

声子水动力学: 进展、应用与展望

郭洋裕 and 王沫然

Citation: 中国科学: 物理学 力学 天文学 47, 070010 (2017); doi: 10.1360/SSPMA2016-00408

View online: <http://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSPMA2016-00408>

View Table of Contents: <http://engine.scichina.com/publisher/scp/journal/SSPMA/47/7>

Published by the 《中国科学》杂志社

Articles you may be interested in



声子水动力学: 进展、应用与展望

郭洋裕, 王沫然*

清华大学工程力学系, 北京 100084

*联系人, E-mail: mrwang@tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2016-09-30; 接受日期: 2016-12-05; 网络出版日期: 2017-06-06

国家自然科学基金(编号: 51676107, 51176089, 51321002)、国家重点基础研究发展计划(编号: 2013CB228301)和清华大学自主科学研究项目资助

摘要 声子水动力学是研究介电固体中热运输的有效宏观方法, 它具有清晰直观的物理图像和简洁统一的数学描述. 本文总结了声子水动力学的理论基础、历史脉络、前沿进展与应用. 从其历史发展看, 声子水动力学经历了经典声子水动力学、唯象声子水动力学以及广义声子水动力学3个阶段. 论文首先回顾了经典声子水动力学的统一动理论框架, 通过声子Boltzmann方程的Chapman-Enskog渐近展开推导, 介绍了前人所得到的不同形式的声子水动力学方程的条件和适用范围. 随后总结了唯象声子水动力学的主要概念和内容及在微纳尺度热运输中的应用, 并阐明了其沿袭经典声子水动力学发展的历史逻辑与局限性. 同时, 为了推广声子水动力学在复杂系统中的应用, 本文介绍了基于声子水动力学理论的数值方法的最新进展, 包括声子格子Boltzmann算法和声子Monte Carlo方法等. 为了能让声子水动力学更准确地描述微纳系统中的热传递规律, 本文还展望了声子水动力学的未来发展趋势, 阐释了广义声子水动力学的内涵和外延, 深入探讨了其非平衡热力学的理论基础. 本文力图促进声子水动力学的进一步发展及其在揭示极端条件热运输机理方面的应用.

关键词 声子水动力学, 宏观模型, 微纳尺度热运输, 非平衡热力学

PACS: 44.10.+i, 63.22.-m, 05.20.Dd, 05.70.Ln

1 引言

传热学是一门古老的学科, 其基本理论框架最早可追溯到Fourier发表的经典论著《热的解析理论》^[1]. 传热学不仅对理论科学如数学、热力学和统计物理学等产生过关键的推动作用, 而且在化工过程、能源环境和航空航天等工程问题中具有广泛而重要的应用. 传热的热载体主要包括4种: 分子、电子、光子和

声子^[2], 本文主要探讨介电固体和半导体中的声子热运输.

在20世纪末期, 随着微纳加工技术和纳米科技的高速发展, 微电子机械系统(Micro-Electro-Mechanical Systems, MEMS)、纳电子机械系统(Nano-Electro-Mechanical Systems, NEMS)^[3]和微流控和纳流控系统(Microfluidics and Nanofluidics)^[4]等应运而生. 这些系统的尺度通常在几十纳米至亚微米量级之间, 远小于人们

引用格式: 郭洋裕, 王沫然. 声子水动力学: 进展、应用与展望. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 070010
Guo Y Y, Wang M R. Phonon hydrodynamics: progress, applications and perspectives (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 070010, doi: [10.1360/SSPMA2016-00408](https://doi.org/10.1360/SSPMA2016-00408)

通常所处宏观世界的米量级. 随着连续介质假设的失效, 经典的Fourier导热理论在纳米系统中可能不再成立^[5,6]. 对微纳尺度热运输的深刻认识既有利于传热理论的进一步发展^[7-9], 又有益于解决纳米系统中遇到的很多重要的热问题如微纳电子器件散热及热管理^[10]. 因而, 亟需发展和完善用于描述微纳尺度热运输的理论和方法.

微纳尺度的热输运理论从描述层次的角度可分为: 微观方法、介观方法和宏观方法^[11]. 微观方法主要包括分子动力学模拟方法^[12]和第一性原理计算方法^[13]等, 直接描述系统中所有分子或原子等热载子的微观运动, 该类方法计算量大, 一般只适用于很小的纳米结构. 介观方法是指基于声子动力学(Phonon Kinetic Theory)的建模, 通过求解声子Boltzmann方程, 获得系统中微观粒子的分布信息, 再统计平均得到描述热输运过程的宏观量(如温度、热流密度等)^[14]. 相比于微观方法, 介观方法舍弃了大量的微观信息, 可适用于更大尺度的热输运问题, 但高维Boltzmann方程的求解及其复杂碰撞项的处理仍然是一个很大的挑战^[15]. 目前国际上研究微纳尺度热输运的主流还是主要基于介观和微观方法(获得声子信息, 包括色散关系、弛豫时间等)^[16-18]. 尽管这些方法可获得绝大部分微纳尺度热输运问题的细致描述, 但涉及复杂繁琐的数值计算, 丢失了理论的简洁性和物理图像的统一性. 因而, 人们未曾放弃发展简洁统一宏观方法的努力. 宏观方法是基于系统的宏观状态变量描述微纳尺度热输运过程, 只需求解类似于Fourier定律的宏观导热方程^[19,20], 具有简单的数学描述和清晰的物理图像. 现有的宏观方法主要包括: 声子水动力学模型(Phonon Hydrodynamic Model)^[21,22]、双相延滞模型(Dual-Phase-Lag Model)^[23]、弹道-扩散模型(Ballistic-Diffusive Model)^[24]和热子气模型(Thermon Gas Model)^[25]等. 在这些宏观模型中, 声子水动力学模型具有严格的统计物理基础, 可从介观的声子Boltzmann方程通过数学多尺度分析(粗化)过程导出; 此外, 声子水动力学还可借鉴成熟而丰富的流体力学理论和模型. 值得注意的是, 声子水动力学(Phonon Hydrodynamics)中的“水动力学”一词源于历史^[26], 强调声子输运的共性及其描述的宏观性, 区别于更早出现的“声子动力学”(Phonon Dynamics), 因此其内涵与流体力学中的“水动力学”(通常指液体动力学)一词有所不同.

声子水动力学的研究起源于20世纪中叶对低温介电固体中热波现象的探索^[27]. Guyer和Krumhansl^[21,26]采用本征值分析方法求解声子Boltzmann方程第一次获得了声子水动力学方程(G-K方程), 并从理论上预言了水动力学主导时的非稳态热输运过程将出现热波. 该理论预言很快被固体氦中观测到的热波现象所证实^[28]. 后续的数学、物理学家们对声子水动力学理论开展了大量的研究工作, 采用其他半解析技术如Chapman-Enskog展开、矩方法等求解声子Boltzmann方程导出了系列的声子水动力学方程^[29-31]. 这些工作在本文称为“经典声子水动力学”, 将在第3.1节中纳入本文提出的一个统一动理论框架. 真正应用声子水动力学模型研究微纳尺度热输运则归功于以Jou为代表的欧洲学者^[22]. 他们的工作主要受到微纳尺度导热与微纳尺度气体流动相似性的启发, 经验性地将只适用于低温的经典声子水动力学方程用于解释常温下微纳结构中的热输运现象, 边界条件则直接借用微纳尺度气体流动中的滑移边界条件^[32]. 声子水动力学给微纳尺度热输运提供了一个崭新的视角, 虽然与微观理论联系的缺失使其丧失了一定的严格性, 但它清晰的物理图像和简单的数学描述无疑大大促进了宏观热输运理论的发展, 在本文中称为“唯象声子水动力学”, 将在第3.2节中予以详细介绍.

本文将系统地介绍声子水动力学的理论基础、历史脉络以及在微纳尺度热输运中的应用, 并展望声子水动力学的未来发展趋势. 本文的结构安排如下: 第2节将给出声子输运的理论基础, 包括声子的基本概念和声子输运的多层次理论描述体系; 第3节将详细介绍声子水动力学的介观统计基础及宏观模型, 包括经典声子水动力学和唯象声子水动力学; 第4节将总结声子水动力学的数值框架及在微纳尺度热输运中的应用, 主要包括声子格子Boltzmann模拟和直接Monte Carlo模拟; 第5节将简要阐述“广义声子水动力学”的概念, 指出现有声子水动力学的局限性和未来的发展方向, 并系统地探讨微纳尺度输运的热力学基础.

2 声子输运的理论基础

2.1 声子的基本概念

声子是一种准粒子或虚拟粒子, 是用于描述介电

固体或半导体中晶格振动热传递的模型^[2]. 声子的概念最早由Einstein^[33]和Debye^[34]在研究低温晶体比热容问题时引入的. 就其本质而言, 从经典力学的角度来看, 声子是晶格振动产生的格波波包; 从量子力学的角度来看, 声子是晶格系统的最小能量单元. Peierls^[35]将平衡态声子模型推广到适用于热传递的非平衡声子模型, 并提出了描述声子输运的声子Boltzmann方程, 也称为Peierls-Boltzmann方程^[14].

2.2 声子输运的多层次理论描述体系

对于真实粒子(分子、原子)组成的流体系统, 其理论描述通常包含3个层次^[36]: 微观粒子动力学层次(Dynamic Level)、基于统计的动理学层次(Kinetic Level)和宏观水动力学层次(Hydrodynamic Level), 如图1(a)所示. 这3个描述层次的详细程度不同, 所包含的系统信息量也不同. 粒子动力学层次的信息量最大, 基于每个微观粒子的Newton运动学方程(或Liouville方程)直接描述所有粒子的微观运动信息. 由于流体系统的粒子数目通常非常大, 运动信息的初始条件很难确定, 直接的微观描述往往不现实或不可能. 对于气体流动, 大部分情况下粒子间相互作用以二元碰撞为主, 且粒子是不可区分的, 描述两个粒子组成的系统的力学规律则足够. Boltzmann进一步提出了分子混沌假设, 认为如果两个粒子之间的关联可以忽略, 则可获得单粒子分布函数的演化方程, 即Boltzmann方程, 从而奠定了流体系统动理学描述的基础. Boltzmann方程属于介观层次的理论, 用于描述人们所处宏观世界的流体输运则显得复杂低效. 因而人们可以通过进一步模型简化, 从Boltzmann方程粗化得到宏观Navier-Stokes水动力学方程, 即基于系统的宏观状态变量描述流体的输运过程.

流体输运的多层次理论描述体系相对完善, 在很多统计力学的专著中均有叙述和解释, 但声子输运的理论描述体系尚不成熟. 本文对照真实粒子的流体系统, 给出了声子输运的多层次理论描述体系, 如图1(b)所示, 试图为声子水动力学构建一个牢固的概念框架. 声子输运的微观、介观和宏观描述将在下面依次予以简介.

2.2.1 微观描述

声子输运的微观描述给出晶格振动的力学规律,

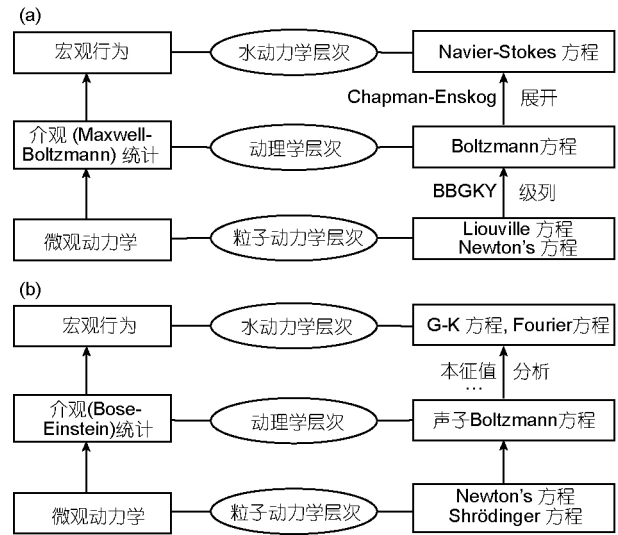


图1 流体输运和声子输运的多层次理论描述体系. (a) 流体输运; (b) 声子输运

Figure 1 Hierarchical theoretical descriptions of fluid transport and phonon transport. (a) Fluid transport; (b) phonon transport.

包括经典力学和量子力学两个角度. 以一维单原子晶格链为例, 基于经典力学, 晶格原子振动满足Newton运动学方程^[7]:

$$m \frac{d^2 u_j}{dt^2} = \kappa (u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j), \quad (1)$$

其中, m 代表原子的质量, u 代表原子偏离平衡位置的位移量, j 为原子的编号($j=0, 1, 2, \dots, N$). 相邻原子之间的相互作用假设为简谐作用, 弹性力常数为 κ . 式(1)具有如下形式的周期解:

$$u_j = A \exp[-i(\omega t - kja)], \quad (2)$$

其中, a 为原子间平衡位置的间距, A , ω , k 分别为晶格振动简谐波(格波)的振幅、角频率和波数. 将式(2)代入式(1), 可获得格波的色散关系:

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \quad (3)$$

实际晶体中的晶格振动存在很大范围的频率分布(不同的模式), 在某一个模式(ω_0 , k_0)附近的格波叠加将产生一个局域波包的传递. 该局域波包只在很小的空间范围内存在能量分布, 因而具有“粒子”的特性, 即为“声子”的经典力学图像^[2]. 声子的描述还可以从量子力学出发, 对于一维单原子晶格链, 其Hamilton函数为

$$H = \sum_j \left[\frac{1}{2} m \dot{u}_j^2 + \frac{1}{2} \kappa (u_{j+1} - u_j)^2 \right]. \quad (4)$$

式(4)表明单原子晶格链是一个耦合的相互作用系统, 直接在实空间中求解Schrödinger方程很困难. 为了使原子之间的相互作用解耦, 可引入Fourier空间的声子坐标 Q_k , 该声子坐标是实空间中的原子坐标的Fourier变换^[37]. 因此, 晶格系统的Hamilton函数变成彼此独立的一维谐振子的Hamilton函数之和:

$$H = \sum_k \left[\frac{1}{2} m Q_k \dot{Q}_{-k} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 Q_k Q_{-k} \right], \quad (5)$$

其中, $\omega_k = 2 \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$ 与基于经典力学获得的色散关系式(3)一致. 此外, 从经典力学中的式(2), 通过Born-Karman周期性边界条件($u_0 = u_N$), 可获得色散关系式(3)中波数的离散取值, 与量子力学中的分立能级取值一致^[7]. 式(5)对应系统的解很容易获得, 其Hamilton函数的能量本征值为

$$E_k = \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k, \quad n_k = 0, 1, 2, \dots, \quad (6)$$

其中, n_k 为谐振子的能级或处于模态(ω_k, k)的平均声子数目, 且满足Bose-Einstein分布(亦称Planck分布), $\hbar = h/2\pi$ 为约化Planck常数, h 为Planck常数. 式(6)中的最小能量单元 $\hbar\omega_k$ 称为“声子”, 与光子的定义类似, 这便是声子的量子力学图像.

2.2.2 介观描述

当系统的尺寸远大于声子的主波长时, 声子的波动效应(相干性等)^[38-40]可以忽略, 声子的输运过程描述可基于粒子图像, 其介观描述的控制方程为声子Boltzmann方程^[14]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_k f = C(f), \quad (7)$$

当系统不受外力($\mathbf{F}=0$)时, 式(7)简化为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla f = C(f), \quad (8)$$

其中, 声子分布函数为 $f=f(\mathbf{x}, t, \mathbf{k})$, 其物理意义是: $f(\mathbf{x}, t, \mathbf{k}) dx d\mathbf{k}$ 表示某一时刻 t 在物理空间间隔 $(\mathbf{x}, \mathbf{x}+d\mathbf{x})$ 和波矢空间间隔 $(\mathbf{k}, \mathbf{k}+d\mathbf{k})$ 附近找到声子的概率统计数目. 波矢 \mathbf{k} 是波数 k 的矢量形式, 与声子微观准动量(晶体动量)相关: $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$. \mathbf{v}_g 是声子的群速度, 表征格波的能

量传播速度, 可从声子的色散关系 $\omega=\omega(\mathbf{k})$ 计算获得: $\mathbf{v}_g=\nabla_{\mathbf{k}}\omega$. $C(f)$ 是声子碰撞项, 表征由于声子散射过程所致的声子分布函数的变化. 根据碰撞动力学的守恒特性, 声子散射过程包括两大类: 声子准动量守恒的N过程(Normal Process)和声子准动量不守恒的R过程(Resistive Process). 其中R过程通常又包括: 三声子U过程(Umklapp Process)、声子-缺陷散射和声子-边界散射. 声子散射过程的粒子数通常不守恒, 但能量总是守恒的. R过程损失了部分声子准动量, 是晶体热阻的直接产生来源, 而N过程则通过改变声子的频谱分布间接产生热阻.

原始声子碰撞项十分复杂, 使得声子Boltzmann方程的求解十分困难. 与气体输运的Boltzmann方程碰撞项的BGK近似模型^[41]类似, 前人对声子碰撞项也提出了简化模型. 声子碰撞项的简化模型主要有两个, 一个是Callaway在研究低温晶体热导率模型时提出的双弛豫时间近似, 另一个是与BGK模型相似的单模态弛豫时间(Single Mode Relaxation Time, SMRT)近似. Callaway的双弛豫时间近似认为N过程和R过程依次使得声子的分布函数趋向于一个偏移(Displaced) Planck分布和平衡Planck分布^[42]:

$$C(f) = -\frac{f-f_N^{\text{eq}}}{\tau_N} - \frac{f-f_R^{\text{eq}}}{\tau_R}, \quad (9)$$

其中, τ_N, τ_R 分别是N过程和R过程的声子弛豫时间, 偏移Planck分布和平衡Planck分布的表达式分别为

$$f_N^{\text{eq}} = \frac{1}{\exp[(\hbar\omega - \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u})/k_B T] - 1}, \quad (10)$$

$$f_R^{\text{eq}} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \quad (11)$$

式(10)中的 \mathbf{u} 为声子的漂移速度, 是一个与声子热流直接相关的宏观速度, 将在后文给出定量解释, k_B 为Boltzmann常数. 单模态弛豫时间近似则认为每个声子模态在散射过程中相互独立、互不关联, 散射过程使得声子分布函数趋向于平衡Planck分布^[7]:

$$C(f) = -\frac{f-f_R^{\text{eq}}}{\tau}, \quad (12)$$

其中, τ 为总弛豫时间, 通常可由Matthiessen定则将不同声子散射过程的弛豫时间叠加获得. 前人的研究表明, 当晶体中N过程比例很小时, 单模态弛豫时间是一

个近似合理的简化模型,可获得对晶体热导率较为准确的描述^[43,44];而当晶体中N过程比例很大或者主导时,声子之间的关联作用和集体效应变得重要,单模态弛豫时间近似将带来较大误差^[45],而双弛豫时间近似可获得与原始碰撞项相当的晶体热导率结果^[46,47].

2.2.3 宏观描述

声子输运的宏观描述基于导热方程,可以从介观层次的声子Boltzmann方程导出.经典声子水动力学的发展主要基于双弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程,这是因为低温介电固体中N过程的比例通常远大于R过程,其详细推导将在第3.1节中给出.事实上,最常见的声子水动力学方程是Fourier定律,该导热方程可从单模态弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程导出,本节将进行简单介绍.将式(12)代入声子Boltzmann方程(8)可得

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla f = -\frac{f - f_R^{\text{eq}}}{\tau}. \quad (13)$$

对于Fourier定律成立的导热过程,声子分布函数偏离平衡分布尚不太远,故有近似关系: $\nabla f \approx \nabla f_R^{\text{eq}}$. 考虑一个稳态导热过程,则式(13)简化为

$$f \simeq f_R^{\text{eq}} - \tau \frac{\partial f_R^{\text{eq}}}{\partial T} \mathbf{v}_g \cdot \nabla T. \quad (14)$$

根据热流密度的微观定义式:

$$\mathbf{q} = \int \int \mathbf{v}_g \hbar \omega f \frac{D(\omega)}{4\pi} d\Omega d\omega,$$

将式(14)代入即可获得经典Fourier定律:

$$\mathbf{q} = -\lambda \cdot \nabla T, \quad (15)$$

其中,

$$\lambda = \int \int \tau \hbar \omega \frac{D(\omega)}{4\pi} \frac{\partial f_R^{\text{eq}}}{\partial T} \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g d\Omega d\omega$$

为热导率张量的微观表达式, $D(\omega)$ 为声子态密度函数.实际中的大部分晶体各向异性很弱,可做各向同性假设,Fourier定律式(15)退化为通常的形式 $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$,其中热导率的微观表达式变为

$$\lambda = \frac{1}{3} \int C_\omega v_g(\omega) l(\omega) d\omega, \quad (16)$$

其中,谱体积比热容为 $C_\omega = \hbar \omega D(\omega) \frac{\partial f_R^{\text{eq}}}{\partial T}$,声子平均自由程为 $l(\omega) = \tau(\omega) v_g(\omega)$.声子群速度和弛豫时间

一般都依赖于声子的频率,当都以一个平均值代替时,从式(16)可以得到热导率的动理论简化表达式: $\lambda = \frac{1}{3} C v_g l$,其中 C 为晶体的体积比热容.

3 声子水动力学

3.1 经典声子水动力学模型

本节将利用Chapman-Enskog渐近展开方法^[48]求解双弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程,在不同阶次的近似下导出前人采用不同方法得到的绝大部分声子水动力学方程,为经典声子水动力学提供一个清晰的统计物理基础.

双弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程可通过将式(9)代入方程(8)得到

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla f = -\frac{f - f_N^{\text{eq}}}{\tau_N} - \frac{f - f_R^{\text{eq}}}{\tau_R}. \quad (17)$$

由于不同晶体的声子性质差异很大,即群速度和弛豫时间的频谱依赖性非常不同,为了捕捉声子热输运的主要宏观特性并得到一个统一的声子水动力学方程,本文的推导基于下述几个假设^[11]: (1)各向同性近似:一个晶向的声子性质可代表整个波矢空间; (2)灰色近似:考虑3个等价的声学分支,忽略光学分支对导热的贡献,声子弛豫时间为一个平均常数; (3)Debye近似:采用线性的声子色散关系 $\omega = kv_g$,故声子群速度的表达式为 $\mathbf{v}_g = k\mathbf{v}_g/k$.

声子系统宏观状态变量的平衡方程是推导声子水动力学导热方程的基础,可通过在式(17)两侧分别乘以相应的声子微观变量($\hbar\omega$ 和 $\hbar\mathbf{k}$)并在全波矢空间积分获得

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \frac{1}{v_g^2} \nabla \cdot \mathbf{Q} = -\frac{\mathbf{P}}{\tau_R}, \quad (19)$$

其中,声子能量密度和动量密度分别定义为: $e = \int \hbar \omega f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$ 和 $\mathbf{P} = \int \hbar \mathbf{k} f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$.这里“3”代表3个等价的声学分支,“ 2π ”来自波矢空间的最小体积单元.在推导方程(18)和(19)时,利用了声子散射过程(包括N过程和R过程)的能量守恒定律和N过程的准动量守恒定律.基于Debye近似,声子热流密度与动量密度

具有如下的关系:

$$\mathbf{q} = \int \mathbf{v}_g \hbar \omega f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = v_g^2 \mathbf{P}. \quad (20)$$

方程(19)中热流密度的通量的定义为

$$\mathbf{Q} = \int \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \hbar \omega f \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}.$$

将式(20)代入方程(19)可得到热流密度的平衡方程:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{Q} = -\frac{\mathbf{q}}{\tau_R}. \quad (21)$$

为了得到导热方程(热流密度和温度梯度之间的关系式), 必须将热流密度的通量 \mathbf{Q} 表达为热流密度和温度(能量密度)的显函数, 这即是声子动理论中的封闭问题(Closure Problem). 为了完成封闭问题, 必须求解声子 Boltzmann 方程(17). 下面采用多尺度Chapman-Enskog 展开方法进行求解.

Chapman-Enskog 展开方法中, 首先将声子分布函数渐近展开为

$$f = f_0 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \dots, \quad (22)$$

其中, f_0, f_1 和 f_2 分别代表声子分布函数的零阶、一阶和二阶近似, 小参数 ε 在气体动理论中通常代表 Knudsen 数(气体平均自由程与系统特征尺寸之比)^[48], 但在这里代表 N 过程和 R 过程声子弛豫时间之比, 即 $\varepsilon = \tau_N / \tau_R$, 因为在声子水动力学区, 声子 N 过程的比例远大于 R 过程, 而 Knudsen 数的定义由于存在 N 过程和 R 过程的两个声子平均自由程变得不明晰. 此外, 引入如下的多重时间和空间尺度^[49]:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_{1i}}, \quad (24)$$

其中, t_1 和 t_2 分别代表对流(快)时间尺度和扩散(慢)时间尺度, \mathbf{x}_1 代表对流和扩散的空间尺度. 将式(22)–(24)代入方程(17)可获得声子分布函数的各阶近似之间的关联式:

$$f_0 = f_N^{\text{eq}}, \quad (25)$$

$$f_1 = f_R^{\text{eq}} - f_N^{\text{eq}} - \tau_N \left(\frac{\partial f_0}{\partial t_1} + v_{gi} \frac{\partial f_0}{\partial x_{1i}} \right), \quad (26)$$

$$f_2 = f_N^{\text{eq}} - f_R^{\text{eq}} + \tau_N \left(\frac{\partial f_0}{\partial t_1} - \frac{\partial f_0}{\partial t_2} - \frac{\partial f_1}{\partial t_1} + v_{gi} \frac{\partial f_0}{\partial x_{1i}} - v_{gi} \frac{\partial f_1}{\partial x_{1i}} \right). \quad (27)$$

利用式(25)–(27)即可获得声子分布函数的各阶近似的表达式, 从而完成封闭问题. 由于偏移 Planck 分布——式(10)的复杂性, 演算过程十分繁琐, 本文只给出主要的逻辑脉络和计算结果, 详细的推导过程请参见文献[11]及其附录.

3.1.1 零阶展开解

考虑声子分布函数的零阶近似式(25), 可获得声子 Boltzmann 方程的零阶展开解. 将式(25)代入热流密度的通量的表达式可得

$$\mathbf{Q} = \int \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \hbar \omega f_N^{\text{eq}} \frac{3d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (28)$$

式(28)中的积分并不简单, 因此, 我们首先考虑偏移 Planck 分布的近似表达式, 得到零阶展开解的亚一阶近似, 然后再考虑完全的零阶展开解.

(1) 亚一阶近似

当声子的漂移速度 \mathbf{u} 比较小时, 对偏移 Planck 分布进行 Taylor 展开至一阶, 可得如下的近似表达式:

$$f_N^{\text{eq}} \approx f_R^{\text{eq}} + f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}}{k_B T}. \quad (29)$$

将式(29)代入式(28)并在全波矢空间进行积分, 可得热流密度的通量的封闭表达式:

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{3} v_g^2 e \mathbf{I}, \quad (30)$$

其中, \mathbf{I} 为单位张量. 将式(29)分别代入声子能量密度和热流密度的定义式并在全波矢空间进行积分可得

$$e = \frac{4\pi^5 (k_B T)^4}{5 (h v_g)^3}, \quad (31)$$

$$\mathbf{q} = \frac{16\pi^5 (k_B T)^4}{15 (h v_g)^3} \mathbf{u} = \frac{4}{3} e \mathbf{u}. \quad (32)$$

式(31)表明, 低温下晶体的能量密度和温度的四次方成正比, 由于比热容是能量密度对温度的一阶导数 ($C_V = de/dT$), 因而这与著名的 Debye 比热容三次方定律^[34]是相符的. 从式(32)可得声子的漂移速度和热

流密度之间的关系: $\mathbf{u}=3\mathbf{q}/4e$. 将式(30)和(31)代入方程(18)和(21)可分别得到能量守恒方程和导热方程:

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (33)$$

$$\tau_R \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} = -\lambda \nabla T. \quad (34)$$

晶体热导率和体积比热容的表达式分别为: $\lambda = C_V \tau_R v_g^2 / 3$ 和 $C_V = 16\pi^5 k_B^4 T^3 / 5(hv_g)^3$. 方程(34)即为 Cattaneo-Vernotte (C-V) 方程^[50,51], 相比经典 Fourier 定律还考虑了热流的弛豫效应(热惯性效应). 方程(33)和(34)与矩声子水动力学中的四场方程组^[52,53]也是一致的. 总之, 声子 Boltzmann 方程的零阶展开解的亚一阶近似可导出著名的 C-V 宏观导热模型.

(2) 完全零阶展开解

当不考虑偏移 Planck 分布的近似表达式, 直接计算式(28)在全波矢空间的积分可得

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} = & v_g^2 \frac{4\pi^5 (k_B T)^4}{15(hv_g)^3} \frac{1}{(1-\chi^2)^2} \mathbf{I} \\ & + \frac{16\pi^5 (k_B T)^4}{15(hv_g)^3} \frac{1}{(1-\chi^2)^3} \mathbf{u}\mathbf{u}, \end{aligned} \quad (35)$$

其中, 声子漂移速度和群速度的比例定义为: $\chi = u/v_g$. 将偏移 Planck 分布函数分别代入声子能量密度和热流密度的定义式并在全波矢空间进行积分可得

$$e = \frac{4\pi^5 (k_B T)^4}{15(hv_g)^3} \frac{\chi^2 + 3}{(1-\chi^2)^3}, \quad (36)$$

$$\mathbf{q} = \frac{16\pi^5 (k_B T)^4}{15(hv_g)^3} \frac{1}{(1-\chi^2)^3} \mathbf{u}. \quad (37)$$

式(35)–(37)的一维形式和前人的非线性四矩声子水动力学中相应的表达式^[54]严格一致. 结合式(35)–(37)消去声子的漂移速度可得热流密度的通量的封闭表达式:

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{3} v_g^2 e \mathbf{I} + \frac{3v_g \langle \mathbf{q}\mathbf{q} \rangle}{2v_g e + \sqrt{4v_g^2 e^2 - 3q^2}}. \quad (38)$$

将式(38)代入方程(21), 可得如下的非线性导热

方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{1}{3} v_g^2 \nabla e + \nabla \cdot \frac{3v_g \langle \mathbf{q}\mathbf{q} \rangle}{2v_g e + \sqrt{4v_g^2 e^2 - 3q^2}} \\ = -\frac{\mathbf{q}}{\tau_R}. \end{aligned} \quad (39)$$

方程(39)与前人采用最大熵矩方法^[29,55,56]、Grad 类型矩方法^[30,57]和 Chapman-Enskog 展开方法^[31,58]得到的声子水动力学方程一致. 可见声子 Boltzmann 方程的零阶展开解可以概括前人很多不同方法得到的声子水动力学方程. 方程(39)中的非线性项将带来有趣的热流饱和现象(Flux-Limited Behaviors)^[59], 这种现象类似于流体力学中的壅塞现象^[60], 其大致的物理机制如下: 当温度梯度比较小时, 系统中的导热处于线性区域, 可由 Fourier 定律描述, 热流密度随着温度梯度的增大线性地增大; 随着温度梯度的进一步增大, 系统中的导热将进入非线性区域, Fourier 定律将失效, 方程(39)中的非线性项的效应将起相当的作用, 热流密度不会随着温度梯度的增大无限地线性增大, 而是存在一个最大值, 即饱和热流密度^[61]. 由于具有较为严格的动理论基础, 声子水动力学模型可为描述这种热流饱和现象的不同非线性导热模型提供一个衡量和比较的标准^[61].

3.1.2 一阶展开解

同时考虑声子分布函数的零阶近似和一阶近似, 可获得声子 Boltzmann 方程的一阶展开解. 声子分布函数的一阶近似可通过将式(25)代入式(26)进行求解:

$$f_1 = f_R^{\text{eq}} - f_N^{\text{eq}} - \tau_N \left(\frac{\partial f_N^{\text{eq}}}{\partial t_1} + v_g \frac{\partial f_N^{\text{eq}}}{\partial x_{1i}} \right). \quad (40)$$

理论上将偏移 Planck 分布的表达式代入式(40)即可获得声子分布函数的一阶近似, 但计算非常繁冗. 这里采用 3.1.1 节中类似的策略, 即只考虑偏移 Planck 分布的一阶近似表达式(29). 完全的一阶展开解目前尚未给出具有清晰物理意义的宏观方程, 导出的宏观热输运方程包含很多非线性项, 形式相当复杂^[31]; 当然, 这些复杂的非线性项可能在经过适当简化后, 能够描述热输运的高阶非平衡效应, 这方面还需要未来更多的工作. 将式(29)代入式(40), 可得分布函数的一阶近似:

$$\begin{aligned}
f_1 = & -\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}}{k_B T} - \tau_N \left[\frac{\hbar k_i}{k_B T} f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \right. \\
& \times \left(-\frac{v_g^2}{4e} \frac{\partial e}{\partial x_{i1}} + \frac{u_i}{e} \frac{\partial q_j}{\partial x_{j1}} - \frac{3q_i}{4e\tau_N} \right) \\
& - \frac{1}{C_V} \frac{\partial q_j}{\partial x_{j1}} \left[f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{\hbar v_g k}{k_B T^2} \right. \\
& + f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{\hbar v_g k}{k_B T^2} (2f_R^{\text{eq}} + 1) \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}}{k_B T} \\
& \left. - f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}}{k_B T^2} \right] \\
& + \frac{v_g}{k} \frac{\hbar k_i k_j}{k_B T} f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{3}{4} \frac{\partial}{\partial x_{i1}} \left(\frac{q_j}{e} \right) \\
& + \frac{v_g}{k} k_i \frac{\partial T}{\partial x_{i1}} \left[f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{\hbar v_g k}{k_B T^2} \right. \\
& + f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{\hbar v_g k}{k_B T^2} (2f_R^{\text{eq}} + 1) \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}}{k_B T} \\
& \left. - f_R^{\text{eq}} (1 + f_R^{\text{eq}}) \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}}{k_B T^2} \right]. \quad (41)
\end{aligned}$$

将声子分布函数的一阶展开解($f=f_0+\epsilon f_1$)代入热流密度的通量的定义式,即可获得其封闭的表达式.当忽略热流密度与温度梯度乘积的非线性项以及类似于流体力学中的“体黏性”项^[11],热流密度的通量的表达式如下:

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{3} v_g^2 e \mathbf{I} - \frac{1}{5} v_g^2 \tau_N [(\nabla \cdot \mathbf{q}) \mathbf{I} + \nabla \mathbf{q} + (\nabla \mathbf{q})^T], \quad (42)$$

其中,上标“T”表示张量的转置运算.将式(42)代入方程(21)可得如下的导热方程:

$$\tau_R \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} + \lambda \nabla T = \frac{1}{5} v_g^2 \tau_N \tau_R [\nabla^2 \mathbf{q} + 2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{q})]. \quad (43)$$

方程(43)即为前人采用本征值分析方法求解线性化的声子Boltzmann方程得到的G-K方程^[21].当只忽略热流密度与温度梯度乘积的非线性项(考虑“体黏性”项),热流密度的通量的表达式如下:

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{3} v_g^2 e \mathbf{I} - \frac{1}{5} v_g^2 \tau_N \left[\nabla \mathbf{q} + (\nabla \mathbf{q})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{q}) \mathbf{I} \right]. \quad (44)$$

将式(44)代入方程(21)可得如下的导热方程:

$$\tau_R \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} + \lambda \nabla T = \frac{1}{5} v_g^2 \tau_N \tau_R \left[\nabla^2 \mathbf{q} + \frac{1}{3} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{q}) \right]. \quad (45)$$

方程(45)与G-K方程具有相同的形式,只在热流散度的梯度项前存在系数的差别,该方程曾被前人采用本征值分析方法^[62]和Grad类型矩方法^[53]获得.因此,声子Boltzmann方程的一阶展开解的亚一阶近似可以导出著名的G-K声子水动力学方程,且当前的Chapman-Enskog渐近展开方法相比本征值分析方法更加简单和直观.

3.2 唯象声子水动力学模型

经典声子水动力学理论上只严格适用于低温(远低于Debye温度)导热分析,而实际应用需求可能处在室温及高温情况,远高于理论适用范围.为了适应需求,近年来一些学者尝试将声子水动力学经验性地拓展到高温情况,建立了相关的导热方程和热力学理论,虽然尚缺乏严格的理论基础,但仍可解释和预测一些非线性热输运现象,具有很好的实用性,故称之为唯象声子水动力学模型.唯象声子水动力学模型吸收了很多气体动力学的物理图像和研究成果,特别是近年来在发展过程中引入了微纳尺度气体流动的宏观理论与模型^[63,64],可以很好地分析微纳尺度材料中的非傅里叶导热现象.该模型的物理图像中,类比气体流动受压差驱动产生质量流(宏观速度),声子导热受温差驱动产生热流,故导热中的“温度”和“热流密度”分别与气体流动中的“压力”和“速度”具有相似的角色.

3.2.1 控制方程与边界条件

与传统导热相比,微纳尺度导热的主要特征之一是非局域效应^[22,65].该效应从物理和数学的两个角度分别表现为:物理上热流密度在边界附近由于受到声子-边界散射的束缚作用而有所降低;数学上可通过热流密度的梯度项进行描述.图2所示硅薄膜面向导热(In-Plane Heat Transport,平行于薄膜边界的导热)的截面热流密度分布即展现了微纳尺度导热中的非局域效应^[66,67].可以看出,截面热流密度偏离经典Fourier定律给出的均匀分布.非均匀的热流密度分布与微纳尺度气体流动中的速度分布十分相似,都在壁面附近存在一个有限的值.基于这种相似性和G-K水动力学方程(43)的数学特性(热流梯度项的存在),前人提出了微纳尺度导热的声子水动力学模型,采用G-K导热方程来捕捉热输运的非局域效应^[22,68].

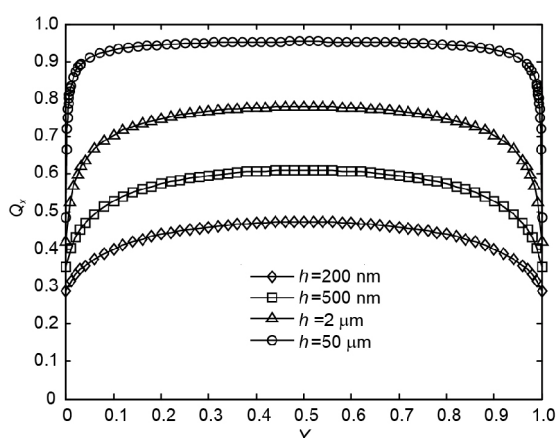


图 2 室温($T=300$ K)下硅薄膜面向导热的截面无量纲热流密度分布示意图, 薄膜壁面为漫射表面, 考虑了4种不同的薄膜厚度情况: $h=200$ nm, $h=500$ nm, $h=2$ μm , $h=50$ μm , 硅的声子弛豫时间和色散关系采用参考文献[66]中的数据, 热流密度分布基于Fuchs-Sondheimer模型^[18,67]计算获得

Figure 2 Schematic of the dimensionless cross-sectional heat flux distributions for in-plane heat transport through silicon thin film at room temperature ($T=300$ K). The lateral surface of thin film is assumed fully diffuse, with four different thicknesses considered: $h=200$ nm, $h=500$ nm, $h=2$ μm , $h=50$ μm ; the phonon relaxation time and dispersion relation of silicon come from ref. [66], whereas the heat flux distribution is computed based on the Fuchs-Sondheimer model [18,67].

$$\tau_{\text{R}} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} + \lambda \nabla T = l^2 [\nabla^2 \mathbf{q} + 2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{q})], \quad (46)$$

其中, l 为声子的平均自由程. 方程(46)和原始的G-K方程(43)有细微的差别(为了方便起见, 并考虑文献中的习惯, 在后文中方程(46)仍被称为G-K方程), 热流密度的梯度项前的系数 $\frac{1}{5}v_{\text{g}}^2\tau_{\text{N}}\tau_{\text{R}}$ 具有“长度”平方的量纲因而被替换为 l^2 . 这种替换具有一定的经验性(“唯象声子水动力学”一词的来源), 但却抓住了微纳尺度导热的主要数理特征, 并避免了N过程弛豫时间的选取问题(常见的室温下微纳尺度导热中N过程通常可忽略不计). 声子水动力学模型给微纳尺度导热提供了一个简单的研究方法, 它具有十分清晰直观的物理图像, 使得抽象的微纳尺度导热过程变得易于理解; 其简单的数学描述也有益于其在工程实际中的推广与应用. 唯象声子水动力学的局限性和声子水动力学模型的未来发展将在5.1节中进行讨论.

唯象声子水动力学模型的控制方程(46)是一个热流密度的二阶偏微分方程, 在求解微纳尺度导热的边值问题时需要两个热流边界条件. 对于一个导热通道而言, 给出在通道两壁面处的热流边界即可. 前人在

发展声子水动力学模型时, 借鉴微纳尺度气体流动中的速度滑移边界直接提出了热流密度的“滑移”边界条件^[22]:

$$\mathbf{q}_{\text{w}} = Cl \left(\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial n} \right)_{\text{w}}, \quad (47)$$

其中, C 为热流“滑移”系数, n 代表边界的法向方向, 下标“w”代表变量在边界壁面处的取值. 后来, 基于拓展不可逆热力学的框架, 一阶热流边界条件式(47)又被推广为二阶热流边界条件^[68]:

$$\mathbf{q}_{\text{w}} = Cl \left(\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial n} \right)_{\text{w}} - \alpha l^2 \left(\frac{\partial^2 \mathbf{q}}{\partial n^2} \right)_{\text{w}}, \quad (48)$$

其中, α 为用于描述边界粗糙结构所致的声子反向散射(Backscattering)的热流“滑移”系数. 值得一提的是, 最近的一个工作^[69]基于离散的Boltzmann方程推导了热流边界条件式(47), 通过将声子分布函数分解为平衡部分和非平衡部分, 依次获得了体区域中的热流密度和边界处的热流密度表达式. 这项工作尝试给唯象声子水动力学的边界条件建立严格的微观基础, 但尚未给出热流“滑移”系数的具体取值. 需要注意的是, 微纳尺度导热与微纳气体流动在边界附近的行为有本质的不同^[11]. 严格来说, 微纳尺度导热中的热流密度边界不能直接借用气体流动中的“滑移”边界; 但在热流边界的物理本质和数学描述尚未充分揭示之前, 为了方便起见, 本文暂时采用前人的“热流‘滑移’边界”一词.

导热方程(46)与热流密度的边界条件式(47)和(48)组成了唯象声子水动力学模型的主体内容. 唯象声子水动力学模型自提出以来, 在微纳结构(包括纳米线、纳米薄膜和纳米多孔材料等)中的热输运问题中得到广泛的应用^[70-79]. 这些应用在参考文献[11,32]中有详细的总结, 在本文的3.2.2节中只以纳米薄膜中的面向导热为例展示唯象声子水动力学的思想.

3.2.2 应用实例: 纳米薄膜中的面向导热

考虑如图3所示的纳米薄膜中的稳态面向声子热输运问题, 薄膜的厚度为 h , 而长度和宽度方向的尺寸均远大于薄膜厚度. 薄膜的面向施加一个均匀的温度梯度 $-dT/dx$, 厚度方向的两侧壁面为绝热边界. 采用声子水动力学建模, 该导热过程变为温差驱动的二维声

子气“流动”过程, 类似于压差驱动的平板间Poiseuille流动.

对于此稳态声子输运问题, 基于能量平衡方程(33)有热流密度的散度为零: $\nabla \cdot \mathbf{q} = 0$. 故声子水动力学方程(46)退化为

$$q_x = -\lambda \frac{dT}{dx} + l^2 \frac{d^2 q_x}{dy^2}. \quad (49)$$

方程(49)的边界条件包括中心线上的对称边界和壁面处的一阶热流边界:

$$\begin{cases} y = 0, \frac{dq_x}{dy} = 0, \\ y = \frac{h}{2}, q_x = -Cl \frac{dq_x}{dy}. \end{cases} \quad (50)$$

第2个边界条件中的负号来自于上壁面处负的热流梯度值. 方程(49)为热流密度的二阶非齐次常微分方程, 其通解为一个特解和相应齐次微分方程的通解之和:

$$q_x(y) = C_1 \exp\left(\frac{y}{l}\right) + C_2 \exp\left(-\frac{y}{l}\right) - \lambda \frac{dT}{dx}, \quad (51)$$

其中的未知系数由边界条件式(50)确定:

$$C_1 = C_2 = \frac{1}{\left[\exp\left(\frac{h}{2l}\right) + \exp\left(-\frac{h}{2l}\right) \right] + C \left[\exp\left(\frac{h}{2l}\right) - \exp\left(-\frac{h}{2l}\right) \right]} \times \lambda \frac{dT}{dx}. \quad (52)$$

故薄膜截面的热流密度分布解为

$$q_x(y) = -\lambda \frac{dT}{dx} \left\{ 1 - \frac{\exp\left(\frac{y}{l}\right) + \exp\left(-\frac{y}{l}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h}{2l}\right) + \exp\left(-\frac{h}{2l}\right) \right] + C \left[\exp\left(\frac{h}{2l}\right) - \exp\left(-\frac{h}{2l}\right) \right]} \right\}. \quad (53)$$

将热流密度分布沿着薄膜的截面积分即可获得单位截面宽度上的面向总热流量:

$$Q_{\text{tot}} = \int_{-h/2}^{h/2} q_x(y) dy = 2 \int_0^{h/2} q_x(y) dy. \quad (54)$$

把式(53)代入式(54)并积分可得

$$Q_{\text{tot}} = -\lambda \frac{dT}{dx} h \left[1 - \frac{(2l/h) \tanh(h/2l)}{1 + C \tanh(h/2l)} \right], \quad (55)$$

其中, 双曲正切函数的定义式为 $\tanh(x) = (e^x - e^{-x}) / (e^x + e^{-x})$. 式(55)表明, 纳米薄膜的面向总热流量低于经典Fourier定律的预测值, 这是声子受到边界的散射作用所致的尺度效应. 基于Fourier定律的形式可以定义纳米薄膜的面向有效热导率为: $Q_{\text{tot}} = -\lambda_{\text{eff}} \frac{dT}{dx} h$. 结合式(55)则可获得面向有效热导率的表达式为

$$\frac{\lambda_{\text{eff}}}{\lambda} = 1 - \frac{(2l/h) \tanh(h/2l)}{1 + C \tanh(h/2l)}. \quad (56)$$

为了验证声子水动力学模型的有效性, 考虑硅纳米薄膜中的热输运问题, 将式(56)预测的面向有效热导率值与文献中已有的实验测量值进行对比. 考虑室温 $T=300\text{ K}$ [18,80-84] 和高温 $T=400\text{ K}$ [85,86] 两种情形, 结果分别如图4(a)和(b)所示. 硅体材料在室温 $T=300\text{ K}$ 和高温 $T=400\text{ K}$ 的热物性如表1所示. $T=300\text{ K}$ 硅体材料的热物性数据来自文献[87], 而 $T=400\text{ K}$ 的热导率值和比热容值来自Knovel工程技术物性数据库. 认为 $T=400\text{ K}$ 时硅体材料的质量密度和声子群速度与 $T=300\text{ K}$ 时的取值相同, 并利用热导率的动理论表达式 $\lambda = \frac{1}{3} \rho c_V v_g l$ 反推得到 $T=400\text{ K}$ 时声子平均自由程的取值.

结果表明, 声子水动力学模型可以较好地解释硅纳米薄膜面向有效热导率的实验数据. 需要说明的是, 正如微纳气体流动中的速度滑移系数依赖于通道壁面的表面性质, 热流“滑移”系数 C 也将与纳米薄膜的表面情况密切相关. 由于尚缺少相关的理论或实验研究结果, 这里 C 暂取经验值0.02和0.2. 图4的结果表明, $C=0.2$ 时, $T=300\text{ K}$ 和 $T=400\text{ K}$ 两种情形中声子水动力学模型的结果和实验数据均能吻合较好. 最后需要说明的是, 声子水动力学模型的经典文献中给出的纳米薄膜面向有效热导率表达式与本文的结果略有不同[22]:

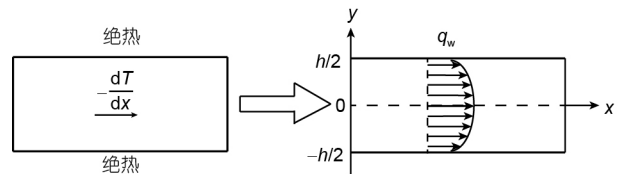


图3 纳米薄膜面向导热及声子水动力学建模示意图
Figure 3 Schematic of in-plane heat transport through a nano thin film and its phonon hydrodynamic modeling.

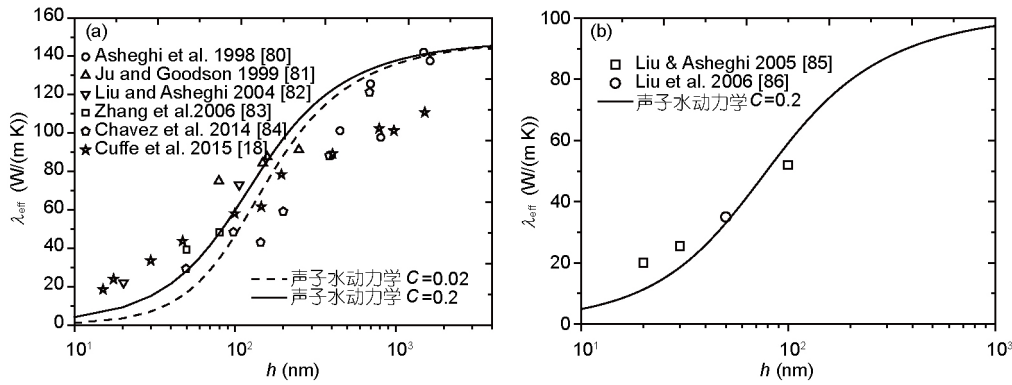


图4 硅纳米薄膜面向有效热导率随厚度的变化. (a) $T=300\text{ K}$; (b) $T=400\text{ K}$. 符号为文献中的实验结果, 实线(热流“滑移”系数 $C=0.2$)和虚线(热流“滑移”系数 $C=0.02$)为声子水动力学模型的结果式(56)

Figure 4 Effective in-plane thermal conductivity of silicon nano thin film versus its thickness. (a) $T=300\text{ K}$; (b) $T=400\text{ K}$. The symbols represent the experimental data from literature, whereas the solid line (heat flux “slip” coefficient $C=0.2$) and dashed line (heat flux “slip” coefficient $C=0.02$) represent the result eq. (56) of phonon hydrodynamic model.

表1 硅体材料 $T=300\text{ K}$ 和 $T=400\text{ K}$ 时的热物性
Table 1 The thermal properties of bulk silicon at $T=300\text{ K}$ and $T=400\text{ K}$

热物性	$T=300\text{ K}$ 值	$T=400\text{ K}$ 值
热导率(λ)	148 W/(m K)	101.9 W/(m K)
质量密度(ρ)	2328 kg/m ³	2328 kg/m ³
比热容(c_V)	713 J/(kg K)	785 J/(kg K)
声子群速度(v_g)	6400 m/s	6400 m/s
声子平均自由程(l)	41.79 nm	26.14 nm

$$\frac{\lambda_{\text{eff}}}{\lambda} = 1 - \frac{2l}{h} \tanh\left(\frac{h}{2l}\right) + C \tanh\left(\frac{h}{2l}\right). \quad (57)$$

前人的结果式(57)和本文的结果式(56)的差异来源于截面热流密度分布求解思路的不同. 前人在求解截面热流密度分布时将总热流密度分解为体区域的热流密度和壁面处的热流密度: $q=q_b+q_w$, 并假设二者是相互独立、可线性叠加的. 基于无“滑移”热流边界条件(边界处的热流密度为零)求解方程(49)获得体区域的热流密度 q_b 后, 再利用式(47)求得边界处的热流密度 q_w , 将两者相加即可获得截面的总热流密度分布^[11,32]. 事实上, 当薄膜厚度远小于声子平均自由程($h \ll l$)时, 热流密度项将远小于其Laplace项($q_x \ll l^2 d^2 q_x / dy^2$)因而可以忽略, 方程(49)可近似简化为

$$\lambda \frac{dT}{dx} = l^2 \frac{d^2 q_x}{dy^2}. \quad (58)$$

方程(58)与流体力学中的Stokes方程^[88]具有相同

的数学形式, 其求解可采用前人文献中的线性叠加原则. 但实际实验中的薄膜厚度与声子平均自由程相当 ($h \sim l$) 甚至大于声子平均自由程 ($h > l$), 方程(49)中的热流密度项不可忽略, 线性叠加原则将失效, 采用本文中的直接求解方法更加合理.

4 声子水动力学模拟及在微纳尺度热输运中的应用

声子水动力学的应用对于简单几何结构中的微纳尺度热输运问题可采用解析方法, 如第3.2.2节中的纳米薄膜面向导热. 但在工程实际中往往会遇到更加复杂的几何结构, 如纳米多孔结构^[89]、纳米网结构^[90]、纳米桁架结构^[91]等. 这些复杂纳米结构中的声子热输运问题很难获得解析结果, 因而亟需发展声子水动力学的数值求解框架. 经典水动力学中, 微纳气体流动模拟的两种主要数值方法是: 格子Boltzmann方法^[92,93]和直接Monte Carlo方法^[94,95], 它们已经获得了非常成熟的发展和广泛的应用. 相比而言, 声子运输的格子Boltzmann方法和直接Monte Carlo方法尚处于摇篮之中. 本节将介绍最近发展的声子格子Boltzmann算法^[96]以及国际前沿的高效、低噪的能量偏差声子Monte Carlo方法^[97-99].

4.1 声子输运的格子Boltzmann模拟

格子Boltzmann方法自提出以来受到广泛的关注

和应用, 主要源于以下3个优点^[49,100]: (1) 基于Boltzmann方程, 具有天然的动理论基础; (2) 局域的求解特性, 易于实现并行运算; (3) 易于处理复杂的几何边界. 利用多尺度展开技术求解格子Boltzmann方程可严格恢复相应的水动力学方程, 因而, 格子Boltzmann方法可看作宏观水动力学的一种高效数值工具. 现有的声子水动力学的格子Boltzmann方法主要包括2个分支: (1) 求解双弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程(17), 对应G-K声子水动力学方程(43)^[101,102]; (2) 求解单模态弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程(13), 对应Fourier导热方程(15)^[87]. G-K方程的声子格子Boltzmann方程包含两个弛豫项, 使得介观数值格式与宏观水动力学的关联十分复杂. 虽然文献[101]基于多尺度展开技术尝试建立这种关联, 但仍未获得充分的成功, 主要体现在如下3个方面: (1) 采用非物理的无量纲变量, 与实际参数取值尚有距离; (2) 采用的方形格子系统的对角方向上引入了非物理的声子迁移速度, 给热流密度的计算带来偏差; (3) 忽略了声子性质的频率依赖性(频谱特性). 事实上, Fourier导热方程的声子格子Boltzmann方法自提出以来^[103,104]也一直存在上述几个方面的问题, 但相比G-K方程的声子格子Boltzmann方法在数学上更简单.

因此, 我们首先发展了单模态弛豫时间近似下的声子格子Boltzmann算法, 严格地建立了介观数值格式与Fourier导热方程和宏观物性之间的定量关系, 解决了上述三方面问题中的前两个, 为后续G-K声子水动力学方程的格子Boltzmann方法的完善提供了技术路线和理论基础. 下面将该算法的理论框架予以介绍, 并给出数值验证及在纳米薄膜法向导热中的应用.

声子格子Boltzmann算法的出发点是声子Boltzmann方程(13)的能量密度形式:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla e = -\frac{e - e^{eq}}{\tau}, \quad (59)$$

其中, 声子的平衡能量密度为

$$e^{eq} \equiv \int f^{eq} \hbar \omega D(\omega) d\omega.$$

声子格子Boltzmann方程是方程(59)的一种差分离散形式:

$$\begin{aligned} & e_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - e_i(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{e_i(\mathbf{x}, t) - e_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau_r}, \end{aligned} \quad (60)$$

其中, 无量纲弛豫时间定义为: $\tau_r = \tau / \Delta t$, Δt 为格子时间步长, 格子空间步长为: $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{c}_i \Delta t$, \mathbf{c}_i ($i=1, 2, 3, \dots, n$)为离散格子速度. 假设离散声子能量密度的各个分量相等, 且考虑温度足够高的情形以忽略比热容的温度依赖性, 则离散的平衡声子能量密度为

$$e_i^{eq} = \frac{1}{n} e^{eq} = \frac{1}{n} C_v T. \quad (61)$$

利用Chapman-Enskog多尺度展开技术求解格子Boltzmann方程(60)可恢复宏观导热方程, 并获得数值参数与宏观物性之间的关联. 考虑如图5所示的3种格子结构, 分别用于模拟一维、二维和三维的声子输运过程. 与经典水动力学的格子Boltzmann算法不同的是, 这里采用的格子结构的中心零速度分量没有计入. 这种区别来源于两个方面: (1) 声子散射过程的粒子数守恒和质量守恒不再成立; (2) 声子是一种没有静止质量的玻色子, 速度一旦为零则粒子消失. 下面以典型的D2Q8格子结构为例给出Chapman-Enskog多尺度展开的推导过程.

首先将 $e_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t)$ 在 $e_i(\mathbf{x}, t)$ 附近进行Taylor展开至二阶, 然后代入方程(60)可得

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + c_{ia} \frac{\partial}{\partial x_a} \right) e_i(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t} + c_{ia} \frac{\partial}{\partial x_a} \right)^2 e_i(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{e_i(\mathbf{x}, t) - e_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau}. \end{aligned} \quad (62)$$

引入多重时间和空间尺度:

$$\partial / \partial t = \varepsilon \partial / \partial t_1 + \varepsilon^2 \partial / \partial t_2 \quad \text{和} \quad \partial / \partial x_a = \varepsilon \partial / \partial x_{1a},$$

这里的小参数 ε 为声子Knudsen数(声子平均自由程与导热系统特征尺寸之比). 将声子的离散能量密度渐近展开为: $e_i(\mathbf{x}, t) = e_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon e_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots$. 代入这些表达式到方程(62)中可分别获得小参数 ε 的零阶、一阶和二阶项:

$$e_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) = e_i^{eq}(\mathbf{x}, t), \quad (63)$$

$$\frac{\partial e_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t_1} + c_{ia} \frac{\partial e_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{1a}} = -\frac{1}{\tau} e_i^{(1)}(\mathbf{x}, t), \quad (64)$$

$$\frac{\partial e_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t_2} + \left(1 - \frac{1}{2\tau_r}\right) \frac{\partial e_i^{(1)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t_1} + \left(1 - \frac{1}{2\tau_r}\right) c_{ia} \frac{\partial e_i^{(1)}(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{ia}} = 0. \quad (65)$$

根据声子散射过程的能量守恒定律 $\sum_i e_i = \sum_i e_i^{ca}$ 可得: 对于 $r \geq 1$ 有: $\sum_i e_i^{(r)} = 0$. 声子的热流密度也可渐近展开为: $q_a(\mathbf{x}, t) = q_a^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon q_a^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots$. 对方程(64)和(65)在所有的离散速度方向 i 上进行求和, 并将两个方程结合可导出能量平衡方程:

$$\frac{\partial e}{\partial t'} + \frac{\partial q_a}{\partial x_a} = 0, \quad (66)$$

其中真实时间 t' 与格子 Boltzmann 方程中的时间 t 之间的关系为: $t' = (1 - 1/2\tau_r)t$. 声子系统的宏观变量可从离散能量密度统计获得: 局域温度 $e = \sum_i e_i = C_v T$ 和热流密度 $q_a(\mathbf{x}, t) = \sum_i c_{ia} e_i(\mathbf{x}, t)$. 在方程(64)和(65)两侧分别乘以离散格子速度 c_i 并在所有的离散方向 i 上进行求和, 然后结合两个方程可获得下述的导热方程:

$$q_a = -\frac{3}{4} \pi c^2 \frac{\partial e}{\partial x_a}. \quad (67)$$

方程(67)即为 Fourier 导热定律 $q_a = -\lambda \partial T / \partial x_a$. 再结合声子热导率的动理论表达式 $\lambda = C_v \tau v_g^2 / 3$ 和比热容的定义式 $de = C_v dT$, 则可获得格子速度与声子群速度之间的定量关系:

$$c = \frac{2}{3} v_g. \quad (68)$$

对于 D1Q2 和 D3Q14 两种格子结构, 通过类似的推导过程, 同样可得到 Fourier 导热方程以及格子速度和声子群速度之间的关系. 这 3 种不同的格子结构和相应的格子速度系统地总结在表 2 中. 至此, 建立了声子格子 Boltzmann 方法的理论基础, 准确地给出了数值参数的取值. 相比而言, 前人的算法一般经验性地将格子速度取为声子群速度^[103-107]; 最近一个研究^[87]则将格子速度取为平均投影声子速度: 一维声子输运情形为 $v_g/2$, 二维声子输运情形为 $2v_g/\pi$. 后续的数值算例将表明, 只有基于严格导出的格子速度取值才能准确地描述声子热输运过程. 声子格子 Boltzmann 方法的边界处理与经典格子 Boltzmann 方法类似, 所以在此不予

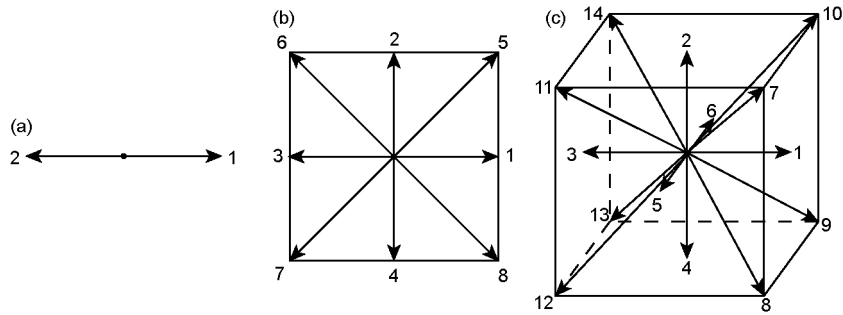


图 5 声子格子 Boltzmann 方法的格子结构示意图. (a) D1Q2; (b) D2Q8; (c) D3Q14
Figure 5 Schematic of the lattice structures in phonon lattice Boltzmann method. (a) D1Q2; (b) D2Q8; (c) D3Q14.

表 2 声子格子 Boltzmann 方法的格子速度和群速度之间的关联
Table 2 Correlation between lattice speed and group speed in phonon lattice Boltzmann method

格子结构	离散速度分量	格子速度
D1Q2	$(\pm 1, 0, 0)c$	$c = \frac{1}{\sqrt{3}} v_g$
D2Q8	$(\pm 1, 0, 0)c, (0, \pm 1, 0)c, (\pm 1, \pm 1, 0)c$	$c = \frac{2}{3} v_g$
D3Q14	$(\pm 1, 0, 0)c, (0, \pm 1, 0)c, (0, 0, \pm 1)c, (\pm 1, \pm 1, \pm 1)c$	$c = \sqrt{\frac{7}{15}} v_g$

介绍, 请读者参见文献[96].

为了验证新发展的声子格子Boltzmann算法, 我们用之于求解一个经典的二维稳态声子导热问题^[87]. 该导热过程发生在一个边长为 L 的正方形区域, 区域处于均匀的初始温度 $T_c=299.5$ K. 区域的上边界突然施加一个恒定的高温热源 $T_h=300.5$ K, 其他3个边界则保持初始温度 T_c 不变. 在充分长的时间之后, 系统将达到随时间不变的稳态. 该导热过程的Knudsen数设定为 $Kn=l/L=0.005$, 声子性质采用表1中硅体材料300 K的数据. 采用D2Q8格子结构, 格子速度为 $2v_g/3$, 经网格无关性验证后采用 201×201 的计算网格. 声子格子Boltzmann方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)的模拟结果如图6所示, 结果表明, 当前的声子LBM可以同时准确地描述温度分布和热流密度分布. 由于采用了经验的格子速度, 先前的声子LBM^[87]虽然可准确描述温度分布, 但无法给出正确的热流密度分布.

采用验证后的声子格子Boltzmann方法模拟纳米薄膜中的一维法向声子导热问题. 薄膜法向两侧分别施加恒定的高温热源 $T_h=300.5$ K和低温热源 $T_c=299.5$ K. 该导热过程的 $Kn=l/h$ (h 为薄膜厚度)考虑从0.001–50内的值, 声子性质也采用表1中硅体材料300 K的数据. 采用D2Q8格子结构, 格子速度为 $2v_g/3$, 经网格无关性验证后采用 1001×6 的二维计算网格. 薄膜法向两侧使用温度边界条件, 面向使用周期性边界以实现法向的一

维输运. 声子格子Boltzmann方法的模拟结果如图7所示. 结果表明, 纳米薄膜法向输运将在边界附近出现温度跳跃, 且随着 Kn 数的增大, 边界附近的非平衡效应增强, 温度跳跃值增大. 边界附近的温度跳跃揭示了薄膜内声子与两侧热源的相互作用不充分, 将增大声子热输运的阻力, 因而薄膜法向的有效热导率随着 Kn 数的增大不断地降低, 表现出强烈的尺度效应. 为了说明新发展的声子格子Boltzmann算法的有效范围, 将当前的数值模拟结果与文献[108]中基于声子辐射输运方程(Equation of Phonon Radiative Transfer, EPRT)的准确结果或声子Boltzmann方程的Monte Carlo解(见4.2节)进行对比. 基于EPRT方程的温度分布解必须通过数值方法(离散坐标法等)获得, 但热流密度和有效热导率则可借鉴热辐射输运理论中的已有模型得到在全部 Kn 数范围内均成立的如下简单解析表达式^[108]:

$$\frac{\lambda_{\text{eff}}}{\lambda} = \frac{1}{1 + \frac{4}{3}Kn}. \quad (69)$$

图7(a)中的对比表明, 当 Kn 数大于~1时, 声子格子Boltzmann方法给出的温度分布将偏离EPRT方程的准确解或声子Boltzmann方程的Monte Carlo解, 新算法不再可靠. 这是因为当前声子格子Boltzmann格式是基于小 Kn 数极限严格推导而来, 所以其有效范围大约在Fourier导热定律和温度跳跃边界条件能够给出正确解

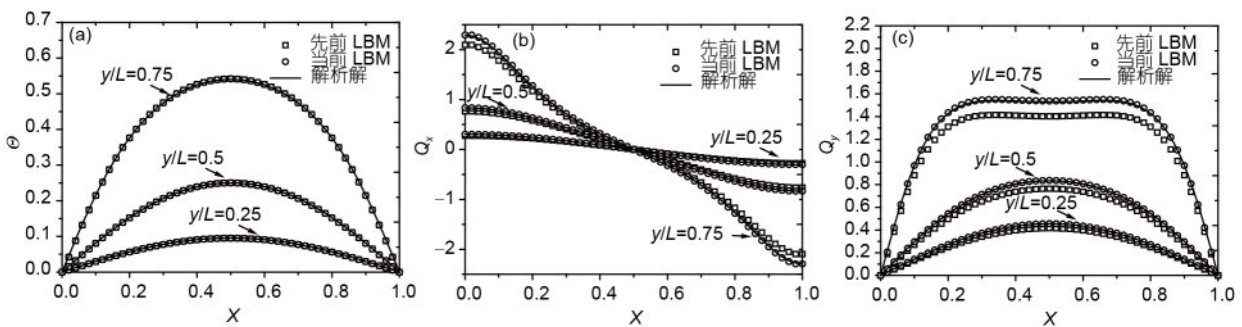


图 6 二维稳态声子导热的格子Boltzmann模拟结果图. (a) 无量纲温度分布; (b) x 方向无量纲热流密度分布; (c) y 方向无量纲热流密度分布. 当前LBM的计算网格为 201×201 , 格子速度为 $2v_g/3$, 对比的先前LBM来自文献[87], 计算网格为 201×201 , 格子速度为 $2v_g/\pi$. 圆圈符号表示当前LBM的数值结果, 方形符号表示先前LBM的数值结果, 实线表示该问题的解析解(详见文献[96]). 无量纲坐标定义为 $X=x/L$, 无量纲温度和无量纲热流密度分别定义为: $\Theta=(T-T_c)/(T_h-T_c)$ 和 $Q=qL/\lambda(T_c-T_h)$

Figure 6 Lattice Boltzmann modeling results of two-dimensional steady-state phonon heat transport. (a) Dimensionless temperature distribution; (b) x -direction dimensionless heat flux distribution; (c) y -direction dimensionless heat flux distribution. The grid is 201×201 in the present LBM, with the lattice speed $2v_g/3$; the previous LBM for comparison comes from ref. [87] with a grid of 201×201 and lattice speed $2v_g/\pi$. The circles represent the results by present LBM, the squares represent the results by previous LBM, whereas the solid lines denote the analytical solution (details in ref. [96]). The dimensionless coordinate is defined as $X=x/L$, with the dimensionless temperature and heat flux defined respectively: $\Theta=(T-T_c)/(T_h-T_c)$ and $Q=qL/\lambda(T_c-T_h)$.

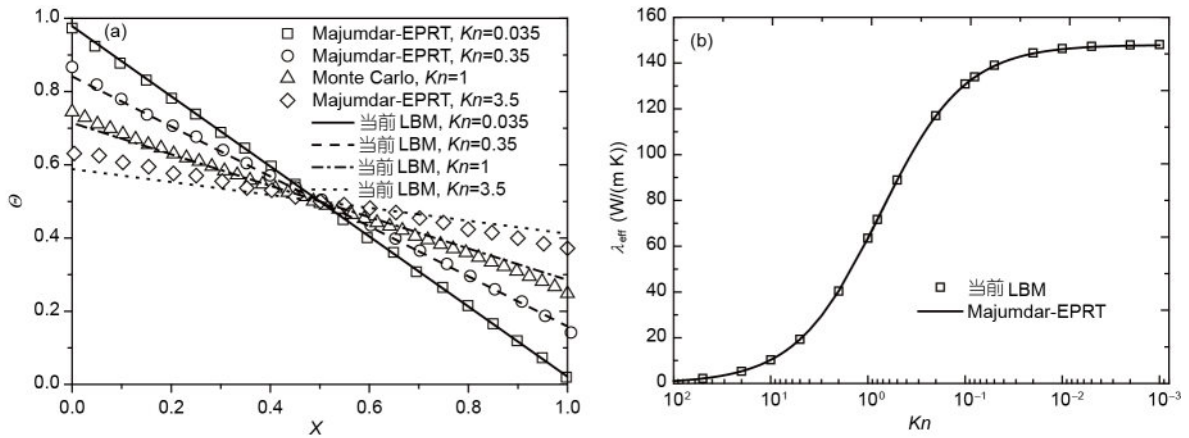


图 7 室温下硅纳米薄膜法向声子导热的格子Boltzmann模拟结果图。(a) 不同 Kn 数下的无量纲温度分布, 考虑了4个 Kn 数的情形: $Kn=0.035$, $Kn=0.35$, $Kn=1$, $Kn=3.5$, 方块、圆圈和菱形符号为文献[108]中EPRT方程的离散坐标解, 三角形符号为声子Boltzmann方程的Monte Carlo解, 实线和虚线代表当前LBM的数值结果, 无量纲坐标定义为 $X=x/h$, 无量纲温度的定义为 $\Theta=(T-T_c)/(T_h-T_c)$; (b) 法向有效热导率随 Kn 数的变化, 实线为文献[108]中EPRT方程的解式(69), 符号代表当前LBM的数值解

Figure 7 Lattice Boltzmann modeling results of cross-plane phonon heat transport through silicon nano thin film at room temperature. (a) Dimensionless temperature distributions at four different Knudsen numbers: $Kn=0.035$, $Kn=0.35$, $Kn=1$, $Kn=3.5$, squares, circles and diamonds represent the DOM solution of EPRT in ref. [108], triangles are the Monte Carlo solution of phonon Boltzmann equation, whereas the solid line and dashed lines denote the numerical results by present LBM, the dimensionless coordinate is defined as $X=x/h$ and the dimensionless temperature is defined as $\Theta=(T-T_c)/(T_h-T_c)$; (b) effective cross-plane thermal conductivity versus Kn , the solid line represent the solution eq. (69) of EPRT in ref. [108], whereas the symbols represent the numerical results by present LBM.

的滑移区^[64]内。一个可能是巧合的事实是, 无论 Kn 数多大, 声子格子Boltzmann方法总能给出非常准确的法向热流密度和有效热导率值, 如图7(b)所示。薄膜法向声子热输运看似简单, 但远未被人们所充分理解^[109,110], 其背后蕴藏着很多传热理论的基本问题, 如微纳尺度下温度的定义、温度跳跃的本质等, 需要未来的更多深入探索。

4.2 声子输运的直接Monte Carlo模拟

求解声子Boltzmann方程的数值方法通常包括两大类: 确定型方法和随机型方法。4.1节中介绍的格子Boltzmann模拟属于确定型方法, 而本节将要介绍的直接Monte Carlo模拟(Direct Simulation Monte Carlo, DSMC)则是一种随机型方法。DSMC是一种基于概率统计原理的粒子法, 一个模拟粒子代表很多实际粒子的集合, 因而从描述层次的角度来看属于介观偏微观的数值方法。模拟粒子的迁移遵循经典力学的运动规律, 而粒子之间的相互作用则通过随机碰撞模型实现^[94]。DSMC最早由Klitsner等人^[111]和Peterson^[112]引入声子输运的模拟, 但只考虑了简单的灰色近似和Debye晶体。一个里程碑式的工作是Mazumder和Majumdar^[113]在声子DSMC(在声子输运的研究领域通常简称为MC, 亦在

下文采用)中考虑了频率依赖的声子弛豫时间、非线性色散关系和声子分支, 从而实现了真实声子热输运的模拟, 计算的硅纳米薄膜有效热导率与实验数据符合良好。后续的许多工作继续发展和完善了Mazumder和Majumdar提出的声子MC数值格式^[114-119]。近年来比较重要的进展是Péraud和Hadjiconstantinou^[97-99]发展的能量偏差(Energy-Based Deviatonal)声子Monte Carlo方法。相比传统声子MC方法, 能量偏差声子MC有下述优点: (1) 模拟的声子散射过程严格满足能量守恒, 无需进行后续的人工增添或删减声子操作, 简化了算法流程并提高了计算精度; (2) 只模拟声子分布函数中偏离平衡的部分, 极大地提高了计算效率并降低了随机统计噪音。本小节将给出能量偏差声子MC的主要思想和算法流程, 其在微纳尺度热输运中的应用请参见文献^[90,91,97-99,120]。

能量偏差声子Monte Carlo方法的出发点是单模态弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程(13)的一种能量形式:

$$\frac{\partial e_{\omega}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{g}} \cdot \nabla e_{\omega} = \frac{e_{\omega}^{\text{loc}} - e_{\omega}}{\tau}, \quad (70)$$

其中, $e_{\omega} = \hbar \omega f$, 注意与方程(59)中的声子能量密度不

同. 局域平衡分布 $e_{\omega}^{\text{loc}} = \hbar\omega f^{\text{loc}}$, f^{loc} 为基于局域伪温度 T_{loc} 的 Bose-Einstein 平衡分布, 局域伪温度的计算基于声子散射过程的能量守恒定律:

$$\sum_p \int_{\omega} \frac{e_{\omega}^{\text{loc}}(T_{\text{loc}})}{\tau} D(\omega, p) d\omega = \sum_p \int_{\omega} \int \frac{e_{\omega}}{\tau} \frac{D(\omega, p)}{4\pi} d\Omega d\omega, \quad (71)$$

其中, p 代表声子分支, 声子弛豫时间一般为声子频率、声子分支和系统温度的函数: $\tau \equiv \tau(\omega, p, T)$. 定义偏差能量: $e_{\omega}^{\text{d}} = e_{\omega} - e_{\omega}^{\text{eq}}$, 其中 $e_{\omega}^{\text{eq}} = \hbar\omega f(T_{\text{eq}})$, $f(T_{\text{eq}})$ 为基于参考温度 T_{eq} (与空间和时间无关的常数) 的 Bose-Einstein 平衡分布, 然后将方程(70)改写成偏差能量的形式^[97]:

$$\frac{\partial e_{\omega}^{\text{d}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{g}} \cdot \nabla e_{\omega}^{\text{d}} = \frac{(e_{\omega}^{\text{loc}} - e_{\omega}^{\text{eq}}) - e_{\omega}^{\text{d}}}{\tau}. \quad (72)$$

方程(72)即为能量偏差声子MC方法求解的声子 Boltzmann 方程形式, 模拟粒子为偏差能量粒子, 且设定每个模拟粒子代表 $\varepsilon_{\text{eff}}^{\text{d}}$ 个实际偏差能量粒子. 该算法的思想起源于 Hadjiconstantinou 课题组早期在气体运输模拟中提出的降噪 (Variance Reduction) DSMC 方法^[121-123], 其精妙之处在于只对分布函数偏离一个参考平衡态的部分进行计算和随机统计, 因而相比传统 MC 方法的计算量更小、统计噪音更低, 如图8所示. 根据参考平衡态的选取, 能量偏差粒子的取值可正可负, 如图8(b)中的符号标记.

能量偏差声子MC的算法流程主要包括如下步骤: 初始化、迁移步、采样步、散射步、边界处理. 下面将依次简要介绍各个步骤, 细节请参见原始文献^[97]. 假设计算区域一共由 N 个用于统计宏观量的元胞组成, 元胞 j 的体积为 V_j , 其中的粒子编号集合为 C_j . 首先进行计算区域的初始化, 粒子的频率和分支按下述的平衡分布函数进行赋值:

$$\hbar\omega D(\omega, p) \times \left[\frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_{\text{B}}T_0) - 1} - \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_{\text{B}}T_{\text{eq}}) - 1} \right], \quad (73)$$

其中, T_0 为计算区域的初始温度. 初始化后对所有的粒子进行迁移操作, 元胞中粒子的位置按下式进行更新: $\mathbf{x}(t+\Delta t) = \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}_{\mathbf{g}}\Delta t$, Δt 为模拟的时间步长. 迁移步后, 对每个元胞中的局域温度和局域伪温度进行采样统计, 元胞 j 的局域温度 T_j 通过对下面的局域能量密度关系式进行逆数值积分获得

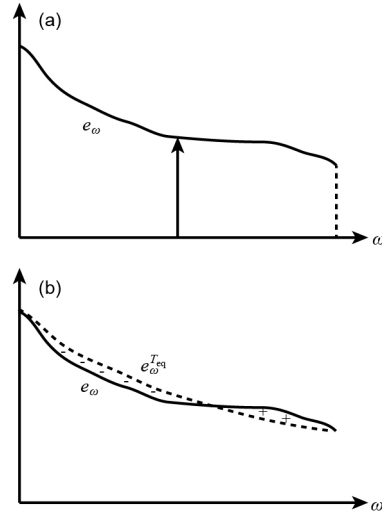


图8 传统声子MC和能量偏差声子MC示意图. (a) 传统声子MC中, 对整个分布函数进行计算和随机统计; (b) 能量偏差声子MC中, 对分布函数偏离一个参考平衡态的部分进行计算和随机统计(该图改编自参考文献^[97])

Figure 8 Schematic of traditional phonon MC and energy-based deviational phonon MC. (a) In traditional phonon MC, the whole energy distribution function is computed and integrated; (b) in energy-based deviational phonon MC, the deviation of energy distribution function from a reference equilibrium state is computed and integrated (This figure is redrawn based on ref. ^[97]).

$$\frac{\Delta E_j}{V_j} = \sum_p \int_{\omega} \hbar\omega D(\omega, p) \times \left[\frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_{\text{B}}T_j) - 1} - \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_{\text{B}}T_{\text{eq}}) - 1} \right] d\omega, \quad (74)$$

其中, ΔE_j 为元胞 j 中的偏差能量, 可通过直接对元胞 j 中所有的粒子求和而得 $\Delta E_j = \varepsilon_{\text{eff}}^{\text{d}}(N_j^+ - N_j^-)$, N_j^+ 和 N_j^- 分别代表正能量偏差粒子和负能量偏差粒子的数目. 获得局域温度后, 可依次计算每个元胞的偏差伪能量 $\Delta \tilde{E}_j$ 和局域伪温度 $T_{\text{loc},j}$:

$$\Delta \tilde{E}_j = \varepsilon_{\text{eff}}^{\text{d}} \sum_{i \in C_j} \frac{s(i)}{\tau(\omega_i, p_i, T_j)}, \quad (75)$$

$$\frac{\Delta \tilde{E}_j}{V_j} = \sum_p \int_{\omega} \frac{\hbar\omega D(\omega, p)}{\tau(\omega, p, T_j)} \times \left[\frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_{\text{B}}T_{\text{loc},j}) - 1} - \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_{\text{B}}T_{\text{eq}}) - 1} \right] d\omega. \quad (76)$$

式(75)中的 $s(i) = \pm 1$ 表示能量偏差粒子的符号, 利

用方程(76)计算局域伪温度也必须通过逆数值积分获得. 采样步之后进行粒子的散射步, 元胞 j 中的 i 粒子发生散射的概率与声子弛豫时间相关, 在单模态弛豫时间近似下按下述表达式进行计算:

$$P(\omega_i, p_i, T_j) = 1 - \exp\left[-\frac{\Delta t}{\tau(\omega_i, p_i, T_j)}\right]. \quad (77)$$

当粒子发生非弹性三声子散射时, 其频率和分支将按下述偏差伪能量分布进行重置:

$$\frac{\hbar\omega D(\omega, p)}{\tau(\omega, p, T_j)} \times \left[\frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T_{\text{loc},j}) - 1} - \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T_{\text{eq}}) - 1} \right]. \quad (78)$$

散射步之后需要加入边界条件对声子运输的影响, 即进行边界处理. 常见的导热边界包括等温边界和热流边界, 热流边界的一个特例是绝热边界. 等温边界通常按照声子“黑体”进行处理, 即粒子与等温边界 T_b 接触后被全吸收, 而等温边界按照基于 T_b 的Bose-Einstein平衡分布向计算区域发射粒子. 绝热边界通常按粒子的漫反射和镜反射进行处理, 漫反射后粒子的能量不变、方向随机给定, 镜反射后粒子的切向速度不变、法向速度反向. 另一个值得一提的是近年来发展的周期性热流边界, 该边界条件可极大减少周期性纳米结构中声子热运输模拟的计算量, 其主要想法是在计算区域周期性方向的两端施加一个恒定的声子分布函数梯度^[97,117].

能量偏差声子Monte Carlo算法近年又有新的进展, 主要是基于线性化的声子Boltzmann方程, 包括动力学型(Kinetic Type)能量偏差格式^[98]和共轭型(Adjoint-Based)能量偏差格式^[99]. 这些改良的能量偏差格式进一步提高了原始格式的计算效率并降低了统计噪音. 尽管如此, 当系统处于近连续区(Kn 数较小但Fourier定律仍不成立)时, MC求解声子Boltzmann方程的效率很低、涨落很大. 这是因为声子MC中迁移步和散射步是解耦的, 要求时间步长小于声子的弛豫时间, 而后者通常很小, 故对于近连续区的导热问题声子MC的计算量很大. 与此相比, 4.1节中介绍的格子Boltzmann方法只在连续区及其附近成立, 恰好可作为声子MC方法的一个互补. 一个有望在所有 Kn 数范围都有效的算法是最近发展的声子离散统一气体动力学格式(Discrete

Unified Gas Kinetic Scheme, DUGKS)^[124]. 声子DUGKS与声子能量偏差MC类似, 均是来源于气体运输中的对应格式^[125]. DUGKS是UGKS算法的变种, 由于在计算声子分布函数时耦合了迁移步和散射步, 也具有渐近保持(Asymptotic Preserving)特性, 时间步长不受弛豫时间大小的限制^[126]. 目前声子DUGKS尚处萌芽阶段, 其数值格式的发展及在微纳尺度热运输中的应用都有待进一步的工作.

5 讨论与展望

5.1 广义声子水动力学模型

经典声子水动力学的发展起源于热波现象的探索, 局限于N过程主导的低温导热过程. 唯象声子水动力学经验性地将声子水动力学拓展应用到室温下微纳尺度的热运输现象, 与经典声子水动力学之间仍然存在理论上的鸿沟. 事实上, 如图1所示, “声子水动力学”的含义不应局限于其起源之处, 准确来说代表声子运输的宏观层次理论描述. 从这个角度看, G-K方程是N过程主导时声子水动力学方程的一个特例, 而Fourier定律是U过程主导时声子水动力学方程的另一个特例. 因此中间地带还存在巨大的空白, 如低维材料中N过程和U过程相当的热运输^[46,127], 以及室温下纳米薄膜中U过程和声子-边界散射相当的导热, 这些热运输过程还缺少相应的宏观理论描述. 本文把除了G-K方程和Fourier定律之外的宏观导热方程称为“广义声子水动力学模型”. 广义声子水动力学模型的发展应基于声子Boltzmann方程, 并可借鉴气体运输理论中从Boltzmann方程导出宏观水动力学方程的各种数学方法^[48,128,129]. 声子Boltzmann方程简化形式的选择应根据导热过程的声子散射特性: 室温下的微纳尺度导热N过程可以忽略, 声子水动力学方程的发展应基于单模态弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程(13); 而低维材料中的热运输N过程和U过程相当, 声子水动力学方程的发展则应基于双弛豫时间近似下的声子Boltzmann方程(17). 声子水动力学模型相应的宏观边界条件也有待进行严格的发展, 正如3.2.1节中所述.

广义声子水动力学模型将在很多方面具有重要的潜在应用, 包括声子器件中的热整流现象^[130]、微纳电子器件中的热管理^[10]和室温下的超快热运输过

程^[131]等, 这些方面的详细研究思路请参见文献^[11]. 为了将广义声子水动力学模型应用于复杂纳米结构中的热输运, 还有待构建相应的数值求解框架, 而第4节中的声子格子Boltzmann方法是一个很好的选择. 广义声子水动力学理论模型和数值框架的系统发展将促进微纳尺度热输运的深刻理解和广泛应用.

5.2 微纳尺度输运的热力学

热力学的本质在于给系统提供简洁抽象的描述, 即通过一组完备的状态变量刻画系统的状态和演化. 描述系统状态动力学的分支称为平衡热力学(又称经典热力学), 而描述系统演化动力学的分支称为非平衡热力学(又称不可逆热力学). 相比成熟的平衡热力学理论, 非平衡热力学仍处于发展和完善之中. 系统的演化往往由输运过程所致, 如导热和扩散过程分别使系统的温度和浓度发生变化. 输运理论包括微观、介观和宏观3个层次(见2.2节), 其中宏观水动力学层次的理论描述基于系统的一组宏观状态变量, 与热力学的本质思想是一致的. 事实上, 输运理论与热力学有着十分密切的联系. 对气体输运而言, 经典水动力学方程可从经典非平衡热力学导出: 线性的唯象热力学力-流关系保证了非负的非平衡熵产率, 从而获得了线性输运定律(Newton黏性定律), 将线性输运定律代入动量平衡方程即可导出经典水动力学方程^[132]. 非平衡熵产率亦可从介观Boltzmann方程导出, 这便是著名的H定理(热力学第二定律的微观解释)的理论基础^[133]. 此外, Boltzmann方程的一阶Chapman-Enskog展开解可给出线性输运定律和经典水动力学方程^[48]. 上述气体输运理论与热力学理论的联系总结在图9(a)中. 对声子输运而言, 现有的Fourier定律和G-K水动力学方程均可从声子Boltzmann方程导出(分别见2.2.3节和3.1节), 它们也都可从非平衡热力学理论导出, 相应的非平衡熵产率亦可基于非平衡统计热力学计算获得, 在经典专著^[132,9]中分别有详细的介绍. 声子输运理论与热力学理论的联系总结在图9(b)中.

近年来, 微纳尺度输运理论的发展引发了微纳尺度输运的热力学研究. 微纳尺度输运是一个高度非平衡的过程, 因而建立相应的非平衡热力学理论框架是一个艰难的问题. 尽管前人进行了很多努力和尝试^[9,134-138], 微纳尺度输运的热力学理论至今仍是一个公开的挑战. 从历史的角度来看, 经典非平衡热力学

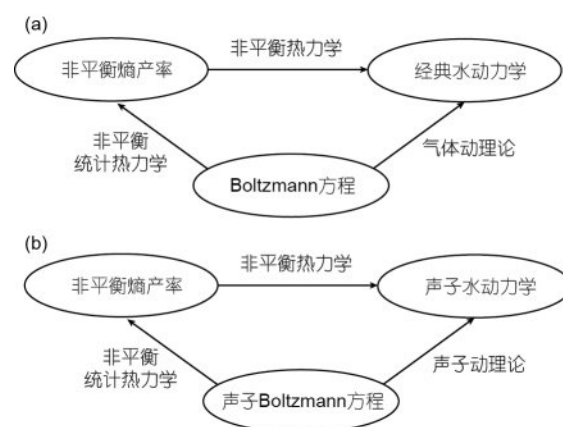


图9 输运理论与热力学理论的联系示意图. (a) 气体输运; (b) 声子输运

Figure 9 Schematic of the relation between transport theory and thermodynamic theory. (a) Gas transport; (b) phonon transport.

框架的建立是基于对传统输运过程的充分认识和线性唯象定律的确立^[139,140]. 因此, 微纳尺度输运热力学的发展也必须首先获得对微纳尺度输运的深刻洞见及其宏观水动力学规律, 然后才可能建立输运过程非平衡熵产率和宏观水动力学的内在联系, 即一个热力学理论框架. 本文大部分内容皆在讨论微纳尺度输运的水动力学规律, 下面将简要介绍最近在微纳尺度传热过程非平衡熵产率方面的理论进展^[141].

考虑图10(a)所示平行通道中的等温微气体流动和图10(b)所示受限空间内的微气体导热, 对微纳尺度传热过程进行非平衡熵产率的分析和计算. 由于气体输运研究相对成熟, 这里暂时没有考虑微纳尺度声子输运的热力学分析, 但是下述的理论研究很容易拓展至声子输运过程. 相比于传统输运过程, 微纳尺度输运中的界面效应变得明显, 分子与通道壁面相互作用不充分将带来速度滑移和温度跳跃等非平衡现象, 如图10(a)和(b)所示, 壁面处的非平衡现象势必会引入额外的不可逆性熵产. 因而, 微纳尺度输运的非平衡熵产率既包括分子与分子之间相互作用产生的体熵产率, 又包括分子与壁面之间相互作用产生的界面熵产率. 前人很早对稀薄气体输运中的非平衡熵产率做过系统的研究^[142-144], 但近年来微纳尺度输运中的热力学分析尚未受到恰当的考虑. 体熵产率的表达式已在经典非平衡热力学中给出, 而界面熵产率的计算必须基于气体动理论. 下面将从Boltzmann方程出发, 分别导出微纳尺度气体传热中速度滑移和温度跳跃所致的

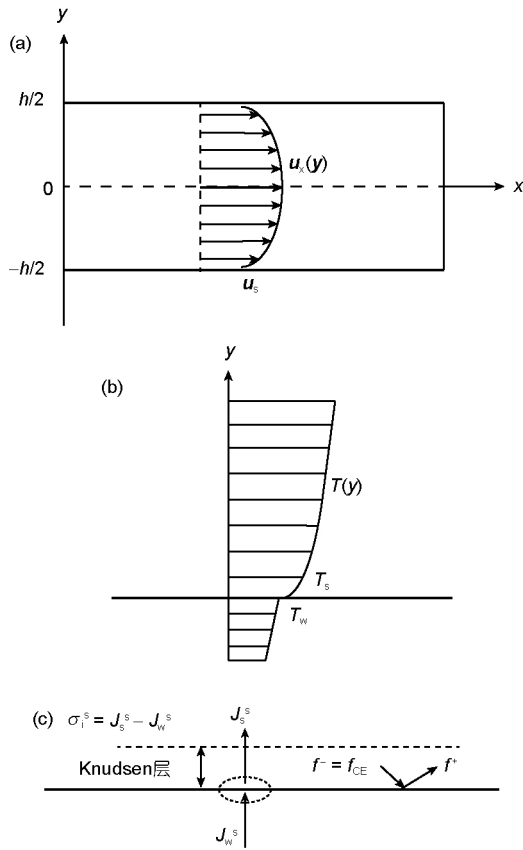


图 10 微纳尺度气体流动与导热的界面熵产率计算示意图. (a) 平行通道中的等温微气体流动, 壁面处存在滑移速度 u_s ; (b) 微气体导热, 壁面处存在温度跳跃 ($T_s - T_w$); (c) 界面熵产率的动理论基础, 界面熵产率 (σ_i^s) = 紧邻壁面气体中的熵流 (J_s^s) - 壁面中的熵流 (J_w^s). 壁面附近气体中的熵流的计算基于入射分布函数 f^- 和反射分布函数 f^+ , 它们之间的关联通过Maxwell气体-壁面相互作用模型

Figure 10 Schematic of the derivation of interfacial entropy generation in microscale gas flow and heat transfer. (a) Isothermal gas flow in parallel micro-channel, with a slip velocity u_s at the wall; (b) microscale gas heat conduction, with a temperature jump ($T_s - T_w$) at the wall; (c) kinetic theory foundation for the interfacial entropy generation: interfacial entropy generation (σ_i^s) = the entropy flux within the gas adjacent to the wall (J_s^s) - entropy flux inside the wall (J_w^s). The calculation of entropy flux within the gas adjacent to the wall is based on the gas distribution functions of incident part f^- and reflecting part f^+ , which are related by the Maxwell gas-wall interaction model.

界面熵产率.

界面熵产率可从壁面处的熵平衡关系获得, 即等于紧邻壁面气体中的熵流与壁面中的熵流之差: $\sigma_i^s = J_s^s - J_w^s$, 如图10(c)所示, 下标s和w分别表示紧邻壁面气体的和壁面的物理量. 首先分析图10(a)中等温微气体流动中下壁面附近的输运过程, 壁面法向热流

为零, 故 $J_w^s = 0$, 界面熵产率变为 $\sigma_i^s = J_s^s$. 由气体动理论中熵流的微观表达式可得

$$\sigma_i^s = -k_B \int c_y f_s \ln f_s \, dc, \tag{79}$$

其中, $c(c_y)$ 为分子无规则运动速度, f_s 为紧邻壁面气体的分布函数, 可分解为撞击壁面分子 ($c_y < 0$) 的入射分布函数和离开壁面分子 ($c_y > 0$) 的反射分布函数:

$$f_s = \begin{cases} f^-, & \text{对 } c_y < 0, \\ f^+, & \text{对 } c_y > 0. \end{cases} \tag{80}$$

由于考虑的是近连续区和滑移区的微气体流动, 体区域的流动控制方程仍为经典Navier-Stokes水动力学方程, 故入射分布函数可近似取为Boltzmann方程的一阶Chapman-Enskog展开解:

$$f^- = f_{CE} = f_{eq} \left[1 - \frac{m^2}{\rho(k_B T)^2} (c_x - u_s) c_y \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} \right)_s \right], \tag{81}$$

其中, u_x 和 u_s 分别为气体的流向宏观速度和壁面处滑移速度, ρ 和 μ 分别为气体的质量密度和动力黏度, m 为气体分子的质量, f_{eq} 为Maxwell-Boltzmann局域平衡分布函数:

$$f_{eq}^- = \frac{\rho}{m} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{(c_x - u_s)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2k_B T / m} \right]. \tag{82}$$

反射分布函数可通过Maxwell气体-壁面相互作用模型与入射分布函数关联:

$$f^+ = s f^-(c_x, -c_y) + (1 - s) f_0(T_w), \tag{83}$$

其中, $f_0(T_w)$ 为基于 T_w 的Maxwell-Boltzmann全局平衡分布函数, s 为镜参数 (Specularity Parameter), 表示在壁面处发生镜面反射气体分子的比例. 为了理论发展的简洁性, 考虑实际中最常见的完全漫反射壁面 ($s=0$), 将式(80)-(83)代入式(79)并在速度空间进行积分, 最终可获得速度滑移所致的界面熵产率表达式 (详细的推导过程参见文献[141]):

$$\sigma_i^s = \frac{\mu}{\pi T} u_s \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} \right)_s. \tag{84}$$

通过类似上述过程的熵平衡分析, 可导出微气体导热中温度跳跃所致的界面熵产率:

$$\sigma_i^s = \frac{q_n}{T_w} - \frac{q_n}{T_s}, \quad (85)$$

其中, q_n 代表法向热流密度, T_w 和 T_s 分别为壁面温度和紧邻壁面气体的温度. 式(84)和(85)表明, 界面熵产率正比于速度滑移和温度跳跃的大小. 换言之, 当输运过程的特征尺寸降低时, 界面熵产率增加, 进一步的分析表明, 系统的总非平衡熵产率也将随之增加, 这与前人忽略界面不可逆性的热力学分析得到的结果截然相反, 揭示了微纳尺度输运热力学中界面效应的主导作用^[141].

微纳尺度输运过程的非平衡熵产率与宏观水动力学的内在联系还没有清晰的答案. 虽然最近的一个工作尝试建立已有唯象声子水动力学方程的拓展不可逆热力学框架^[145], 但由于唯象声子水动力学方程的经验性和局限性, 这只能算是一个引子. 未来还需要在广义声子水动力学模型和微纳尺度输运热力学分析两个方面进行更深入的研究工作.

6 结论

热输运理论是物理与工程学科中一个相对抽象而艰涩的分支. 由于传统的输运理论在微纳尺度下面临诸多问题甚至失效, 微纳尺度的热输运理论变得更具挑战性. 声子水动力学给热输运宏观建模提供了一个富有前景的解决方案, 它具有坚实的统计物理基础、

清晰的物理图像和简单的数学描述. 本文对声子水动力学的理论基础及应用进行了一个全面的介绍.

声子水动力学是声子输运的宏观层次理论描述, 扎根于粒子动力学层次的微观理论和动理学层次的介观理论, 又与二者有显著不同, 三者共同构建成一个热传递多层次输运理论的描述体系. 声子水动力学的历史发展脉络包括经典声子水动力学、唯象声子水动力学和广义声子水动力学. 本文采用Chapman-Enskog渐近展开方法求解声子Boltzmann方程, 在不同阶次的近似下导出了前人采用不同方法得到的声子水动力学方程, 给出了经典声子水动力学清晰的动理论基础. 唯象声子水动力学经验性地拓展了经典声子水动力学的温度适用范围, 为微纳尺度热输运提供了直观的定性理解和相对准确的定量描述, 然而其数理基础尚存在一定缺失. “广义声子水动力学”的概念为严格描述非线性热输运的宏观规律提供了新的发展思路. 为了便于在复杂系统热输运中的应用, 本文还介绍了声子水动力学的数值求解方法的新进展, 包括最近开发的声子格子Boltzmann算法和国际前沿的能量偏差声子Monte Carlo方法. 本文最后系统地阐述了声子输运理论与非平衡热力学理论之间的联系, 介绍了微纳尺度输运热力学方面的进展, 并尝试指明了未来的探索方向. 希望本文可促进热输运宏观理论和声子水动力学的进一步发展及应用.

致谢 本文得益于与Jou D教授、Hadjiconstantinou N G教授、Müller I教授、Pan N教授、杨诺教授、翟荟教授和Péraud J P M博士的有益讨论, 冉鑫提供了Monte Carlo模拟的部分材料, 在此一并感谢.

参考文献

- 1 Fourier J. *Théorie Analytique De La Chaleur*. Paris: Firmin Didot Père et Fils, 1822
- 2 Kaviany M. *Heat Transfer Physics*. New York: Cambridge University Press, 2008
- 3 Gad-el-Hak M. *The MEMS Handbook: MEMS Introduction and Fundamentals*. New York: Taylor & Francis, 2006
- 4 Kirby B J. *Micro- and Nanoscale Fluid Mechanics: Transport in Microfluidic Devices*. New York: Cambridge University Press, 2010
- 5 Chang C W, Okawa D, Garcia H, et al. Breakdown of Fourier's law in nanotube thermal conductors. *Phys Rev Lett*, 2008, 101: 075903
- 6 Yang N, Zhang G, Li B. Violation of Fourier's law and anomalous heat diffusion in silicon nanowires. *Nano Today*, 2010, 5: 85–90
- 7 Chen G. *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons*. New York: Oxford University Press, 2005
- 8 Zhang Z M. *Nano/Microscale Heat Transfer*. New York: McGraw-Hill, 2007
- 9 Jou D, Casas-Vázquez J, Lebon G. *Extended Irreversible Thermodynamics*. Heidelberg: Springer, 2010
- 10 Moore A L, Shi L. Emerging challenges and materials for thermal management of electronics. *Mater Today*, 2014, 17: 163–174
- 11 Guo Y, Wang M. Phonon hydrodynamics and its applications in nanoscale heat transport. *Phys Rep*, 2015, 595: 1–44
- 12 McGaughey A J H, Kaviany M. Phonon transport in molecular dynamics simulations: Formulation and thermal conductivity prediction. *Adv*

- [Heat Transfer](#), 2006, 39: 169–255
- 13 Broido D A, Malorny M, Birner G, et al. Intrinsic lattice thermal conductivity of semiconductors from first principles. [Appl Phys Lett](#), 2007, 91: 231922
 - 14 Peierls R E. *Quantum Theory of Solids*. Oxford: The Clarendon Press, 1955
 - 15 Ziman J M. *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*. Oxford: The Clarendon Press, 1960
 - 16 Turney J E, McGaughey A J H, Amon C H. In-plane phonon transport in thin films. [J Appl Phys](#), 2010, 107: 024317
 - 17 Chen G. Multiscale simulation of phonon and electron thermal transport. [Annu Rev Heat Transfer](#), 2014, 17: 1–8
 - 18 Cuffe J, Eliason J K, Maznev A A, et al. Reconstructing phonon mean-free-path contributions to thermal conductivity using nanoscale membranes. [Phys Rev B](#), 2015, 91: 245423, arXiv: [1408.6747](#)
 - 19 Maassen J, Lundstrom M. Steady-state heat transport: Ballistic-to-diffusive with Fourier's law. [J Appl Phys](#), 2015, 117: 035104, arXiv: [1408.1631](#)
 - 20 Péraud J P M, Hadjiconstantinou N G. Extending the range of validity of Fourier's law into the kinetic transport regime via asymptotic solution of the phonon Boltzmann transport equation. [Phys Rev B](#), 2016, 93: 045424, arXiv: [1508.04694](#)
 - 21 Guyer R A, Krumhansl J A. Solution of the linearized phonon Boltzmann equation. [Phys Rev](#), 1966, 148: 766–778
 - 22 Alvarez F X, Jou D, Sellitto A. Phonon hydrodynamics and phonon-boundary scattering in nanosystems. [J Appl Phys](#), 2009, 105: 014317
 - 23 Tzou D Y. A unified field approach for heat conduction from macro- to micro-scales. [J Heat Transfer](#), 1995, 117: 8–16
 - 24 Chen G. Ballistic-diffusive heat-conduction equations. [Phys Rev Lett](#), 2001, 86: 2297–2300
 - 25 Guo Z Y. Motion and transfer of thermal mass—thermal mass and thermal gas. [J Eng Therm](#), 2006, 27: 631–634
 - 26 Guyer R A, Krumhansl J A. Thermal conductivity, second sound, and phonon hydrodynamic phenomena in nonmetallic crystals. [Phys Rev](#), 1966, 148: 778–788
 - 27 Joseph D D, Preziosi L. Heat waves. [Rev Mod Phys](#), 1989, 61: 41–73
 - 28 Ackerman C C, Bertman B, Fairbank H A, et al. Second sound in solid helium. [Phys Rev Lett](#), 1966, 16: 789–791
 - 29 Larecki W, Piekarski S. Symmetric conservative form of low-temperature phonon gas hydrodynamics. [Il Nuovo Cimento D](#), 1991, 13: 31–53
 - 30 Banach Z, Larecki W. Nine-moment phonon hydrodynamics based on the modified Grad-type approach: Formulation. [J Phys A Math Gen](#), 2004, 37: 9805–9829
 - 31 Banach Z, Larecki W. Chapman-Enskog method for a phonon gas with finite heat flux. [J Phys A Math Theor](#), 2008, 41: 375502
 - 32 Álvarez F X, Cimmelli V A, Jou D, et al. Mesoscopic description of boundary effects in nanoscale heat transport. [Nanoscale Syst Math Mod Theor Appl](#), 2012, 1: 112
 - 33 Einstein A. Die Plancksche theorie der strahlung und die theorie der spezifischen wärme. [Ann Phys](#), 1906, 327: 180–190
 - 34 Debye P. Zur theorie der spezifischen wärmen. [Ann Phys](#), 1912, 344: 789–839
 - 35 Peierls R. Zur kinetischen theorie der wärmeleitung in kristallen. [Ann Phys](#), 1929, 395: 1055–1101
 - 36 Huang K. *Statistical Mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1987
 - 37 Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*. New York: John Wiley & Sons, 2005
 - 38 Xiong S, Sääskilähti K, Kosevich Y A, et al. Blocking phonon transport by structural resonances in alloy-based nanophononic metamaterials leads to ultralow thermal conductivity. [Phys Rev Lett](#), 2016, 117: 025503
 - 39 Ma D, Ding H, Meng H, et al. Nano-cross-junction effect on phonon transport in silicon nanowire cages. [Phys Rev B](#), 2016, 94: 165434, arXiv: [1510.08185](#)
 - 40 Volz S, Ordóñez-Miranda J, Shchepetov A, et al. Nanophononics: State of the art and perspectives. [Eur Phys J B](#), 2016, 89: 15
 - 41 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. [Phys Rev](#), 1954, 94: 511–525
 - 42 Callaway J. Model for lattice thermal conductivity at low temperatures. [Phys Rev](#), 1959, 113: 1046–1051
 - 43 McGaughey A J H, Kaviani M. Quantitative validation of the Boltzmann transport equation phonon thermal conductivity model under the single-mode relaxation time approximation. [Phys Rev B](#), 2004, 69: 094303
 - 44 Ward A, Broido D A, Stewart D A, et al. *Ab initio* theory of the lattice thermal conductivity in diamond. [Phys Rev B](#), 2009, 80: 125203
 - 45 Fugallo G, Cepellotti A, Paulatto L, et al. Thermal conductivity of graphene and graphite: Collective excitations and mean free paths. [Nano Lett](#), 2014, 14: 6109–6114
 - 46 Cepellotti A, Fugallo G, Paulatto L, et al. Phonon hydrodynamics in two-dimensional materials. [Nat Commun](#), 2015, 6: 6400
 - 47 Majee A K, Aksamija Z. Length divergence of the lattice thermal conductivity in suspended graphene nanoribbons. [Phys Rev B](#), 2016, 93: 235423
 - 48 Chapman S, Cowling T G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge: Cambridge University Press, 1953
 - 49 Succi S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford: Clarendon Press, 2001

- 50 Cattaneo C. Sulla conduzione del calore. *Atti Sem Mat Fis Univ Modena*, 1948, 3: 21
- 51 Vernotte P. Les paradoxes de la théorie continue de l'équation de la chaleur. *CR Acad Sci*, 1958, 246: 3154–3155
- 52 Dreyer W, Struchtrup H. Heat pulse experiments revisited. *Continuum Mech Ther*, 1993, 5: 3–50
- 53 Fryer M J, Struchtrup H. Moment model and boundary conditions for energy transport in the phonon gas. *Continuum Mech Ther*, 2014, 26: 593–618
- 54 Nielsen H, Shklovskii B. Heat transfer and second sound in dielectrics at large drift velocities of the phonon gas. *Soviet Phys JETP*, 1969, 29: 386–390
- 55 Larecki W. Symmetric conservative form of low-temperature phonon gas hydrodynamics. *Il Nuovo Cimento D*, 1992, 14: 141–176
- 56 Banach Z, Larecki W. Nine-moment phonon hydrodynamics based on the maximum-entropy closure: One-dimensional flow. *J Phys A Math Gen*, 2005, 38: 8781–8802
- 57 Banach Z, Larecki W. Nine-moment phonon hydrodynamics based on the modified Grad-type approach: Hyperbolicity of the one-dimensional flow. *J Phys A Math Gen*, 2004, 37: 11053–11072
- 58 Banach Z, Larecki W. Modified Chapman-Enskog moment approach to diffusive phonon heat transport. *Phys Rev E*, 2008, 78: 061137
- 59 Sellitto A, Cimmelli V A. Flux limiters in radial heat transport in silicon nanolayers. *J Heat Transfer*, 2014, 136: 071301
- 60 Shan X, Wang M. On mechanisms of choked gas flows in microchannels. *Phys Lett A*, 2015, 379: 2351–2356
- 61 Guo Y, Jou D, Wang M. Understanding of flux-limited behaviors of heat transport in nonlinear regime. *Phys Lett A*, 2016, 380: 452–457
- 62 Hardy R J, Albers D L. Hydrodynamic approximation to the phonon Boltzmann equation. *Phys Rev B*, 1974, 10: 3546–3551
- 63 Struchtrup H. *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows*. Heidelberg: Springer-Verlag, 2005
- 64 Karniadakis G, Beskok A, Aluru N. *Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation*. New York: Springer, 2005
- 65 Tzou D Y. Nonlocal behavior in phonon transport. *Int J Heat Mass Transfer*, 2011, 54: 475–481
- 66 Hopkins P E, Reinke C M, Su M F, et al. Reduction in the thermal conductivity of single crystalline silicon by phononic crystal patterning. *Nano Lett*, 2011, 11: 107–112
- 67 Fuchs K, Mott N F. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals. *Math Proc Camb Phil Soc*, 1938, 34: 100–108
- 68 Sellitto A, Alvarez F X, Jou D. Second law of thermodynamics and phonon-boundary conditions in nanowires. *J Appl Phys*, 2010, 107: 064302
- 69 Xu M. Slip boundary condition of heat flux in Knudsen layers. *Proc Math Phys Eng Sci*, 2014, 470: 20130578
- 70 Alvarez F X, Jou D, Sellitto A. Pore-size dependence of the thermal conductivity of porous silicon: A phonon hydrodynamic approach. *Appl Phys Lett*, 2010, 97: 033103
- 71 Sellitto A, Alvarez F X, Jou D. Temperature dependence of boundary conditions in phonon hydrodynamics of smooth and rough nanowires. *J Appl Phys*, 2010, 107: 114312–114312
- 72 Alvarez F X, Jou D, Sellitto A. Phonon boundary effects and thermal conductivity of rough concentric nanowires. *J Heat Transfer*, 2011, 133: 022402
- 73 Sellitto A, Alvarez F X, Jou D. Geometrical dependence of thermal conductivity in elliptical and rectangular nanowires. *Int J Heat Mass Transfer*, 2012, 55: 3114–3120
- 74 Ma Y. Size-dependent thermal conductivity in nanosystems based on non-Fourier heat transfer. *Appl Phys Lett*, 2012, 101: 211905
- 75 Wang M, Guo Z Y. Understanding of temperature and size dependences of effective thermal conductivity of nanotubes. *Phys Lett A*, 2010, 374: 4312–4315
- 76 Wang M, Yang N, Guo Z Y. Non-Fourier heat conductions in nanomaterials. *J Appl Phys*, 2011, 110: 064310
- 77 Wang M, Shan X, Yang N. Understanding length dependences of effective thermal conductivity of nanowires. *Phys Lett A*, 2012, 376: 3514–3517
- 78 Dong Y, Cao B Y, Guo Z Y. Size dependent thermal conductivity of Si nanosystems based on phonon gas dynamics. *Phys E*, 2014, 56: 256–262
- 79 Sellitto A, Carlomagno I, Jou D. Two-dimensional phonon hydrodynamics in narrow strips. *Proc Math Phys Eng Sci*, 2015, 471: 20150376
- 80 Asheghi M, Touzelbaev M N, Goodson K E, et al. Temperature-dependent thermal conductivity of single-crystal silicon layers in SOI substrates. *J Heat Transfer*, 1998, 120: 30
- 81 Ju Y S, Goodson K E. Phonon scattering in silicon films with thickness of order 100 nm. *Appl Phys Lett*, 1999, 74: 3005–3007
- 82 Liu W, Asheghi M. Phonon-boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers. *Appl Phys Lett*, 2004, 84: 3819–3821
- 83 Zhang H, Lv Z C, Tian L L, et al. Thermal conductivity measurements of ultra-thin single crystal silicon films using improved structure. In: Tang T A, Ru G P, Jiang Y L, eds. *Proceedings of 8th International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology*. Shanghai, 2006
- 84 Chávez-Ángel E, Reparaz J S, Gomis-Bresco J, et al. Reduction of the thermal conductivity in free-standing silicon nano-membranes investigated by non-invasive Raman thermometry. *APL Mater*, 2014, 2: 012113

- 85 Liu W, Asheghi M. Thermal conduction in ultrathin pure and doped single-crystal silicon layers at high temperatures. *J Appl Phys*, 2005, 98: 123523
- 86 Liu W, Etessam-Yazdani K, Hussin R, et al. Modeling and data for thermal conductivity of ultrathin single-crystal SOI layers at high temperature. *IEEE Trans Electron Dev*, 2006, 53: 1868–1876
- 87 Nabovati A, Sellan D P, Amon C H. On the lattice Boltzmann method for phonon transport. *J Comp Phys*, 2011, 230: 5864–5876
- 88 Landau L D, Lifshitz E M. *Fluid Mechanics*. Singapore: Elsevier Pte Ltd., 2004
- 89 Jean V, Fumeron S, Termentzidis K, et al. Monte Carlo simulations of phonon transport in nanoporous silicon and germanium. *J Appl Phys*, 2014, 115: 024304
- 90 Ravichandran N K, Minnich A J. Coherent and incoherent thermal transport in nanomeshes. *Phys Rev B*, 2014, 89: 205432, arXiv: 1403.7647
- 91 Dou N G, Minnich A J. Heat conduction in multifunctional nanotrusses studied using Boltzmann transport equation. *Appl Phys Lett*, 2016, 108: 011902, arXiv: 1510.05715
- 92 Nie X, Doolen G D, Chen S. Lattice-Boltzmann simulations of fluid flows in MEMS. *J Stat Phys*, 2002, 107: 279–289
- 93 Succi S. Mesoscopic modeling of slip motion at fluid-solid interfaces with heterogeneous catalysis. *Phys Rev Lett*, 2002, 89: 064502
- 94 Bird GA. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. New York: Oxford University Press, 1994
- 95 Wang M, Li Z. Nonideal gas flow and heat transfer in micro- and nanochannels using the direct simulation Monte Carlo method. *Phys Rev E*, 2003, 68: 46704
- 96 Guo Y, Wang M. Lattice Boltzmann modeling of phonon transport. *J Comp Phys*, 2016, 315: 1–15
- 97 Péraud J P M, Hadjiconstantinou N G. Efficient simulation of multidimensional phonon transport using energy-based variance-reduced Monte Carlo formulations. *Phys Rev B*, 2011, 84: 205331, arXiv: 1109.3910
- 98 Péraud J P M, Hadjiconstantinou N G. An alternative approach to efficient simulation of micro/nanoscale phonon transport. *Appl Phys Lett*, 2012, 101: 153114, arXiv: 1206.3316
- 99 Péraud J P M, Hadjiconstantinou N G. Adjoint-based deviational Monte Carlo methods for phonon transport calculations. *Phys Rev B*, 2015, 91: 235321
- 100 Chen S, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 329–364
- 101 Jiaung W S, Ho J R. Lattice-Boltzmann modeling of phonon hydrodynamics. *Phys Rev E*, 2008, 77: 066710
- 102 Lee J, Roy A K, Farmer B L. Kapitza resistance in the lattice Boltzmann-Peierls-Callaway equation for multiphase phonon gases. *Phys Rev E*, 2011, 83: 056706
- 103 Ghai S S, Kim W T, Escobar R A, et al. A novel heat transfer model and its application to information storage systems. *J Appl Phys*, 2005, 97: 10P703
- 104 Escobar R A, Ghai S S, Jhon M S, et al. Multi-length and time scale thermal transport using the lattice Boltzmann method with application to electronics cooling. *Int J Heat Mass Transfer*, 2006, 49: 97–107
- 105 Sellan D P, Turney J E, McGaughey A J H, et al. Cross-plane phonon transport in thin films. *J Appl Phys*, 2010, 108: 113524
- 106 Han Y F, Xia X L, Tan H P, et al. Modeling of phonon heat transfer in spherical segment of silica aerogel grains. *Phys B*, 2013, 420: 58–63
- 107 Mao Y, Xu M. Lattice Boltzmann numerical analysis of heat transfer in nano-scale silicon films induced by ultra-fast laser heating. *Int J Therm Sci*, 2015, 89: 210–221
- 108 Majumdar A. Microscale heat conduction in dielectric thin films. *J Heat Transfer*, 1993, 115: 7–16
- 109 Hua C, Minnich A J. Semi-analytical solution to the frequency-dependent Boltzmann transport equation for cross-plane heat conduction in thin films. *J Appl Phys*, 2015, 117: 175306
- 110 Vermeersch B, Carrete J, Mingo N. Cross-plane heat conduction in thin films with *ab-initio* phonon dispersions and scattering rates. *Appl Phys Lett*, 2016, 108: 193104, arXiv: 1512.01354
- 111 Klitsner T, Vanleve J E, Fischer H E, et al. Phonon radiative heat transfer and surface scattering. *Phys Rev B*, 1988, 38: 7576–7594
- 112 Peterson R B. Direct simulation of phonon-mediated heat transfer in a debye crystal. *J Heat Transfer*, 1994, 116: 815–822
- 113 Mazumder S, Majumdar A. Monte Carlo study of phonon transport in solid thin films including dispersion and polarization. *J Heat Transfer*, 2001, 123: 749–759
- 114 Chen Y, Li D, Lukes J R, et al. Monte Carlo simulation of silicon nanowire thermal conductivity. *J Heat Transfer*, 2005, 127: 1129–1137
- 115 Lacroix D, Joulain K, Lemonnier D. Monte Carlo transient phonon transport in silicon and germanium at nanoscales. *Phys Rev B*, 2005, 72: 064305
- 116 Randrianalisoa J, Baillis D. Monte Carlo simulation of steady-state microscale phonon heat transport. *J Heat Transfer*, 2008, 130: 072404
- 117 Hao Q, Chen G, Jeng M S. Frequency-dependent Monte Carlo simulations of phonon transport in two-dimensional porous silicon with aligned

- pores. *J Appl Phys*, 2009, 106: 114321
- 118 Mittal A, Mazumder S. Monte Carlo study of phonon heat conduction in silicon thin films including contributions of optical phonons. *J Heat Transfer*, 2010, 132: 052402
- 119 Wong B T, Francoeur M, Pinar Mengüç M. A Monte Carlo simulation for phonon transport within silicon structures at nanoscales with heat generation. *Int J Heat Mass Transfer*, 2011, 54: 1825–1838
- 120 Zeng L, Chiloyan V, Huberman S, et al. Monte Carlo study of non-diffusive relaxation of a transient thermal grating in thin membranes. *Appl Phys Lett*, 2016, 108: 063107, arXiv: [1512.03986](https://arxiv.org/abs/1512.03986)
- 121 Baker L L, Hadjiconstantinou N G. Variance reduction for Monte Carlo solutions of the Boltzmann equation. *Phys Fluids*, 2005, 17: 051703
- 122 Radtke G A, Hadjiconstantinou N G. Variance-reduced particle simulation of the Boltzmann transport equation in the relaxation-time approximation. *Phys Rev E*, 2009, 79: 056711
- 123 Radtke G A, Péraud J P M, Hadjiconstantinou N G. On efficient simulations of multiscale kinetic transport. *Philos Trans R Soc A*, 2013, 371: 20120182
- 124 Guo Z, Xu K. Discrete unified gas kinetic scheme for multiscale heat transfer based on the phonon Boltzmann transport equation. *Int J Heat Mass Transfer*, 2016, 102: 944–958
- 125 Guo Z, Xu K, Wang R. Discrete unified gas kinetic scheme for all Knudsen number flows: Low-speed isothermal case. *Phys Rev E*, 2013, 88: 033305
- 126 Xu K, Huang J C. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. *J Comp Phys*, 2010, 229: 7747–7764
- 127 Lee S, Broido D, Esfarjani K, et al. Hydrodynamic phonon transport in suspended graphene. *Nat Commun*, 2015, 6: 6290
- 128 Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases. *Comm Pure Appl Math*, 1949, 2: 331–407
- 129 Torrilhon M. Modeling nonequilibrium gas flow based on moment equations. *Annu Rev Fluid Mech*, 2016, 48: 429–458
- 130 Li N, Ren J, Wang L, et al. Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond. *Rev Mod Phys*, 2012, 84: 1045–1066, arXiv: [1108.6120](https://arxiv.org/abs/1108.6120)
- 131 Chaput L. Direct solution to the linearized phonon Boltzmann equation. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 265506
- 132 De Groot S R, Mazur P. *Non-equilibrium Thermodynamics*. New York: Dover Publications, 1962
- 133 Boltzmann L. *Lectures on Gas Theory*. London: Cambridge University Press, 1964
- 134 Müller I, Ruggeri T. *Rational Extended Thermodynamics*. New York: Springer, 1998
- 135 Cimmelli V A. Different thermodynamic theories and different heat conduction laws. *J Non-Equilibrium Ther*, 2009, 34: 299–333
- 136 Müller I, Weiss W. Thermodynamics of irreversible processes—past and present. *Eur Phys J H*, 2012, 37: 139–236
- 137 Cimmelli V, Jou D, Ruggeri T, et al. Entropy principle and recent results in non-equilibrium theories. *Entropy*, 2014, 16: 1756–1807
- 138 Jou D, Cimmelli V A. Constitutive equations for heat conduction in nanosystems and nonequilibrium processes: An overview. *Commun Appl Indust Math*, 2016, 7: 196
- 139 Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes. I. *Phys Rev*, 1931, 37: 405–426
- 140 Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes. II. *Phys Rev*, 1931, 38: 2265–2279
- 141 Guo Y, Wang M. Thermodynamic analysis of gas flow and heat transfer in microchannels. *Int J Heat Mass Transfer*, 2016, 103: 773–782
- 142 Sharipov F. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. *Phys A-Stat Mech Its Appl*, 1994, 203: 437–456
- 143 Sharipov F. Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. *Phys A-Stat Mech Its Appl*, 1994, 203: 457–485
- 144 Zhdanov V M, Roldugin V I. Non-equilibrium thermodynamics and kinetic theory of rarefied gases. *Phys-Usp*, 1998, 41: 349–378
- 145 Guo Y, Wang M. Thermodynamic framework for a generalized heat transport equation. *Commun Appl Industrial Math*, 2016, 7: 167

Phonon hydrodynamics: progress, applications and perspectives

GUO YangYu & WANG MoRan*

Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Phonon hydrodynamics is an effective macroscopic method to study heat transport in dielectric solid, which has a clear and intuitive physical picture, and also an elegant and unified mathematical description. The present work provides a systematic summary of its theoretical foundation, historical line, recent progress and applications. The historical line of phonon hydrodynamics consists of three stages in all: the classical phonon hydrodynamics, phenomenological phonon hydrodynamics and generalized phonon hydrodynamics. The unified kinetic theory framework for classical phonon hydrodynamics is first elaborated, with an incorporation of various previous phonon hydrodynamic equations valid in different situations through a Chapman-Enskog expansion solution to phonon Boltzmann equation. The main idea and content of phenomenological phonon hydrodynamics is then summarized, together with its application in nanoscale heat transport. Its historical logic and limitation is therefore elucidated along the classical phonon hydrodynamics. Meanwhile, to foster the wide applications of phonon hydrodynamics in complex systems, we give an introduction to the recent advance of corresponding numerical schemes, including both phonon lattice Boltzmann method and phonon Monte Carlo method. Finally, the perspectives of phonon hydrodynamics are discussed towards a more accurate description of heat transport in nanosystems. The generalized phonon hydrodynamics is interpreted in terms of its connotation and denotation, as well as the nonequilibrium thermodynamic foundation. The present work aims at promoting the further development of phonon hydrodynamics and its application in uncovering the mechanisms of heat transport in extreme situations.

phonon hydrodynamics, macroscopic model, nanoscale heat transport, nonequilibrium thermodynamics

PACS: 44.10.+i, 63.22.-m, 05.20.Dd, 05.70.Ln

doi: [10.1360/SSPMA2016-00408](https://doi.org/10.1360/SSPMA2016-00408)