. DOI: 10.1126/science.aac8385.
- [39] BERL M, TIEMANN L, DIETSCHE W, et al. Structured back gates for high-mobility two-dimensional electron systems using oxygen ion implantation[J/OL]. *Applied Physics Letters*, 2016, 108(13):132102. <https://doi.org/10.1063/1.4945090>.
- [40] BANDURIN D A, SHYTOV A V, LEVITOV L S, et al. Fluidity onset in graphene[J/OL]. *Nature Communications*, 2018, 9(1):4533. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-07004-4>.
- [41] GALLAGHER P, YANG C S, LYU T, et al. Quantum-critical conductivity of the dirac fluid in graphene[J/OL]. *Science*, 2019, 364(6436):158-162. <https://science.sciencemag.org/content/364/6436/158>. DOI: 10.1126/science.aat8687.
- [42] TOPINKA M A, LEROY B J, SHAW S E J, et al. Imaging coherent electron flow from a quantum point contact[J/OL]. *Science*, 2000, 289(5488):2323-2326. <https://science.sciencemag.org/content/289/5488/2323>. DOI: 10.1126/science.289.5488.2323.
- [43] SCHÜTT M, OSTROVSKY P M, GORNYI I V, et al. Coulomb interaction in graphene: Relaxation rates and transport[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2011, 83:155441. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.155441>.
- [44] DE JONG M J M, MOLENKAMP L W. Hydrodynamic electron flow in high-mobility wires [J/OL]. *Phys. Rev. B*, 1995, 51:13389-13402. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.13389>.
- [45] GUO H, ILSEVEN E, FALKOVICH G, et al. Higher-than-ballistic conduction of viscous electron flows[J/OL]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2017, 114(12): 3068-3073. <https://www.pnas.org/content/114/12/3068>. DOI: 10.1073/pnas.1612181114.
- [46] ALEKSEEV P S, SEMINA M A. Ballistic flow of two-dimensional interacting electrons [J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2018, 98:165412. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.165412>.
- [47] LUCAS A, HARTNOLL S A. Kinetic theory of transport for inhomogeneous electron fluids [J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2018, 97:045105. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.045105>.
- [48] 栗弗席兹, 皮塔耶夫斯基. 物理动理学: 第2版[M]. 徐锡申, 徐春华, 黄京民, 译. 北京: 高等教育出版社, 2008.
- [49] 陈刚. 纳米尺度能量输运和转换: 对电子、分子、声子和光子的统一处理[M]. 周怀春, 李水清, 黄志, 译. 北京: 清华大学出版社, 2014.
- [50] GUO Y, WANG M. Phonon hydrodynamics and its applications in nanoscale heat transport [J/OL]. *Physics Reports*, 2015, 595:1 - 44. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157315003373>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2015.07.003>.

- [51] GUO Y, WANG M. Phonon hydrodynamics for nanoscale heat transport at ordinary temperatures[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2018, 97:035421. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.035421>.
- [52] FUCHS K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals [J/OL]. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1938, 34(1):100-108. DOI: 10.1017/S0305004100019952.
- [53] MACDONALD D K C, SARGINSON K, SIMON F E. Size effect variation of the electrical conductivity of metals[J/OL]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 1950, 203(1073):223-240. <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1950.0136>.
- [54] DINGLE R B, BRAGG W L. The electrical conductivity of thin wires[J/OL]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 1950, 201(1067):545-560. <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1950.0077>.
- [55] CHAMBERS R G, BRAGG W L. The conductivity of thin wires in a magnetic field[J/OL]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 1950, 202(1070):378-394. <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1950.0107>.
- [56] SONDHEIMER E H. The influence of a transverse magnetic field on the conductivity of thin metallic films[J/OL]. *Phys. Rev.*, 1950, 80:401-406. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.80.401>.
- [57] DITLEFSEN E, LOTHE J. Theory of size effects in electrical conductivity[J/OL]. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 1966, 14(130):759-773. <https://doi.org/10.1080/14786436608211970>.
- [58] HOLWECH I, JEPPESEN J. Temperature dependence of the electrical resistivity of aluminium films[J/OL]. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 1967, 15(134):217-228. <https://doi.org/10.1080/14786436708227694>.
- [59] SOFFER S B. Statistical model for the size effect in electrical conduction[J/OL]. *Journal of Applied Physics*, 1967, 38(4):1710-1715. <https://doi.org/10.1063/1.1709746>.
- [60] SONDHEIMER E. The mean free path of electrons in metals[J/OL]. *Advances in Physics*, 1952, 1(1):1-42. <https://doi.org/10.1080/00018735200101151>.
- [61] SCAFFIDI T, NANDIN, SCHMIDT B, et al. Hydrodynamic electron flow and hall viscosity [J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 118:226601. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.226601>.
- [62] BABER W G, MOTT N F. The contribution to the electrical resistance of metals from collisions between electrons[J/OL]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, 1937, 158(894):383-396. <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1937.0027>.

- [63] STEINBERG M S. Viscosity of the electron gas in metals[J/OL]. Phys. Rev., 1958, 109: 1486-1492. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.1486>.
- [64] SHYTOV A, KONG J F, FALKOVICH G, et al. Particle collisions and negative nonlocal response of ballistic electrons[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2018, 121:176805. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.176805>.
- [65] PELLEGRINO F M D, TORRE I, POLINI M. Nonlocal transport and the hall viscosity of two-dimensional hydrodynamic electron liquids[J/OL]. Phys. Rev. B, 2017, 96:195401. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.195401>.
- [66] GURZHI R N. A quantum mechanical transport equation for electrons in metals[J]. Sov. Phys. JETP., 1958, 6:352.
- [67] GURZHI R N, AZBEL M Y. Electron relaxation time in a high frequency electromagnetic field and the surface impedance of a metal[J]. Sov. Phys. JETP., 1960, 11(2).
- [68] GURZHI R N, KOPELIOVICH A I. Low-temperature electrical conductivity of pure metals [J]. Sov. Phys. Usp., 1981, 24(1):17.
- [69] GURZHI R N. Minimum of resistance in impurity-free conductors[J]. Sov. Phys. JETP., 1963, 17:521.
- [70] GURZHI R N. Some features of the electrical conductivity of metals at low temperatures[J]. Sov. Phys. JETP., 1965, 20:953-960.
- [71] GURZHI R P, SHEVCHENKO S I. Hydrodynamic mechanism of electric conductivity of metals in a magnetic field[J]. Sov. Phys. JETP., 1968, 27:1019.
- [72] GURZHI R N, KOPELIOVICH A I, RUTKEVICH S B. Electric conductivity of two-dimensional metallic systems[J]. Sov. Phys. JETP., 1982, 56(1):159-165.
- [73] GURZHI R N, KALINENKO A N, KOPELIOVICH A I, et al. Hydrodynamic effects in the electric conductivity of two-dimensional metals[J]. Sov. Phys. JETP., 1986, 64(2).
- [74] GURZHI R N, KALINENKO A N, KOPELIOVICH A I. Hydrodynamic effects in the electrical conductivity of impure metals[J]. Sov. Phys. JETP., 1989, 69(4):863-870.
- [75] GURZHI R N, KALINENKO A N, KOPELIOVICH A I. Electron-electron momentum relaxation in a two-dimensional electron gas[J/OL]. Phys. Rev. B, 1995, 52:4744-4747. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.4744>.
- [76] GURZHI R N. Hydrodynamic effects in solids at low temperature[J]. Sov. Phys. Usp., 1968, 11:255.
- [77] AVRON J E. Odd Viscosity[J]. arXiv e-prints, 1997.
- [78] MOVSHOVITZ D, WISER N. Electrical resistivity of thin wires at low temperatures: strained whiskers of copper[J/OL]. Journal of Physics: Condensed Matter, 1991, 3(33):6403-6413. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/3/33/017>. DOI: 10.1088/0953-8984/3/33/017.

- [79] GENNARO S D, RETTORI A. Normal electron-electron contribution to the anomalous surface impedance[J/OL]. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1985, 15(9):L227-L230. <https://doi.org/10.1088%2F0305-4608%2F15%2F9%2F003>. DOI: 10.1088/0305-4608/15/9/003.
- [80] MOVSHOVITZ D, WISER N. Normal electron-electron scattering in thin films at low temperatures: Anomalous surface impedance[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 1990, 41:10503-10509. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.10503>.
- [81] ROSS D W. Comments on the solution to the boltzmann equation for a weakly ionized plasma [J/OL]. *Phys. Rev.*, 1967, 153:244-249. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.153.244>.
- [82] KUNHARDT E E. Electron macrokinetics in partially ionized gases: The hydrodynamic regime[J/OL]. *Phys. Rev. A*, 1990, 42:803-814. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.42.803>.
- [83] KAVEHM, WISER N. Electron-electron scattering in conducting materials[J/OL]. *Advances in Physics*, 1984, 33(4):257-372. <https://doi.org/10.1080/00018738400101671>.
- [84] VAN VUCHT R J M, VAN KEMPEN H, WYDER P. Simple transport properties of simple metals: classical theories and modern experiments[J/OL]. *Reports on Progress in Physics*, 1985, 48(6):853-905. <https://doi.org/10.1088%2F0034-4885%2F48%2F6%2F003>. DOI: 10.1088/0034-4885/48/6/003.
- [85] WISER N. The electrical resistivity of the simple metals[J/OL]. *Contemporary Physics*, 1984, 25(3):211-249. <https://doi.org/10.1080/00107518408210706>.
- [86] BASS J, PRATT W P, SCHROEDER P A. The temperature-dependent electrical resistivities of the alkali metals[J/OL]. *Rev. Mod. Phys.*, 1990, 62:645-744. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.62.645>.
- [87] GASPAROV V, HUGUENIN R. Electron-phonon, electron-electron and electron-surface scattering in metals from ballistic effects[J/OL]. *Advances in Physics*, 1993, 42(4):393-521. <https://doi.org/10.1080/00018739300101514>.
- [88] KNUDSEN M. The laws of molecular flow and of inner friction flow of gases through tubes [J/OL]. *Journal of Membrane Science*, 1995, 100(1):23 - 25. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037673889400299E>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0376-7388\(94\)00299-E](https://doi.org/10.1016/0376-7388(94)00299-E).
- [89] YU Z Z, HAERLE M, ZWART J W, et al. Negative temperature derivative of resistivity in thin potassium samples: The gurzhi effect?[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, 52:368-371. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.368>.
- [90] JURA M P, GROBIS M, TOPINKA M A, et al. Spatially probed electron-electron scattering in a two-dimensional electron gas[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2010, 82:155328. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.155328>.

- [91] BRAEM B A, PELLEGRINO F M D, PRINCIPI A, et al. Scanning gate microscopy in a viscous electron fluid[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2018, 98:241304. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.241304>.
- [92] CASTRONETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The electronic properties of graphene [J/OL]. *Rev. Mod. Phys.*, 2009, 81:109-162. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>.
- [93] LUCAS A, FONG K C. Hydrodynamics of electrons in graphene[J/OL]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2018, 30(5):053001. <https://doi.org/10.1088%2F1361-648x%2Faaa274>. DOI: 10.1088/1361-648x/aaa274.
- [94] MACKENZIE A P. The properties of ultrapure delafossite metals[J/OL]. *Reports on Progress in Physics*, 2017, 80(3):032501. <https://doi.org/10.1088%2F1361-6633%2Faa50e5>. DOI: 10.1088/1361-6633/aa50e5.
- [95] KOTOV V N, UCHOA B, PEREIRA V M, et al. Electron-electron interactions in graphene: Current status and perspectives[J/OL]. *Rev. Mod. Phys.*, 2012, 84:1067-1125. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.84.1067>.
- [96] HARTNOLL S A. Theory of universal incoherent metallic transport[J/OL]. *Nature Physics*, 2014, 11:54. <https://doi.org/10.1038/nphys3174>.
- [97] LUCAS A, CROSSNO J, FONG K C, et al. Transport in inhomogeneous quantum critical fluids and in the dirac fluid in graphene[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93:075426. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.075426>.
- [98] LUCAS A, DAS SARMA S. Electronic hydrodynamics and the breakdown of the wiedemann-franz and mott laws in interacting metals[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2018, 97:245128. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.245128>.
- [99] ALEKSEEV P S. Negative magnetoresistance in viscous flow of two-dimensional electrons [J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117:166601. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.117.166601>.
- [100] ALLEN P B. New method for solving boltzmann's equation for electrons in metals[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 1978, 17:3725-3734. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.17.3725>.
- [101] GUO Y, WANG M. Lattice boltzmann modeling of phonon transport[J/OL]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 315:1 - 15. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999116001935>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.03.041>.
- [102] COELHO R C, DORIA M M. Lattice boltzmann method for semiclassical fluids[J/OL]. *Computers and Fluids*, 2018, 165:144 - 159. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793018300276>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.01.019>.
- [103] ONSAGER L. Reciprocal relations in irreversible processes. i.[J/OL]. *Phys. Rev.*, 1931, 37: 405-426. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.37.405>.

- [104] ONSAGER L. Reciprocal relations in irreversible processes. ii.[J/OL]. Phys. Rev., 1931, 38: 2265-2279. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.38.2265>.
- [105] ANDREEV A V, KIVELSON S A, SPIVAK B. Hydrodynamic description of transport in strongly correlated electron systems[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2011, 106:256804. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.256804>.
- [106] LEVCHENKO A, XIE H Y, ANDREEV A V. Viscous magnetoresistance of correlated electron liquids[J/OL]. Phys. Rev. B, 2017, 95:121301. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.121301>.
- [107] ALEKSEEV P S, DMITRIEV A P, GORNYI I V, et al. Nonmonotonic magnetoresistance of a two-dimensional viscous electron-hole fluid in a confined geometry[J/OL]. Phys. Rev. B, 2018, 97:085109. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.085109>.
- [108] TOKATLY I, PANKRATOV O. Hydrodynamic theory of an electron gas[J/OL]. Phys. Rev. B, 1999, 60:15550-15553. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.15550>.
- [109] BARLETTI L. Hydrodynamic equations for an electron gas in graphene[J/OL]. Journal of Mathematics in Industry, 2016, 6(1):7. <https://doi.org/10.1186/s13362-016-0023-7>.
- [110] MENDOZA M, HERRMANN H J, SUCCI S. Hydrodynamic model for conductivity in graphene[J/OL]. Scientific Reports, 2013, 3:1052. <https://doi.org/10.1038/srep01052>.
- [111] NAROZHNY B N, GORNYI I V, TITOV M, et al. Hydrodynamics in graphene: Linear-response transport[J/OL]. Phys. Rev. B, 2015, 91:035414. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.035414>.
- [112] NAROZHNY B N, GORNYI I V, MIRLIN A D, et al. Hydrodynamic approach to electronic transport in graphene[J/OL]. Annalen der Physik, 2017, 529(11):1700043. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.201700043>.
- [113] 汪志诚. 热力学与统计物理[M]. 5 版. 北京: 高等教育出版社, 2013.
- [114] 朱明善, 刘颖, 林兆庄, 等. 工程热力学[M]. 北京: 清华大学出版社, 2011.
- [115] 计光华, 计洪苗. 微流动及其元器件[M]. 北京: 高等工业出版社, 2009.
- [116] 王尚云, 张树发, 马燕云. 粒子输运问题的数值模拟[M]. 北京: 国防工业出版社, 2013.
- [117] BHATNAGAR P L, GROSS E P, KROOK M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems[J/OL]. Phys. Rev., 1954, 94:511-525. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.94.511>.
- [118] GROSS E P, KROOK M. Model for collision processes in gases: Small-amplitude oscillations of charged two-component systems[J/OL]. Phys. Rev., 1956, 102:593-604. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.102.593>.
- [119] CALLAWAY J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures[J/OL]. Phys. Rev., 1959, 113:1046-1051. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.113.1046>.
- [120] 郭洋裕. 非傅里叶导热的宏观声子运输模型及非平衡热力学[D]. 北京: 清华大学, 2018.

- [121] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1998.
- [122] 胡安, 章维益. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2005.
- [123] ASHCROFT N W, MERMIN N D. Solid state physics[M/OL]. 1st ed. Brooks Cole, 1976. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=93A70859CACE383B5CB02ABD99E132C1>.
- [124] KITTEL C. Introduction to solid state physics[M/OL]. 8th ed ed. Wiley, 2005. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=D37E470A008E14DC939AE53E1EB2F988>.
- [125] WEN X G. Quantum field theory of many-body systems: from the origin of sound to an origin of light and electrons[M/OL]. Oxford University Press, 2004. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=B1B857EFBFFCEB74E79F2030B2413622>.
- [126] GIULIANI G, VIGNALE G. Quantum theory of the electron liquid[M/OL]. Cup ed. Cambridge University Press, 2005. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=55C403C67B8A073AEF15178D61E51D87>.
- [127] ZIMAN J M. Electrons and phonons: The theory of transport phenomena in solids[M/OL]. Oxford University Press, USA, 1960. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=A484D289202D7EB84BDBD8DFB33781C6>.
- [128] CHAPMAN S, COWLING T G, CERCIGNANI C. The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases [M/OL]. 3rd ed. Cambridge University Press, 1995. <http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=7C332C877699C757D6C5A6585A0CFE76>.
- [129] GUO Y, WANG M. Heat transport in two-dimensional materials by directly solving the phonon boltzmann equation under callaway's dual relaxation model[J/OL]. Phys. Rev. B, 2017, 96:134312. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.134312>.
- [130] JOSHI A A, MAJUMDAR A. Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin films[J/OL]. Journal of Applied Physics, 1993, 74(1):31-39. <https://doi.org/10.1063/1.354111>.
- [131] CHEN G. Ballistic-diffusive heat-conduction equations[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2001, 86: 2297-2300. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.2297>.

附录 A 外文资料的书面翻译

高迁移率导体线中具有水动力学特征的电子流动

摘要：通过观察实测得到的静电约束下 (Al,Ga)As 导体线的微分电阻曲线可以发现，这种异质结构中存在着二维电子气的水动力学流动。实验中采用电流的热效应来增加并控制导体线中电子-电子散射的强度。在扩散性的边界散射与电子-电子散射的共同作用下，导体线的微分电阻随着电流强度的增加将呈现先增加然后减小的变化趋势，这里不同的变化特征可以依次看成是气体运输的 Knudsen 流与 Poiseuille 流在电子流动中的类比。本文综合考虑了电子-杂质散射、电子-电子散射与边界散射的影响，应用 Boltzmann 输运方程求解得到了任意散射参数下电子流动的解。通过计算导体线中的电子流动速度剖面，说明了正常的均匀流逐步演变为 Poiseuille 流的过程。用栅极标定的导体线的边界散射参数可以通过 Knudsen 效应的幅度计算得到。本文中的理论结果与实验结果符合得很好。

1 引言

Knudsen 在其 1909 年的一篇研究毛细管内气体流动的论文中提到，管内压降与气体流率的比值随着气体密度的增加将呈现先增加然后减少的变化趋势。这种现象背后的机制为，随着气体分子数密度的增加，分子间的碰撞将变得越来越频繁。在密度较低时，也就是在所谓的 Knudsen 输运相区中，气体分子几乎是相互独立地运动，因此流动主要是由平行于导体线轴线运动的气体分子贡献的，这些分子在相邻两次与壁面碰撞的间隔内会移动较长的距离^①。一次偶然的分子间碰撞，虽然由于其动量守恒的特征不会带来体相的阻力，但是会驱使平行于轴线运动的分子撞向壁面从而缩短了相邻两次与壁面碰撞间隔内运动轨迹的长度。因此，在这一相区，分子间碰撞几率的增加将导致粒子轴向动量壁面耗散^②的增强。然而，在密度较高时，分子在相邻两次与壁面碰撞的间隔内会经历多次分子间碰撞，这将会导致一种类似随机游走的行为。最终，流动将演变为层流，亦即所谓 Poiseuille 流，此时分子与壁面的有效碰撞强度将减弱。

通过电子与气体分子的经典扩散输运之间的类比，可以预见到电子输运中

① 译者注：这里所指的较长距离是相对于分子在体相的平均自由程而言的。

② 译者注：此处所谓壁面耗散是指轴向动量在垂直壁面方向的衰减速率。

也可能存在类似于 Knudsen 流到 Poiseuille 流的转变。在电子输运中，电子-电子 (e-e) 散射过程^①对应于气体分子之间的碰撞。这种散射对体相材料的电阻率没有影响，因为该过程中电子分布的总动量是守恒的。e-e 散射在经典输运相区的效应只可能在薄膜或导体线等高纯度低维材料的电阻率特性中显现，这与气体输运中呈现水动力学流动现象的条件类似。一般来说，水动力学流动要求样品宽度 W 在量级上不超过体相材料的电子-杂质 (e-i) 散射平均自由程 l_b 。上述两个尺度需要与 e-e 散射平均自由程 l_{ee} 作比较：当 $l_{ee} > W$ 时，可以预料电阻率将随 e-e 散射率的增加而增加，此即电子流的 Knudsen 效应；而当 $l_{ee} < W$ 时，电阻率应该随着 e-e 散射率的增加而减小，此即电子 Poiseuille 流。实际上，早在 1963 年 Gurzhi 便已经从理论上预言了后一现象的存在，因此该效应也被称作 Gurzhi 效应。然而，实验中很难获得能够证实上述两种效应的可靠结果，这是由于在电子输运过程中存在着与气体流动迥异的体相耗散机制，这种机制通常会阻碍电子流动的 Knudsen 相区及 Gurzhi 相区的涌现：首先，金属中的电子会经历体相的 e-i 散射；并且，由于 e-e 散射率通常受样品晶格温度影响，由此带来的效应会被电子-声子 (e-p) 散射掩盖；更进一步地，温度上升也会增强 e-e 倒逆散射的散射率，而这种散射会造成体电阻率的增加；最后，材料实际的 Fermi 面形状相对于理想球形 Fermi 面的偏离也会影响对实验结果的解释。

由于上述如此众多的复杂因素，只有很少一部分实验暗示了 e-e 散射效应的存在性。大部分实验采用金属钾作为实验材料，它作为一种典型简单金属具有足够接近球形的 Fermi 面。然而，目前观测到的给定晶格温度下电阻率的变化只有总电阻率的约 0.01%，这主要源于偏小的 l_b 值以及 e-p 散射的存在。Yu 等报道了温度不超过 1 K 时，钾导体线的电阻率关于温度的导数 ($d\rho/dT$) 呈现负值的现象。然而，该现象是否可以归于 Gurzhi 效应仍存在争议，因为此时的实验温度条件下 $l_{ee} > W$ 。该组随后发表的文章表明上述负 ($d\rho/dT$) 的现象可能源于金属样品制备时的缺陷，同时该组也报道了在金属电阻率特性中存在的类 Kondo 效应^②。相对应地，较宽导体线中观察到的正 ($d\rho/dT$) 的现象被 Movshovitz 和 Wisner 解释为类 Knudsen 流的行为，它是 e-e 散射与 e-p 散射共同的结果。类似的机制也被用来解释极薄的钾薄膜中反常强烈的正 ($d\rho/dT$) 的现象。然而，直至今现在，据我们所知，仍然没有实验观察到电子的 Poiseuille 流动，也没有实验报

① 本文中，e-e 散射仅指保持总动量守恒的散射，这也被称为正规 e-e 散射。相反的是，倒逆 e-e 散射并不保持总动量守恒，每次在正文中提到这一问题时都已被明确地指出。正如我们在正文中讨论的那样，在本文研究的二维电子气中不存在倒逆 e-e 散射。

② 译者注：Kondo 效应是指金属中由于存在某些磁性杂质而造成的电阻率-温度曲线出现极小值的现象。

道在 Knudsen 流与 Gurzhi 流的过渡相区中存在有电阻率的 Knudsen 极大值的现象。

本文介绍了对二维导体线中 Knudsen 和 Gurzhi 输运现象的实验与理论研究。实验中采用静电约束下的 (Al,Ga)As 异质结构中的二维电子气 (2DEG) 作为导体线。应用上述材料研究具有水动力学特征的电子流动具有如下优势：首先，由于材料的高纯度以及电子束蚀刻的高分辨率，样品很容易满足 $l_b > W$ 的条件；其次，该样品中不存在 e-e 倒逆散射，这是由于材料较低的电子数密度以及近乎完美的球形 Fermi 面；第三，电子-声学声子耦合效应在 (Al,Ga)As-2DEG 系统中非常弱，这使得我们不必改变整个样品的温度 T ，而是通过给样品加直流电直接改变导体线内的电子温度 T_e 的方式来探究 e-e 散射的影响。此前已经证实，这种电流热效应技术在研究纳米结构的热电现象时十分有用。本文研究的导体线在边界处放置有一对量子点接触的电势源，考虑到点接触电势源的热电系数是量子化的，我们可以由热电测量出的电流 I 进一步得到导体线中的电子温度 T_e 。这样，我们就能够有选择性地调节导体线内部的 e-e 散射率，从而得以更为清晰地展现导体电阻特性中呈现的水动力学流动效应。

在实验中我们测量了微分电阻 dV/dI 随电流 I 的变化曲线 $dV/dI \sim I$ ^①。从电阻曲线中我们可以辨别出三个不同的相区：(1) 在 $I = 0$ 附近，我们观察发现 dV/dI 随 I 的增大而增大，这就是所谓的 Knudsen 效应，可以看到电阻变化幅度约为总电阻的 10%；(2) 接下来的一段中 dV/dI 将随 I 的继续增大而减小，这就是所谓的 Gurzhi 效应，可以看到电阻的相对变化幅度可以达到 20%；(3) 随着 I 的继续增大， dV/dI 将会再次增大，此时电流的热效应造成了晶格温度的升高，e-p 散射因而增强并导致了电阻的增加^②。在 (1) 和 (2) 两个相区的过渡段将出现电阻的 Knudsen 极大值，而相区 (2) 和 (3) 间电阻的极小值实际上是 Gurzhi 最先发表的文章中其中一篇的主题。

为了理解上述实验结果，我们发展了一套基于 Boltzmann 输运方程的理论，该理论能够给出与实验定性一致的结果。Boltzmann 方法在本世纪的上半叶曾一直用于研究低维导体电阻特性的尺寸效应，如 Fuchs 和 Dingle 曾分别研究了薄膜和细导体线的情形。Chambers 提出了求解 Boltzmann 方程的一个极具洞察力的方法，他将电导率的解表达为了有效平均自由程的形式，该自由程描述了电子经过体相 e-i 散射与边界散射等各类散射后的平均自由运动距离。这一处理方式

① 电阻与微分电阻之间的关系为 $dV/dI = R + IdR/dI$ 。

② 译者注：此时，电子流动逐渐演变至所谓 Ohmic 相区，主要特征是流动速度剖面趋于均匀。

考虑了扩散性的边界散射^①，即边界处的一部分入射电子被镜面反射，而其余入射电子经历漫反射从而各向同性化。这样，边界散射便可由所谓的镜面反射系数来刻画^②。Soffer 对此给出了一个更为接近实际的处理，即考虑了电子的波动特性，结果表明镜面反射系数应与电子掠射角度有关。从文献 22 可以看出，与 Dingle 的原始理论相比，基于角度依赖的镜面反射系数计算得到的细导体线电阻率与实验符合得更好。

如何将 e-e 散射的影响引入 Boltzmann 方法并非显而易见，而且前人的大多数处理方法只能局限于处理一定参数范围内的问题。在 Gurzhi 的先驱性工作中，他考虑了 $l_{ee} \ll l_b, W$ 的情形。研究表明在这种条件下，从 Boltzmann 方程能够推导得到一个 Navier-Stokes 类型的方程。相对应的 Knudsen 相区即 $l_{ee} \gg l_b, W$ 的情形则已由 Movshovitz 和 Wisner 讨论过。在电子至多连续经历一次 e-e 散射的假定下，他们采用 Chambers 的方法近似计算了电子的有效平均自由程。在文献 23 中，Gurzhi 及其合作者给出了处理该相区的另一种方法，即求解 Boltzmann 方程的渐近解。这种方法也允许将 e-e 散射的具体特征纳入考虑范围，如各向同性散射与小角度散射的区分。对于处理由 Knudsen 相区到 Gurzhi 相区的过渡区的方法，我们只了解到了以下两种。第一种方法是由 Black 提出的用于计算导体线内有效平均自由程的蒙特卡洛方法。尽管囿于当时有限的计算能力，采用该方法得到的结果并不是十分精确，但是仍然有电阻率的 Knudsen 极大值现象出现。同时，计算结果显示出了与各向同性的小角度 e-e 散射相同的结果。第二种方法是由 De Gennaro 和 Rettori 提出的，主要是通过求解带有 Callaway 散射项的 Boltzmann 方程。Callaway 提出的散射项引入了一项趋于带有净漂移速度的偏移平衡分布函数的弛豫项，从而考虑了 e-e 散射的影响。然而正如 Gurzhi 等人指出的那样，文献 25 的最终结果是有误的，因为净漂移速度的空间分布被忽略了。

我们的理论推导基于与文献 25 类似的动理学方程，得到了相应 Boltzmann 方程的自洽解。这一理论给出了在参数 l_{ee}, l_b, W 的任意取值下均成立的 Boltzmann 分布函数的解析表达式。我们也将看到，将 Boltzmann 分布函数表达为有效平均自由程的处理方法是十分机智的。在 $l_{ee} \gg l_b, W$ 的相区内，我们给出的解与 Movshovitz 和 Wisner 的结果是等价的，因此我们为他们将 e-e 散射纳入电子运动轨迹的方法提供了一种形式化的基础。实际上，我们的方法还可以用来描述由 Knudsen 流到 Poiseuille 流的转变，这可以从电子沿导体线的流向速度剖面演化

① 译者注：即带有部分漫反射成分的边界散射。

② 译者注：具体地说，我们将在边界处的所有入射电子中被镜面反射的比例称为镜面反射系数。

过程中看出。

在三维情况下，正如先前大多数处理所指出的那样，Fermi 面附近热激发电子形成的薄壳内的 e-e 散射率与 T^2 成正比，这一结论可以从众所周知的对相空间的讨论中得到。但对于二维电子气而言，e-e 散射率将与 $T^2 \ln T$ 成正比。Laikhtman 研究发现，对于新加入电子在零温二维电子气中弛豫效应来说，小角度散射是重要的。Gurzhi 及其合作者也讨论了二维电子气中 e-e 散射的特性。我们采用的 e-e 散射项形式最早由 Callaway 引入，尽管并非源于微观的分析，但却抓住了 e-e 散射最主要的特征，即电子总动量的守恒性。正如后文呈递的那样，这一简化的散射项形式最引人注目之处就在于可以由此得到 Boltzmann 方程的一个精确解（或称精确解意义上的数值结果）。

我们通过以下三个步骤对比了实验与理论的结果：首先，由点接触温度计的结果给出 $T_e \sim I$ 的关系；接着，应用 Giuliani 和 Quinn 提出的公式计算 $l_{ee}(T_e)$ 的表达式；最后，通过求解 Boltzmann 方程得到给定 l_{ee} 下的导体线电阻率。我们由此得到了在 Knudsen 和 Gurzhi 相区均符合得很好的结果。但对于相区 (3)，其主要机制为格子温度升高导致 e-p 散射增强进而提高了电阻率，因此这已经超出了本文理论的适用范围。通过 Knudsen 效应的幅度，我们可以得到用栅极标定的导体线的边界散射参数。

此前我们已经发表了一篇概括了本文实验结果的报道。这里，我们将进行更为广泛的讨论，尤其会关注理论模型的细致推导以及理论结果与实验的对比。本文的大纲如下：第 II 节将呈现我们的实验结果；第 III 节将介绍基于 Boltzmann 方程的理论模型；求解的过程及结果将放在第 IV 节；第 V 节将对比理论与实验的结果；第 VI 节将叙述本文的结论。附录 A 和附录 B 提供了理论计算中的部分技术细节。

2 实验观测：Knudsen 与 Gurzhi 输运相区

我们的实验样品分别采用两种不同的 (Al,Ga)As 异质结构制造而成，二者内部均存在有高迁移率的二维电子气；材料的生长制备由位于英国萨里郡红丘市的菲利普研究实验室完成。实验中采用的导体线是应用分离式电极技术通过二维电子气的静电约束制作而成的。具体而言，我们在异质结构的顶部蚀刻出了一个 Hall 棒状的台面，接着在其上使用电子束蚀刻得到了钛金栅极的图案，示意图见图 A-1 的小图。导体线的蚀刻宽度 $W_{\text{lith}} \simeq 4.0 \mu\text{m}$ （注意导体线的实际宽度 W 由于静电损耗可能会窄一些），长度处于 20 到 120 μm 之间不等。量子点接触施加在导体线的各个端点处。这里我们采用了三种类型的样品，其长度 L ,

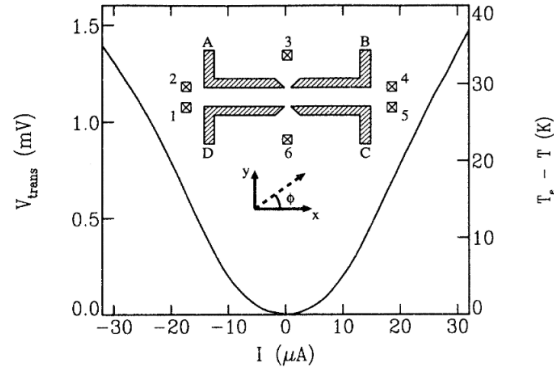


图 A-1 在 $T = 1.5 \text{ K}$ 下导体线样品 I 内热电压 $V_{\text{trans}} \equiv V_6 - V_3$ 和电子相对晶格温升 $T_e - T$ 对加热电流 I 的依赖曲线。点接触 AB 用于调节热电系数的最大值， CD 用于调节其零点。小图的阴影区展现了用于标定导体线的栅极图案以及相应的点接触电压探针。导体线宽度 W 一般为 $4 \mu\text{m}$ ，长度在 20 到 $120 \mu\text{m}$ 之间不等。内部带叉的方块代表 Ohmic 接触。用于理论建模的坐标图例也已在小图内表明。

宽度 W ，电子数密度 n 以及平均自由程 l_b 等参数见图表 A-2。在进行输运性质的测量时，样品被放置在温度不低于 1.5 K 的低温恒温器中，磁感应强度置零。出于测量敏感性的考虑，我们采用标准的低频锁定技术在 $100 \mu\text{V}$ 直流电压下测量点接触与导体线的微分电阻。所有的测量均采用四端点几何的方式进行。

Sample	L (μm)	W_{lith} (μm)	W (μm)	n (10^{11} cm^{-2})	l_b (μm)	α
I	20.2	3.9	3.5	2.2	12.4	0.6
II	63.7	4.0	3.6	2.7	19.7	0.7
III	127.3	4.0	3.6	2.7	19.7	0.7

图 A-2 本文实验样品的长度 L ，蚀刻宽度 W_{lith} ，电流区域实际宽度 W ，电子数密度 n ，平均自由程 l_b [样品 I 为 1.5 K 条件下，样品 II 和 III 为 1.8 K 条件下]，以及镜面反射系数 α 。

为了调节导体线内的电子温度，我们在导体线的 Ohmic 接触点 1 和 5 处施加了 $I \equiv I_{15}$ 的加热电流，该电流一般要比测量用直流电流大一个量级。由于能量的耗散，导体线内电子的平均动能将增加。得益于频繁的 e-e 散射过程，导体线内的电子分布函数会迅速趋于温度 T_e 下的热化 Fermi 分布函数，其温度 T_e 要高于晶格温度 T 。这一温升可以通过导体线边界的量子点接触测量得到：由于导体线外部区域的电子与晶格处于相同的温度，在点接触 AB 与 CD 处均会建立热电压，这可以通过测量横向电压 $V_{\text{trans}} \equiv V_6 - V_3$ 得到。注意 V_{trans} 并不包含沿导体线的压降的贡献，因为点接触 AB 与 CD 关于导体线是对称的。这样，我

们便有

$$V_{\text{trans}} \equiv V_6 - V_3 = (S_{AB} - S_{CD})(T_e - T), \quad (\text{A-1})$$

这里 $S_{AB(CD)}$ 代表点接触 $AB(CD)$ 处的热电系数。

与电导率类似，量子点接触的热电系数 S 也会出现确定的量子尺寸效应：与量子电接触的电导率随分离式栅极电压呈现阶跃变化不同，其热电系数会呈现振荡特征。外加栅极电压控制着量子点接触处于 Fermi 能级以下的一维子带的数目。当量子点接触的 Fermi 能级落入两个子带之间是，电导率将被量子化，而热电系数 $S \simeq 0$ 。然而，当其 Fermi 能级刚好与第 N 条子带的底部重合时，电导率将处于第 N 个和第 $N + 1$ 个峰之间，而热电系数则达到了最大值。此时，对于传输概率为阶跃函数的点接触来说，热电系数为

$$S = -\frac{k_B}{e} \frac{\ln 2}{N - \frac{1}{2}}, \quad (\text{A-2})$$

这里 $N > 1$ 。量子点接触中热电系数的量子振荡效应由 Streda 预言，并且已被其他组的实验报道所证实。这里，我们使用这一效应来测量导体线内部的电子温度：我们将点接触 CD 调节至电导率的峰值，从而使得 $S_{CD} \simeq 0$ ，同时将点接触 CD 调节至热电系数的峰值 [$G_{AB} = 1.5 \times 2e^2/h$ ，这里 $S_{AB} \simeq -40 \mu\text{V/K}$]。利用这种方法测量得到的样品 I 中 V_{trans} 随直流加热电流 I 变化曲线如图 A-1 所示。通常来说，对于电流 $|I| \lesssim 20 \mu\text{A}$ 、晶体温度 $T \lesssim 2 \text{K}$ 的情形，电子温度 T_e 可以近似表达为

$$T_e = T + \left(\frac{I}{W}\right)^2 \frac{C}{\sigma}, \quad (\text{A-3})$$

这里 σ 为导体线的电导率，拟合常数 $C \simeq 0.05 \text{m}^2\text{K/W}$ 。显然，这样一个 T_e 关于 I 的二次函数关系正是我们所期望的对 Joule 耗散的简单近似。当电流 $|I| > 20 \mu\text{A}$ 时，情况将变得复杂得多，因为此时由于电流的热效应较强，晶格温度 T 也将随之升高。

本文的主题即电子流动的水动力学效应可以从导体线的微分电阻 $dV/dI \equiv dV_{24}/dI_{15}$ 随直流加热电流 I 的变化曲线中观察到。在一系列晶格温度下获得的样品 I/II/III 的实验结果如图 A-3 和图 A-4 所示。图中也展示了理论计算的结果，其导出过程我们将在第 V 节进行讨论。可以看到，图中所有的变化曲线都展现出了鲜明的非单调特征。微分电阻曲线的这一非单调特征也是本文关注的焦点，我们将会看到这实际上来源于电子 Knudsen 流与 Poiseuille 流的行为差异。

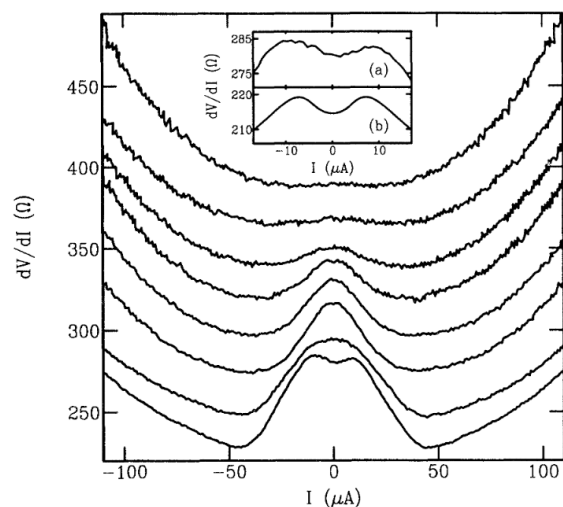


图 A-3 图中为在不同晶格温度下导体线样品 I 内微分电阻 dV/dI 随电流 I 的变化曲线, 从上至下分别对应于 $T = 24.7, 20.4, 13.6, 8.7, 4.4, 1.5$ K。上方小图 (a) 为 $T = 1.5$ K 结果的放大图; 小图 (b) 为第 V 节的理论结果。

这里我们首先要说明的是, 诸如弱局域化等对高迁移率二维电子气电阻特性的量子修正在本文的实验温度下无法通过测量得到。这意味着上述非单调特征只能是经典效应的结果。通过对图 A-3 和图 A-4 中较低晶格温度下结果的进一步观察, 可以发现引言一节中提到的三个电阻特性相区确实存在: (1) 首先 dV/dI 随着 I 的增加而不断增大, 这可以归于 Knudsen 流; (2) 接着 dV/dI 随着 I 的进一步增加开始减小, 这就是 Gurzhi 相区; (3) 当 I 超过一定阈值时, dV/dI 由于晶格温度升高而呈现近似二次函数的增长。我们只在最后一个相区发现邻近处测得的晶格温度有所上升, 这说明近似二次函数的增长行为 (3) 是源于晶格的 Joule 热效应以及 e-p 散射的线性增强。通过更细致的观察可以发现, 导体线 I (见图 A-3) 比导体 II 和 III 的 Knudsen 效应要弱一些, 从后面的讨论中可以看到这一结果是由于导体线 I 的 l_b/W 比值更小造成的。随着晶格温度 T 的增加, 我们可以从图 A-3 中看到两个非常明显的效应。一方面, $I = 0$ 处的电阻逐渐增加, 这是 e-p 散射增强使得 l_b 减小的结果。另一方面, 电阻特性的水动力学效应逐渐消失, 其中 Knudsen 效应与 Gurzhi 效应相比临界温度更低^①。这是由于随着晶格温度 T 的升高, $I = 0$ (此时 $T_e = T$) 附近的 l_{ee} 会逐渐减小。还有一点需要指出的是, 在 $I = 0$ 附近导体线样品 III 切线电阻 dV/dI 初始增加 (Knudsen 效应) 的幅度是导体线样品 II 的两倍左右。这说明 Knudsen 效应的幅度与导体线长度有关, 而并非源自导体线入口效应等因素。

为了理解第 I 节提到的电子流动的水动力学现象如何对应于 dV/dI 的反常

① 译者注: 这意味着, 随着晶格温度 T 的升高, Knudsen 效应消失得更快。

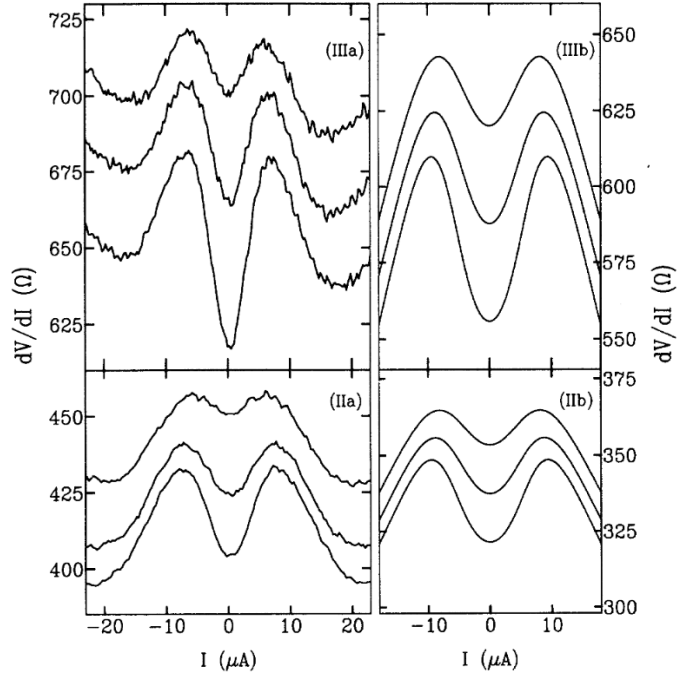


图 A-4 图中为在不同晶格温度下导体线样品 II 和 III 内微分电阻 dV/dI 随电流 I 的变化曲线，从上至下分别对应于 $T = 4.5, 3.1, 1.8$ K。在电流较大时，相应的图像呈现与图 A-3 类似的近似二次函数增长趋势。左图 (IIa) 和 (IIIa) 为实验结果；右图 (IIb) 和 (IIIb) 为理论计算结果，见第 V 节。

行为，我们不妨估计一下在电流 $I = 15 \mu\text{A}$ 时导体线样品 I 中的 e-e 散射平均自由程 l_{ee} ，此时系统处于 dV/dI 下降的 Gurzhi 相区。根据式 (A-3)，电流 $I = 15 \mu\text{A}$ 对应于电子温度 $T_e \approx 16$ K（在晶格温度 $T = 1.5$ K 下）。我们有 $l_{ee} = v_F \tau_{ee}$ ，这里 v_F 为 Fermi 速度，并且 e-e 散射平均自由时 τ_{ee} 由下式给出

$$\frac{1}{\tau_{ee}} = \frac{E_F}{h} \left(\frac{k_B T_e}{E_F} \right)^2 \left[\ln \left(\frac{E_F}{k_B T_e} \right) + \ln \left(\frac{2q}{k_F} \right) + 1 \right]. \quad (\text{A-4})$$

这里， $q = me^2/2\pi\epsilon_r\epsilon_0\hbar^2$ 为 Thomas-Fermi 屏蔽效应特征波矢。我们得到 $l_{ee} \approx 0.8 \mu\text{m}$ ，这与 W 相比要小得多。在这一极限条件下，电子将会在频繁的 e-e 散射作用下经历随机游走，这样我们便可以暂且将 dV/dI 的减小归结于 Gurzhi 效应。对于电流小于 $8 \mu\text{A}$ 的情形， dV/dI 呈现出单调递增的趋势。实际上，由于在 $I = 8 \mu\text{A}$ 且 $T = 1.5$ K 时 $l_{ee} \approx 5 \mu\text{m} \approx W$ ，单调增加的 dV/dI 正好落在了应出现电子流 Knudsen 效应的电流范围中。在接下来的几节中，我们将通过计算证实 dV/dI 的反常行为确实来源于电子流动的水动力学效应。

3 Boltzmann 方程

我们来研究宽度为 W 的二维导体线中的电子流动对沿 x 轴方向（即平行

于导体线方向) 的恒定电场 \mathbf{E} 的响应。假定二维电子气拥有理想的圆形费米面。我们要寻找的是描述位置在 $\mathbf{r} = (x, y)$ 附近且波矢量在 $\mathbf{k} = k(\cos \varphi, \sin \varphi)$ (见图 A-1 的小图) 附近的电子数的定常分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$, 这一分布函数遵从稳态 Boltzmann 输运方程

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} = \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial t} \right|_{\text{scatt}}, \quad (\text{A-5})$$

这里方程的右端为散射项, 其中同时考虑了 e-i 散射与 e-e 散射两种散射机制。电场的施加将会给电子的分布函数带来扰动, 使其偏离相应的 Fermi-Dirac 平衡分布 $f_0(\varepsilon) = 1/\{1 + \exp[(\varepsilon - E_F)/k_B T_e]\}$, 其中 $\varepsilon = \hbar^2 k^2/2m = mv^2/2$ 为电子能量而 E_F 为 Fermi 能级。在外加电场不太强时, 电子分布函数的非平衡部分只存在于 Fermi 面附近的薄壳中。因此, 利用系统沿 x 轴的平移对称性, 我们可将分布函数写为

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f_0(\varepsilon) + \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \chi(y, \varphi). \quad (\text{A-6})$$

将式 (A-6) 代入式 (A-5) 可以得到线性响应方程

$$e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial \chi(y, \varphi)}{\partial y} = \left. \frac{\partial \chi(y, \varphi)}{\partial t} \right|_{\text{scatt}}, \quad (\text{A-7})$$

其中 $\hat{\mathbf{y}}$ 为沿 y 轴的单位矢量。我们忽略 Fermi 能级附近的热激发区域内电子运动速度对能量的依赖关系, 因此有 $\mathbf{v} = v_F(\cos \varphi, \sin \varphi)$ ^①。

一旦获得了分布函数的表达式, 电流密度就可以用如下的方法计算得到:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(y) &= 2 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) e \mathbf{v}, \\ &= \int d\varepsilon D(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \chi(y, \varphi) e \mathbf{v}, \\ &= e D v_F \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \chi(y, \varphi) \hat{\mathbf{v}}, \end{aligned} \quad (\text{A-8})$$

其中二维态密度 $D(\varepsilon) = D = m/\pi \hbar^2$ (假定存在自旋的二重简并) 而单位矢量 $\hat{\mathbf{v}} = (\cos \varphi, \sin \varphi)$ 。

① 译者注: 实际上, 在写式 (A-6) 中的 $\chi(y, \mathbf{v}) =: \chi(y, \varphi)$ 时已经应用了这一近似。

现在我们来给出式 (A-7) 右端散射项的具体形式。这里假定体相杂质引起的散射是弹性且各向同性的，由此可以写出

$$\left. \frac{\partial \chi(y, \varphi)}{\partial t} \right|_b = -\frac{\chi(y, \varphi)}{\tau_b} + \frac{1}{\tau_b} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \chi(y, \varphi'), \quad (\text{A-9})$$

这里 τ_b 代表 e-i 散射自由时。注意式 (A-9) 右端第二项刻画了由其它状态经历散射后变成状态 (y, φ) 的那部分电子，但这一项在 Boltzmann 输运方程的许多处理中都被略去了。在这些处理中，局域密度的非平衡部分为零是作为一个先验的假设出现的。为了完整性起见，我们这里保留这一项，并将在附录 A 中通过细致的分析证明，对于上述完整的 Boltzmann 方程来讲该项确实为零。对于 e-e 散射项，我们遵照文献 25 和 26 的处理方式 (Callaway 假定)，

$$\left. \frac{\partial \chi(y, \varphi)}{\partial t} \right|_{ee} = -\frac{\chi(y, \varphi)}{\tau_{ee}} + \frac{1}{\tau_{ee}} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \chi(y, \varphi') + \frac{m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}_{\text{drift}}(y)}{\tau_{ee}}, \quad (\text{A-10})$$

这里 τ_{ee} 代表 e-e 散射自由时而 $\mathbf{v}_{\text{drift}}$ 代表净漂移速度。e-e 散射项表达式 (A-10) 表明电子将弛豫到偏移分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f_0(\varepsilon - m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}_{\text{drift}})$ 。上式右端第二项同样确保了电子数密度的守恒性。偏移速度由电流密度给出 $\mathbf{j}(y) = ne\mathbf{v}_{\text{drift}}$ ，其中电子数密度 $n = DE_F$ ，这样式 (A-10) 又可写成

$$\left. \frac{\partial \chi(y, \varphi)}{\partial t} \right|_{ee} = -\frac{\chi(y, \varphi)}{\tau_{ee}} + \frac{1}{\tau_{ee}} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \chi(y, \varphi') (1 + 2\hat{\mathbf{v}}' \cdot \hat{\mathbf{v}}). \quad (\text{A-11})$$

可以验证该散射项确实能够保证电子的总动量守恒，即

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \left. \frac{\partial \chi(y, \varphi)}{\partial t} \right|_{ee} \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{0}. \quad (\text{A-12})$$

实际上，式 (A-11) 是拥有这一性质的可能散射项中形式上最简单的。由于从方向 φ 到 φ' 的散射概率与 $1 + 2\hat{\mathbf{v}}' \cdot \hat{\mathbf{v}} = 1 + 2\cos(\varphi - \varphi')$ 成正比，因此小角度散射 ($\varphi - \varphi' \approx 0$) 的概率最大。 $\varphi - \varphi' \approx \pi$ 的负值情形对应于非平衡电子从相反方向散射到非平衡空穴的情形。

对于电子与导体线边界的散射，我们假定入射电子中比例为 p 将被镜面反射，而其余电子则将经历热化漫反射。在最初有关尺寸效应的理论中，镜面反射

系数 p 被假定为与入射角度无关。后来 Soffer 基于入射波被粗糙边界散射的微观模型，得到了 p 关于入射角度 φ 的如下依赖关系

$$p(\varphi) = e^{-(\alpha \sin \varphi)^2}. \quad (\text{A-13})$$

这意味着掠入射^①的电子 ($\sin \varphi \rightarrow 0$) 会拥有接近 1 的镜面反射概率。式中的参数 $\alpha = 4\pi\delta/\lambda_F$ ，其大小取决于边界的方根粗糙度 δ 与 Fermi 波矢的比值。

Boltzmann 方程 (A-7) 的定解边界条件可由边界散射前后粒子数守恒条件确定。对于 $y = 0$, $\varphi \in [0, \pi]$ 和 $y = W$, $\varphi \in [\pi, 2\pi]$ 处的边界，分别有

$$\chi(0, \varphi) = p(\varphi)\chi(0, 2\pi - \varphi) + \int_{\pi}^{2\pi} \frac{d\varphi'}{\pi} [1 - p(\varphi')]\chi(0, \varphi'), \quad (\text{A-14a})$$

$$\chi(W, \varphi) = p(\varphi)\chi(W, 2\pi - \varphi) + \int_0^{\pi} \frac{d\varphi'}{\pi} [1 - p(\varphi')]\chi(W, \varphi'). \quad (\text{A-14b})$$

上述两式中，右端第一项代表经历镜面反射的电子，第二项则代表经历漫反射的电子。

为了接下来的推导起见，我们将分布函数的非平衡部分表达为

$$\chi(y, \varphi) =: (-e)E \cos \varphi l_{\text{eff}}(y, \varphi). \quad (\text{A-15})$$

正如我们下面将要看到的，这里的有效平均自由程 $l_{\text{eff}}(y, \varphi)$ 可以理解为位于 y 处沿 φ 方向运动的电子自上一次经历边界或体相 e-i 散射起运动的平均距离。很明显，将式 (A-15) 中的 $l_{\text{eff}}(y, \varphi)$ 替换成体相平均自由程 l_b 就给出了著名的 Boltzmann 方程体相解。这里我们引入体相 e-i 散射平均自由程 $l_b = v_F \tau_b$ ，e-e 散射平均自由程 $l_{ee} = v_F \tau_{ee}$ 以及二者的结合 $l^{-1} = l_b^{-1} + l_{ee}^{-1}$ 。经过附录 A 中所示的细致推导，将式 (A-15) 带入式 (A-7), (A-9) 和 (A-11) 可以得到

$$\sin \varphi \frac{\partial l_{\text{eff}}(y, \varphi)}{\partial y} + \frac{l_{\text{eff}}(y, \varphi)}{l} = 1 + \frac{\tilde{l}_{\text{eff}}(y)}{l_{ee}}, \quad (\text{A-16})$$

$$\tilde{l}_{\text{eff}}(y) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\pi} \cos^2 \varphi l_{\text{eff}}(y, \varphi). \quad (\text{A-17})$$

① 译者注：即沿边界的切线方向入射，此时 $\varphi \sim 0$ 。

微分积分方程 (A-16) 与我们推导的起始形式相比已经有了很大的简化。这一结果也是我们在接下来一节中分析的基础。约化平均自由程 $\tilde{l}_{\text{eff}}(y)$ 直接与偏移速度成正比

$$\mathbf{v}_{\text{drift}}(y) = \frac{(-e)\mathbf{E}}{m v_F} \tilde{l}_{\text{eff}}(y), \quad (\text{A-18})$$

这可以结合式 (A-8), (A-15) 和 (A-17) 推得。由 $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ 定义的导体线的电导率可写为

$$\sigma = \frac{ne^2}{m v_F} \int_0^W \frac{dy}{W} \tilde{l}_{\text{eff}}(y) = \frac{ne^2}{m v_F} L_{\text{eff}}. \quad (\text{A-19})$$

这里的总有效平均自由程 L_{eff} 直接与电导率 σ 成正比，因此在接下来的分析中我们将采用 L_{eff} 代替电导率 σ 来刻画系统的电导特性。

4 理论结果

作为式 (A-16) 的一个初步应用，我们首先简要地考察电子在体相导体中输运的情形。此时，我们只需寻找 Boltzmann 方程的一个空间均匀解。当式 (A-16) 中不显含变量 y 时，有效平均自由程 l_{eff} 也不显含 φ ，因此从式 (A-17) 中可以得到 $\tilde{l}_{\text{eff}} = l_{\text{eff}}$ 。这样便很容易写出式 (A-16) 的解

$$l_{\text{eff}} = \frac{1}{l^{-1} - l_{ee}^{-1}} = l_b. \quad (\text{A-20})$$

值得注意的是，将上式代入式 (A-15) 可以给出 Boltzmann 方程不含 e-e 散射效应的通常的体相解，该解不显含 e-e 散射率。由此可以清晰地看出，使得电子总动量守恒的 e-e 散射并不影响体相电导率。

现在回到导体线的问题，此时 e-e 散射对电导率有着重要的影响。从附录 A 关于对称性的讨论可知，对于任意的 φ 成立 $l_{\text{eff}}(y, \varphi) = l_{\text{eff}}(y, \pi - \varphi)$ 。这样由式 (A-15) 可知，式 (A-14) 右端第二项均为零。因此，对应于边界条件 (A-14) 的式 (A-16) 的解可以写成积分方程的形式。为了简单明确起见，我们首先处理完全漫

反射边界的情形，此时 $p = 0$ 。容易得到，对于 $\varphi \in [0, \pi]$ 和 $\varphi \in [\pi, 2\pi]$ 分别有

$$l_{\text{eff}}(y, \varphi) = \int_0^y \frac{dy'}{l \sin \varphi} \frac{y - y'}{\sin \varphi} e^{-(y-y')/l \sin \varphi} + \frac{y}{\sin \varphi} e^{-y/l \sin \varphi} \quad (\text{A-21a})$$

$$+ \int_0^y \frac{dy'}{l_{ee} \sin \varphi} \tilde{l}_{\text{eff}}(y') e^{-(y-y')/l \sin \varphi},$$

$$l_{\text{eff}}(y, \varphi) = \int_y^W \frac{dy'}{l |\sin \varphi|} \frac{y' - y}{|\sin \varphi|} e^{-(y'-y)/l |\sin \varphi|} + \frac{W - y}{|\sin \varphi|} e^{-(W-y)/l |\sin \varphi|} \quad (\text{A-21b})$$

$$+ \int_y^W \frac{dy'}{l_{ee} |\sin \varphi|} \tilde{l}_{\text{eff}}(y') e^{-(y'-y)/l \sin \varphi}.$$

从式 (A-21) 中可以看出有效平均自由程的物理意义为，电子自上一次扩散散射起运动到状态 (y, φ) 所经过的距离。式 (A-21a) 右端第一项考虑了在 0 和 y 间的任意一点 y' 处刚刚经历过散射的电子的运动距离。指数因子给出了粒子在不经历任何额外散射时由 y' 变为状态 (y, φ) 的概率，该过程中电子的运动距离为 $(y - y')/\sin \varphi$ 。需要注意的是，电子在 y' 处经历的散射既可以是扩散性质的杂质散射，也可以是 e-e 散射。对于后者，e-e 散射前的路径需要单独考虑，这对应于右端最后一项。右端第二项代表经历了刚刚经历过边界漫反射的电子的贡献。对 Boltzmann 方程解的这种诠释由 Chambers 最先给出。上述推导过程也表明该方法在考虑 e-e 散射的 Boltzmann 方程中仍然适用。然而，此时求解途径也更加复杂，式 (A-21) 和式 (A-17) 必须同时求解。

此前，Movshovitz 和 Wisner 已经通过计算至多连续经历一次 e-e 散射情形下电子的有效平均自由程的方式，估算过 e-e 散射对（三维）薄膜和导体线电阻率的影响。利用这种方法（文献 11 对此作了集中阐述）可以获得 Knudsen 相区 $l_{ee} \gg W, l_b$ 内的合理结果。在我们的理论框架内，通过微扰求解式 (A-21) 可以更方便地处理这一问题，即只将式 (A-21) 的前两项代入第三项。可以证明这一方法与文献 11 的处理方法是等价的。

在附录 B 中我们采用微扰方法分析了完全漫反射边界（此时 $p = 0$ ）下二维导体线的问题。这里，我们将列出主要的结果。在 $l_b \gg W$ 的极限下，忽略 e-e

散射时的电导率（见式 (A-19)）为

$$L_{\text{eff}} = \frac{2W}{\pi} \left[\ln \left(\frac{l_b}{W} \right) + \ln 2 + \frac{1}{2} - \gamma \right], \quad (\text{A-22})$$

这里 γ 为欧拉常数（见附录 B）。此时，电导率正比于通道宽度，而与平均自由程之间则是对数依赖关系。微扰解使得我们可以计算 e-e 散射影响给电导率带来的一阶修正。在 $l_{ee} \gg l_b \gg W$ 的情况下，我们得到

$$\Delta L_{\text{eff}} = -\frac{2Wl_b}{\pi l_{ee}}. \quad (\text{A-23})$$

我们指出，e-e 散射的引入将使得电导率降低，此即 Knudsen 效应。从式 (A-22) 和 (A-23) 可见， l_b/W 越大，这一效应越显著。先前关于该相区的计算给出：对于厚度为 W 的三维薄膜有 $\Delta L_{\text{eff}} = -\frac{3}{4}Wl_b/l_{ee}$ ，而对于直径为 W 的三维导体线有 $\Delta L_{\text{eff}} \sim (-W^2/l_{ee}) \ln(l_{ee}/W)$ 。

在相反的相区极限 $l_b \ll W$ 下，边界散射对电导率的影响变得微乎其微。根据附录 B 的分析，我们得到

$$L_{\text{eff}} = l_b - \frac{4l_b^2}{3\pi W}. \quad (\text{A-24})$$

漫反射边界对体相电导率只有微小的负修正。在 $l_{ee} \gg W \gg l_b$ 的情况下 e-e 散射带来的一阶修正为

$$\Delta L_{\text{eff}} = \frac{4l_b^3}{15\pi W l_{ee}}. \quad (\text{A-25})$$

显然，此时 e-e 散射总是使得电导率增大，对此我们可以这样理解：由于 e-e 散射不影响体相电导率，因此它只能改变由式 (A-24) 右端第二项代表的边界散射所致负修正。e-e 散射会削弱这一负修正，这可以解释为一种 Gurzhi 效应。作为对照，我们再次给出三维情形下的结果：对于薄膜有 $\Delta L_{\text{eff}} = \frac{6}{35} \left(\frac{9}{8} - \ln 2 \right) l_b^4/W^2 l_{ee}$ （这可以通过文献 11 的结果计算得到），而对于导体线有 $\Delta L_{\text{eff}} \sim l_b^3/W l_{ee}$ 。

从上述计算结果中可以看到，e-e 散射给电导率带来的一阶修正在不同相区极限下呈现出相反的行为。随之而来的问题便是， ΔL_{eff} 是如何从小 l_b/W 下的正值过渡到大 l_b/W 下的负值的。我们期待当 $l_b > W$ 时会呈现对电导率的负修正。为了证实上述期望，我们计算了在 l_b/W 全相区内 e-e 散射对电导率的修正值，计算细节放在了附录 B 中。计算结果如图 A-5 所示，图中显示了忽略 e-e 散射时的电导率 L_{eff} 以及 e-e 散射带来的一阶修正 ΔL_{eff} 相对值关于 l_b/W 的变化

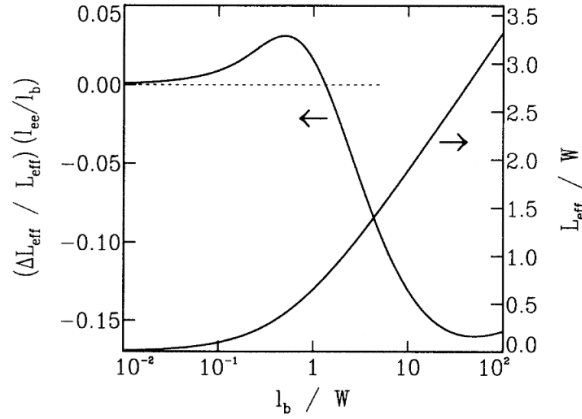


图 A-5 图中为忽略 e-e 散射时的电导率 L_{eff} 以及 e-e 散射带来的一阶修正 ΔL_{eff} 关于体相 e-i 散射平均自由程 l_b 的变化曲线。图示结果适用于带有完全漫反射边界 ($p = 0$) 的二维导体线，曲线依照式 (A-39) 和 (A-42) 绘出。

曲线。从修正前电导率的变化中，我们可以观察到从体相行为（式 (A-24)）到对数依赖性（式 (A-22)）的过渡。e-e 散射对电导率的一阶修正呈现由正值到负值的变化。我们发现 Knudsen 效应只存在于 $l_b \gtrsim 1.3W$ 的范围内。

上述结果只在 e-e 散射率很低的相区有效。为了与实验结果对比，我们必须获得式 (A-16) 在 l_{ee} 不高于 l_b, W 的相区内的解。除此之外，我们还需要考虑任意镜面反射系数 $p(\varphi)$ 下的边界条件 (A-14a)。将式 (A-16) 变换为积分方程的形式并对 φ 进行积分，我们得到

$$\tilde{l}_{\text{eff}}(y) = \tilde{l}_{\text{eff}}^{(0)}(y) + \int_0^W dy' G(y, y') \tilde{l}_{\text{eff}}(y'), \quad (\text{A-26})$$

$$\tilde{l}_{\text{eff}}^{(0)}(y) = l - \frac{2l}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi \times \frac{[1 - p(\varphi)][e^{-y/l \sin \varphi} + e^{-(W-y)/l \sin \varphi}]}{1 - p(\varphi)e^{-W/l \sin \varphi}}, \quad (\text{A-27})$$

$$G(y, y') = \frac{2}{\pi l_{ee}} \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{\cos^2 \varphi}{\sin \varphi} \left\{ e^{-|y-y'|/l \sin \varphi} + \frac{p(\varphi)[e^{-(y+y')/l \sin \varphi} + e^{-(2W-y-y')/l \sin \varphi}]}{1 - p(\varphi)e^{-W/l \sin \varphi}} \right\}. \quad (\text{A-28})$$

以上方程式我们估算任意 l_{ee}, l_b, W, p 取值下的电导率的关键。实际上， $\tilde{l}_{\text{eff}}^{(0)}$ 项就是 Boltzmann 方程 Fuchs 解的二维等价物。式 (26) 右端第二项是考虑了 e-e 散

射修正的经典的电子传播子函数。需要注意的是，附录 B 中叙述的微扰方法等价于近似 $\tilde{l}_{\text{eff}} = (1 + G)\tilde{l}_{\text{eff}}^{(0)}$ 。然而，对于 l_{ee} 更大的情形^①，式 (A-26) 必须根据 $(1 - G)\tilde{l}_{\text{eff}} = \tilde{l}_{\text{eff}}^{(0)}$ 进行自洽求解。我们可以通过离散 y 轴来对此进行数值求解，这样式 (A-26) 便退化为了一个矩阵方程。这样我们便能充分发挥计算资源的作用，尽可能精确地计算得到 \tilde{l}_{eff} 的近似解。我们在计算中使用了至少 400 个网格点来获得足够的精度。

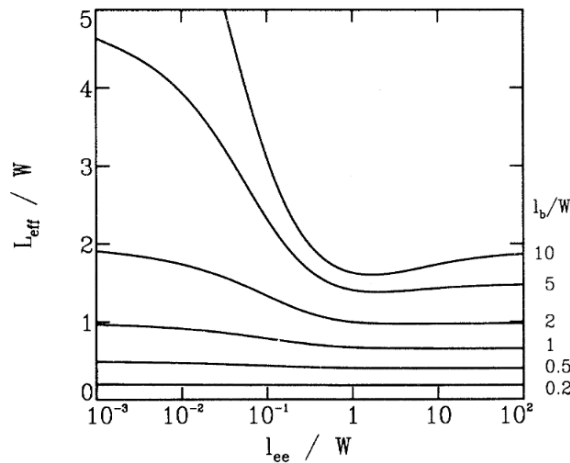


图 A-6 图中为在不同的体相 e-i 散射平均自由程 l_b 下，带有完全漫反射边界 ($p = 0$) 的导体线的电导率 L_{eff} 关于 e-e 散射平均自由程 l_{ee} 的变化曲线。

图 A-6 显示了在不同的体相 e-i 散射平均自由程 l_b 下，带有完全漫反射边界 ($p = 0$) 的导体线的电导率 L_{eff} 关于 e-e 散射平均自由程 l_{ee} 的变化曲线。对于较宽的导体线 ($l_b/W = 0.2$)，电导率在 l_{ee}/W 的整个变化范围内几乎维持常数。在 $l_b/W = 0.5, 1$ 的情形， L_{eff} 随着 l_{ee} 的减小单调上升，也就是 Gurzhi 效应。只有当通道宽度小于平均自由程 ($l_b/W = 2, 5, 10$) 时，才能从计算结果中同时观察到 Knudsen 相区与 Gurzhi 相区：随着 l_{ee} 的减小， L_{eff} 先减小后增大。电导率的 Knudsen 极小值发生在 $l_{ee} \simeq W$ 附近。显然，Knudsen 效应与 Gurzhi 效应对电导率的影响在比例 l_b/W 更大时更为显著。我们进一步指出，当 e-e 散射率较大 ($l_{ee} \rightarrow 0$) 时，电导率将趋于饱和值即体相电导率 ($L_{\text{eff}} \rightarrow l_b$)，这反映出该相区内边界影响逐渐减弱直至消失。

现在让我们更仔细地考察边界散射的影响。图 A-7 给出了不同的常镜面反射系数 p 下， $l_b/W = 5$ 的导体线的电导率曲线。可以看到，电导率随着边界散射扩散性的减弱而增加。除此之外，我们发现当 $p < 1$ 时 Knudsen 效应和 Gurzhi 效

^① 译者注：此处叙述疑有误，似应为 l_{ee} 更小的情形。

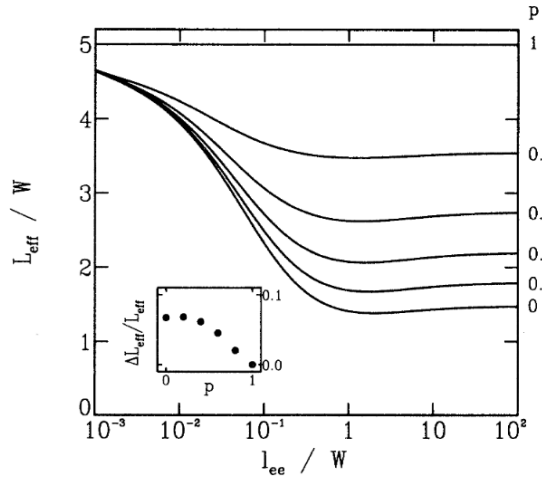


图 A-7 图中为在不同的镜面反射系数 p 下，平均自由程 $l_b = 5W$ 的导体线的电导率关于 e-e 散射平均自由程 l_{ee} 的变化曲线。小图中显示了（电阻率的）Knudsen 极大值处电导率的相对变化（这对应于电导率的极小值）。

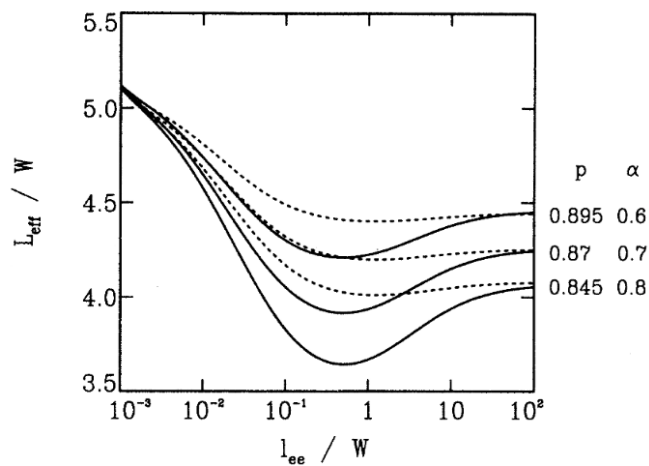


图 A-8 图中为在常镜面反射系数（点线）和角度相关情形（实线，具体表达式见式 (A-13)）下，电导率 L_{eff} 关于 l_{ee} 的变化曲线对比。为了得到忽略 e-e 散射时近似相等的电导率，这里的参数选取分别为（对应于自上而下的曲线） $p = 0.895, 0.87, 0.845$ 和 $\alpha = 0.6, 0.7, 0.8$ 。体相 e-i 散射平均自由程为 $l_b = 5.5W$ 。

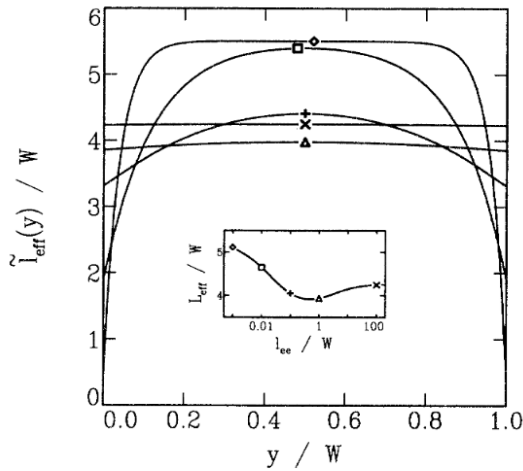


图 A-9 图中为导体线内部的电子流动速度剖面，这显示了流动从 Knudsen 相区过渡到 Gurzhi 相区的过程。具体而言，上图给出了 $l_{ee}/W = 100(\times)$, $1(\Delta)$, $0.1(+)$, $0.01(\square)$, $0.001(\diamond)$ 条件下约化漂移速度 $\tilde{l}_{\text{eff}}(y)$ 与横向坐标 y 之间的关系。小图给出了电导率 L_{eff} 随 e-e 散射平均自由程 l_{ee} 的变化曲线，里边的符号代表对应流动剖面的电导率的值。上述结果针对的是体相 e-i 散射平均自由程 $l_b = 5.5W$ 及角度相关边界散射参数 $\alpha = 0.7$ 的情形。

应同时存在。如果边界处是完全镜面反射 ($p = 1$)，则忽略 e-e 散射可得 $L_{\text{eff}} = l_b$ 。实际上，镜面边界散射的情形与忽略了 e-e 散射效应的体相情形是等价的。容易验证 $\tilde{l}_{\text{eff}}(y) = l_b$ 恰是式 (A-26) 在 $p = 1$ 情形下的解。Knudsen 极大值处电导率的相对变化 $\Delta L_{\text{eff}}/L_{\text{eff}}$ (对应于 $l_{ee} = \infty$) 见图 A-7 的小图。当边界散射的扩散性减弱时，电导率的上述变化将会减弱。

正如上文已经提到的，用常镜面反射系数给边界散射建模只是一个近似。Soffer 给出了基于角度相关镜面反射系数 (A-13) 的一个更优的描述方法。由于电导率的水动力学效应来源于 e-e 散射与边界散射的相互作用，可以期待镜面反射系数对角度的依赖性将影响 Knudsen 效应和 Gurzhi 效应的幅度。两种边界模型比较见图 A-8，其中参数选取的原则为保证忽略 e-e 散射时二者给出相同的电导率。由图 A-8 可以清楚地看到，角度相关的边界散射会导致强得多的 Knudsen 效应。这一现象的原因如下。电导率主要由运动方向与轴线近乎平行的那部分电子贡献。这些电子在掠入射时会撞击到边界，根据 Soffer 模型，掠入射的电子将伴随更高的镜面反射系数。然而，为了使得两个模型在忽略 e-e 散射时导致相同的电导率，Soffer 模型中以大入射角入射的电子必须经历更强的扩散，这显然会增强 Knudsen 效应^①。

① 译者注：以大入射角入射的电子由于其运动方向与轴线近乎平行因而对电导率贡献较大，而在 Soffer 模型中这部分电子将在边界处经历更强的扩散，亦即增强了边界对电子流动的阻碍作用（见引言部分）

到现在为止，我们仅仅讨论了电导率。实际上，我们还可以从 $\tilde{l}_{\text{eff}}(y)$ 中获知导体线内的微观流动过程。由式 (A-18) 可知， $\tilde{l}_{\text{eff}}(y)$ 与漂移速度成正比，因此也代表了导体线内的流动速度剖面。图 A-9 给出了 $l_b = 5.5W$ 、 $\alpha = 0.7$ 条件下不同 e-e 散射平均自由程对应的速度剖面。忽略 e-e 散射时，漂移速度关于 y 几乎为一常数。随着 e-e 散射率的逐渐增大，导体截面的流动速度剖面由于 Knudsen 效应而逐渐下移：偶然的 e-e 散射过程使得平行于轴线运动的电子撞向边界，由此减小了漂移速度从而减小了电导率。然而，对于 l_{ee} 继续减小的情形，流动速度剖面呈现出明显的弯曲。这表明，近壁处的电子由于扩散性边界散射的作用，比导体线中部的电子经受了更强的摩擦。流动速度剖面的这一变化最终导致电导率随着 e-e 散射率的增加而增加，也就是 Gurzhi 效应。随着 l_{ee} 的进一步减小，这一行为愈发显著，而流动速度剖面也逐渐接近经典的层流 Poiseuille 流动。不过对于更小的 l_{ee} ，流动最终将受到体相 e-i 散射的限制，如图 A-9 中的曲线所示。导体线中部的电子将以体相值的漂移速度运动，而近壁处的漂移速度将减为零。

在这一节中，我们讨论了同时存在扩散性 e-i 散射和非阻性 e-e 散射的导体线中的各类可能流动现象。在下一节中，我们将展示如何用上述理论上的预言解释我们的实验现象。

5 实验与理论的对比

利用前几节的理论我们已经至少可以定性地解释在实验中观察到的 Knudsen 效应和 Gurzhi 效应（如第 II 节所述），因此这里我们希望进行一个更加定性的比较。需要注意的是，我们从实验中得到的是 dV/dI 关于 I 的变化曲线，而理论结果给出的则是 L_{eff} 与 l_b , l_{ee} , W 的函数关系。

实验中测得的样品电阻 R 的主要贡献有二。其一，是导体线的电阻本身。如文献 36 所示，作为一个足够好的近似，这与 Drude 电阻和 Sharvin 接触电阻是相等的。其二，是由在 Ohmic 接触和导体线入口之间的无约束区域内的二维电子气带来的 R_0 （见图 A-1 的小图）。需要注意的是，在一个理想的四探头测量实验中，Ohmic 接触需要与导体线的入口足够接近，以至于这一部分贡献为零。在我们的样品中，Ohmic 接触与导体线之间的典型距离在 $200 \mu\text{m}$ 的量级。 R_0 的实际值可能随着导体线或者晶格温度的不同而不同。从先前的实验中，我们可

的讨论)，亦即增强了 Knudsen 效应。

以估算出 $R_0 \approx 60 - 90 \Omega$ 。这样，我们就获得了电阻的表达式

$$R = R_0 + \frac{h\pi}{2e^2k_F W} + \frac{L}{W\sigma}, \quad (\text{A-29})$$

其中的第二项为 Sharvin 电阻，第三项为 Drude 电阻。电导率 σ 由式 (A-19) 给出。各个导体线的 L, W, n, l_b 值已在图表 A-2 中给出。由于静电损耗的原因，导体线的实际宽度 W 比栅极结构的蚀刻宽度略小。对于导体线样品 I，我们取 $W = 3.5 \mu\text{m}$ ；而对于导体线样品 II 和 III，我们取 $W = 3.6 \mu\text{m}$ 。

我们可以通过以下三个步骤将理论上 L_{eff} 随 l_{ee} 的变化曲线变换到 $R \sim I$ 曲线的形式。首先，利用式 (A-3) 可以给出电子温度 T_e 随 I 的变化曲线。接着，应用式 (A-4) 可得 $l_{ee}(T_e)$ 的函数关系。最后，由 Boltzmann 方程理论能够得出在给定 l_{ee} 下 L_{eff} （从而 σ ）的值，进而可由式 (A-29) 得到电阻的表达式。这里的情况有点微妙，因为电导率 σ 的结果已在式 (A-3) 里面应用过。对此，我们可以采取两种办法：其一，是忽略式 (A-4) 对 σ 的依赖性，只采用 $I = 0$ 时的取值；其二，也是我们这里所采用的，则是利用数值手段求得 σ 和 l_{ee} 的自洽值。实际上，这一处理只是轻微地移动了 I 轴。从 $R \sim I$ 的曲线中，我们可以推得微分电阻 $dV/dI \sim I$ 的关系。需要提到的是，由于式 (A-4) 的近似特征，我们确实需要对 I 轴进行一定的移动。而正因式 (A-4) 适用性的这种局限，我们只能处理 $|I| < 20 \mu\text{A}$ 的相区。考虑到我们仅需给 Knudsen 相区和 Gurzhi 相区建模，因此上述处理已经足够。注意，我们并没有考虑如图 A-3 和图 A-4 所示的大电流情形下晶格加热导致的耗散行为。

在图 A-10 中，我们将上述分析应用在了 $T = 1.8 \text{ K}$ 下导体线样品 II 的微分电阻计算上。实验曲线由图 A-4 中最低温度的一支经放大得到。理论曲线针对不同的边界散射参数且对应于图 A-8（其中 $l_b = 5.5W$ ）。需要强调的是， R_0 并没有包含在上述理论曲线中，因为该量的精确值是未知的。这也适用于这里所有的比较。显然，常镜面反射系数下的数值结果中的 Knudsen 及 Gurzhi 行为都太过微弱。两种效应可以通过减小 p 得到增强，但同时这也将使 $I = 0$ 处的电阻增大到不合理的值。角度相关的边界散射（见式 (A-13)）将导致同实验更为相符的结果。这样，我们的实验便清楚地表明了 Soffer 模型在刻画用分离式栅极标定的导体线的边界散射时的有效性。我们发现，最佳的拟合参数为 $\alpha = 0.7$ 。在 $I = 0$ 处，电阻的理论结果同实验结果相差了 83Ω ，这也处于 R_0 的合理范围之内。

我们也将相同的分析方式应用到了 $T = 1.5 \text{ K}$ 下导体线样品 I 的结果中。正

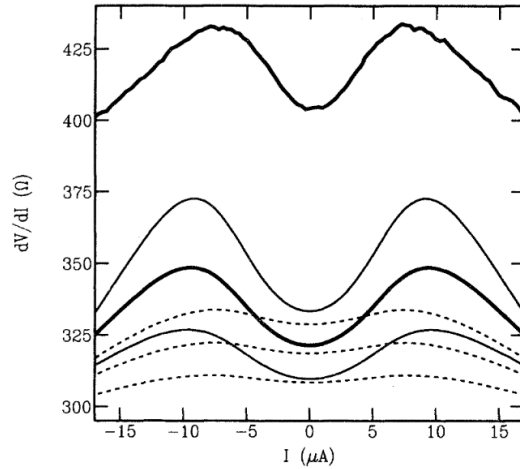


图 A-10 导体线 II 的微分电阻 dV/dI 关于电流 I 变化曲线。最上方的曲线是在 $T = 1.8$ K 条件下的实验结果，而其他的曲线则是在不同边界散射系数时求得的理解。点划线是利用常镜面反射系数 $p = 0.845, 0.87, 0.895$ 的结果（自上而下）；实线对应于角度相关边界散射 $\alpha = 0.8, 0.7, 0.6$ 的结果。与实验符合得最好的结果对应于 $\alpha = 0.7$ （加粗曲线）。

如此前说明的那样，由于其 $l_b/W = 3.5$ 的比值较低，这时 Knudsen 效应的幅度远小于导体线样品 II 和 III。这正是我们在理论计算中所发现的。理论与实验的对照已在图 A-3 的小图中给出。我们发现，对于导体线样品 I， $\alpha = 0.6$ 将给出最佳的拟合结果。

利用对比拟合得到的 α 值，可以得到用栅极标定的导体线边界的方均根粗糙度约为 $\delta \approx 2.5$ nm，且约 80% 的边界散射为镜面反射。与此前在用栅极标定的二维电子气系统中做的磁阻以及电子聚焦实验的结果是一致的。注意，对于用作电子水动力学流动实验材料的钾导体线中，其边界散射的扩散性要强得多，其 α 值约为 25。

最后，我们来考察当晶格温度升高时的电阻行为。图 A-4 给出了导体线样品 II 和 III 在 $T = 1.8, 3.5, 4.5$ K 下的实验曲线。晶格温度的变化不仅会对式 (A-3) 造成影响，还会改变体相的平均自由程 l_b ，这也包括一些 e-p 散射。由此，三种不同温度下 $I = 0$ 处电阻的差异正来源于 l_b 及 l_{ee} 的变化，二者均会随着晶格温度的增加而使得电阻值增大。 l_{ee} 减少带来的 Knudsen 效应部分修正已经考虑在了 $I = 0$ 下的 dV/dI 值之中。从温度依赖的迁移率测量中，我们得到 $T = 3.1$ K 时 $l_b = 18.5 \mu\text{m}$ ，而 $T = 4.5$ K 时 $l_b = 17.1 \mu\text{m}$ 。注意，在应用式 (A-3) 对 $T = 3.1, 4.5$ K 作理论分析时，我们稍稍超出了该式的适用范围。图 A-4 展示了 $\alpha = 0.7$ 下理论与实验的对比结果。对于导体线样品 II 和 III，理论曲线无论在形状还是幅度上都与实验结果十分相近。实际上，我们也能够发现 Knudsen 效

应随着晶格温度升高而减弱。然而，我们的确发现实验结果的不同曲线之间还有一定的额外偏离，这可能是由于 R_0 存在一定的温度依赖性。

6 讨论与结论

我们的实验明确地给出了电子输运过程中 Knudsen 相区与 Gurzhi 相区的存在性。这些相区的存在早在二十世纪六十年代就已经被预言。尽管电子水动力学流动的部分特性已经在钾导体线中观察到，但也正是 (Al,Ga)As 异质结构的高迁移率以及纳米蚀刻技术的采用使得对 Knudsen 到 Gurzhi 相区转变完整过程的观察成为了可能。可以看到电流加热技术充当了一个关键的工具，利用它可以在不改变其他类型散射强度时，单独改变 e-e 散射的散射率。由于点接触温度计的使用，我们得以获得不同电流下导体线内的电子温度。尽管电子的水动力学流动在很多年前便已经被预言，但能够在我们的实验材料中实际观察到如此显著的现象仍然是十分难以置信的。

我们基于 Boltzmann 输运方程发展了一套理论。由于体相 e-i 散射的引入，该理论较气体流动相比要更为复杂。先前的大多数理论工作都只在特定的流动相区极限内适用，而我们的方法则具有更大的普适性。我们能够给出全流动相区内的电导率的值，即对于导体线宽度、e-e 散射平均自由程以及体相 e-i 散射平均自由程等参数的任意值均有效。需要指出的是，我们的 Boltzmann 方法中包含有两个重要的简化。其一是，我们假设了 e-e 散射的各向同性，而非二维电子气中应该出现的小角度散射。其二是，我们应用了 Callaway 提出的简化形式的 e-e 散射项，它只考虑了总动量的守恒。现在，我们还没有看到 Boltzmann 方程的这样一种解法，它既能够处理更符合真实情况的散射项，又能适用于全输运相区。然而，我们的方法已经表明，阻性的 e-i 散射、部分扩散的边界散射以及非阻性的 e-e 散射的结合将会导致相当复杂的流动行为。

我们给出了 Boltzmann 理论结果同实验结果的定量比较，因为电子温度和由此得到的导体线内 e-e 散射的平均自由程均能通过实验测量得到。从结果来看，二者符合得相当好。这证明，尽管做了一定的简化，我们的 Boltzmann 理论仍然抓住了实验中较为关键的物理特征。我们的结果表明，描述角度相关的边界散射的 Soffer 模型与常镜面反射系数模型相比，更适合于描述用栅极标定的导体线的边界散射。除了镜面反射系数的确定外，我们的比较只依赖于实验结果而不含其他的任何拟合。

对电子的水动力学流动开展进一步的实验将是非常有意义的。值得进一步研究的领域包括扩散性更强的边界散射的影响（如利用反应离子蚀刻或离子暴

露方法形成的导体线) 以及磁场的应用。这里的理论分析可以很直接地推广到三维系统中来描述从 Knudsen 流到 Gurzhi 的转变。

7 附录 A

这一节附录将给出式 (A-16) 的推导过程。将 e-i 散射 (A-9) 与 e-e 散射 (A-11) 的表达式代入 Boltzmann 方程 (A-7) 中, 可得

$$\begin{aligned}
 -eEv_F \cos \varphi + v_F \sin \varphi \frac{\partial \chi(y, \varphi)}{\partial y} = & -\frac{\chi(y, \varphi)}{\tau} + \frac{1}{\tau} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \chi(y, \varphi') \\
 & + \frac{1}{\tau_{ee}} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{\pi} \cos(\varphi - \varphi') \chi(y, \varphi').
 \end{aligned} \tag{A-30}$$

这里, $\tau^{-1} = \tau_b^{-1} + \tau_{ee}^{-1}$ 。对于定常情形, 漂移速度在 y 方向的分量为零, 即

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\pi} \sin \varphi \chi(y, \varphi) = 0. \tag{A-31}$$

这样, 式 (A-30) 最后一项中的 $\cos(\varphi - \varphi')$ 便可以替换为 $\cos \varphi \cos \varphi'$ 。将代表参数化的式 (A-15) 代入式 (A-30), 有

$$\begin{aligned}
 -\cos \varphi + \cos \varphi \sin \varphi \frac{\partial l_{\text{eff}}(y, \varphi)}{\partial y} = & -\frac{\cos \varphi l_{\text{eff}}(y, \varphi)}{l} + \frac{1}{l} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \cos \varphi' l_{\text{eff}}(y, \varphi') \\
 & + \frac{\cos \varphi}{l_{ee}} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{\pi} \cos^2 \varphi' l_{\text{eff}}(y, \varphi').
 \end{aligned} \tag{A-32}$$

通过对式 (A-32) 的分析可知, $l_{\text{eff}}(y, \varphi)$ 与 $l_{\text{eff}}(y, \pi - \varphi)$ 满足同一个方程。除此之外, 二者的边界条件 (A-14) 也是相同的。考虑到上述对称性, 我们有

$$l_{\text{eff}}(y, \varphi) = l_{\text{eff}}(y, \pi - \varphi). \tag{A-33}$$

结合式 (A-15), 可以得到在任意 y 处的密度非平衡部分均为零

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \chi(y, \varphi) = eE \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi l_{\text{eff}}(y, \varphi) = 0. \tag{A-34}$$

因此，式 (A-32) 右端第二项退化为零。这一结论对于式 (A-9), (A-11) 和 (A-14) 同样成立。这样，由式 (A-32) 便可推得正文中的微分积分方程 (A-16)。

8 附录 B

这一节附录将给出第 IV 节部分结果的推导过程。我们研究了带有完全漫反射边界 ($p = 0$) 的导体线的电导率以及 e-e 散射对它的一阶修正。在式 (A-21) 两边乘以 $\cos^2 \varphi$ 并对 φ 积分，可以得到

$$\begin{aligned} \tilde{l}_{\text{eff}}(y) = l - \frac{2l}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi [e^{-y/l \sin \varphi} + e^{-(W-y)/l \sin \varphi}] \\ + \frac{2}{\pi l_{ee}} \int_0^W dy' \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{\cos^2 \varphi}{\sin \varphi} e^{-|y-y'|/l \sin \varphi} \times \tilde{l}_{\text{eff}}(y'). \end{aligned} \quad (\text{A-35})$$

在小 e-e 散射率极限下 ($l_{ee} \gg l_b, W$)，我们可以利用微扰法求解式 (A-35)。将式 (A-35) 右端前两项代入其第三项并对 y 积分，可以得到电导率的如下表达式 (参考式 (A-19))

$$L_{\text{eff}} = l - \frac{4l^2}{\pi W} I\left(\frac{l}{W}\right) + \frac{l^2}{l_{ee}} - \frac{8l^3}{\pi l_{ee} W} I\left(\frac{l}{W}\right) + \frac{8l^3}{\pi^2 l_{ee} W} K\left(\frac{l}{W}\right), \quad (\text{A-36})$$

$$I(\lambda) = \int_0^1 du u \sqrt{1-u^2} (1 - e^{-1/\lambda u}), \quad (\text{A-37})$$

$$K(\lambda) = \int_0^1 du u \sqrt{1-u^2} \int_0^1 dv v \sqrt{1-v^2} \times \left[\frac{1 - e^{-1/\lambda u - 1/\lambda v}}{u+v} + \frac{e^{-1/\lambda u} - e^{-1/\lambda v}}{u-v} \right]. \quad (\text{A-38})$$

在忽略 e-e 散射的条件下 ($l_{ee} = \infty$)，电导率可由下式给出

$$L_{\text{eff}} = l_b - \frac{4l_b^2}{\pi W} I\left(\frac{l_b}{W}\right). \quad (\text{A-39})$$

欲计算 e-e 散射带来的一阶修正，可以从式 (A-36) 中减掉式 (A-39)，并作一阶近似展开 $l = l_b - l_b^2/l_{ee}$ 。我们能够解析地估计出两个极限下的结果。对于非常宽的导体线 ($l_b \ll W$)，应用以下结果，可以给出式 (A-24) 和 (A-25)。

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} I(\lambda) = \frac{1}{3}, \quad (\text{A-40a})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} K(\lambda) = \frac{\pi}{30}, \quad (\text{A-40b})$$

在相反相区即导体线非常窄的情形 ($l_b \gg W$), 积分 (A-37) 和 (A-38) 要更为复杂。利用下述级数展开的结果, 可以推得式 (A-22) 和 (A-23)。

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} I(\lambda) = \frac{\pi}{4\lambda} - \frac{1}{2\lambda^2} \left(\ln 2\lambda + \frac{1}{2} - \gamma \right) + O(\lambda^{-3}), \quad (\text{A-41a})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} K(\lambda) = \frac{\pi^2}{8\lambda} - \frac{1}{2\lambda^2} \left(\ln 2\lambda + \frac{1}{2} - \gamma \right) + O(\lambda^{-3}), \quad (\text{A-41b})$$

这里 $\gamma \simeq 0.577$ 为 Euler 常数。

对于两个相区之间的 e-e 散射一阶修正, 可以通过从式 (A-36) 中减掉式 (A-39) 的方式估算:

$$\Delta L_{\text{eff}} = \frac{l_b}{l_{ee}} \left[\frac{8l_b^2}{\pi^2 W} K\left(\frac{l_b}{W}\right) - \frac{4l_b}{\pi} J\left(\frac{l_b}{W}\right) \right], \quad (\text{A-42})$$

$$I(\lambda) = \int_0^1 du \sqrt{1-u^2} e^{-1/\lambda u}. \quad (\text{A-43})$$

通过对 I, J, K 的数值积分, 可以得到图 A-5 中的曲线。

书面翻译对应的原文索引

- [1] DE JONG M J M, MOLENKAMP L W. Hydrodynamic electron flow in highmobility wires[J/OL]. Phys. Rev. B, 1995, 51:13389-13402.

附录 B 已(可) 发表论文或发明专利

平面运动刚体两类瞬心轨迹之间关系的探讨

摘要：首先阐述了刚体运动的列阵-矩阵描述方法，然后在阐明刚体瞬心及两类瞬心轨迹等概念的基础上，经过简洁的数学推演，给出了平面运动刚体的动瞬心轨迹与定瞬心轨迹在固定坐标系中投影的运动方程。通过分析二者的运动方程，证明了结论：平面运动刚体任一时刻的动瞬心轨迹在定瞬心轨迹上作纯滚动，接触点即为刚体在该时刻的瞬心固连点。然后通过一个具体算例展示了瞬心轨迹运动方程的求解方法，并讨论了运动方程的物理意义。最后还对一般运动刚体的情形进行了简要讨论。

关键词：刚体，平面运动，瞬心轨迹，纯滚动，坐标方法

1 引言

与刚体固连而瞬时速度为零的点称为刚体在该时刻的瞬时速度中心，简称瞬心。如果某瞬时刚体的瞬心存在，则该时刻所有瞬心将构成三维欧氏空间中的一条直线，这条直线称为刚体在该时刻的瞬时转轴。

对于平面运动刚体的情况，由于平行于该刚体运动平面的任一截面上的刚体固连点即可代表该刚体的运动，且此时瞬时转轴一定存在，这时“瞬心”一词特指瞬时转轴与上述给定截面的交点。给定一个参考系（称为固定参考系），则定义在固定参考系中观察瞬心运动得到的轨迹为定瞬心轨迹，在与刚体相固连的固连参考系中观察其运动得到的轨迹为动瞬心轨迹。

对于平面运动刚体两类瞬心轨迹之间的关系，许多理论力学教材将其作为结论直接给出 [1]。文献 [2] 采用了自然坐标系，利用矢量分析的方法给出了上述关系的严格证明。笔者采用刚体运动在笛卡尔坐标系下的列阵-矩阵表述，利用简洁的代数方法导出了该关系，供读者参考。

为行文的简洁明确起见，约定函数 $f(t, \tau)$ (t, τ 相互独立) 的偏导数记号如下：

$$\dot{f}(t, \tau) \equiv \frac{\partial f(t, \tau)}{\partial t}, \quad f'(t, \tau) \equiv \frac{\partial f(t, \tau)}{\partial \tau}.$$

2 两类瞬心轨迹运动方程的导出

2.1 刚体固连点运动的描述

首先阐述刚体固连点运动的列阵-矩阵描述方法。任取一个相对于固定参考系静止的点 O_0 作为原点建立固定坐标系 $O_0X_0Y_0Z_0$ ，任取刚体一固连点 O 作为基点建立固连坐标系 $Oxyz$ 以及相对固定坐标系为平移变换关系的平动坐标系 $OXYZ$ 。现任取一刚体固连点 P ，设 \mathbf{R} 为 P 相对 O_0 的位矢， \mathbf{R}_O 为 O 相对 O_0 的位矢， \mathbf{r} 为 P 相对 O 的位矢（如图 B-1 所示）。并记 \mathbf{A} 为由固定坐标系到固连坐标系的方向余弦矩阵， $\underline{\mathbf{R}}$ 、 $\underline{\mathbf{R}}_O$ 分别为 \mathbf{R} 、 \mathbf{R}_O 在固定坐标系中的列阵， $\underline{\mathbf{r}}$ 为 \mathbf{r} 在平动坐标系中的列阵， $\underline{\boldsymbol{\rho}}$ 为 \mathbf{r} 在固连坐标系中的列阵，则 $\underline{\mathbf{r}} = \mathbf{A}\underline{\boldsymbol{\rho}}$ 。

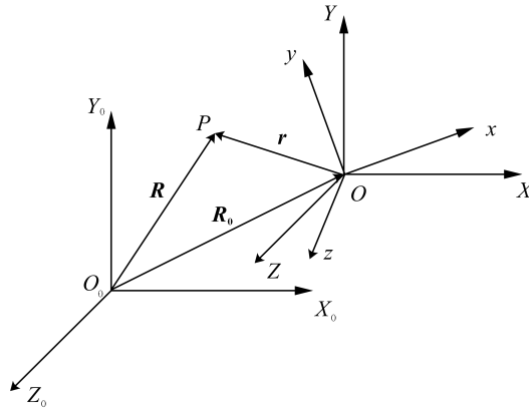


图 B-1 坐标系基矢及相对位矢示意图

于是，在 t 时刻有

$$\underline{\mathbf{R}}(t) = \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \underline{\mathbf{r}}(t) = \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \mathbf{A}(t)\underline{\boldsymbol{\rho}}(t).$$

注意到点 P 是刚体固连点，因此位矢 \mathbf{r} 在固连坐标系 $Oxyz$ 中的列阵 $\underline{\boldsymbol{\rho}}$ 为常列阵，即 $\dot{\underline{\boldsymbol{\rho}}}(t) \equiv 0$ 。从而有

$$\dot{\underline{\mathbf{R}}}(t) = \dot{\underline{\mathbf{R}}}_O(t) + \dot{\mathbf{A}}(t)\underline{\boldsymbol{\rho}}(t) = \dot{\underline{\mathbf{R}}}_O(t) + \boldsymbol{\Omega}(t)\underline{\mathbf{r}}(t). \quad (\text{B-1})$$

其中，

$$\boldsymbol{\Omega}(t) \equiv \dot{\mathbf{A}}(t)\mathbf{A}^{-1}(t) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{pmatrix}$$

为刚体角速度张量在固定坐标系中的投影矩阵。这样，(B-1) 式就给出了刚体上

任意一点在固定坐标系中的速度，即该点的绝对速度。

2.2 瞬心概念辨析与瞬心几何点坐标的导出

通常情况下，我们在使用“ t_0 时刻的瞬心”这种提法时会有两种不同的含义：一是指指在 t_0 时刻瞬时速度为零的刚体固连点，它始终与刚体相固连；二是特指该固连点在 t_0 时刻所在的空间位置，它是不与刚体相固连的空间几何点，而只是在 t_0 时刻与该时刻的瞬心固连点相重合。为避免混淆，本文在表达前一种语义时将其表述为“某时刻的瞬心固连点”，在表达后一种语义时则将其表述为“某时刻的瞬心几何点”。特别地，在瞬心轨迹的定义里提到的瞬心指的就是瞬心几何点，也就是说瞬心轨迹实际上是针对瞬心几何点而定义的概念。

令点 P 为刚体在 t_0 时刻的瞬心固连点，则它应该满足在 t_0 时刻的瞬时速度为零的条件。在 (B-1) 式中令 $\dot{\underline{\mathbf{R}}}(t) = 0$ ，有

$$\underline{\boldsymbol{\Omega}}(t)\underline{\mathbf{r}}(t) = -\underline{\dot{\mathbf{R}}}_O(t). \quad (\text{B-2})$$

对于平面运动刚体的情况，上式退化为给定截面（不妨设为 $O_0X_0Y_0$ 平面）上的平面向量式，其中

$$\underline{\boldsymbol{\Omega}}(t) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z \\ \omega_z & 0 \end{pmatrix}.$$

当 $\omega(t_0) = \omega_z \mathbf{e}_z \neq \mathbf{0}$ 时， $\underline{\boldsymbol{\Omega}}(t)$ 的行列式为

$$|\underline{\boldsymbol{\Omega}}(t_0)| = \omega_z^2 \neq 0,$$

此时式 (B-2) 存在唯一解

$$\underline{\mathbf{r}}(t_0) = -\underline{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(t_0)\underline{\dot{\mathbf{R}}}_O(t_0). \quad (\text{B-3})$$

注意到 $\underline{\mathbf{A}}^{-1}(t_0) \in \text{SO}(2)$ ，故

$$|\dot{\underline{\mathbf{A}}}(t_0)| = \frac{|\underline{\boldsymbol{\Omega}}(t_0)|}{|\underline{\mathbf{A}}^{-1}(t_0)|} \neq 0.$$

由式 (B-3) 有

$$\underline{\mathbf{R}}(t_0) = \underline{\mathbf{R}}_O(t_0) - \underline{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(t_0)\underline{\dot{\mathbf{R}}}_O(t_0). \quad (\text{B-4})$$

$$\underline{\boldsymbol{\rho}}(t_0) = -[\dot{\underline{\mathbf{A}}}(t_0)]^{-1}\underline{\dot{\mathbf{R}}}_O(t_0). \quad (\text{B-5})$$

式 (B-4) 和式 (B-5) 分别给出了刚体在 t_0 时刻的瞬心 P 的位矢 \mathbf{R} 在固定坐标系中以及位矢 \mathbf{r} 在固连坐标系中的投影列阵。

为了与前面用于刻画包括瞬心固连点在内的刚体固连点的记号加以区分, 本文后面将刚体在 τ 时刻的瞬心几何点记为 C , 并设 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 为 C 相对 O_0 的位矢, $\tilde{\mathbf{r}}(\tau)$ 为 C 相对 O 的位矢, $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 为 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 在固定坐标系的列阵, $\tilde{\mathbf{r}}(\tau)$ 在平动坐标系中的列阵, $\underline{\rho}(\tau)$ 为 $\tilde{\mathbf{r}}(\tau)$ 在固连坐标系中的列阵。这样, 由式 (B-4) 和式 (B-5) 可得到

$$\underline{\mathbf{R}}(\tau) = \underline{\mathbf{R}}_{O_0}(\tau) - \underline{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(\tau) \underline{\mathbf{R}}'_O(\tau). \quad (\text{B-6})$$

$$\underline{\rho}(\tau) = -[\underline{\mathbf{A}}'(\tau)]^{-1} \underline{\mathbf{R}}'_O(\tau). \quad (\text{B-7})$$

式 (B-6) 和式 (B-7) 分别给出了任意 τ 时刻的瞬心几何点 C 的位矢 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 在固定坐标系中以及位矢 $\tilde{\mathbf{r}}(\tau)$ 在固连坐标系中的投影列阵, 亦即 τ 时刻的瞬心几何点坐标。

2.3 两类瞬心轨迹的概念辨析

按照 2.2 节中的描述, 刚体的瞬心几何点是指某时刻在固定参考系中瞬时速度为零的刚体固连点在该时刻所在的空间位置。一般情况下, 不同时刻的瞬心几何点并不一定对应于同一个刚体固连点, 因此它们在固连参考系中将形成一条曲线, 称为动瞬心轨迹。类似地, 不同时刻的瞬心几何点在固定参考系形成的曲线称为定瞬心轨迹。形象地说, 瞬心轨迹中蕴含了瞬心运动的全部历程。

从上述定义中, 可以看出动瞬心轨迹与定瞬心轨迹之间的两点差异:

- (1) 两条曲线的形成过程不同: 前者是在固定参考系中观察得到的, 而后者则是在固连参考系中观察得到的。我们指出, “在某参考系中观察某点的运动” 用数学语言描述就是作以该参考系的任意固连点为始点、以被观察点为终点的位矢 \mathbf{x} 并考察其形成的曲线 $\mathbf{x}(\tau)$ 。例如, 由于点 O 相对固连参考系静止, 因此在固连参考系中观察上述点 P 的运动, 即为曲线 $\mathbf{r}(\tau)$ 。同理, 定瞬心轨迹就是位矢 $\tilde{\mathbf{R}}$ (它的始点 O_0 相对固定参考系静止) 随时间变化形成的曲线 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$, 动瞬心轨迹就是位矢 $\tilde{\mathbf{r}}$ (它的始点 O 相对固连参考系静止) 随时间变化形成的曲线 $\tilde{\mathbf{r}}(\tau)$, 这样也就给出了两类瞬心轨迹的数学定义。
- (2) 两条曲线的运动状态不同: 由上述对两种瞬心轨迹形成过程的分析中可以认识到, 瞬心轨迹实际上就是三维欧氏空间中按照给定方式生成的曲线。这里 “按照给定方式生成” 指的是通过在某参考系中观察瞬心几何点变化

轨迹的方式给出曲线，这显然蕴含了这种曲线在生成它的参考系中是静止的。具体地说，定瞬心轨迹相对于固定参考系静止，而动瞬心轨迹则相对固连参考系静止。特别地，动瞬心轨迹上的瞬心几何点与瞬心固连点在任意时刻向固连坐标系的投影均重合。

考察式 (B-6) 和式 (B-7) 可知，定瞬心轨迹 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 是空间中一条确定的曲线，它由刚体在各个时刻的瞬心几何点构成，曲线上参数 $\tau = \tau_0$ 的点就是刚体上作为 τ_0 时刻瞬心的那个固连点；整条曲线 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 在固定参考系中静止，即它在任意时刻 t 向固定坐标系得到的投影曲线是相同的。因此式 (B-6) 中 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 的表达式实际上给出了定瞬心轨迹在任意时刻 t 向固定坐标系投影的参数方程。同理，式 (B-7) 则给出了动瞬心轨迹在任意时刻 t 向固连坐标系投影的参数方程。

2.4 瞬心轨迹在固定坐标系中投影的运动方程

需要说明的是，由于固定坐标系相对固定参考系静止，因此将曲线在不同时刻向固定坐标系投影得到的投影运动方程，实际上就代表了该曲线在固定参考系中的运动方程。

两类瞬心轨迹均是空间中以某种形式运动着的曲线，而曲线在空间中的运动则是一个二维的问题：时间是一个维度，需要设置参数（称为时间参数）用于指明是哪个时刻的曲线，在瞬心轨迹这一问题中具体指在哪个时刻将曲线（即瞬心轨迹上所有点的全体）向给定坐标系投影；曲线本身又是一个一维结构，需要设置参数（称为位形参数）来区分在同一时刻投影得到的曲线上的各点。这实际上就是拓扑学概念——同伦的一个具体例子 [3]。

可以看到，式 (B-6) 和式 (B-7) 中的参数 τ 就是位形参数。以式 (B-7) 为例进行说明。在任一时刻 t 将动瞬心轨迹 $\tilde{\mathbf{r}}(\tau)$ 向固定坐标系中投影得到其投影曲线，可以通过给出参数 τ 的值来区分曲线上的各点。例如，若给出 $\tau = \tau_0$ ，便可知道该点就是 τ_0 时刻的瞬心固连点。因此，下面我们将着重于设置时间参数 t 用来指明在 t 时刻将曲线向对应坐标系投影。

对于定瞬心轨迹，如前面 2.3 小节末尾所述，由于定瞬心轨迹 $\tilde{\mathbf{R}}(\tau)$ 在固定参考系中静止，它在固定坐标系中的投影不随时间变化，因此在任意时刻 t 将定瞬心轨迹投影到固定坐标系中，得到的投影参数方程形式与式 (B-6) 相同，即有

$$\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_r(t, \tau) = \underline{\mathbf{R}}_O(\tau) - \underline{\boldsymbol{\Omega}}^{-1}(\tau) \underline{\mathbf{R}}'_O(\tau). \quad (\text{B-8})$$

其中，下标 r 表示定瞬心轨迹的投影曲线。

对于动瞬心轨迹 $\tilde{\mathbf{r}}(\tau)$ ，与上面类似，由于它在固连参考系中静止，它在固连

坐标系中的投影不随时间变化，因此在任意时刻 t 将动瞬心轨迹投影到固连坐标系中，得到的形式均与 (B-7) 式相同，即有

$$\underline{\tilde{\rho}}_b(t, \tau) = -[\mathbf{A}'(\tau)]^{-1} \underline{\mathbf{R}}_O'(\tau). \quad (\text{B-9})$$

其中，下标 b 表示动瞬心轨迹的投影曲线。结合固定坐标系和固连坐标系在 t 时刻的坐标转换关系（注意，这里包含牵连项 $\underline{\mathbf{R}}_O(t)$ ）

$$\underline{\mathbf{R}}(t) = \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \mathbf{A}(t) \underline{\rho}(t),$$

进而可由式 (B-9) 得到动瞬心轨迹在 t 时刻向固定坐标系投影的参数方程，即有

$$\begin{aligned} \underline{\tilde{\mathbf{R}}}_b(t, \tau) &= \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \mathbf{A}(t) \underline{\tilde{\rho}}_b(t, \tau) \\ &= \underline{\mathbf{R}}_O(t) - \mathbf{A}(t) [\mathbf{A}'(\tau)]^{-1} \underline{\mathbf{R}}_O'(\tau). \end{aligned} \quad (\text{B-10})$$

在给定参考系下，式 (B-9) 和 (B-10) 给出了两类瞬心轨迹在固定坐标系中投影的运动方程。具体地说， $\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_r(t, \tau)$ （或 $\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_b(t, \tau)$ ）是指定（动）瞬心轨迹上 τ 时刻的瞬心几何点在 t 时刻向固定坐标系投影的坐标值。

下面以式 (B-10) 为例，通过考察 $\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_b(t, \tau)$ 的 τ 曲线和 t 曲线来说明两个参数的物理意义。 t 为时间参数，将 $t = t_0$ 固定得到的 τ 曲线是动瞬心轨迹在 t_0 时刻向固定坐标系中投影形成的曲线； τ 为位形参数，将 $\tau = \tau_0$ 固定得到的 t 曲线代表了动瞬心轨迹上 τ_0 时刻的瞬心几何点在固定坐标系中投影的运动。

3 两类瞬心轨迹的运动规律

3.1 瞬心轨迹的几何特征

由式 (B-9) 和式 (B-10)，可以得出如下结论：

- (1) 动瞬心轨迹投影的形状不随时间变化；
- (2) 两类瞬心轨迹在同一时刻 t_0 的 τ 曲线相切，切点为位形参数 $\tau = t_0$ 对应的点；
- (3) 动瞬心轨迹上位形参数为 τ_0 的 t 曲线在 $t = \tau_0$ 处沿 t 方向的方向导数为 0。

现证明如下：

- (1) 式 (B-10) 表明，动瞬心轨迹在任意两个时刻只相差一个刚性运动。由于刚性运动不改变确定投影曲线形状的特征量（弧长、曲率、挠率），这就证明了结论。

(2) 只需证明 $\forall t$, 有

$$\begin{cases} \underline{\tilde{\mathbf{R}}}_r(t, t) = \underline{\tilde{\mathbf{R}}}_b(t, t) \\ \underline{\tilde{\mathbf{R}}}'_r(t, \tau) \Big|_{\tau=t} = \underline{\tilde{\mathbf{R}}}'_b(t, \tau) \Big|_{\tau=t}. \end{cases}$$

前式显然。对于后式, 有:

$$\begin{aligned} & \underline{\tilde{\mathbf{R}}}'_r(t, \tau) \Big|_{\tau=t} \\ &= \underline{\mathbf{R}}'_O(\tau) \Big|_{\tau=t} - \frac{d}{d\tau} \left\{ \mathbf{A}(\tau) [\mathbf{A}'(\tau)]^{-1} \underline{\mathbf{R}}'_O(\tau) \right\} \Big|_{\tau=t} \\ &= -\mathbf{A}(t) \frac{d}{d\tau} \left\{ [\mathbf{A}'(\tau)]^{-1} \underline{\mathbf{R}}'_O(\tau) \right\} \Big|_{\tau=t} \\ &= \underline{\tilde{\mathbf{R}}}'_b(t, \tau) \Big|_{\tau=t}. \end{aligned}$$

(3) 即证 $\forall \tau$, 有

$$\dot{\underline{\tilde{\mathbf{R}}}}_b(t, \tau) \Big|_{t=\tau} = 0.$$

将式 (B-10) 代入即得证。事实上, 由瞬心的定义也可得知该式的合理性。

3.2 瞬心轨迹的运动规律

结论 (1) 表明, 动瞬心轨迹与定瞬心轨迹均具有刚体的特征, 即形状不随时间变化。再结合结论 (2) 和结论 (3) 可以得到: 作平面运动的刚体, 它在任一时刻的动瞬心轨迹相对于定瞬心轨迹的运动是纯滚动, 接触点即为动瞬心轨迹 (亦即刚体) 在该时刻的瞬心。

事实上, 从运动学的角度来看, 两个刚体的相对运动是纯滚动, 其充要条件是二者在接触点处相切且在接触点位置的相对速度为零。结论 (2) 说明, 任一时刻 t_0 , 平面运动刚体的动瞬心轨迹与定瞬心轨迹相切, 切点即为该时刻的瞬心固连点; 结论 (3) 则说明, 动瞬心轨迹上位形参数为 τ_0 的点在 τ_0 时刻的速度为零, 取 $\tau_0 = t_0$ 即得 t_0 时刻两类瞬心轨迹在切点处的相对速度为零。

4 算例分析

一架长为 $2l$ 的梯子斜倚在与地面垂直的墙上, 梯子中点到墙角连线与水平向右的方向成角设为 θ 。如图 B-2 建立平面笛卡尔坐标系 $O_0X_0Y_0$ 和 Oxy 。为讨论问题的简便起见, 我们设角 θ 随时间的变化规律为 $\theta = \omega t$ ($\omega > 0$)。

4.1 建立刚体固连点的运动方程

任取梯子的一个固连点 P , 设它对 O 的位矢 \mathbf{r} 在固连坐标系中的列阵为

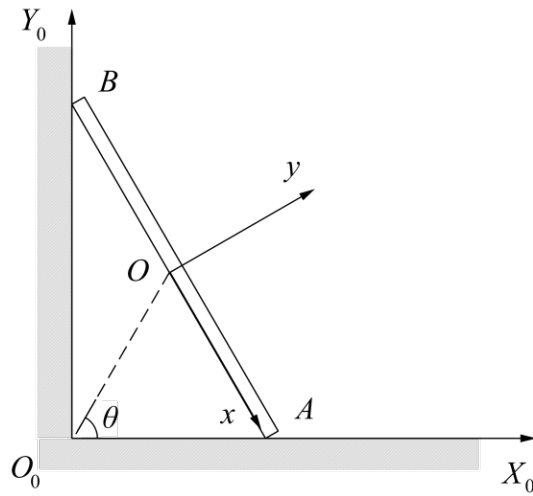


图 B-2 斜梯算例示意图

$\underline{\rho}(t) \equiv \underline{\rho}$ 。依次计算得到

$$\mathbf{A}(t) = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \sin \omega t \\ -\sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix},$$

$$\underline{\boldsymbol{\Omega}}(t) = \dot{\mathbf{A}}(t)\mathbf{A}^{-1}(t) = \omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B-11})$$

从而可得固连点 P 的运动方程

$$\underline{\mathbf{R}}(t) = \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \underline{\mathbf{r}}(t) = \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \mathbf{A}(t)\underline{\rho} \quad (\text{B-12})$$

其中, $\underline{\mathbf{R}}_O(t) = l(\cos \omega t, \sin \omega t)^T$ 。另外, 从式 (B-12) 中也可以得出 $\boldsymbol{\omega} = -\omega \mathbf{e}_z \neq \mathbf{0}$, 这与梯子作顺时针旋转的事实相符。

4.2 计算 t_0 时刻瞬心几何点的坐标

不妨设固连点 P 为刚体在 t_0 时刻的瞬心固连点。在式中令 $\underline{\dot{\mathbf{R}}}(t) = \mathbf{0}$ 可解出

$$\underline{\mathbf{R}}(t_0) = 2l(\cos \omega t_0, \sin \omega t_0)^T,$$

$$\underline{\rho}(t_0) = 2l(\cos 2\omega t_0, \sin 2\omega t_0)^T.$$

由上面两式, 一方面我们可以获得 t_0 时刻的瞬心固连点 P 的运动方程

$$\underline{\rho}(t) = 2l(\cos 2\omega t_0, \sin 2\omega t_0)^T,$$

$$\underline{\mathbf{R}}(t) = \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \mathbf{A}(t)\underline{\rho}(t_0)$$

$$= 2l \cos \omega(t - t_0)(\cos \omega t_0, \sin \omega t_0)^T. \quad (\text{B-13})$$

另一方面，也可由式 (B-6) 和式 (B-7) 得出任意 τ 时刻瞬心几何点坐标为

$$\begin{aligned}\underline{\tilde{\mathbf{R}}}(\tau) &= 2l(\cos \omega\tau, \sin \omega\tau)^{\text{T}}, \\ \underline{\tilde{\rho}}(\tau) &= 2l(\cos 2\omega\tau, \sin 2\omega\tau)^{\text{T}}.\end{aligned}$$

4.3 瞬心轨迹运动方程的导出与有关讨论

利用前面已求得的任意 τ 时刻的瞬心几何点坐标，与式 (B-8) ~ (B-10) 类似，可得

$$\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_r(t, \tau) = 2l(\cos \omega\tau, \sin \omega\tau)^{\text{T}}, \quad (\text{B-14})$$

$$\underline{\tilde{\rho}}_b(t, \tau) = 2l(\cos 2\omega\tau, \sin 2\omega\tau)^{\text{T}},$$

$$\begin{aligned}\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_b(t, \tau) &= \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \mathbf{A}(t)\underline{\tilde{\rho}}_b(t, \tau) \\ &= 2l \cos \omega(t - \tau)(\cos \omega\tau, \sin \omega\tau)^{\text{T}}.\end{aligned} \quad (\text{B-15})$$

式 (B-14) 和式 (B-15) 分别给出了梯子的定瞬心轨迹与动瞬心轨迹的运动方程。下面我们分别具体解释这两式的意义。

1. $\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_r(t, \tau)$ 是以 $2l$ 为半径的 $1/4$ 圆弧，圆弧上坐标 $\tau = \tau_0$ 的点是梯子在此时刻的瞬心几何点在固定坐标系中的投影。从式 (B-14) 中可以看到，圆弧在固定坐标系中的位置不随时间 t 而变化，这表明定瞬心轨迹在固定参考系中静止。
2. $\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_b(t, \tau)$ 是与梯子相固连的以梯子为直径的半圆，半圆上坐标 $(t, \tau) = (t_0, \tau_0)$ 的点是 τ 时刻的瞬心固连点在 t 时刻向固定坐标系的投影。

当取定 $t = t_0$ 时，该式描述了动瞬心轨迹在 t_0 时刻向固定坐标系的投影。结合上面的结果可知，梯子的动瞬心轨迹是与梯子相固连的半圆。

当取定 $\tau = \tau_0$ 时，由式 (B-15) 可得

$$\underline{\tilde{\mathbf{R}}}_b(t, \tau_0) = \underline{\mathbf{R}}_O(t) + \mathbf{A}(t)\underline{\tilde{\rho}}_b(t, \tau_0) = 2l \cos \omega(t - \tau_0)(\cos \omega\tau_0, \sin \omega\tau_0)^{\text{T}}. \quad (\text{B-16})$$

该式描述了 τ_0 时刻的瞬心固连点在固定坐标系中投影的运动。式 (B-16) 与式 (B-13) 无论在形式还是在物理意义上都别无二致。由上式可知，该固连点始终位于 $(\cos \omega\tau_0, \sin \omega\tau_0)^{\text{T}}$ 这一方向，并在 $t = \tau_0$ 这一时刻运动至半径为 $2l$ 的圆周（即定瞬心轨迹）上，这也表明该固连点就是 τ_0 时刻的瞬心固连点。

容易验证结论 (2)、(3) 均适合本算例，因此两类瞬心轨迹之间的相对运动为纯滚动，这也符合我们的物理直观。

5 一般运动刚体情形的讨论

最后简要讨论一下一般运动刚体 ($\boldsymbol{\omega} \neq \mathbf{0}$) 的瞬心分布及其运动规律。由于此时 $\boldsymbol{\Omega}(t)$ 为奇数阶反称矩阵, 故 $|\boldsymbol{\Omega}(t)| = 0$; 又 $\boldsymbol{\omega} = \omega_x \mathbf{e}_x + \omega_y \mathbf{e}_y + \omega_z \mathbf{e}_z \neq \mathbf{0}$, 容易知道 $\text{rank}(\boldsymbol{\Omega}(t)) = 2$ 。故 $\boldsymbol{\Omega}(t)$ 像空间的维数为 2, 此时式 (B-2) 作为关于位矢 \mathbf{r} 的线性方程组可能无解。

在式 (B-2) 有解的情况下 (如刚体作定点运动的情形), 解空间的维数为 1。也就是说, 此时刚体的瞬心构成了三维欧氏空间中的一条直线, 亦即引言中提到的瞬时转轴。

在刚体运动过程中, 这条瞬时转轴将形成一张直纹曲面, 此时的瞬心轨迹实际上意味着这张直纹曲面, 瞬心轨迹的运动就是空间曲面的运动。可以预见, 这是两类瞬心轨迹 (即两张直纹曲面) 之间的关系将只具有局部意义, 且将涉及古典微分几何中曲面论的内容, 此处权当启发而不予更多讨论。

6 小结

本文采用笛卡尔坐标系下的列阵-矩阵语言给出了平面运动刚体的动瞬心轨迹与定瞬心轨迹的运动方程, 并根据运动方程阐释了两类瞬心轨迹的几何特征与物理意义, 进而证明了结论: 平面运动刚体在任一时刻的动瞬心轨迹在定瞬心轨迹上作纯滚动, 接触点即为动瞬心轨迹在该时刻的瞬心固连点。然后通过一个具体算例展示了瞬心几何点坐标及瞬心轨迹运动方程的求解方法, 并讨论了运动方程的物理意义。最后还简要讨论了一般运动刚体的情形。

论文对应的原文索引

- [1] 黄云帆. 平面运动刚体两类瞬心轨迹之间关系的探讨 [J/OL]. 力学与实践, 2017, 39(3): 306-311.