

弱温度场条件下电子输运的离散 统一气体动理学格式求解

李 威¹, 廉 猛², 吕京涛², 郭照立^{1,3,*}

(1. 华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北 武汉 430074; 2. 华中科技大学物理学院, 湖北 武汉 430074;

3. 华中科技大学数学与应用学科交叉创新研究院, 湖北 武汉 430074)

摘 要: 采用基于有限体积法框架的离散统一气体动理学格式求解弱温度场条件下的电子玻尔兹曼输运方程。该格式在界面处提取特征线以构建界面通量,旨在保持二阶空间精度的同时具备较小的数值耗散;通过耦合碰撞与迁移过程,该格式的时间步长不受限于弛豫时间,仅由 Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件确定,且在弹道区域至扩散区域均具备良好的渐进保持性质。通过不同 Knudsen 数的测试算例,验证了所提格式的高效性与准确性。

关键词: 多尺度热输运; 电子输运; 玻尔兹曼方程; 离散统一气体动理学格式

中图分类号: O469

文献标识码: A

DOI:10.19596/j.cnki.1001-246x.8899

0 引言

电子输运是研究电子在材料中移动、传递能量以及在固体结构内相互作用的重要领域^[1-2]。伴随集成电路技术的不断进步,半导体、金属薄膜等微电子元器件尺寸不断减小至纳微米尺度,材料的空间和时间特征尺度已经缩小到与载流子平均自由程或弛豫时间相当或更小^[1,3-5],在此类尺度下粒子的个体作用将无法忽略,因此材料的输运性质和电子行为发生显著变化,一般的宏观定律与理论将不再适用。对于多尺度的电子元器件和纳米材料,需要采用相应尺度或多尺度的理论与模型来准确描述粒子传输行为,这对微电子技术和纳米科学的研究和应用具有重要意义^[6-9]。

对于一般的固体材料,其主要载能粒子为电子与声子,但是对于晶格结构较为稳定的金属,其原子之间相互联结形成稳定的晶格结构,而原子核外轨道中处于费米能级附近的电子极易被外部条件激发发生跃迁,从而脱离原子核束缚成为自由电子,通常其运动速度比声子运动速度大三个数量级,因此对于金属而言电子是主要的载能粒子^[2,10-12]。此外,电子在固体内部并非无阻碍地自由移动,由于晶格中的缺陷、振动、掺杂等因素使得电子在迁移过程中遭受阻碍,并在固体内部发生体相散射^[13-14],从而形成宏观层面的热阻与电阻,该过程通常为一类复杂的多体相互作用系统。为满足宏观守恒方程的同时避免追踪单个电子的行为轨迹,可以通过将电子类比为经典气体分子,忽略其部分量子效应并追踪其群体行为,使用唯象的玻尔兹曼方程(BTE)来描述电子的运动^[10,15-17]。

玻尔兹曼输运方程通过追踪粒子速度分布函数,描述介观尺度上粒子的迁移与碰撞过程^[18-19],目前已在多孔介质渗流^[20-22]、多组分气体^[23-26]、声子输运^[27-29]、中子输运^[30-31]等不同粒子的非平衡问题中取得了重要进展。不同粒子的平衡态速度分布各有不同,对于气体分子等经典粒子,其平衡态可由麦克斯韦-玻尔兹曼速度分布描述;声子是玻色子的一种,因此平衡态遵循玻色-爱因斯坦分布;电子作为费米子满足费米-狄拉克分布,由于泡利不相容原理其系统中并非所有电子均参与能量传递,而仅有位于费米能级附近的电子会在该过程产生贡献^[32]。考虑到电子的能带色散关系与不同的电子结构,因此区别于气体分子与声子,求解电子玻尔兹曼输运方程需要针对电子的量子特性引入合理的模型与假设。

收稿日期: 2024-01-18; 修回日期: 2024-03-13

基金项目: 华中科技大学交叉研究支持计划(2023JCYJ002)资助

第一作者: 李威,硕士研究生,研究方向为电子介观输运数值方法研究, E-mail: levihust@hust.edu.cn

* 通信作者: 郭照立, E-mail: zlguo@hust.edu.cn

目前已有多种方法用于求解电子玻尔兹曼输运方程。例如 Miao 等^[33]采用蒙特卡罗方法(MC)直接求解电子玻尔兹曼方程,通过偏差 MC 算法追踪费米能级上下的占据和未占据电子态,以模拟金属薄膜中弱关联近自由电子系统的输运特性。然而由于 MC 算法的随机涨落,其结果易产生较大数值噪声,并在面对电子碰撞频繁的扩散区域时收敛缓慢;Gabbana 等^[34-35]使用基于近平衡假设的格子玻尔兹曼方法(LBM)研究石墨烯中的电子运输系数和电势,并通过测量横向电流和涡度的变化,确定了电子流从层流到(预)湍流流动的转变。但该工作未考虑电子的量子效应,且在弹道区域会存在假收敛的非物理解现象;此外,离散坐标法(DOM)也被应用于计算电子在材料中的输运过程^[35-37],通过各类模型与数值方法预测到电子在低维材料中能够产生类似宏观流体性质的电子涡流^[35,37-38]、非负磁电阻^[36,39]等水动力学现象。

本文基于动理学理论与自由电子气模型,采用离散统一气体动理学格式(DUGKS)求解电子玻尔兹曼输运方程^[40]。该方法基于有限体积法框架,对复杂几何问题具有有效的处理能力。在界面构造过程中,DUGKS 提取界面处特征线以构建界面通量,在保持二阶精度的同时具备较好的数值稳定性与鲁棒性。此外,DUGKS 通过引入辅助分布函数耦合碰撞与迁移过程,能够消除动理学方法中弛豫时间对时间步长的限制,并在电子输运的扩散区域至弹道区域的全流域内拥有良好的渐进保持性质(AP)^[40-42],因此该方案十分适用于处理电子元器件中的多尺度输运问题。

1 介观尺度电子输运方程模型

1.1 玻尔兹曼输运方程

电子玻尔兹曼输运方程可计算刚性晶格固体中的电子非平衡输运问题。在自由电子近似假设下忽略离子对电子作用以及电子之间的强相互作用,可将晶格系统中的电子视为类似气体的简并电子气^[10-11]。每个计算域中的电子气由实空间与相空间状态描述,其行为可由玻尔兹曼输运方程描述,在不考虑外在电场与磁场情况下,有

$$\frac{\partial f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{r}} = \Omega = \left(\frac{\partial f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}}, \quad (1)$$

其中电子速度分布函数 $f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 代表在 t 时刻、第 α 个能带、物理空间 $\mathbf{r}$ 处,在 $\mathbf{k}$ 电子量子态的分布概率。式(1)左侧第一项为电子随时间的变化关系瞬态项;第二项为实空间或物理空间项,代表电子在物理晶格中的迁移过程,因此也可称为漂移项,其中 $\dot{\mathbf{r}} = \partial \mathbf{r} / \partial t = \mathbf{v}(\mathbf{k})$ 为电子群速度,根据半经典模型与能带理论,有

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{k}). \quad (2)$$

在近自由电子近似下有 $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \hbar \mathbf{k} / m$, $\varepsilon(\mathbf{k}) = (\hbar \mathbf{k})^2 / (2m) + \varepsilon_0$, 其中 $\hbar = h / (2\pi)$ 为约化普朗克常数, m 为电子质量。对于 d 维度问题,已知某处电子速度分布函数则当地宏观量电流密度的统计定义表示为

$$\mathbf{J} = - \frac{2e}{(2\pi)^d} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d\mathbf{k}, \quad (3)$$

其中 e 为单个电子所携带的电荷量。热流密度统计定义为

$$\mathbf{Q} = \frac{2}{(2\pi)^d} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{r})] f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d\mathbf{k}. \quad (4)$$

式(1)中右侧为碰撞项,该项表示为由于固体内部结构的晶体杂质、晶格振动、电子相互作用等过程所导致的散射过程,电子从 $\mathbf{k}$ 量子态跃迁至 $\mathbf{k}'$ 量子态,通常可分为电子-杂质散射、电子-声子散射、电子-电子散射等^[43]。该项完整表达式为

$$\left(\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \int \Theta(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] - \Theta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] d\mathbf{k}', \quad (5)$$

其中 Θ 为迁移概率,也可称为散射核。 $\Theta(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ 表示电子从 $\mathbf{k}'$ 电子态因散射而迁移至 $\mathbf{k}$ 电子态的概率。玻尔兹曼输运方程的碰撞项需满足守恒定律,区别于声子系统,电子系统需满足电子数密度守恒与能量守恒^[2,16],即

$$\int \Omega d\mathbf{k} = 0, \quad \int \varepsilon(\mathbf{k}) \Omega d\mathbf{k} = 0. \quad (6)$$

由于散射过程后会发生电子能态跃迁至邻近布里渊区,电子局部发生动量迁移,因此电子玻尔兹曼输运方程碰撞项不满足动量守恒。

结合式(1)与式(5),完整的电子玻尔兹曼输运方程是一个包含时间项、空间项、波矢空间项的七维方程,具有较大的直接求解难度。为简化散射项,本文引入弛豫时间近似假设,并假定仅考虑某单一能带下的电子分布,则有

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = -\frac{f - f^{\text{eq}}}{\tau}, \quad (7)$$

其中 $\tau(T, \mathbf{k})$ 为弛豫时间,表示电子发生散射后恢复至平衡态所需时间,通常可取决于材料性质、温度 T 或电子态 $\mathbf{k}$, 在本文灰体模型下该参数为固定值。如果单个散射过程相互独立则可用 Matthessen 规则估算^[1-2,40], 其中 τ_D 、 τ_e 、 τ_p 等为由于晶格缺陷、电子间碰撞、电-声相互作用等引起的弛豫时间:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_D} + \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_p} + \dots \quad (8)$$

式(7)中 f^{eq} 为电子平衡态,该项满足费米-狄拉克分布 $f^{\text{eq}} = 1/\{\exp[(\varepsilon - \mu)/(k_B T)] + 1\}$, $\mu(\mathbf{r})$ 、 $T(\mathbf{r})$ 为处于实空间 $\mathbf{r}$ 处的局部宏观化学势与温度, k_B 为玻尔兹曼常数。结合式(1)与式(7)并对原方程无量纲化后可得基于灰体模型单弛豫近似下单一能带的电子玻尔兹曼输运方程为

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}^*, \mathbf{k}^*, t^*)}{\partial t^*} + \dot{\mathbf{r}}^* \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}^*, \mathbf{k}^*, t^*)}{\partial \mathbf{r}^*} = -\frac{f(\mathbf{r}^*, \mathbf{k}^*, t^*) - f^{\text{eq}}(T^*, \mu^*)}{\tau^*}, \quad (9)$$

其中

$$f^{\text{eq}} = \frac{1}{\exp[(\varepsilon^* - \mu^*)/(k_B^* T^*)] + 1}, \quad (10)$$

无量纲参数定义为

$$\begin{aligned} r^* &= \frac{r}{L}, \quad k^* = \frac{k}{k_F}, \quad \tau^* = Kn = \frac{\tau}{L/v_F}, \quad t^* = \frac{t}{L/v_F}, \\ \dot{r}^* &= \frac{\dot{r}}{v_F}, \quad T^* = \frac{T}{T_{\text{ref}}}, \quad \mu^* = \frac{\mu}{E_F}, \quad \varepsilon^* = \frac{\varepsilon}{E_F}, \quad k_B^* = \frac{k_B}{E_F/T_{\text{ref}}}, \end{aligned} \quad (11)$$

其中 L 为系统特征长度, k_F 、 v_F 、 E_F 为费米波矢、费米速度、费米能级, T_{ref} 为系统参考温度。为简洁起见,后续电子 Boltzmann 输运方程将省略无量纲符号。

1.2 偏差分布函数与线性近似

为避免非线性迭代过程,假设温差、化学势差均较小以简化计算,即 $\Delta T \ll T_{\text{ref}}$ 、 $\Delta \mu \ll \mu_{\text{ref}}$, 其中 ΔT 为系统最大温差, T_{ref} 为系统平均参考温度; $\Delta \mu$ 为系统最大化学势差, μ_{ref} 为系统平均参考化学势。由于在微纳尺度结构下,内部系统最大温差与化学势差一般不会偏离平均或初始值太大,因此在大量文献中都广泛采纳该近似假设。基于上述假设,采用偏差分布函数替换原分布函数,即假设系统各处分布函数偏离初始时刻平衡态较小,则可将式(9)转换得到电子偏移玻尔兹曼输运方程为

$$\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - g^{\text{eq}}(T, \mu)}{\tau}, \quad (12)$$

其中 $g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f^{\text{eq}}(T_{\text{ref}}, \mu_{\text{ref}})$, $g^{\text{eq}}(T, \mu) = f^{\text{eq}}(T, \mu) - f^{\text{eq}}(T_{\text{ref}}, \mu_{\text{ref}})$ 。将平衡分布函数 f^{eq} 于 T_{ref} 、 μ_{ref} 展开,则可得线性假设下系统的平衡分布函数为

$$g^{\text{eq}}(T, \mu) = C_T(T - T_{\text{ref}}) + C_\mu(\mu - \mu_{\text{ref}}), \quad (13)$$

C_T 、 C_μ 表达式为

$$C_T = \frac{\exp[(\varepsilon - \mu_{\text{ref}})/(k_B T_{\text{ref}})]}{\{\exp[(\varepsilon - \mu_{\text{ref}})/(k_B T_{\text{ref}})] + 1\}^2} \frac{\varepsilon - \mu_{\text{ref}}}{k_B T_{\text{ref}}^2}, \quad (14)$$

$$C_\mu = \frac{\exp[(\varepsilon - \mu_{\text{ref}})/(k_B T_{\text{ref}})]}{\{\exp[(\varepsilon - \mu_{\text{ref}})/(k_B T_{\text{ref}})] + 1\}^2} \frac{1}{k_B T_{\text{ref}}} \quad (15)$$

2 电子输运的离散统一气体动理学格式

2.1 控制体单元

对于式(12),本文将采用离散统一气体动理学格式对弱温度场近似下的电子玻尔兹曼灰体输运方程进行求解。在求解方程前需先确定变量范围用以进行方程离散,对于实空间 $\mathbf{r}$ 将其离散为 n 个有限离散域单元 $\mathbf{r}_i (i = 1, 2, 3, \dots, n)$; 对于相空间,由于在倒格空间中晶格波矢具有周期性,第一布里渊区外波矢所代表的电子行为模式均为第一布里渊区内波矢所代表的行为模式的重复或重现^[1,11,32],因此仅需对第一布里渊区范围内电子进行模拟。本文所采用局部波矢坐标系如图1所示,相空间采用极坐标系则可对极径 $k \in [0, \pi/a]$ 、方位角 $\varphi \in [0, 2\pi]$ 范围内波矢离散为 m 个有限电子态离散域 $\mathbf{k}_j (j = 1, 2, 3, \dots, m)$, 其中 a 为晶格常数。

以一维问题为例,对式(12)左右两边以 $\mathbf{x}_i$ 为中心的体积 V_i 上,同时对时间 t_n 至 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ 进行积分,对实空间项与碰撞项采用中点积分与梯形积分近似方法,可以得到有限体积离散后的玻尔兹曼输运方程:

$$g_{i,j}^{n+1} - g_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{|V_i|} F_{i,j}^{n+1/2} = \frac{\Delta t}{2} [\Omega_{i,j}^{n+1} + \Omega_{i,j}^n], \quad (16)$$

其中 $\Omega_{i,j} = -(g_{i,j} - g_{i,j}^{\text{eq}})/\tau_{i,j}$, 对于实空间项则有界面通量:

$$F^{n+1/2} = \sum_{\mathbf{x}_b \in N_\alpha} (\mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_b) g(\mathbf{x}_b, t_{n+1/2}) S(\mathbf{x}_b). \quad (17)$$

式中 N_α 表示在控制单元中心 $\mathbf{x}_c$ 处所包含界面中心的集合, $\mathbf{n}_b$ 则是界面中心处的单位外法向量, $S(\mathbf{x}_b)$ 为界面面积。在式(16)中的偏差分布函数与碰撞项则为在控制单元处的单元平均值,即

$$g_{i,j} = \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} g(\mathbf{r}_i, \mathbf{k}_j, t) d\mathbf{x}, \quad \Omega_{i,j} = \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} \Omega(\mathbf{r}_i, \mathbf{k}_j, t) d\mathbf{x}. \quad (18)$$

由于式(16)包含 $n+1$ 时刻的碰撞项 $\Omega_{i,j}^{n+1}$ 以及半时间步长通量 $F_{i,j}^{n+1/2}$, 为消除隐式运算,引入辅助演化分布函数参数,可将式(16)更新为

$$\tilde{g}_{i,j}^{n+1} = \tilde{g}_{i,j}^{+,n} - \frac{\Delta t}{|V_i|} F_{i,j}^{n+1/2}, \quad (19)$$

其中,引入的辅助分布函数定义为

$$\tilde{g}_{i,j}^{n+1} = g_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \Omega_{i,j}^{n+1}, \quad \tilde{g}_{i,j}^{+,n} = g_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{2} \Omega_{i,j}^n. \quad (20)$$

在求解过程中,通过 n 时刻已知的分布函数可计算得到 $\tilde{g}_{i,j}^{+,n}$; 在求得通量 $F_{i,j}^{n+1/2}$ 后,可根据式(19) 计算得到下一时间步的 $\tilde{g}_{i,j}^{n+1}$ 。

2.2 界面微通量构造

通过式(19)可知,求解得到下一时间步新演化分布函数需要确定控制单元界面处微通量 $F_{i,j}^{n+1/2}$, 也即界面处原偏移分布函数 $g(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t + \Delta t/2)$ 。DUGKS 通过在界面处提取特征线,如图2所示。对式(16)从界面 $\mathbf{x}_b$ 处沿特征线上对半个时间步长进行积分,对碰撞项采用梯形积分近似,便可得到

$$g(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h) - g(\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h, \mathbf{k}, t_n) = \frac{h}{2} [\Omega(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h) + \Omega(\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h, \mathbf{k}, t_n)], \quad (21)$$

其中, $h = \Delta t/2$ 。对于式(21),为避免隐式计算,引入辅助分布函数

$$\bar{g} = g - \frac{h}{2} \Omega, \quad \bar{g}^+ = g + \frac{h}{2} \Omega. \quad (22)$$

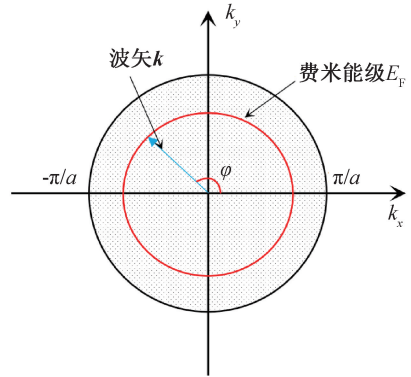


图1 相空间局部坐标系

Fig.1 Local coordinate system in wave vector space

式(21)可表示为

$$\bar{g}(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h) = \bar{g}^+(\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h, \mathbf{k}, t_n). \quad (23)$$

为得到 $\bar{g}^+(\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h, \mathbf{k}, t_n)$, 假定分布函数在控制体单元内满足线性分布, 因此对于连续情况下可在 $\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h$ 处根据迁移方向对控制单元中心处 $\mathbf{x}_c$ 得到

$$\bar{g}^+(\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h, \mathbf{k}, t_n) = \bar{g}^+(\mathbf{x}_c, \mathbf{k}, t_n) + (\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h - \mathbf{x}_c) \delta_c, \quad (24)$$

其中 δ_c 是控制单元中心 $\mathbf{x}_c$ 处 $\bar{g}^+$ 的梯度。对于梯度的求解方式有相当多的方法, 为限制数值解的梯度以减小数值振荡和保持解的稳定性, 本文在求解梯度处采用 van Leer 限制器^[44]。van Leer 限制器通常用于高分辨率方法, 通过修正数值解的梯度来确保解在光滑区域内保持平稳, 并且在激波和间断区域附近减小数值振荡。对于 $\mathbf{x}_i$ 处 $\bar{g}^+$ 的梯度则有

$$\delta_i = [\text{sgn}(s_1) + \text{sgn}(s_2)] \frac{|s_1| |s_2|}{|s_1| + |s_2|}, \quad (25)$$

其中

$$s_1 = \frac{\bar{g}_{i,j}^+ - \bar{g}_{i-1,j}^+}{x_i - x_{i-1}}, \quad s_2 = \frac{\bar{g}_{i+1,j}^+ - \bar{g}_{i,j}^+}{x_{i+1} - x_i}. \quad (26)$$

结合式(23)可得

$$\bar{g}(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h) = \bar{g}^+(\mathbf{x}_c, \mathbf{k}, t_n) + (\mathbf{x}_b - \mathbf{v}h - \mathbf{x}_c) \delta_c. \quad (27)$$

根据辅助演化分布函数定义, 则用于求解界面上微通量 $F^{n+1/2}$ 的原偏离分布函数为

$$g(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h) = \frac{2\tau}{2\tau + h} \bar{g}(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h) + \frac{h}{2\tau + h} g^{\text{eq}}(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h). \quad (28)$$

为求得界面 $\mathbf{x}_b$ 处的平衡分布函数 $g^{\text{eq}}(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h)$, 根据线性化平衡分布函数式(13), 可知还要求解界面处宏观量温度 T_b 与化学势 μ_b 。同时需要注意的是, 此处温度与化学势并非宏观真实温度与真实化学势, 而是为界面处分布函数满足散射项守恒的虚假温度与虚假化学势。为求解虚假温度 T_b 与虚假化学势 μ_b , 可以根据式(6)对界面处散射项进行求矩得到

$$\int \Omega_b d\mathbf{k} = \int -\frac{g_b - g_b^{\text{eq}}}{\tau_b} d\mathbf{k} = 0, \quad (29)$$

$$\int \varepsilon(\mathbf{k}) \Omega_b d\mathbf{k} = \int -\varepsilon(\mathbf{k}) \frac{g_b - g_b^{\text{eq}}}{\tau_b} d\mathbf{k} = 0. \quad (30)$$

根据式(22), 对 $\bar{g}$ 求矩可以得到与 g 求矩相同的结果, 因此可以采用辅助演化分布函数 $\bar{g}_b$ 替换式(29)与式(30)中的 g_b 。由于采用线性化平衡分布函数, 式(29)与式(30)可表示为

$$\int \frac{C_T(T_{\text{loc},b} - T_{\text{ref}}) + C_\mu(\mu_{\text{loc},b} - \mu_{\text{ref}})}{\tau} d\mathbf{k} = \int \frac{\bar{g}}{\tau} d\mathbf{k}, \quad (31)$$

$$\int \varepsilon(\mathbf{k}) \frac{C_T(T_{\text{loc},b} - T_{\text{ref}}) + C_\mu(\mu_{\text{loc},b} - \mu_{\text{ref}})}{\tau} d\mathbf{k} = \int \varepsilon(\mathbf{k}) \frac{\bar{g}}{\tau} d\mathbf{k}. \quad (32)$$

假设弛豫时间 τ 不随电子量子态变化, 仅是实空间相关参数, 则可得虚假温度 $T_{\text{loc},b}$ 与虚假化学势 $\mu_{\text{loc},b}$ 求解式为

$$\begin{pmatrix} \int C_T d\mathbf{k} & \int C_\mu d\mathbf{k} \\ \int \varepsilon(\mathbf{k}) C_T d\mathbf{k} & \int \varepsilon(\mathbf{k}) C_\mu d\mathbf{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{\text{loc},b} \\ \mu_{\text{loc},b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int (\bar{g} + C_T T_{\text{ref}} + C_\mu \mu_{\text{ref}}) d\mathbf{k} \\ \int \varepsilon(\mathbf{k}) (\bar{g} + C_T T_{\text{ref}} + C_\mu \mu_{\text{ref}}) d\mathbf{k} \end{pmatrix}. \quad (33)$$

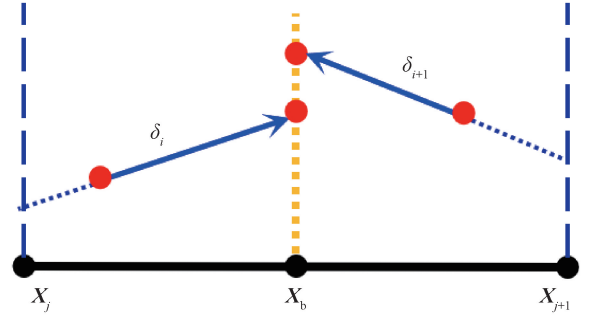


图2 界面通量构造几何示意图

Fig. 2 Geometric schematic of interface flux construction

至此求解得到虚假温度 $T_{\text{loc},b}$ 与虚假化学势 $\mu_{\text{loc},b}$ 后, 即可通过式(28) 计算得到界面上原偏差分布函数

$g(\mathbf{x}_b, \mathbf{k}, t_n + h)$, 并计算界面微通量 $F^{n+1/2}$ 。注意到整个界面微通量构造过程, 由于在避免式(21)的隐式计算时引入辅助演化分布函数 $\bar{g}$ 与 $\bar{g}^+$, 包括在控制单元中心 $\mathbf{x}_c$ 处同样引入了 $\bar{g}$ 与 $\bar{g}^+$, 电子在系统域计算过程中将迁移过程与碰撞过程进行了耦合求解, 因此 DUGKS 计算时间步长不受弛豫时间限制, 仅由 Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件决定, 即

$$\Delta t = CFL \frac{\Delta x_{\min}}{|\mathbf{v}_{\max}|}, \quad (34)$$

其中 $\Delta x_{\min}$ 为空间步长最小值, $|\mathbf{v}_{\max}|$ 为电子速度最大值。为方便对比与计算, 本文选取费米能级处电子速度 $|\mathbf{v}_{\max}| = |\mathbf{v}_F| = \hbar k_F / m$ 。

2.3 算法流程

本节介绍 DUGKS 的计算流程。DUGKS 算法主体由控制单元中心 $\mathbf{x}_c$ 处与界面 $\mathbf{x}_b$ 处两个演化方程构成。对于系统初始值, DUGKS 可以通过平衡分布态用以初始化演化分布函数, 其中由于在弱温度场与低温条件下化学势 μ 通常偏离费米能级极小, 因此可以用费米能级对材料初始条件 μ_0 进行初始化。在 DUGKS 演化过程中仅需对 $\bar{g}$ 进行更新, $\bar{g}^+$ 与 $\bar{g}^-$ 分别为

$$\bar{g}^+ = \frac{2\tau - h}{2\tau + \Delta t} \bar{g} + \frac{3h}{2\tau + \Delta t} g^{\text{eq}}, \quad (35)$$

$$\bar{g}^- = \frac{4}{3} \bar{g}^+ - \frac{1}{3} \bar{g}. \quad (36)$$

在单位时间步 Δt 内, 系统单位控制体中 DUGKS 计算流程如下:

- 1) 根据式(35)计算每个控制体单元的 $G_{i,j}^{+,n}$;
- 2) 根据式(27)计算控制体界面处 $\bar{g}_j^{n+1/2}(\mathbf{x}_b)$;
- 3) 根据式(33)求得界面处虚假宏观量 $T(\mathbf{x}_b)$ 与 $\mu(\mathbf{x}_b)$, 并计算得到界面处平衡分布函数 $g_j^{\text{eq}, n+1/2}(\mathbf{x}_b)$;
- 4) 根据式(28)计算得到界面处分布函数 $g_j^{n+1/2}(\mathbf{x}_b)$, 并以此计算界面处微通量 $F_j^{n+1/2}(\mathbf{x}_b)$;
- 5) 根据式(36)计算得到 $\bar{g}_{i,j}^{+,n}$;
- 6) 根据式(19)更新得到下一时间步 $\bar{g}_{i,j}^{n+1}$ 。

3 边界条件

在固体材料中通常有多种边界条件用以描述电子在晶体结构中 与边界的相互作用, 如定温定势边界、绝热边界、周期边界等^[2, 16, 40, 45]。

对于定温定势边界条件, 可以理解为不同量子态的电子群在碰撞界面时将被壁面全部吸收, 此时电子群将在此处失去全部信息, 随后在界面处将向系统域内部均匀发射出处于热平衡态的新电子群。该类边界条件可以对控制体界面处的分布函数进行处理,

$$f_j(\mathbf{x}_b) = f_j^{\text{eq}}(T_b, \mu_b), \quad \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_b < 0, \quad (37)$$

其中 T_b 、 μ_b 为边界宏观温度与化学势, $\mathbf{n}_b$ 为控制体界面处外法向量。

对于绝热边界, 也可表示为全反射边界条件, 包括镜面反射与漫反射两类边界条件。镜面反射类似于经典气体动理学格式中的镜面反射格式, 在电子系统中假设不同量子态的电子群接触边界后, 切向速度不变而法向速度相反, 此类边界条件将良好保留反射前电子群信息, 表达式为

$$f_j(\mathbf{x}_b) = f_{j'}(\mathbf{x}_b), \quad \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_b < 0. \quad (38)$$

对于漫反射边界, 与经典气体动理学理论中麦克斯韦漫反射相似, 电子群在接触边界后被界面全部吸收, 撞击边界的电子将以相等概率沿着所有反射方向均匀散射, 即

$$f_j(\mathbf{x}_b) = - \frac{\int_{\mathbf{v}_{j'} \cdot \mathbf{n}_b > 0} (\mathbf{v}_{j'} \cdot \mathbf{n}_b) f_{j'}(\mathbf{x}_b) d\Omega}{\int_{\mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_b < 0} \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_b d\Omega}, \quad \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{n}_b < 0. \quad (39)$$

其中 Ω 为实空间中立体角。

4 算例

4.1 薄膜介质法向热输运

首先将对一无限长、有限厚度介质薄膜热传导算例进行数值验证,算例示意图如图 3 所示。在稳态情况下,该算例满足方程

$$v \frac{\partial g}{\partial x} = - \frac{g - g^{\text{eq}}(T, \mu)}{\tau} \tag{40}$$

在不考虑化学势变化与平衡态一阶线性近似情况下,薄膜介质法向温度梯度应满足^[2]

$$\Theta^*(x) = \frac{1}{2} E_2(x) + \frac{1}{2} \int_0^L \Theta^*(x') E_1\left(\frac{|x - x'|}{Kn}\right) dx', \tag{41}$$

其中 $\Theta^* = (T_{\text{loc}} - T_{\text{right}})/\Delta T$, n 阶指数积分 $E_n = \int_0^1 t^{n-2} \exp(-x/t) dt$ 。薄膜法向的有效导热系数解析解为

$$K_{\text{eff}}^* = 1 - \frac{2}{Kn} \int_0^L \Theta^*(x') E_2(x') dx', \tag{42}$$

其中 $K_{\text{eff}}^* = K_{\text{eff}}/\text{Kn} = -Q^*L/\Delta T$ 。

通过对厚度为 L 的薄膜介质两侧施加定温定势边界条件,在 $x = 0$ 处 $T_{\text{left}} = T_0 + \Delta T/2$ 、 $\mu_{\text{left}} = \mu_0$,在 $x = L$ 处 $T_{\text{right}} = T_0 - \Delta T/2$ 、 $\mu_{\text{right}} = \mu_0$,其中 ΔT 满足低偏差假设,即 $\Delta T \ll T_0$ 。此时电子将在温度差或化学势差的驱动下,沿薄膜介质法向方向发生输运与碰撞。

针对网格离散问题,本算例于实空间采用均匀网格,在相空间对极径 k 与方位角 φ 进行均匀离散。该算例分别采用 $N_x = 20, 40, 80$ 以及 $N_k \times N_\varphi = 20 \times 20, 40 \times 40$ 以探究网格分辨率对计算结果影响。算例中 CFL 数取 0.8,材料含量纲费米波矢 $k_F = 4 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$,弛豫时间 $\tau = 1 \times 10^{-14} \text{ s}$,薄膜厚度 $L = v_F \tau / \text{Kn}$,初始温度 $T_0 = 300 \text{ K}$,温度差 $\Delta T = 1.0 \text{ K}$,初始化学势 $\mu_0 = E_F$ 。不同 Kn 数工况下薄膜介质法向无量纲温度分布与有效热导率分布结果如图 4 所示。

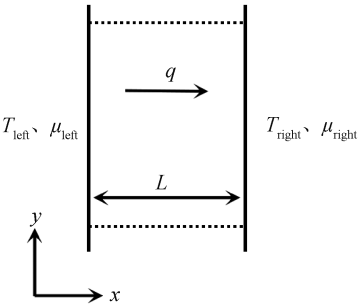


图 3 无限长介质薄膜电子一维输运示意图
Fig. 3 Schematic of one-dimensional cross-plane electron transport in infinite-length film

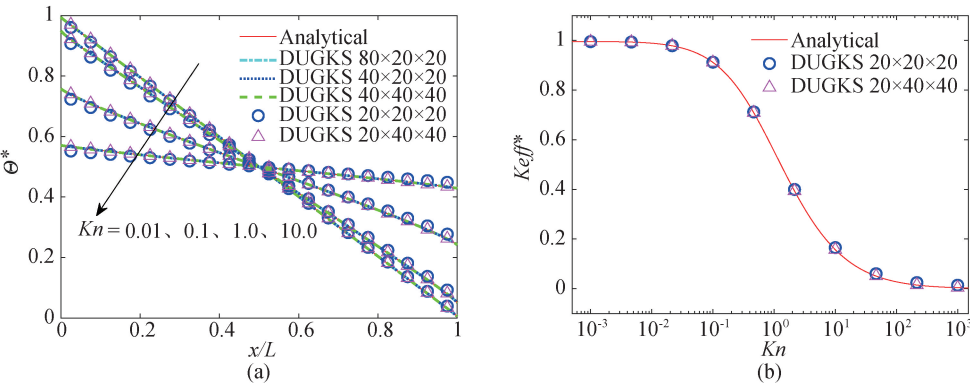


图 4 不同 Kn 数薄膜介质法向导热 (a) 无量纲温度分布; (b) 无量纲有效热导率

Fig. 4 Cross-plane thermal conduction with variable Kn number (a) dimensionless temperature distribution; (b) dimensionless effective thermal conductivity

图 4 给出了在不同 Kn 数下的无量纲温度场分布与有效热导率。计算结果发现,当 Kn 数较小时整个系统处于扩散输运区域,系统尺寸远远大于电子平均自由程,此时电子间碰撞与散射频繁,其群体行为占主导作用,计算结果满足宏观傅里叶定律;随着 Kn 数逐渐增大,电子平均自由程尺寸相当或大于系统特征尺寸,

电子将处于弹道输运区域,传递到界面处的电子与从界面向薄膜内发射的电子相互作用较弱,使得边界附近存在温度滑移现象^[2],傅里叶定律失效,材料的有效热导率也随 Kn 数变化。此外,DUGKS 结果在粗网格条件下也能够与解析解吻合良好,而随着网格分辨率提高,计算结果均与解析解保持一致。综上所述,DUGKS 格式对网格分辨率有着较低的敏感性。

4.2 电子面内传输

对二维 DUGKS 进行数值验证。考虑长度为 W 、厚度为 L 的二维平板薄膜,类似于 4.1 节中薄膜介质法向传热,计算电子在平板薄膜面内的传输特性。结构示意图如图 5 所示。

通过沿薄膜面内方向施加较小的温度梯度 $\partial T/\partial y$,电子将在温度场的驱动下发生迁移与散射。薄膜上下两处边界选择为绝热漫反射边界条件;左右两侧则采用周期性边界,电子将于薄膜面内循环传递以避免温度滑移,即

$$g_j(\mathbf{x}_{\text{left}}) = g_j^{\text{eq}}(T_{\text{left}}, \mu_{\text{left}}) + g_j(\mathbf{x}_{\text{right}}) - g_j^{\text{eq}}(T_{\text{right}}, \mu_{\text{right}}), \quad v_j > 0, \quad (43)$$

$$g_j(\mathbf{x}_{\text{right}}) = g_j^{\text{eq}}(T_{\text{right}}, \mu_{\text{right}}) + g_j(\mathbf{x}_{\text{left}}) - g_j^{\text{eq}}(T_{\text{left}}, \mu_{\text{left}}), \quad v_j < 0. \quad (44)$$

随着系统逐渐稳定,薄膜中分布函数将与 y 无关,引入偏差分布函数 $\delta f = f - f_0$,其中 f_0 为采用系统平均宏观量下的平衡分布函数,则薄膜介质面内传输方程存在解析解^[46]:

$$\delta f = \begin{cases} -v_y \tau \left(\frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{dT}{dy} + \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \frac{d\mu}{dy} \right) \left[1 - \exp\left(-\frac{x}{\tau v_x}\right) \right], & v_x > 0, \\ -v_y \tau \left(\frac{\partial f_0}{\partial T} \frac{dT}{dy} + \frac{\partial f_0}{\partial \mu} \frac{d\mu}{dy} \right) \left[1 - \exp\left(\frac{L-x}{\tau v_x}\right) \right], & v_x < 0. \end{cases} \quad (45)$$

此处设定沿 y 方向面内的温度梯度 $\partial T/\partial y = 1$, $\partial \mu/\partial y = 0$ 。在网格离散数方面,沿 x 方向网格划分为 $N_x = 20$ 、50、100, y 方向对于该问题影响有限,因此可以采用较少网格数进行计算,本文选取 $N_y = 5$,且 $W = L/(N_x \times N_y)$;相空间网格数为 $N_k \times N_\varphi = 50 \times 50$,且更高的相空间网格将不会对结果产生影响。图 6 给出了不同 Kn 数时电子在薄膜介质面内传输过程中,沿 x 方向的无量纲电流密度分布与无量纲热流密度分布,其中 $J^* = J/J_{\text{bulk}}$ 、 $Q^* = Q/Q_{\text{bulk}}$, J_{bulk} 与 Q_{bulk} 分别为当 $Kn \rightarrow 0$ 时的电流密度与热流密度。从计算结果得出,采用 DUGKS 的电子面内传输数值结果在粗细网格条件下均与解析解整体吻合良好,在较稀薄的弹道区域,电子传输将会体现出类似流体中泊肃叶流动的特征,这是由于在界面处由于采用漫反射边界,入射电子将失去全部速度信息并均匀反弹至系统中,在边界处产生电子黏性;同时在弹道区域中系统特征尺寸与电子平均碰撞自由程相近,电子内相互作用较弱,使得壁面处的边界效应对电子面内传输起主要作用。

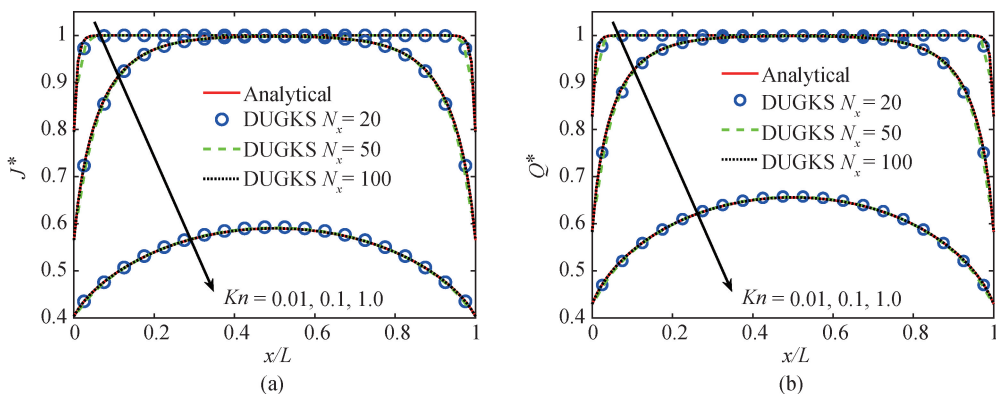


图 6 薄膜介质中电子面内传输 (a) 无量纲电流密度分布;(b) 无量纲热流密度分布

Fig. 6 In-plane electron transport through a thin film (a) current density; (b) heat flux

使用当前结果计算等效热导率,即

$$\kappa_{\text{eff}} = - \left(dT/dx \right)^{-1} \int_0^1 Q_x(y^*) dy^*,$$

可得到电子面内传输的等效热导率随 Kn 数变化图像,计算结果如图 7 所示。计算结果表明,DUGKS 对于二维薄膜介质中的电子面内传输问题有着较好的数值精度与较低的网格依赖性,对 10^{-3} 至 10^3 跨越多个数量级的 Kn 数情况下均能得到与解析解相吻合的计算结果。

4.3 非均匀系统中的多尺度运输

微纳尺度电子器件因其几何结构复杂多变,特征尺度通常可跨越多个数量级,例如图 8 所示的孔喉结构、狭缝通道等,其内部电子输运本质上为多尺度问题^[38,47-48],这对数值格式方法在多尺度问题上的鲁棒性与准确性提出了挑战,本节将测试 DUGKS 求解此类问题的能力。

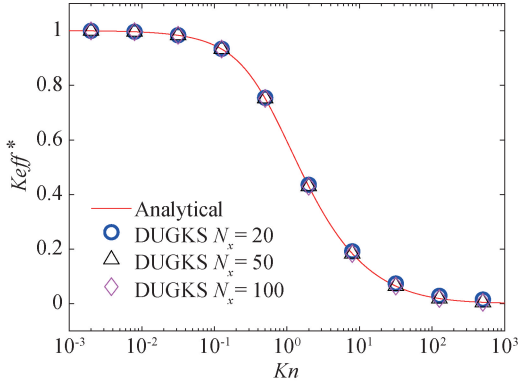


图 7 不同 Kn 数下电子面内传输等效热导率分布

Fig. 7 Distribution of effective thermal conductivity of in-plane electron transport under different Kn numbers

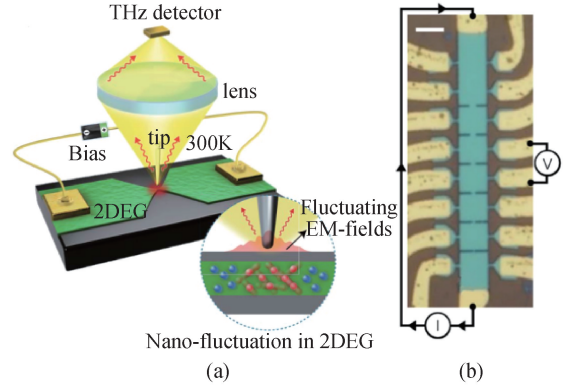


图 8 多尺度电子电路器件 (a)孔喉结构电路; (b)狭缝结构通道(尺寸跨越 $10^{-8} \sim 10^{-5}$ m)

Fig. 8 Multiscale electronic circuit devices

(a) pore-throat structure circuit; (b) slit-structure channel (dimensions spanning of $10^{-8} \sim 10^{-5}$ m)

对于多尺度结构可将其简化为近一维问题,在 4.1 节中薄膜介质的弛豫时间为不与空间相关的常量,而在该模型中弛豫时间将根据空间位置发生平滑变化,以获得具有非均匀多尺度散射性质的薄膜介质^[40]。除去弛豫时间在薄膜介质中沿法向变化之外,其余材料参数、薄膜结构、边界条件均与 4.1 节中相同。弛豫时间沿法向方向满足

$$\tau(x) = \frac{\tau_{\max} + \tau_{\min}}{2} - \frac{\tau_{\max} - \tau_{\min}}{2} \tanh\left(\frac{1 - 2x^*}{2d}\right), \quad (46)$$

其中, $\tau_{\max}$ 与 $\tau_{\min}$ 为最大与最小弛豫时间, $x^* = x/L$ 为无量纲空间坐标, d 表征为弛豫时间发生阶跃过渡的厚度参数,在本节中 d 选取 0.01。通过将弛豫时间以无量纲参数 Kn 数替换,则薄膜介质沿法向方向 Kn 数变化曲线如图 9 所示。

本节选取的 Kn 数跨越多个数量级,因此电子在薄膜介质中的法向热传输为一个多尺度问题。通过图 9 可以观测到,在 $0 \leq x^* \leq 0.45$ 与 $0.55 \leq x^* \leq 1$ 处电子的 Kn 数近乎保持为一恒定值,其中前者区域的电子系统以扩散输运为主,后者则处于弹道输运区域;在 $0.45 < x < 0.55$ 处,电子发生平滑的过渡变化,称该区域为过渡区。由于 Kn 数数量级跨度较大、界面梯度剧烈,因此对一般方法的数值模拟产生较大困难,通常需要采用较为稠密的网格与极小的时间步以模拟扩散区域与过渡区域的电子输运。

除 DUGKS 外,本节采用一阶迎风 (Upwind) 格式、二阶迎风 (2nd-Upwind) 格式与三阶 Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO) 格式^[49]进行对比验证,网格数设置为 $N_x \times N_k \times N_\varphi = 50 \times 50 \times 50$ 。由于该问题无解析解,因此采用三阶 WENO 于 $N_x \times N_k \times N_\varphi = 256 \times 256 \times 128$ 稠密网格结果作为参考解,并确认进一步的网格质量将不会对计算结果产生影响。

由于在扩散区域电子平均自由程远小于系统尺寸,而一般的数值方法需要时间步长小于弛豫时间,否则

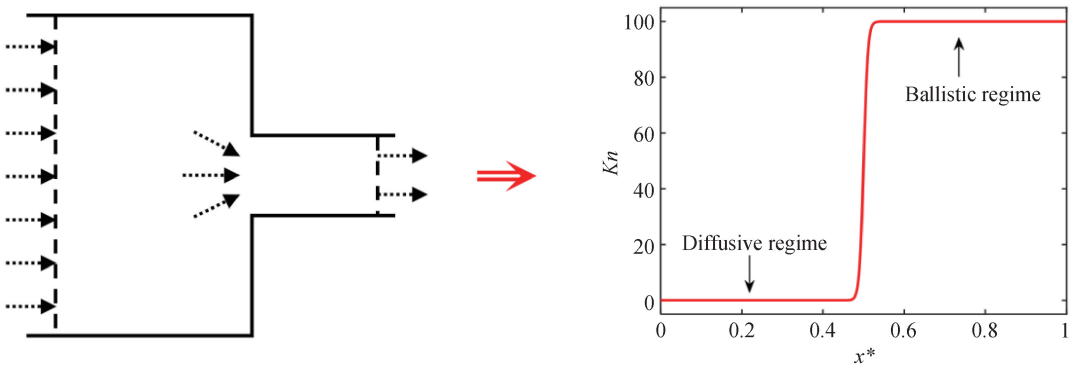


图 9 等效薄膜介质法向方向 Kn 数分布 ($Kn_{\max} = 100, Kn_{\min} = 1 \times 10^{-4}$)

Fig. 9 Kn number distribution in the normal direction of the equivalent thin film ($Kn_{\max} = 100, Kn_{\min} = 1 \times 10^{-4}$)

会导致迭代发散,因此需采用极小的时间步长以确认迭代过程稳定。本文采用式 (34) 确认时间步长,在扩散区域无量纲弛豫时间 $\tau^* = 10^{-4}$,因此对于其他数值方法需满足 $CFL \leq 0.005$,本节 CFL 数选取 0.005,则 $\Delta t_{\text{others}}^* = 1 \times 10^{-4}$; DUGKS 中 CFL 数也选取 0.5,则 $\Delta t_{\text{DUGKS}}^* = 1 \times 10^{-2}$ 。对于计算结果,选取归一化温度 $\theta^* = (T - T_{\text{right}})/\Delta T$,薄膜介质法向温度不同时间分布如图 10 所示。计算结果显示,在扩散区域,一阶迎风格式、二阶迎风格式由于本身数值耗散与参考解偏差较大,故发生虚假扩散;三阶 WENO 格式在较粗网格情况下在温度梯度变化剧烈处发生数值波动,该现象是由于经典 WENO 格式虽然能够在数据平滑处具备三阶精度,但是在梯度变化剧烈处 WENO 所采用的非线性加权平均会使其退化至二阶或一阶^[50],即便是在光滑函数极值点处其精度也会下降,而这可能是为避免非线性权重分母为零而引入的小参量 ε 过大所导致的^[51];在弹道区域,一阶迎风格式收敛位置则与其他格式显示出显著区别。DUGKS 因其耦合了碰撞项与对流项,

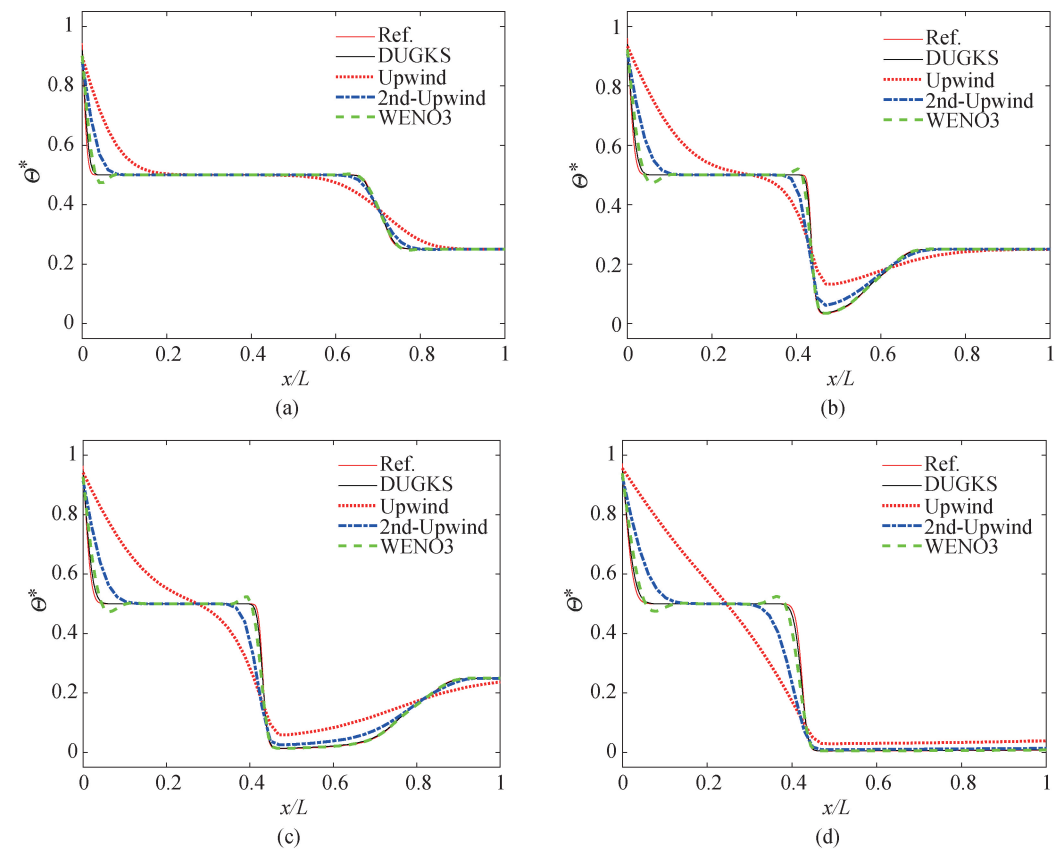


图 10 不同时间薄膜介质法向归一化温度分布 (a) $t^* = 0.3$; (b) $t^* = 0.7$; (c) $t^* = 0.9$; (d) $t^* = 1.7$

Fig. 10 Normalized temperature of thin film at different times (a) $t^* = 0.3$; (b) $t^* = 0.7$; (c) $t^* = 0.9$; (d) $t^* = 1.7$

使其面对多尺度问题具备良好渐进性质^[52];由于在计算梯度过程中采用 van Leer 限制器,因此能够有效减缓数值振荡并提升模型鲁棒性,使得 DUGKS 在各时间步内均与参考解保持一致。

由于 CFL 数所取不同,各方法时间推进计算所需时间亦有差异。对各方法的计算时间进行了测试,计算环境如下:12th Gen Intel(R) Core(TM) i7-12700F,采用 OpenMP 16 核并行计算框架,一阶迎风、二阶迎风与三阶 WENO 格式由于 $CFL \leq 0.005$,计算至 $t^* = 10$ 分别至少需要 12.82、14.70、26.98 s,而 DUGKS 方法 CFL 数则可以选取至 0.5,计算至 $t^* = 10$ 仅需 0.08 s。表 1 列出了各方法在不同实网格条件下的计算时长,相较于一般格式,DUGKS 在粗细网格条件下均可达到 10^2 数量级加速效率,综上所述,DUGKS 格式时间步长不受弛豫时间限制的特性能够极大地提升数值模拟的计算速度。

由于速度分布函数的高阶矩对分布函数变化更为敏感,因此在弱场条件下通过对式(40)直接或者乘以电子速度 v 后积分,可得到稳态条件下电流密度与热流密度应满足 $\partial J/\partial x = 0$ 、 $\partial Q/\partial x \approx 0$,即在稳态情况下薄膜介质法向电流密度与热流密度应约为常数。通过对各类方法在粗网格条件下选取收敛至稳态时刻薄膜介质内部法向电流密度与热流密度分布,其结果如图 11 所示。

表 1 不同数值格式于不同分辨率网格下计算至 $t^* = 10$ 所需时长

Table 1 Time required to calculate to $t^* = 10$ using various numerical scheme and qualities of grids

数值格式	实空间网格数	计算时长/s
一阶迎风	50	12.82
	100	43.94
	150	101.56
二阶迎风	50	14.70
	100	47.98
	150	117.64
三阶 WENO	50	26.98
	100	69.85
	150	147.59
DUGKS	50	0.08
	100	0.35
	150	0.98

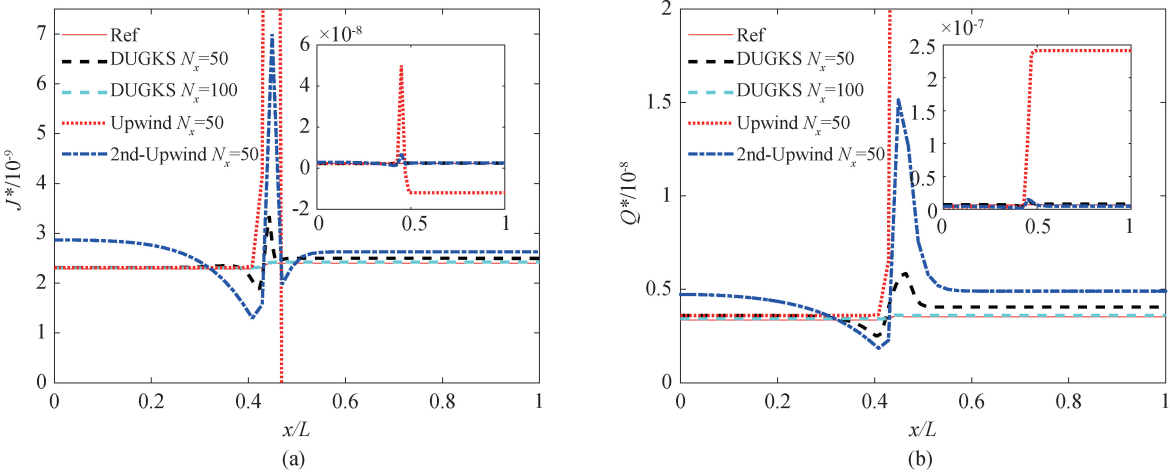


图 11 稳态时薄膜介质法向通量分布 (a) 电流密度分布; (b) 热流密度分布
Fig. 11 (a) Normalized electric current and (b) heat flux of thin film at steady state

根据计算结果观测到:在电子扩散区域中的二阶迎风格式与参考解产生较大偏差,并在过渡区域产生剧烈的数值波动;在弹道区域一阶迎风格式收敛位置明显偏离其他格式结果;DUGKS 计算结果在过渡区存在一定的数值波动,这主要是由于过渡区缺少足够的网格点以描述该区间中的 Kn 数激烈变化,其结果相较于其他格式鲁棒性明显,伴随实空间网格加密至 $N_x = 100$ 后结果将收敛于参考解,因此 DUGKS 格式能够有效应对剧烈梯度的多尺度过度问题;此外,DUGKS 格式在扩散区域中与参考解保持良好的一致性,并相比其他格式整体上沿薄膜法向方向的电流与热流更接近为定值。综上所述,DUGKS 在面对多尺度问题具备良好的鲁棒性与精确性。

5 结论

本文针对低尺度金属材料中的电子输运问题,通过对单弛豫近似电子初始 BTE 采用线性近似与偏差格式处理,构建了能够快速求解弱温度场条件下的电子离散统一气体动理学格式(DUGKS)。经算例验证,电子 DUGKS 在弹道-扩散区域内均保持较低的网格敏感性与良好的数值精度;在面对多尺度问题时,DUGKS 相较于一般的数值方法具备更好的鲁棒性与稳定性,同时其计算时间步长能够不受弛豫时间限制,因此在扩散区域的计算效率将高于一般方法 10^2 数量级。

目前关于电子玻尔兹曼输运方程的直接求解工作通常需要包含各类近似假设与模型以简化计算过程,且很少考虑到温度场、内外电场、磁场等多场耦合的计算。为描述更多的电子行为,可以采用 Callaway 理论将碰撞项分为守恒项与非守恒项;DUGKS 对于含外电场的电子问题,可以考虑用源项近似处理,但由于分布函数与外力项耦合,因此会使得数值精度与稳定性降低;对含磁场问题,由于界面处特征线包含速度项,因此无法采用 DUGKS 在界面处的线性重构方案,因此可使用 Strang-Splitting 格式将外力项进行分裂计算。

参 考 文 献

- [1] CAHILL D G, BRAUN P V, CHEN G, et al. Nanoscale thermal transport. II. 2003—2012[J]. *Applied Physics Reviews*, 2014, 1(1): 011305.
- [2] CHEN Gang. Nanoscale energy transport and conversion: A parallel treatment of electrons, molecules, phonons, and photons [M]. New York: Oxford University Press, 2005.
- [3] SHI L, DAMES C, LUKES J R, et al. Evaluating broader impacts of nanoscale thermal transport research[J]. *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, 2015, 19(2): 127–165.
- [4] KAVIANY M. Heat transfer physics[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
- [5] 胡毅, 安恒斌. 半导体器件数值模拟中电子连续性方程的求解算法[J]. *计算物理*, 2023, 40(5): 570–582.
- [6] MOZAFARIFARD M, LIAO Yiliang, NIAN Qiong, et al. Two-temperature time-fractional model for electron-phonon coupled interfacial thermal transport[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023, 202: 123759.
- [7] QIU Lin, ZHU Ning, ZOU Hanying, et al. Advances in thermal transport properties at nanoscale in China[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 125: 413–433.
- [8] MIAO Wuli, WANG Moran. Importance of electron-phonon coupling in thermal transport in metal/semiconductor multilayer films[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023, 200: 123538.
- [9] 袁益让. 半导体瞬态问题计算方法的新进展[J]. *计算物理*, 2009, 26(3): 317–324.
- [10] VIGNALE G, TOSI M P. Electron gas(theory) [M]. 2nd ed. oxford: Academic Press, 2024: 778–796.
- [11] TOKATLY I, PANKRATOV O. Hydrodynamic theory of an electron gas[J]. *Physical Review B*, 1999, 60(23): 15550–15553.
- [12] 刘霞, 杜晓, 张骏杰, 等. Bi₄ Se₃ 薄膜的声子结构及电声子相互作用的第一性原理研究[J]. *计算物理*, 2016, 33(4): 483–489.
- [13] FOULK N L, RAIKH M E. Scattering of electron from a disk in 2D electron gas: Full cross section, transport cross section, and the interaction correction[J]. *Solid State Communications*, 2021, 324: 114113.
- [14] CAMIOLA V D, NASTASI G. Hydrodynamical model for charge transport in graphene nanoribbons: Confinement and edge scattering effects[J]. *Journal of Statistical Physics*, 2021, 184(2): 23.
- [15] BRINGUIER E. The Boltzmann equation and relaxation-time approximation for electron transport in solids[J]. *European Journal of Physics*, 2019, 40(2): 025103.
- [16] LIAN Meng, ZHANG Chuang, GUO Zhaoli, et al. Discrete unified gas kinetic scheme for the solution of electron Boltzmann transport equation with Callaway approximation[J]. *Physical Review E*, 2024, 109(6/2): 065310.
- [17] MUSCATO O. Relaxation-time approximations to the Boltzmann equation for electron transport in bulk Silicon[J]. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2003, 317(1/2): 113–128.
- [18] CERCIGNANI C, ARONSON R. Theory and application of the Boltzmann equation[J]. *Physics Today*, 1977, 30(1): 66–68.
- [19] A. V. C. F. The mathematical theory of non-uniform gases: An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases. Sydney Chapman and T G Cowling. 2nd ed., pp. ix, 431. 60s. 1952. (Cambridge University Press)

- [J]. *The Mathematical Gazette*, 1954, 38(323): 63–64.
- [20] LIU Peiyao, GUO Zhaoli. A discrete unified gas kinetic scheme for simulating transient hydrodynamics in porous media with fractures[J]. *Gas Science and Engineering*, 2023, 115: 204997.
- [21] CHAI Zhenhua, SHI Baochang, LU Jianhua, et al. Non-Darcy flow in disordered porous media: A lattice boltzmann study [J]. *Computers & Fluids*, 2010, 39(10): 2069–2077.
- [22] LIEHUI Zhang, BAOCHAO Shan, YULONG Zhao, et al. Review of micro seepage mechanisms in shale gas reservoirs[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 139: 144–179.
- [23] De ANGELISE E, GRUNFELD C P. Modeling and analytic problems for a generalized Boltzmann equation for a multicomponent reacting gas[J]. *Nonlinear Analysis-Real World Applications*, 2003, 4(1): 189–202.
- [24] ZUDROP J, MASILAMANI K, ROLLER S, et al. A robust lattice Boltzmann method for parallel simulations of multicomponent flows in complex geometries[J]. *Computers & Fluids*, 2017, 153: 20–33.
- [25] SOLSVIK J, JAKOBSEN H A. A review of the concepts for deriving the equations of change from the classical kinetic theory of gases: Single-component, multicomponent, and reactive gases[J]. *European Journal of Mechanics B-Fluids*, 2016, 56: 46–65.
- [26] 万启坤, 张月, 郭照立. 两平板间两组分稀薄气体振荡传热的数值模拟[J]. *计算物理*, 2023, 40(6): 653–665.
- [27] LIU Jia, ZHANG Chuang, YUAN Haizhuan, et al. A fast-converging scheme for the phonon Boltzmann equation with dual relaxation times[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, 467: 111436.
- [28] GUO Yangyu, WANG Moran. Lattice Boltzmann scheme for hydrodynamic equation of phonon transport[J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2022, 171: 107178.
- [29] ZHANG Chuang, HUBERMAN S, SONG Xinliang, et al. Acceleration strategy of source iteration method for the stationary phonon Boltzmann transport equation[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023, 217: 124715.
- [30] WANG Yahui, MA Yu, XIE Ming. GPU accelerated lattice Boltzmann method in neutron kinetics problems II: Neutron transport calculation[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2019, 134: 305–317.
- [31] AGARWAL G, SINGH S. Coupling of first collision source method with lattice Boltzmann method for the solution of neutron transport equation[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, 175: 109242.
- [32] SNOKE D W. *Solid state physics: Essential concepts*[M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2020.
- [33] MIAO W, GUO Y, RAN X, et al. Deviation Monte Carlo scheme for thermal and electrical transport in metal nanostructures [J]. *Physical Review B*, 2019, 99(20): 205433.
- [34] GABBANA A, POLINI M, SUCCI S, et al. Prospects for the detection of electronic pre-turbulence in graphene[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121(23): 236602.
- [35] GABBANA A, MENDOZA M, SUCCI S, et al. Numerical evidence of electron hydrodynamic whirlpools in graphene samples [J]. *Computers & Fluids*, 2018, 172: 644–650.
- [36] HUANG Y, WANG M. Nonnegative magnetoresistance in hydrodynamic regime of electron fluid transport in two-dimensional materials[J]. *Physical Review B*, 2021, 104(15): 155408.
- [37] CHANDRA M, KATARIA G, SAHDEV D, et al. Hydrodynamic and ballistic AC transport in two-dimensional Fermi liquids [J]. *Physical Review B*, 2019, 99(16): 165409.
- [38] KU M J H, ZHOU T X, LI Qing, et al. Imaging viscous flow of the Dirac fluid in graphene[J]. *Nature*, 2020, 583(7817): 537–541.
- [39] DMITRIEV A, DYAKONOV M, JULLIEN R. Classical mechanism for negative magnetoresistance in two dimensions [J]. *Physical Review B*, 2001, 64(23): 233321.
- [40] GUO Zhaoli, XU Kun. Discrete unified gas kinetic scheme for multiscale heat transfer based on the phonon Boltzmann transport equation[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, 102: 944–958.
- [41] XU Kun, HUANG Juanchen. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows[J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229(20): 7747–7764.
- [42] MIEUSSENS L. On the asymptotic preserving property of the unified gas kinetic scheme for the diffusion limit of linear kinetic models[J]. *Journal of Computational Physics*, 2013, 253: 138–156.
- [43] 马维刚, 王海东, 张兴, 等. 铜薄膜电子-声子耦合系数的实验研究[J]. *工程热物理学报*, 2010, 31(3): 499–502.
- [44] VAN LEER B. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection[J]. *Journal*

of Computational Physics, 1977, 23(3) : 276–299.

[45] SOFFER S B. Statistical model for the size effect in electrical conduction[J]. Journal of Applied Physics, 1967, 38(4) : 1710–1715.

[46] SONDHEIMER E H. The mean free path of electrons in metals[J]. Advances in Physics, 1952, 1(1) : 1–42.

[47] KRISHNA K R, BANDURIN D A, PELLEGRINO F M D, et al. Superballistic flow of viscous electron fluid through graphene constrictions[J]. Nature Physics, 2017, 13(12) : 1182–1185.

[48] WENG Qianchun, KOMIYAMA S, YANG Le, et al. Imaging of nonlocal hot-electron energy dissipation via shot noise[J]. Science, 2018, 360(6390) : 775–778.

[49] GANDE N R, RATHOD Y, RATHAN S. Third-order WENO scheme with a new smoothness indicator[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2017, 85(2) : 90–112.

[50] WANG Y, DU Y, ZHAO K, et al. A low-dissipation third-order weighted essentially nonoscillatory scheme with a new reference smoothness indicator[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2020, 92(9) : 1212–1234.

[51] HENRICK A K, ASLAM T D, POWERS J M. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: Achieving optimal order near critical points[J]. Journal of Computational Physics, 2005, 207(2) : 542–567.

[52] GUO Zhaoli, WANG Ruijie, XU Kun. Discrete unified gas kinetic scheme for all Knudsen number flows. II. Thermal compressible case[J]. Physical Review. E, 2015, 91(3) : 033313.

Discrete Unified Gas Kinetic Scheme for Electron Transport under Weak Temperature Field Conditions

LI Wei¹, LIAN Meng², LV Jingtao², GUO Zhaoli^{1,3}

(1. State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074, China;
2. School of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074, China;
3. Institute of Interdisciplinary Research for Mathematics and Applied Science, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074, China)

Abstract: In the study of electron transport within lattice materials, the temporal and spatial scales generally cover a wide range. These multiscale nature leads to significant challenges for numerical simulations. In this work, we present a discrete unified gas-kinetic scheme infinite volume framework for solving the electron Boltzmann transport equation under the condition of weak temperature fields. Our method innovatively employs characteristic solution at cell interfaces in the flux reconstruction, achieving a second-order spatial accuracy with low numerical dissipation. A notable feature of this scheme is its decoupling of the time step from the relaxation time; instead, the time step is only determined by the Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) condition. This characteristic ensures an enhanced asymptotic preservation across a spectrum from ballistic to diffusive regimes. The efficiency and accuracy of the proposed method are validated by a series of test cases involving a wide range of Knudsen numbers. The results confirm the robustness and accuracy of the method, demonstrating its potential as an effective numerical tool for the study of electron heat transfer in metals.

Key words: multiscale heat transfer; electron transport; Boltzmann transport equation; discrete unified gas kinetic scheme