arXiv:2301.00445v1 [math-ph] 1 Jan 2023

声子输运与量子热流的维格纳方程

V.D. Camiola[a]、V.Romano[a]、G. Vitanza[a]、 [a]数学与计算机科学系 - 卡塔尼亚大学

摘要

从密度算符的量子刘维尔方程出发，并应用魏尔量子化，推导出纵向和横向光学声子与声学声子的维格纳方程。这些方程适用于任何固体，包括石墨烯等二维晶体。利用莫亚尔演算及其性质，将伪微分算子展开至 $\hbar$中的二阶。声子-声子碰撞算子采用BGK形式建模，用于描述维格纳函数向局域平衡函数的弛豫过程；该局域平衡函数取决于根据 [1]确定的局域平衡温度。

通过采用基于量子版本最大熵原理的闭合关系，利用矩方法获得了一个能量输运模型。在适当的标度下，得到了带有量子修正的热导率显式形式。

1. 引言

采用维格纳函数是研究量子输运最有前景的方法之一。其主要优势在于，在适当的相空间中，可以获得类似于经典理论或半经典输运的描述。相对于维格纳函数而言，均值是期望值，就好像后者是一个概率密度；而维格纳输运方程的半经典极限至少在形式上可以恢复玻尔兹曼输运方程。关于维格纳方程及其数值求解方法，已有大量文献（例如参见 [2, 3, 4]及其中的参考文献）。然而，大多数相关研究都考虑能量的二次色散关系。相反，对于半导体或半金属（例如石墨烯）等多种材料，则必须考虑其他色散关系 [5, 6, 7]。基于维格纳输运方程，文献 [8] 针对抛物线能带情况下硅中的电荷输运，建立了量子流体动力学模型；而文献 [9] 则针对石墨烯中运动的电子进行了相同的研究。

电子和机械器件的进一步微型化使热效应日益重要 [10, 11] ，因此需要采用物理上准确的模型。在动力学层面，一种良好的描述方式是针对每个声子支使用半经典佩尔斯-玻尔兹曼方程。然而，对于小于声子平均自由程的典型长度，还必须考虑量子效应（例如参见 [11]）。维格纳方程是一种自然的方法，在这种情况下能更好地揭示声子的波动性，

它以佩尔斯-玻尔兹曼方程为半经典极限，同时保留了动力学表述的结构。本文重点研究具有一般色散关系的声学声子和光学声子的动力学。

为了深入了解量子修正，我们从相应的维格纳方程推导出矩方程。与经典情形一样，这会导出一个尚未闭合的平衡方程组。因此，众所周知的闭合关系问题随之出现，也就是如何用一组基本变量（例如声子能量密度和能流）来表示矩方程中出现的附加场。实现这一目标的一种可靠方法是采用最大熵原理的量子表述 [12] （下文简称量子最大熵原理），该表述最早由 Jaynes 提出 [13]。最近，一系列论文 [14, 15]发展出了一套更为形式化的理论，并将其应用于多个领域，例如半导体中的电荷输运 [8, 16, 17, 18]。感兴趣的读者还可参阅 [19]。

我们将量子最大熵原理应用于维格纳方程，并假设每种声子的能量密度和能流为基本场。通过将$\hbar$展开至二阶，推导出相对于半经典情形 [1] 的量子修正。特别是在长时间尺度下，我们得到了热流的渐近表达式。该表达式由傅里叶型部分和温度梯度的高度非线性二阶修正构成。文中给出了德拜近似下声学声子的显式公式。

本文结构安排如下。第 2 节概述半经典声子输运，第 3 节则写出声学声子和光学声子的维格纳方程。第 4 节专门推导矩方程，并在第 5 节通过量子最大熵原理（QMEP）建立其闭合关系。最后一节将介绍局部温度的定义，并推导热流量子修正的渐近表达式。

2. 半经典声子输运

在晶格中，能量输运以准粒子的形式量子化，这些准粒子称为声子，具有多个支和传播模式。传播模式因材料而异，但无论如何，声子都分为声学支和光学声子支；它们又可沿纵向或横向振荡。通常可以通过数值方法在第一布里渊区（FBZ）内求得完整的色散关系 $\mathcal{B}$。然而，在实际应用中，往往会采用一些标准近似。

对于声学声子，通常假设其色散关系采用德拜近似 $\varepsilon_s(\mathrm{q})$，即 $\varepsilon_s(\mathrm{q}) = \hbar\omega_s(\mathrm{q}) = \hbar c_s|\mathrm{q}|$, $s = LA, TA$。 LA 表示纵声学，而 TA 表示横声学。 c_s 是 s 支的声速， $\hbar$ 表示约化普朗克常数。相应地，第一布里渊区扩展至$\mathbb{R}^d$。此处， d 为空间维数；对于块体晶体， $d = 3$ ；对于石墨烯或二硫属化物等类似的二维材料， $d = 2$ 。

对于纵向光学（LO）声子和横向光学（TO）声子，通常采用爱因斯坦色散关系 $\hbar\omega_s \approx$ const，其中 $s = LO$、TO 为声子角频率。

采用。

需要注意的是，在这种假设下，光学声子的群速度可以忽略不计。

在石墨烯等一些特殊材料中，通常还会引入一个称为 K-声子的虚构支，它由波矢接近第一布里渊区中狄拉克点 K 或 K'的声子构成（取原点为 Γ 第一布里渊区的中心）。在这种情况下，由于这些点附近的声子能量变化范围有限，也采用爱因斯坦近似。此外，在石墨烯中，声子分为面内声子和面外声子：前者代表平行于材料平面的振动，后者代表垂直于材料平面的振动模式。 LA、 TA、 LO、 TO 和 K声子属于面内声子。面外声子属于声学支，称为 ZA 声子。对于它们，二次色散关系是一个很好的近似$\varepsilon_{ZA}(\mathbf{q}) = \hbar\omega_{ZA}(\mathbf{q}) = \hbar\alpha|\mathbf{q}|^2$，其中 $\alpha = 6.2 \times 10^7 m^2/s$ （见 [20]）

下面我们不使用波矢 $\mathbf{q}$，而改用声子动量 $\hbar\mathbf{q}$，但为简化记号，仍保留相同的字符。因此， $\varepsilon_s(\mathbf{q}) = c_s|\mathbf{q}|, s = LA, TA$ 和 $\varepsilon_{ZA}(\mathbf{q}) = \overline{\alpha}|\mathbf{q}|^2$，其中 $\overline{\alpha} = \alpha/\hbar$。

热输运通常用宏观模型来描述，例如傅里叶模型、基于最大熵方法的模型 [19] 或基于唯象描述的模型[10]。处理这一问题更准确的方法是采用半经典输运方程，即所谓的佩尔斯-玻尔兹曼方程，针对每个声子支的声子分布 $f_\mu(t, \mathbf{x}, \mathbf{q})$

$$\frac{\partial f_\mu}{\partial t} + \mathbf{c}_\mu \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_\mu = C_\mu, \quad \mu = LA, TA, \ldots, \tag{1}$$

其中，$\mathbf{c}_\mu = \nabla_{\mathbf{q}} (\hbar\omega_\mu)$ 是第 μ 种声子的群速度。

声子碰撞项 C_μ 可分为两项

$$C_\mu = C_\mu^\mu + \sum_{\nu,\nu\neq\mu} C_\mu^\nu, \quad \nu = LA, TA, \ldots. \tag{2}$$

C_μ^μ 描述同一支内的声子相互作用，而 C_μ^ν 描述不同种类之间的声子-声子相互作用。即使从数值计算的角度来看，要处理 C_μ 的完整表达式也是一项非常复杂的任务 [21]。因此，通常采用巴特纳加尔-格罗斯-克鲁克（BGK）近似对其进行简化

$$C_\mu = -\frac{f_\mu - f_\mu^{LE}}{\tau_\mu(\mathbf{q})},$$

这模拟了各声子支向共同局域平衡状态弛豫的过程，该状态由局域平衡温度 T_L 表征，且该温度对每个声子群体都相同。

局域平衡　平衡声子分布由玻色-爱因斯坦分布给出

$$f_\mu^{LE} = \left[e^{\hbar\omega_\mu/k_B T_L} - 1\right]^{-1}. \tag{3}$$

而函数 τ_μ 是声子弛豫时间。还可以添加额外的 BGK 项，以纳入不同支之间的相互作用。

如果我们知道声子分布 f_μ，就可以计算平均声子能量密度

$$W_\mu = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathcal{B}} \hbar\omega_\mu\, f_\mu\, d\mathbf{q}, \tag{4}$$

以及任意函数 $\psi(\mathbf{q})$ 的期望值

$$M_\psi = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathcal{B}} \psi(\mathbf{q})\, f_\mu\, d\mathbf{q},$$

例如，当取 $\psi(\mathbf{q}) = \hbar\omega_\mu \mathbf{v}_\mu$ 时，便可得到能流。

现代器件（例如双栅极MOSFET等电子器件，见 [19]）正日益微型化。这意味着其特征尺度与量子效应变得越来越显著时所对应的典型长度处于同一量级。因此，必须考虑量子效应，并以更精确的模型取代半经典声子输运方程。在各种可能的方法中，基于维格纳方程的方法具有一个优点：它是在相空间中表述的，因此我们可以类比半经典情形，推测解的特征。

大量文献致力于将维格纳方程应用于电荷输运（见 [2, 3, 4]），但其在声子输运中的应用却很有限。接下来的章节将构建一种基于维格纳准分布的输运模型，用于纳米结构中的声子输运。

3. 声子维格纳函数

我们推导的重点是用单粒子维格纳函数来表述单粒子量子统计态的动理学描述。现在简要回顾基本定义和性质。由标量粒子系综在 $\mathbb{R}^d$ 中的混合（统计）单粒子量子态，可用密度算符 $\hat{\rho}$ 描述；它是作用于 $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ 上的有界非负算符，且迹为 1。给定作用于 $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ 上的密度算符 $\hat{\rho}$，与之对应的维格纳函数 $w = w(x, \mathbf{q}), (x, \mathbf{q}) \in \mathbb{R}^{2d}$ 是 $\hat{\rho}$ 的逆魏尔量子化，

$$w = Op_\hbar^{-1}(\hat{\rho}). \tag{5}$$

我们回顾一下，相空间函数（一个符号） $a = a(x,\mathbf{q})$ 的魏尔量子化是算符 $Op_\hbar(a)$（厄米算符），其形式定义为 [22]

$$Op_\hbar(a)\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{x+y}{2}, \mathbf{q}\right)\psi(y)e^{i(x-y)\cdot\mathbf{q}/\hbar}dy\, d\mathbf{q} \tag{6}$$

对于任意 $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$。$\hat{\rho}$ 的逆量子化可写为.....的维格纳变换

$$w(x, \mathbf{q}) = \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x + \xi/2, x - \xi/2)e^{i\mathbf{q}\cdot\xi/\hbar}d\xi, \tag{7}$$

密度算符的核 $\rho(x,y)$。

时变声子维格纳函数 $g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q}\ t)$ $\mu = LA, TA, \ldots$ 的演化直接源自相应密度算符 $\hat{}\rho_\mu(t)$ 的演化，即源自冯·诺依曼方程或量子刘维尔方程

$$i\hbar\partial_t\hat{\rho}_\mu(t) = [\hat{H}_\mu, \hat{\rho}_\mu(t)] := \hat{H}_\mu\hat{\rho}_\mu(t) - \hat{\rho}_\mu(t)\hat{H}_\mu, \tag{8}$$

$\hat{}$其中， H_μ 表示第 μ种声子的哈密顿算符， $[\cdot,\cdot]$ 表示对易子。若 $h_\mu = Op_\hbar^{-1}$ $(\hat{}H_\mu)$ 是与 $\hat{}$ H_μ 关联的符号，则根据方程 (8)，我们可得到每种声子的维格纳方程

$$i\hbar\partial_t g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t) = \{h_\mu, g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\}_\# := h_\mu \# g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t) - g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\# h_\mu. \tag{9}$$

我们用符号 # 表示莫亚尔（或扭曲）乘积，它将算符乘积转换为符号层面的乘积，规则如下

$$a\#b = Op_\hbar^{-1}(Op_\hbar(a)Op_\hbar(b)), \tag{10}$$

对于任意一对符号 a和 b。这里，我们不讨论保证上述关系成立的解析问题，而仅指出：若两个算符属于希尔伯特–施密特类，即迹存在、非负且有界，则它们的乘积仍属于希尔伯特–施密特类，且莫亚尔演算定义良好。下文中，我们假设这些条件均成立。

在适当的正则性假设下（见 [23]），莫亚尔乘积具有如下形式上的半经典展开

$$a\#_\hbar b(\mathbf{x},\mathbf{q}) = \sum_{\alpha,\beta}\left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{|\alpha|+|\beta|}\frac{(-1)^{|\beta|}}{\alpha!\beta!}\partial_{\mathbf{x}}^{\alpha}\partial_{\mathbf{p}}^{\beta}a(\mathbf{x},\mathbf{q})\partial_{\mathbf{x}}^{\beta}\partial_{\mathbf{q}}^{\alpha}b(\mathbf{x},\mathbf{q}) \tag{11}$$

其中 $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$ 是一个多重指标， $|\alpha| = \sum_i \alpha_i$, $\alpha! = \prod_i \alpha_i!$ $\partial_{\mathbf{x}}^{\alpha} = \prod_i \partial_{x_i}^{\alpha_i}$， β 也类似。

展开式 (11) 可改写为

$$a\#_\hbar b(\mathbf{x},\mathbf{q}) = \sum_{n=0}^{\infty}\hbar^n a\#_n b \tag{12}$$

其中

$$a\#_n b(\mathbf{x},\mathbf{q}) = \sum_{\alpha,\beta,|\alpha|+|\beta|=n}\left(\frac{i}{2}\right)^n\frac{(-1)^{|\beta|}}{\alpha!\beta!}\partial_{\mathbf{x}}^{\alpha}\partial_{\mathbf{q}}^{\beta}a(\mathbf{x},\mathbf{q})\partial_{\mathbf{x}}^{\beta}\partial_{\mathbf{q}}^{\alpha}b(\mathbf{x},\mathbf{q}) \tag{13}$$

式 (13) 的前几项为

$$a\#_0 b = ab, \tag{14}$$

$$a\#_1 b = \frac{i}{2}(\nabla_{\mathbf{x}}a\cdot\nabla_{\mathbf{q}}b - \nabla_{\mathbf{q}}a\cdot\nabla_{\mathbf{x}}b), \tag{15}$$

$$a\#_2 b = -\frac{1}{8}(\nabla_{\mathbf{x}}^2 a : \nabla_{\mathbf{q}}^2 b - 2\nabla_{\mathbf{x}}\nabla_{\mathbf{q}}a : \nabla_{\mathbf{q}}\nabla_{\mathbf{x}}b + \nabla_{\mathbf{q}}^2 a : \nabla_{\mathbf{x}}^2 b). \tag{16}$$

其中， ∇^2 表示海森矩阵，: 表示张量缩并积。容易看出

$$a\#_n b(\mathbf{x},\mathbf{q}) = (-1)^n b\#_n a(\mathbf{x},\mathbf{q}),$$

也就是说，当 n 为偶数时，该运算 $\#_n$ 是可交换的；当 n 为奇数时，则是反交换的。

暂且忽略声子-声子相互作用，则每个声子支的哈密顿量符号为

$$h_\mu(\mathbf{q}) = \varepsilon_\mu(\mathbf{q}) \quad \mu = LA, TA, \ldots. \tag{17}$$

利用莫亚尔演算，可以展开前述维格纳方程右端的第二项。保留 $\hbar^2$的一阶项，得到

$$\partial_t g_\mu(t) + S[h_\mu]g_\mu(t) = 0, \quad \mu = LA, TA, \ldots, \tag{18}$$

其中[1]

$$S[h_\mu]g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t) := \mathbf{c}_\mu \cdot \nabla_{\mathbf{x}} g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t) - \frac{\hbar^2}{24}\frac{\partial^3_{\mathbf{q}} h_\mu(\mathbf{q})}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k}\frac{\partial^3_{\mathbf{x}} g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t)}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} + O(\hbar^4)) \quad \mu = LA, TA, \cdots. \tag{19}$$

前述方程仅描述弹道输运，并且只包含哈密顿量中的谐波贡献。为了同时描述支内和支间的声子-声子相互作用，必须加入一个额外的非谐项 H_{int} ，以涵盖哈密顿算符的高阶修正。这样便得到所谓的维格纳-玻尔兹曼方程

$$\partial_t g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t) + S[h_\mu]g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t) = C_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t), \quad \mu = LA, TA, \ldots, \tag{20}$$

在量子情形下， C_μ 的表达式相当复杂。关于半导体中的电子输运，感兴趣的读者可参阅 [24]。在某些条件下，采用与半经典情形相同形式的半经典碰撞算符是合理的 [4]。这里我们采用量子 BGK 方法，并将碰撞项建模为

$$C_\mu = -\frac{(g_\mu - g_\mu^{LE})}{\tau_\mu(\mathbf{q})}, \quad \mu = LA, TA, \ldots. \tag{21}$$

其中 g_μ^{LE} 现在是稍后将定义的局域平衡维格纳函数 .

方程（20）以及碰撞算子表达式（21）构成了声子输运的出发点。值得注意的是，对于能带采用爱因斯坦近似的光学声子，由于群速度为零，其输运方程在形式上与半经典情形相同。

[1]约定对重复指标从 1 到 d 求和。

通过显式写出冯·诺依曼方程，可以得到（20）的另一种推导（详情请参见 [18, 19] ）。由此可得

$$S[h_\mu]g_\mu(t) = \frac{i}{\hbar(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d_{\mathbf{x}'}\times\mathbb{R}^d_{\boldsymbol{\nu}}}\left[\varepsilon\left(\mathbf{q}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\nu},t\right)-\varepsilon\left(\mathbf{q}-\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\nu},t\right)\right]g_\mu(\mathbf{x}',\mathbf{q},t)e^{-i(\mathbf{x}'-\mathbf{x})\cdot\boldsymbol{\nu}}d\mathbf{x}'d\boldsymbol{\nu}, \tag{22}$$

其展开显然与莫亚尔演算相一致。

4. 声子矩方程

要获得方程 (20)-(21) 的解析解是一项艰巨的任务。因此，可行的方法是采用基于有限差分或有限元的数值求解 [2] ，或者采用随机求解，例如通过对半经典玻尔兹曼方程的蒙特卡罗方法进行适当修改而得到的求解方法 [3]。不过，也可以针对所关注的期望值采用矩方法，建立更简单的模型，即使这些模型只是近似的。事实上，众所周知，尽管维格纳函数并非正定，但它是实函数，而且算符的期望值在形式上可通过对相应的符号关于 $g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t)$ 求平均来获得。因此，对于任何足够规则的权函数 $\psi(\mathbf{q})$，我们引入如下简写

$$<\psi>(\mathbf{x},t) := \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\psi(\mathbf{q})g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t)d\mathbf{q}, \tag{23}$$

它表示关于声子动量 $\mathbf{q}$ 的偏平均 .

更一般地，如果 $a = a(\mathbf{x},\mathbf{q})$ 是光滑符号，则可以证明，厄米算符 $A = Op_\hbar(a)$ 的期望值满足[2]

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[A] = \mathrm{tr}(\hat{\rho}A) = \int_{\mathbb{R}^{2d}}\rho(\mathbf{x},\mathbf{y})k_A(\mathbf{x},\mathbf{y})d\mathbf{x}d\mathbf{y} &= \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^{2d}}a(\mathbf{x},\mathbf{q})g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t)d\mathbf{x}d\mathbf{q}\\ &= \int_{\mathbb{R}^d}<a>(\mathbf{x},t)d\mathbf{x},\end{aligned}$$

其中， $k_A(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 是 A 的核。

我们希望考虑一组数量最少且物理意义明确的矩。具体而言，我们将考虑每个支的声子能量和能流

$$W_\mu(\mathbf{x},t) =< h_\mu >(\mathbf{x},t), \quad \mathbf{Q}_\mu(\mathbf{x},t) =< h_\mu\mathbf{c}_\mu >(\mathbf{x},t). \tag{24}$$

注意，后者与热流直接相关。

[2]这里我们考虑的是一个固定的时刻。

通过将相对维格纳方程分别乘以 h_μ(q) 和 h_μ(q)c$_\mu$ ，并对 q 进行积分，可以得到 W_μ (x t) 和 Q$_\mu$(x t) 的演化方程

$$\begin{aligned}
&\partial_t W_\mu(\mathbf{x},t) + \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu(\mathbf{q}) S[h_\mu] g_\mu \, d\mathbf{q} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu(\mathbf{q}) C_\mu \, d\mathbf{q}, \\
&\partial_t \mathbf{Q}_\mu(\mathbf{x},t) + \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu(\mathbf{q}) \mathbf{c}_\mu S[h_\mu] g_\mu \, d\mathbf{q} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu(\mathbf{q}) \mathbf{c}_\mu C_\mu \, d\mathbf{q}.
\end{aligned} \qquad \mu = LA, TA, \ldots. \tag{25}$$

我们隐含地假设，这些积分至少在柯西主值意义下存在。为了从方程 (25) 中获得一些整体认识，我们形式上假设每个声子支均具有以下展开[3]

$$g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t) = g_\mu^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) + \hbar^2 g_\mu^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) + o(\hbar^2). \tag{26}$$

可以证明，至少在形式上 [6]，当 $\hbar \mapsto 0^+$时，维格纳方程可还原为半经典玻尔兹曼方程。因此， $g_\mu^{(0)}$(x, q t) 可视为半经典输运方程的解 f_μ 。相应地，我们写作

$$W_\mu = W_\mu^{(0)} + \hbar^2 W_\mu^{(2)} + o(\hbar^2), \quad \mathbf{Q}_\mu = \mathbf{Q}_\mu^{(0)} + \hbar^2 \mathbf{Q}_\mu^{(2)} + o(\hbar^2), \tag{27}$$

其中

$$\begin{aligned}
W_\mu^{(0)} &= \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu g_\mu^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) d\mathbf{q}, \quad W_\mu^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu g_\mu^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) d\mathbf{q}, \\
\mathbf{Q}_\mu^{(0)} &= \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu \mathbf{c}_\mu g_\mu^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) d\mathbf{q}, \quad \mathbf{Q}_\mu^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu \mathbf{c}_\mu g_\mu^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) d\mathbf{q}.
\end{aligned}$$

关于碰撞项的矩，只有在进行大幅简化后才能推导出解析表达式。类似于 BGK近似，若考虑一个与 q 无关的平均弛豫时间，则可将方程 (25) 右端按 $\hbar^2$ 的一阶项展开，写成弛豫时间项

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu(\mathbf{q}) C_\mu \, d\mathbf{q} &= -\frac{W_\mu - W_\mu^{LE}}{\tau_\mu^W} = -\frac{W_\mu^{(0)} - W_\mu^{(0)LE}}{\tau_\mu^W} - \hbar^2 \frac{W_\mu^{(2)} - W_\mu^{(2)LE}}{\tau_\mu^W} + o(\hbar^2), \\
\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu(\mathbf{q}) \mathbf{c}_\mu C_\mu \, d\mathbf{q} &= -\frac{\mathbf{Q}_\mu}{\tau_\mu^{\mathbf{Q}}} = -\frac{\mathbf{Q}_\mu^{(0)} + \hbar^2 \mathbf{Q}_\mu^{(2)}}{\tau_\mu^{\mathbf{Q}}} + o(\hbar^2),
\end{aligned}$$

其中

$$W_\mu^{LE} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h_\mu(\mathbf{q}) g_\mu^{LE} \, d\mathbf{q}.$$

请注意，在计算能流方程的产生项时，利用了平衡维格纳函数的各向同性，因此 Q$_\mu^{LE}$为零。

[3]系数 根据之前的莫亚尔展开，假设 $\hbar$ 中的奇次幂为零 .

假设能量弛豫时间和能流弛豫时间 τ_μ^W 和 $\tau_\mu^{\mathbf{Q}}$ 分别取决于相对分支的温度，该温度将在下一节中定义。

Alt综上，所得模型由以下流体型方程组成

$$\begin{cases} \partial_t W_\mu + \nabla_{\mathbf{x}} \left[\mathbf{Q}_\mu - \dfrac{\hbar^2}{24} \partial^2 \mathbf{T}_\mu \right] = -\dfrac{W_\mu^{(0)} - W_\mu^{(0)LE}}{\tau_\mu^W} - \hbar^2 \dfrac{W_\mu^{(2)} - W_\mu^{(2)LE}}{\tau_\mu^W} + o(\hbar^2) \\ \partial_t \mathbf{Q}_\mu + \nabla_{\mathbf{x}} \left[\mathbf{J}_\mu - \dfrac{\hbar^2}{24} \partial^2 \mathbf{U}_\mu \right] = -\dfrac{\mathbf{Q}_\mu^{(0)} + \hbar^2 \mathbf{Q}_\mu^{(2)}}{\tau_\mu^{\mathbf{Q}}} + o(\hbar^2), \end{cases} \tag{28}$$

其中 $\mathbf{J}^\mu = \mathbf{J}_\mu^{(0)} + \hbar^2 \mathbf{J}_\mu^{(2)}$为

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_\mu^{(0)} &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{c}_\mu \otimes \mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q}) g_\mu^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{q}, t) d\mathbf{q}, \\ \mathbf{J}_\mu^{(2)} &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{c}_\mu \otimes \mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q}) g_\mu^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{q}, t) d\mathbf{q}, \end{aligned}$$

且完全对称张量 $\mathbf{T}^\mu$ 和 $\mathbf{U}^\mu$ 的分量为

$$\begin{aligned} (\mathbf{T}_{ijk})_\mu &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} h_\mu \frac{\partial^3 h_\mu(\mathbf{q})}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k} g_\mu^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{q}, t) d\mathbf{q}, \\ (\mathbf{U}_{ijkr})_\mu &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} (\mathbf{c}_\mu)_r h_\mu(\mathbf{q}) \frac{\partial^3 h_\mu(\mathbf{q})}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k} g_\mu^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{q}, t) d\mathbf{q}. \end{aligned}$$

若按 $\hbar^2$ 的零阶项和一阶项展开，演化方程为

$$\partial_t W_\mu^{(0)} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{Q}_\mu^{(0)} = -\frac{W_\mu^{(0)} - W_\mu^{(0)LE}}{\tau_\mu^W} \tag{29}$$

$$\begin{aligned} &\partial_t W_\mu^{(2)} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{Q}_\mu^{(2)} + \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{h_\mu(\mathbf{q})}{24} g_\mu^{(0)} \frac{\partial^3}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k} h_\mu(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \\ &= -\frac{W_\mu^{(2)} - W_\mu^{(2)LE}}{\tau_\mu^W}, \end{aligned} \tag{30}$$

$$\partial_t \mathbf{Q}_\mu^{(0)} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{J}_\mu^{(0)} = -\frac{\mathbf{Q}_\mu^{(0)}}{\tau_\mu^{\mathbf{Q}}}, \tag{31}$$

$$\partial_t \mathbf{Q}_\mu^{(2)} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{J}_\mu^{(2)} + \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{c}_s \frac{h_\mu(\mathbf{q})}{24} g_\mu^{(0)} \frac{\partial^3}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k} h_\mu(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{Q}_\mu^{(2)}}{\tau_\mu^{\mathbf{Q}}}. \tag{32}$$

零阶方程是已在多篇论文中研究过的模型 [1, 7]，这些论文证明它是一个双曲型守恒律系统。因此，能量扰动的有限传播速度得以保证，从而克服经典理论中众所周知的悖论

傅里叶热流定律。然而， $\hbar^2$ 中的一阶修正引入了色散项，而且在量子区域中，热效应的有限传播速度似乎无法得到满足。另一方面，这并不令人意外，因为量子演化方程的非局域性可能导致能量传播速度不受限。

5. 用于闭合关系的量子最大熵原理

演化方程 (29)-(32) 并未构成一个闭合的平衡律系统。若假设能量 W_μ 和能流 $\mathbf{Q}_\mu$ 为主场，为了得到一组闭合方程，我们需要将附加场 $\mathbf{J}_\mu$、$\mathbf{T}_\mu$ 和 $\mathbf{U}_\mu$ 表示为 W_μ 和 $\mathbf{Q}_\mu$的函数。在半经典情形中，一种成功的方法是基于最大熵原理（MEP）的方法（完整综述另见 [19]）；该方法源自 Jaynes 的开创性论文 [12, 13]，Jaynes 也提出了将此方法推广至量子情形的途径。量子情形下的最大熵原理已成为多篇论文的研究主题 [8, 14, 15, 16, 17]，并有多种应用，例如石墨烯中的电荷输运 [1, 18]。本文将采用这种方法研究声子输运。

起点是所研究量子系统的熵。在[18] 中，作者采用了冯·诺依曼熵，但它并未考虑统计方面。因此，我们将玻色子的经典熵推广形式作为熵。引入算符

$$s(\hat{\rho}_\mu) = -k_B[\hat{\rho}_\mu \ln \hat{\rho}_\mu - (1+\hat{\rho}_\mu)\ln(1+\hat{\rho}_\mu)], \tag{33}$$

其含义应根据泛函演算来理解。这里， k_B 是玻尔兹曼常数。第 μ个声子支的熵为

$$S(\hat{\rho}_\mu) = \mathrm{Tr}\{s(\hat{\rho}_\mu)\}$$

这可以视为量子玻色–爱因斯坦熵。

根据最大熵原理，我们用$\hat{}\rho_\mu^{MEP}$估计$\hat{}\rho_\mu$；$\hat{}\rho_\mu^{MEP}$是通过在保持某些期望值不变的约束条件下，使 $S(\hat{}\rho_\mu)$最大化而得到的。在半经典点的情形下，最大化熵时需保持我们选作基本场变量的各个矩的值不变

$$(W_\mu(\mathbf{x},t), \mathbf{Q}_\mu(\mathbf{x},t)) = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} \boldsymbol{\psi}_\mu(\mathbf{q}) g_\mu(\mathbf{x},\mathbf{q},t)d\mathbf{q} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} \boldsymbol{\psi}_\mu(\mathbf{q}) g_\mu^{MEP}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)d\mathbf{q}, \tag{34}$$

其中

$$\boldsymbol{\psi}_\mu(\mathbf{q}) = (h_\mu(\mathbf{q}), \mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q})) \tag{35}$$

是权函数的向量，而 g_μ^{MEP}是与 $\hat{}\rho_\mu^{MEP}$相关联的维格纳函数。在前述关系中，时间 t 和位置 $\mathbf{x}$ 必须视为固定值。

MEP 的量子表述以期望值的形式给出

$$E_1(t) = \mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}_\mu Op_\hbar(h_\mu(\mathbf{q}))\right\}(t), \quad \mathbf{E}_2(t) = \mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}_\mu Op_\hbar(\mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q}))\right\}(t),$$

如下：对于固定的 t

$$\hat{\rho}_\mu^{MEP} = \text{argument max}\, S(\hat{\rho}_\mu) \tag{36}$$
$$\text{under the constraints}$$
$$\mathrm{tr}\{\hat{\rho}_\mu^{MEP} Op_\hbar(h_\mu(\mathbf{q}))\} = E_1(t), \quad \mathrm{tr}\{\hat{\rho}_\mu^{MEP} Op_\hbar(\mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q}))\} = \mathbf{E}_2(t), \tag{37}$$

在 $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ 上正定、迹为一且存在上述期望值的希尔伯特–施密特算子空间中。请注意，我们分别对每个声子支进行熵最大化。换言之，我们要求熵具有可加性。

如果我们引入拉格朗日乘子向量

$$\boldsymbol{\eta}_\mu = (\eta_{0\mu}(\mathbf{x}, t), \boldsymbol{\eta}_{1\mu}(\mathbf{x}, t)), \tag{38}$$

矩向量

$$\mathbf{m}[\rho_\mu](\mathbf{x}, \mathbf{t}) := \mathbf{m}_\mu(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \boldsymbol{\psi}_\mu(\mathbf{q}) g_\mu(\mathbf{x}, \mathbf{q}, t) d\mathbf{q}, \tag{39}$$

以及必须视为已知的矩向量

$$\mathbf{M}_\mu(\mathbf{x}, t) := \left(W_\mu(\mathbf{x}, t), \mathbf{Q}_\mu(\mathbf{x}, t)\right), \tag{40}$$

约束优化问题 (36)-(37) 可重新表述为关于拉格朗日函数的鞍点问题

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\mu(\hat{\rho}_\mu, \boldsymbol{\eta}_\mu) &= S(\hat{\rho}_\mu) - \int_{\mathbb{R}^d} \boldsymbol{\eta}_\mu \cdot (\mathbf{m}_\mu(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M}_\mu(\mathbf{x}, t))\, d\mathbf{x} \\ &= S(\hat{\rho}_\mu) - \mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}_\mu Op_\hbar(\boldsymbol{\eta}_\mu \cdot h_\mu(\mathbf{q}), \mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q}))\right\} + \int_{\mathbb{R}^d} \boldsymbol{\eta}_\mu \cdot \mathbf{M}_\mu(\mathbf{x}, t)\, d\mathbf{x} \end{aligned} \tag{41}$$

在可容许的 $\hat{\rho}_\mu$ 和光滑函数 $\boldsymbol{\eta}_\mu$ 的空间中。

若拉格朗日函数 $\mathcal{L}_\mu(\hat{\rho}_\mu, \boldsymbol{\eta}_\mu)$ 关于 $\hat{\rho}_\mu$ 是 Gâteaux 可微的，则一阶最优性条件要求

$$\delta\mathcal{L}_\mu(\hat{\rho}_\mu, \boldsymbol{\eta}_\mu)(\delta\hat{\rho}) = 0$$

对于定义在 $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ 上的每个希尔伯特–施密特算子 $\delta\hat{\rho}$，其为正、迹为一，且前述期望值存在。

一阶 Gâteaux 导数的存在性是以下引理的推论（证明见 [25]；离散谱情形下的初等证明见 [14]）。

引理 1. 若 $r(x)$ 是定义在 $\mathbb{R}^+$ 上的连续可微递增函数，则 $\mathrm{tr}\{r(\hat{\rho})\}$ 在 $L^2(\mathbb{R}^d,\mathbb{C})$ 上的厄米希尔伯特–施密特正算子类中是 Gâteaux 可微的。沿 $\delta\rho$ 的 Gâteaux 导数为

$$\delta tr\{r(\hat{\rho})\}(\delta\hat{\rho}) = tr\{r'(\hat{\rho})\delta\hat{\rho}\}\,. \tag{42}$$

无约束最小化问题 (36)-(37) 的极值条件与半经典情形类似，如下列引理所示（见 [14]）。

引理 2. 最小化问题 (36)-(37) 的一阶最优性条件等价于

$$\hat{\rho}_\mu = (s')^{-1}(Op_\hbar(\boldsymbol{\eta}_\mu \cdot \boldsymbol{\psi}_\mu)) \tag{43}$$

其中 $(s')^{-1}$ 是 s的一阶导数的反函数。

证明。由 应用引理 1，可得拉格朗日函数的 Gâteaux 导数为

$$\delta\mathcal{L}_\mu(\hat{\rho}_\mu,\boldsymbol{\eta}_\mu)(\delta\hat{\rho}) = \mathrm{tr}\left\{\left(s'(\hat{\rho}_\mu) - Op_\hbar(\boldsymbol{\eta}_\mu\cdot\boldsymbol{\psi}_\mu)\right)\delta\hat{\rho}\right\}$$

$\forall\delta\hat{}\rho$ 是$L^2(\mathbb{R}^d,\mathbb{C})$上厄米希尔伯特–施密特正算子类中的扰动。这意味着

$$s'(\hat{\rho}_\mu) = Op_\hbar(\boldsymbol{\eta}_\mu\cdot\boldsymbol{\psi}_\mu).$$

□

由于函数 $s(x)$ 是凹函数， $s'(x)$ 可逆。具体而言，我们有

$$(s')^{-1}(z) = \frac{1}{e^{z/k_B}-1}$$

满足一阶最优性条件的算符为

$$\hat{\rho}^*_\mu = (s')^{-1}(Op_\hbar(\boldsymbol{\eta}_\mu\cdot\boldsymbol{\psi}_\mu)) = \frac{1}{e^{Op_\hbar(\boldsymbol{\eta}_\mu\cdot\boldsymbol{\psi}_\mu)}-1}. \tag{44}$$

此外，这样的算符是拉格朗日函数的最大值点。 □

现在，为了完成这一方案，我们必须通过求解约束条件，在光滑函数中确定拉格朗日乘子 $\boldsymbol{\eta}_\mu$

$$\mathrm{tr}\left\{\hat{\rho}_\mu Op_\hbar(\boldsymbol{\eta}_\mu\cdot(h_\mu(\mathbf{q}),\mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q}))\right\} - \int_{\mathbb{R}^d}\boldsymbol{\eta}_\mu\cdot\mathbf{M}_\mu(\mathbf{x},t)\,d\mathbf{x} = 0. \tag{45}$$

如果这样的 方程有解 $\boldsymbol{\eta}^*_\mu$，那么最大熵原理密度算子可写为 s

$$\hat{\rho}^{MEP}_\mu = \frac{1}{\exp\left[Op_\hbar\left(\eta^*_{0\mu}(\mathbf{x},t)h_\mu(\mathbf{q}) + \boldsymbol{\eta}^*_{1\mu}(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q})\right)\right]-1}, \tag{46}$$

w这里我们对拉格朗日乘子进行了重新缩放，其中包括因子 $1/k_B$。

要确定方程 (45) 在什么条件下有解，是一项非常困难的任务。即使在半经典情形下，也有一些例子（见 [26]）表明，某些矩集合不可能是 MEP 分布的矩。我们将直接求出解，至少求到 $\hbar^2$ 的一阶项。

确定 MEP 密度函数后，MEP 维格纳函数为

$$g_\mu^{MEP}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) = Op_\hbar^{-1}(\hat{\rho}_\mu^{MEP})$$

通过将 g_μ 替换为 g_μ^{MEP} 来计算附加场，即可利用该函数得到所需的闭合关系。

我们指出，约束条件 (45) 可以更方便地表示为

$$\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^2 d} \boldsymbol{\eta}_\mu \cdot \boldsymbol{\psi}_\mu(\mathbf{x},t) g_\mu^{MEP}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\, d\mathbf{q}\, d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^d} \boldsymbol{\eta}_\mu \cdot \mathbf{M}_\mu(\mathbf{x},t)\, d\mathbf{x} = 0$$

并且我们 将要求满足更强的条件，这与半经典情形类似:

$$\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} \boldsymbol{\psi}_\mu(\mathbf{x},t) g_\mu^{MEP}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\, d\mathbf{q} = \mathbf{M}_\mu(\mathbf{x},t),$$

其中，拉格朗日乘子通过 g_μ^{MEP}(x, q t) 引入。

5.1. 拉格朗日乘子的确定

为了简化记号，本节中我们考虑单支，并省略维格纳函数中的指标 μ 。我们形式上寻找关于 $\hbar$ 的幂级数解

$$g^{MEP} = g_0^{MEP} + \hbar g_1^{MEP} + \hbar^2 g_2^{MEP} + ... \tag{47}$$

首先不考虑拉格朗日乘子对 $\hbar$ 的依赖。

当然，根据魏尔量子化的性质， g_0^{MEP} 等于其半经典对应物 [22]

$$g_0^{MEP} = \frac{1}{\exp\left[\eta_0(\mathbf{x},t)h(\mathbf{q}) + \boldsymbol{\eta}_1(\mathbf{x},t)\cdot \mathbf{c}h(\mathbf{q})\right] - 1}$$

为了确定高阶项 g_k^{MEP}、 $k \geq 1$，给定一个符号 a(x, q)，我们引入所谓的量子指数 $Exp(a)$，定义如下

$$Exp(a) = Op_\hbar^{-1}[exp(Op_\hbar(a))]$$

它可以展开为

$$Exp(a) = Exp_0(a) + \hbar Exp_1(a) + \hbar^2 Exp_2(a) + ... \tag{48}$$

命题 设 a(x, p) 为一个光滑符号，则下列展开式成立

$$\begin{aligned} Exp(a) = \exp(a) - \frac{\hbar^2}{8}\exp(a)\Bigg(&\frac{\partial^2 a}{\partial x_i \partial x_j}\frac{\partial^2 a}{\partial p_i \partial p_j} - \frac{\partial^2 a}{\partial x_i \partial p_j}\frac{\partial^2 a}{\partial p_i \partial x_j} + \frac{1}{3}\frac{\partial^2 a}{\partial x_i \partial x_j}\frac{\partial a}{\partial p_i}\frac{\partial a}{\partial p_j} \\ &- \frac{2}{3}\frac{\partial^2 a}{\partial x_i \partial p_j}\frac{\partial a}{\partial p_i}\frac{\partial a}{\partial x_j} + \frac{1}{3}\frac{\partial^2 a}{\partial p_i \partial p_j}\frac{\partial a}{\partial x_i}\frac{\partial a}{\partial x_j}\Bigg) + O(\hbar^4), \end{aligned} \tag{49}$$

其中使用了爱因斯坦求和约定。 □

证明可参见例如 [14]。

利用 [16], 中证明的结果，我们有

$$g_{2n+1}^{MEP} = 0, \quad n \geq 0, \tag{50a}$$

$$g_{2n}^{MEP} = -\sum_{m=0}^{n-1} \sum_{k+l+m=n} \frac{Exp_{2k}(\xi)\#_{2l} g_{2m}^{MEP}}{e^{\xi}-1}, \quad n \geq 1 \tag{50b}$$

其中 $\#_{2l}$ 是莫亚尔乘积展开中的偶数阶项，并且

$$\xi = \eta_{0\mu}(\mathbf{x},t)h(\mathbf{q}) + \boldsymbol{\eta}_1(\mathbf{x},t)\cdot \mathbf{c}h(\mathbf{q}).$$

特别地

$$g_1^{MEP} = 0$$

and

$$\begin{aligned} g_2^{MEP} &= -\frac{1}{8}\frac{e^{\xi}}{(e^{\xi}-1)^3}\left[(e^{\xi}+1)\left(\frac{\partial^2\xi}{\partial x_i\partial x_j}\frac{\partial^2\xi}{\partial q_i\partial q_j} - \frac{\partial^2\xi}{\partial x_i\partial q_j}\frac{\partial^2\xi}{\partial q_i\partial x_j}\right)\right. \\ &\left. -\frac{(e^{2\xi}+4e^{\xi}+1)}{3(e^{\xi}-1)}\left(\frac{\partial^2\xi}{\partial x_i\partial x_j}\frac{\partial\xi}{\partial q_i}\frac{\partial\xi}{\partial q_j} - 2\frac{\partial^2\xi}{\partial x_i\partial q_j}\frac{\partial\xi}{\partial q_i}\frac{\partial\xi}{\partial x_j} + \frac{\partial^2\xi}{\partial q_i\partial q_j}\frac{\partial\xi}{\partial x_i}\frac{\partial\xi}{\partial x_j}\right)\right] \end{aligned}$$

因此，保留到 $\hbar^2$ 的一阶项，我们有

$$g_{\mu}^{MEP} = g_0^{MEP} + \hbar^2 g_2^{MEP}.$$

每个声子支的约束条件为

$$W = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\frac{h(\mathbf{q})}{e^{\xi}-1}d\mathbf{q} + \hbar^2\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} h(\mathbf{q})g_2^{MEP}d\mathbf{q}, \tag{51}$$

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\frac{\mathbf{c}h(\mathbf{q})}{e^{\xi}-1}d\mathbf{q} + \hbar^2\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{c}h(\mathbf{q})g_2^{MEP}d\mathbf{q}. \tag{52}$$

前面的方程构成了一个关于拉格朗日乘子的非线性偏微分方程组，其解析解似乎很难求得。事实上，情况甚至更加棘手，因为在数值格式中，每个时间步都需要对约束条件进行求逆。

一种可行的策略是将拉格朗日乘子用作场变量，把演化方程 (28) 改写为如下形式

$$\nabla_{\boldsymbol{\eta}} W\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\eta}^T + \sum_{i=1}^{d}\left[\nabla_{\boldsymbol{\eta}} Q_i\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{\eta}^T - \frac{\hbar^2}{24}\nabla_{\boldsymbol{\eta}}\left(\nabla_{\mathbf{x}}\partial_{\mathbf{x}}^2\mathbf{T}\right)\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{\eta}^T\right] = -\frac{W-W^{LE}}{\tau^W}, \tag{53}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\eta}} Q_i\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\eta}^T + \sum_{j=1}^{d}\left[\nabla_{\boldsymbol{\eta}}\mathbf{J}\frac{\partial}{\partial x_j}\boldsymbol{\eta}^T - \frac{\hbar^2}{24}\nabla_{\boldsymbol{\eta}}\left(\partial_{\mathbf{x}}^2\mathbf{U}\right)\frac{\partial}{\partial x_j}\boldsymbol{\eta}^T\right] = -\frac{Q_i}{\tau^{\mathbf{Q}}}, \tag{54}$$

由此得到一个高度非线性偏微分方程组。注意， $\nabla_{\boldsymbol{\eta}} W$ 和 $\nabla_{\boldsymbol{\eta}} Q_i$ 均包含 $\boldsymbol{\eta}$ 的空间导数。

通过展开拉格朗日乘子，可以进一步简化：

$$\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}^{(0)} + \hbar^2 \boldsymbol{\eta}^{(2)} + o(\hbar^2).$$

因此，基本场也按 $\hbar^2$ 展开

$$W = W^{(0)} + \hbar^2 W^{(2)} + o(\hbar^2), \quad \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{(0)} + \hbar^2 \mathbf{Q}^{(2)} + o(\hbar^2)$$

其中

$$\begin{aligned}
W^{(0)} &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{h(\mathbf{q})}{e^{\xi^{(0)}} - 1} d\mathbf{q}, \\
W^{(2)} &= -\frac{1}{(2\pi)^d} \boldsymbol{\eta}^{(2)} \cdot \int_{\mathbb{R}^d} e^{\xi^{(0)}} \frac{h(\mathbf{q}) \boldsymbol{\psi}}{\left(e^{\xi^{(0)}} - 1\right)^2} d\mathbf{q} + \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} h(\mathbf{q}) g_2^{MEP}(\boldsymbol{\eta}^{(0)}) d\mathbf{q}, \\
Q_i^{(0)} &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{c_i h(\mathbf{q})}{e^{\xi^{(0)}} - 1} d\mathbf{q}, \\
Q_i^{(2)} &= -\frac{1}{(2\pi)^d} \boldsymbol{\eta}^{(0)} \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \frac{c_i \boldsymbol{\psi} e^{\xi^{(0)}} h(\mathbf{q})}{(e^{\xi^{(0)}} - 1)^2} d\mathbf{q} + \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} c_i h(\mathbf{q}) g_2^{MEP}(\boldsymbol{\eta}^{(0)}) d\mathbf{q},
\end{aligned}$$

且 $\xi^{(0)} = \boldsymbol{\eta}^{(0)} \cdot \boldsymbol{\psi}$。

平衡方程变为

$$\nabla_{\boldsymbol{\eta}^{(0)}} W^{(0)} \frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\eta}^{(0)})^T + \sum_{i=1}^{d} \left[\nabla_{\boldsymbol{\eta}^{(0)}} \mathbf{Q}^{(0)} \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{\eta}^{(0)})^T \right] = -\frac{W^{(0)} - W^{(0)LE}}{\tau^W} \tag{55}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\eta}^{(0)}} Q_i^{(0)} \frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{\eta}^{(0)})^T + \sum_{i=1}^{d} \left[\nabla_{\boldsymbol{\eta}^{(0)}} \mathbf{J}^{(0)} \frac{\partial}{\partial x_j} (\boldsymbol{\eta}^{(0)})^T \right] = -\frac{Q_i^{(0)}}{\tau^{\mathbf{Q}}}, \tag{56}$$

$$\begin{aligned}
&\partial_t W^{(2)} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{Q}^{(2)} + \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{h(\mathbf{q})}{24} g_0^{MEP}(\boldsymbol{\eta}^{(0)}) \frac{\partial^3}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k} h(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \\
&= -\frac{W^{(2)} - W^{(2)LE}}{\tau^W},
\end{aligned} \tag{57}$$

$$\partial_t \mathbf{Q}^{(2)} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{J}^{(2)} + \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{c} \frac{h(\mathbf{q})}{24} g_0^{MEP}(\boldsymbol{\eta}^{(0)}) \frac{\partial^3}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k} h(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{Q}^{(2)}}{\tau^{\mathbf{Q}}}. \tag{58}$$

我们注意到，方程 (55)–(56) 是解耦的。求解这些方程后，可以由 (57)–(58) 求得拉格朗日乘子的二阶项；这两个方程构成关于 $\boldsymbol{\eta}^{(2)}$的线性方程组。从计算角度来看，这相当有利

命题1. 在 $\hbar^2$ 的零阶下，映射 $\boldsymbol{\eta} \mapsto \mathbf{M}(\boldsymbol{\eta})$ 局部可逆。

命题2. 方程 (55)-(56) 构成一个平衡律的对称双曲系统。

证明见 [19]。

6. 局域平衡温度与热导率

非平衡温度这一概念是一个微妙的话题，至今仍存在争议。在半导体中的电荷输运问题中，声子通常被视为热浴，并且在某些合理假设下，可以假定电子与热浴处于热平衡状态。一般而言，如果必须将声子的动力学纳入考虑，就不存在用于声子的热浴，除非考虑一个恒温系统。因此，我们需要为整个声子系统引入局域平衡温度。

在统计力学中，将温度概念推广到非平衡态的一种最合理且广为采用的方法，是将其与能量约束对应的拉格朗日乘子联系起来。对于石墨烯中的声子输运， [1] 采用了基于拉格朗日乘子的方法（感兴趣的读者可参阅该文了解详情）。这里回顾其主要特点。在平衡态下，声子温度与相应的拉格朗日乘子之间的关系为

$$k_B\, T_\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{\eta_{0,\mu}(\mathbf{x})} = \frac{1}{\eta^{(0)}_{0,\mu}(\mathbf{x})} - \hbar^2 \frac{\eta^{(2)}_{0,\mu}(\mathbf{x})}{(\eta^{(0)}_{0,\mu}(\mathbf{x}))^2} + o(\hbar^2).$$

如果假设这些关系在非平衡状态下也成立，则可用拉格朗日乘子如下定义局部温度。

定义 1. 两个或更多声子支组成的系统的局部温度为$T_{LE} := \frac{1}{k_B \eta_0^{LE}(\mathbf{x})}$, 其中， $\eta_0^{LE}(\mathbf{x})$ 是一个共同的~~拉格朗~~日乘子；如果所考虑各支的占据数处于与其总能量密度相对应的局域热力学平衡态，则它们具有这一乘子，即:

$$W(\eta_0^{LE}(\mathbf{x})) := \sum_\mu W_\mu(\eta_{0,\mu}(\mathbf{x})) = \sum_\mu W_\mu(\eta_0^{LE}(\mathbf{x})), \tag{59}$$

其中求和遍及所有声子支。

¯在全局平衡时，温度为常数 $T = \bar{T}$ ，维格纳函数则化简为玻色–爱因斯坦分布

$$g_\mu = \left[e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B\bar{T}} - 1 \right]^{-1}. \tag{60}$$

且每个声子支的温度都相同。

考虑温度的一个小扰动 $\delta T(\mathbf{x})$，即$\delta(\mathbf{x})/\bar{T} \ll 1$。我们可以将 g_μ^{MEP}按 $\delta(\mathbf{x})/\bar{T}$ 的幂次展开

$$\begin{aligned} g_\mu^{MEP} \;=\; & \left[e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B\bar{T}} - 1 \right]^{-1} + \left[e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B\bar{T}} - 1 \right]^{-2} e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B\bar{T}} \frac{h_\mu(\mathbf{q})}{k_B\bar{T}} \frac{\delta T(\mathbf{x})}{\bar{T}} \\ & + \hbar^2 \bar{T} \frac{\partial g^{MEP}_{2,\mu}(\bar{T})}{\partial T} \frac{\delta T}{\bar{T}} + o\left(\hbar^2 \frac{\delta T}{\bar{T}} \right). \end{aligned}$$

我们注意到，通常弛豫能量弛豫时间远长于能流弛豫时间，即 $\tau^{\mathbf{Q}} \ll \tau^{W}$。在远长于$\tau^{\mathbf{Q}}$的长时间尺度下，我们得到

$$\mathbf{Q}_{\mu}=-\tau^{\mathbf{Q}}\left[\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{J}_{\mu}+\frac{\hbar^{2}}{(2\pi)^{d}}\frac{\partial^{3}}{\partial x_{i}\partial x_{j}\partial x_{k}}\int_{\mathbb{R}^{d}}\mathbf{c}\frac{h(\mathbf{q})}{24}g_{0,\mu}^{MEP}(\boldsymbol{\eta}^{(0)})\frac{\partial^{3}}{\partial q_{i}\partial q_{j}\partial q_{k}}h(\mathbf{q})d\mathbf{q}\right]. \tag{61}$$

如前所述，拉格朗日乘子与基本场之间的关系几乎无法解析地求逆，因此需要采用数值方法。然而，如果系统状态与平衡态相差不大，就可以对拉格朗日乘子在平衡态附近进行展开。在平衡态下， g^{MEP}是各向同性的，因此 $\boldsymbol{\eta}_{1}^{equil}=\mathbf{0}$ ，而在平衡态附近， $\boldsymbol{\eta}_{1}$ 仍然很小。因此，对于偏离热力学平衡态不大的情况，展开

$$g_{\mu}^{(0)MEP}=\left[e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}-1\right]^{-1}-\left[e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}-1\right]^{-2}e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}h_{\mu}(\mathbf{q})\boldsymbol{\eta}_{1,\mu}\cdot\mathbf{c}_{\mu}+O(\hbar^{2}).$$

成立。

将其代入（61），可得关于 $\hbar^2$的一阶近似

$$\begin{aligned}&\mathbf{Q}_{\mu}=-\tau^{\mathbf{Q}}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{J}_{\mu}\\&-\tau^{\mathbf{Q}}\frac{\hbar^{2}}{(2\pi)^{d}}\frac{\partial^{3}}{\partial x_{i}\partial x_{j}\partial x_{k}}\int_{\mathbb{R}^{d}}\mathbf{c}\frac{h_{\mu}(\mathbf{q})}{24}\left[e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}-1\right]^{-2}e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}h_{\mu}(\mathbf{q})\boldsymbol{\eta}_{1,\mu}\cdot\mathbf{c}\frac{\partial^{3}}{\partial q_{i}\partial q_{j}\partial q_{k}}h_{\mu}(\mathbf{q})d\mathbf{q}.\end{aligned}$$

特别地，在零阶近似下，我们有

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}_{\mu}^{(0)}=-\tau^{\mathbf{Q}}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{J}_{\mu}^{(0)}&=-\frac{\tau}{(2\pi)^{d}}\nabla_{\mathbf{x}}\int_{\mathbb{R}^{d}}\mathbf{c}_{\mu}\otimes\mathbf{c}_{\mu}h_{\mu}(\mathbf{q})g_{\mu}^{(0)MEP}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)d\mathbf{q}.\\&=-\frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^{d}}\nabla_{\mathbf{x}}\int_{\mathbb{R}^{d}}\mathbf{c}_{\mu}\otimes\mathbf{c}_{\mu}h_{\mu}(\mathbf{q})\left[e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}-1\right]^{-1}d\mathbf{q}\\&=-\frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^{d}}\int_{\mathbb{R}^{d}}\mathbf{c}_{\mu}\otimes\mathbf{c}_{\mu}h_{\mu}(\mathbf{q})\frac{\partial}{\partial T}\left[e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}-1\right]^{-1}d\mathbf{q}\,\nabla_{\mathbf{x}}T_{\mu}\\&=-\frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^{d}k_{B}T^{2}}\int_{\mathbb{R}^{d}}\mathbf{c}_{\mu}\otimes\mathbf{c}_{\mu}h_{\mu}^{2}(\mathbf{q})\frac{e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}}{\left(e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}-1\right)^{2}}d\mathbf{q}\,\nabla_{\mathbf{x}}T_{\mu}\end{aligned}$$

这可以写成傅里叶形式

$$\mathbf{Q}_{\mu}^{(0)}=-\mathbf{K}_{\mu}^{(0)}\nabla_{\mathbf{x}}T_{\mu}$$

热导率张量为

$$\mathbf{K}_{\mu}^{(0)}=\frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^{d}k_{B}T^{2}}\int_{\mathbb{R}^{d}}\mathbf{c}_{\mu}\otimes\mathbf{c}_{\mu}h_{\mu}^{2}(\mathbf{q})\frac{e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}}{\left(e^{h_{\mu}(\mathbf{q})/k_{B}T}-1\right)^{2}}d\mathbf{q}.$$

显然，$\mathbf{K}^{\mu}$ 是正定的。

注意， $\forall \mathbf{n} \in S^d$

$$\int_{S^d} n_{i_1} n_{i_2} \cdots n_{i_r} d\Omega = 0 \quad \text{if } r \quad \text{odd},$$

S^d 是 $\mathbb{R}^d$中的单位球面。因此，若 $h_\mu(\mathbf{q})$是各向同性的，$\mathbf{K}_\mu$ 也各向同性

$$\mathbf{K}_\mu^{(0)} = \frac{1}{d} k^{(0)} \mathbf{I},$$

其中 $\mathbf{I}$ 是 d 阶单位矩阵， $k^{(0)}$ 是零阶迹

$$k^{(0)} = \frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^d k_B T^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\mathbf{c}_\mu|^2 h_\mu^2(\mathbf{q}) \frac{e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B T}}{\left(e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B T} - 1\right)^2} d\mathbf{q}.$$

$\hbar^2$ 中的二阶修正为

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}_\mu^{(2)} &= -\frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^d} \nabla_{\mathbf{x}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{c}_\mu \otimes \mathbf{c}_\mu h_\mu(\mathbf{q}) g_\mu^{(2)}(\boldsymbol{\eta}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{q}, t)) d\mathbf{q} \\
&- \frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^d} \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{c} \frac{h_\mu(\mathbf{q})}{24} \left[e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B T} - 1\right]^{-2} e^{h_\mu(\mathbf{q})/k_B T} h_\mu(\mathbf{q}) \boldsymbol{\eta}_{1,\mu} \cdot \mathbf{c} \frac{\partial^3}{\partial q_i \partial q_j \partial q_k} h_\mu(\mathbf{q}) d\mathbf{q}.
\end{aligned}$$

事实上，前一关系式中的最后一项是 $\hbar^2 \dfrac{\delta T}{T}$ 阶的，对于偏离局域平衡态较小的情况，可以认为它可忽略。其余部分给出一个高度非线性的修正，无法写成傅里叶形式。

例如，我们考虑德拜近似下单支纵向和横向声学声子的情形。在这种情况下，声子哈密顿量对应的符号为 $c|\mathbf{q}|$ ，因此

$$\begin{aligned}
k_{ac}^{(0)} &= \frac{\tau^{\mathbf{Q}}}{(2\pi)^d k_B T_{ac}^2} \int_{\mathbb{R}^d} c^4 |\mathbf{q}|^2 \frac{e^{c|\mathbf{q}|/k_B T_{ac}}}{\left(e^{c|\mathbf{q}|/k_B T_{ac}} - 1\right)^2} d\mathbf{q} \\
&= \frac{\tau^{\mathbf{Q}} c^4}{(2\pi)^d k_B T_{ac}^2} \mathrm{mis}(S_d) \int_0^{+\infty} |\mathbf{q}|^{d+1} \frac{e^{c|\mathbf{q}|/k_B T_{ac}}}{\left(e^{c|\mathbf{q}|/k_B T_{ac}} - 1\right)^2} d|\mathbf{q}| \\
&= \frac{k_B \tau^{\mathbf{Q}} c^{3-d}}{(2\pi)^d} \mathrm{mis}(S_d) \left(k_B T_{ac}\right)^{d-1} \int_0^{+\infty} z^{d+1} \frac{e^z}{\left(e^z - 1\right)^2} d\, z
\end{aligned} \tag{62}$$

其中

$$\mathrm{mis}(S_d) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$$

是 S_d、 Γ（x）的测度，其中 x 为欧拉伽马函数。前一个积分对任意 $d \in \mathbb{N}$ 都收敛。注意，我们得到的依赖于温度的关系与温度成正比

于 T_{ac}^{d-1}。关于二阶修正，我们观察到

$$g_2^{MEP} = -\frac{1}{8}\frac{e^\xi}{(e^\xi-1)^3}\left\{\frac{c^2(e^\xi+1)}{k_B^2T(\mathbf{x},t)^4|\mathbf{q}|^2}\left[\delta_{ij}|\mathbf{q}|^2\left(2\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}-T\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\partial x_j}\right)\right.\right.$$
$$\left.+q_iq_j\left(T\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\partial x_j}-3\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)\right]$$
$$\left.-\frac{c^3(e^{2\xi}+4e^\xi+1)}{3k_B^3|\mathbf{q}|(e^\xi-1)T(\mathbf{x},t)^5}\left[(\delta_{ij}|\mathbf{q}|^2-q_iq_j)\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}-q_iq_jT\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\partial x_j}\right]\right\}$$
$$= -\frac{1}{8}\frac{c^2e^\xi}{(e^\xi-1)^3}\left\{\frac{(e^\xi+1)}{k_B^2T(\mathbf{x},t)^4}\left[2|\nabla_{\mathbf{x}}T|^2-T\Delta_{\mathbf{x}}T+n_in_j\left(T\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\partial x_j}-3\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)\right]\right.$$
$$\left.-\frac{c(e^{2\xi}+4e^\xi+1)|\mathbf{q}|}{3k_B^3(e^\xi-1)T(\mathbf{x},t)^5}\left[(\delta_{ij}-n_in_j)\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}-n_in_jT\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\partial x_j}\right]\right\}$$

此时 $\xi = c|\mathbf{q}|/k_BT$。因此，热流的二阶修正为

$$\mathbf{Q}_\mu^{(2)} = -\tau^{\mathbf{Q}}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{J}_\mu^{(2)}$$

with

$$\mathbf{J}^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\mathbf{c}\otimes\mathbf{c}h(\mathbf{q})g_2^{MEP}d\mathbf{q} = \frac{c^2}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}n_hn_kh(\mathbf{q})g_2^{MEP}d\mathbf{q}\,\mathbf{e_h}\otimes\mathbf{e_k} := \mathbf{J}_{hk}^{(2)}\mathbf{e_h}\otimes\mathbf{e_k}$$

$(\mathbf{e_1},\mathbf{e_2},\cdots,\mathbf{e_d})$ 是 $\mathbb{R}^d$ 的标准正交基。

考虑到众所周知的公式

$$\int_\Omega n_hn_kd\Omega = \frac{\mathrm{mis}(S_d)}{d}\delta_{ij},$$
$$\int_\Omega n_in_jn_hn_kd\Omega = \frac{\mathrm{mis}(S_d)}{d(d+2)}(\delta_{ij}\delta_{hk}+\delta_{ih}\delta_{jk}+\delta_{ik}\delta_{jk})$$

以及

$$\int_0^{+\infty}\frac{h(\mathbf{q})e^\xi(e^\xi+1)}{(e^\xi-1)^3}q^{d-1}dq = c\left(\frac{k_BT}{c}\right)^{d+1}\int_0^{+\infty}\frac{e^\xi(e^\xi+1)}{(e^\xi-1)^3}\xi^d d\xi := c\left(\frac{k_BT}{c}\right)^{d+1}I_1(d),$$
$$\int_0^{+\infty}\frac{h(\mathbf{q})e^\xi(e^{2\xi}+4e^\xi+1)}{(e^\xi-1)^4}q^ddq = c\left(\frac{k_BT}{c}\right)^{d+2}\int_0^{+\infty}\frac{e^\xi(e^{2\xi}+4e^\xi+1)}{(e^\xi-1)^4}\xi^{d+1}d\xi$$
$$:= c\left(\frac{k_BT}{c}\right)^{d+2}I_2(d),$$

$\mathbf{J}^{(2)}$ 的分量$^{(2)}$ read

$$\mathbf{J}_{hk}^{(2)} = -\frac{c^3}{8(2\pi)^d}\frac{\mathrm{mis}(S_d)}{d}\frac{1}{k_B^2T^4(\mathbf{x},t)}\left(\frac{k_BT}{c}\right)^{d+1}$$
$$\left\{\left[(2|\nabla_xT|^2-T\Delta_xT)I_1(d)-\frac{1}{3}\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}\delta_{ij}I_2(d)\right]\delta_{hk}+\left[\left(T\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\partial x_j}-3\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)I_1(d)\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{1}{3}\left(\frac{\partial T}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}+T\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\partial x_j}\right)I_2(d)\right](\delta_{ij}\delta_{hk}+\delta_{ih}\delta_{jk}+\delta_{ik}\delta_{jk})\right\}.$$

在 $d = 1$ 和 $d = 2$的情况下，积分 $I_1(d)$和 $I_2(d)$发散。因此，量子修正仅在体相（$d = 3$）情况下有效，其中 $I_1(3) = \pi^2$， $I_2(3) = 4\pi^2$。这一特性在物理上与态密度以及能量色散关系的形式有关。

结论与致谢

针对一般色散关系，建立了声子的维格纳方程。推导出矩方程，并采用量子最大熵原理将其封闭。在长时间尺度下，得到了包含非线性量子修正的热流表达式。该模型适用于现代微型器件的研究；在这些器件中，日益增强的微型化使热效应变得越来越重要。

作者感谢 INdAM (GNFM) 和卡塔尼亚大学（Universit`a degli Studi di Catania）提供的支持，感谢其 2020/2022 年研究计划第 2 项干预线“QICT”。V. D. Camiola 感谢 AIM 项目“研究人员流动性”（PON R & I 2014-2020 第一轴，提案 AIM1893589）提供的经济支持。

声明

利益冲突/竞争性利益

作者声明，他们没有任何经济利益。

数据可用性

由于本研究未创建或分析任何新数据，因此本文不适用数据共享。

参考文献

[1] Mascali, G., Romano, V.:“石墨烯中的电荷输运及热效应”。SIAM J. APPL. MATH, 第 77 卷，第 2 期，第 593-613 页，(2017) 工业与应用数学学会。doi: 10.1137/15M1052573.[2] Morandi, O.; Sch¨urrer, F. “石墨烯量子输运的维格纳模型”。J. Phys. A Math. Theor. 2011, 44, 265301.[3] Muscato, O.;Wagner,W. “一类用于维格纳方程的随机算法”。SIAM J. Sci. Comp. 2016, 38, A1483–A1507.[4] Querlioz, D.; Dollfus, P. “纳米电子器件的维格纳蒙特卡罗方法”；ISTE Wiley：英国伦敦，2010 年。[5]Jacoboni, C.“半导体中的电子输运理论”；施普林格：德国柏林/海德堡，2013 年。

[6] J¨ungel, A. “半导体输运方程”；施普林格：德国柏林/海德堡，2009 年。

[7]Mascali, G., Romano, V.：《基于声子输运的石墨烯宏观模型层级》。Physica A, 548（2020）124489。doi：https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.124489。

[8]Romano, V.《基于最大熵原理的半导体半经典流体动力学模型的量子修正》。J. Math. Phys. 2007, 48, 123504。

[9]Luca, L., Romano, V.：“比较基于最大熵原理的石墨烯电荷输运线性与非线性流体动力学模型”。《国际非线性力学杂志》，第104卷，第39-58页（2018年），doi:10.1016/j.ijnonlinmec.2018.01.010。[10] Sellitto, A., Cimmelli, A., Jou, D.：“纳米系统热输运的介观理论”，施普林格，（2016）。[11] Simoncelli, M., Marzari, N., Mauri, F.：“固体中热输运的维格纳表述”，arXiv（2021），知识共享署名-非商业性使用-禁止演绎 4.0 国际许可协议，doi 10.48550/ARXIV.2112.06897。[12] E. T. Jaynes，“信息论与统计力学”，Phys. Rev. 106, 620-630（1957）。[13] E. T. Jaynes，“信息论与统计力学（II）”，Phys. Rev. 108, 171-190（1957）。[14] Degond, P. and Ringhofer, C.：“量子矩流体动力学与熵原理”。统计物理学杂志，第112卷，第3/4期，587-628（2003）。[15]Degond, P., M´ehats, F., Ringhofer, C.：“量子能量输运与漂移-扩散模型”。统计物理学杂志，第118卷，第3/4期，625-667（2005）。[16] Barletti, L.：“基于最大熵原理推导的石墨烯电子流体动力学方程”，J. Math. Phys., 55, 083303, 21页（2014）。[17]Barletti, L., Cintolesi, C.：“采用费米-狄拉克统计和玻色-爱因斯坦统计推导等温量子流体方程”。《统计物理学杂志》148,353–386（2012）。doi: 10.1007/s10955-012-0535-5。[18]Luca, L., Romano, V.：“石墨烯电荷输运的量子修正流体动力学模型”。物理学年鉴，第406卷，第30-53页（2019），doi:10.1016/j.aop.2019.03.018。[19] Camiola, V.D., Mascali, G., Romano, V.：“低维半导体结构中的电荷输运：最大熵方法”。施普林格，（2020）。

[20] Coco, M., Romano, V.: “悬浮单层石墨烯中电子-声子耦合与加热动力学的模拟: 纳入所有声子支”, 《传热学杂志》140 092404-1（2018年）。[21] Srivastava, G. P.: 《声子的物理学》, 泰勒-弗朗西斯出版社（1990）。[22] Hall, B. C.: 《数学家的量子理论》, 施普林格（2013）。[23] Folland, G. B.: 《相空间中的调和分析》, 普林斯顿大学出版社（1989）。[24] Frommlet, F., Markowich, P., Ringhofer, C.: “声子散射的维格纳函数方法”, 《超大规模集成电路设计》9 (4) 339-350（1999）。[25] Nier, F.: “d ≤3维中薛定谔-泊松系统的一种变分表述”, Comm. in Partial Differential equations 18:7-8 1125-1147。[26] Junk, M.: “Levermore五矩系统的定义域”, 《统计物理学杂志》93 1143-1167（1998）。[27] Luca, L., Romano, V.: “基于最大熵原理的石墨烯电荷输运流体动力学模型：基于能量幂次的矩的情形”。佩洛里塔尼学院学报——物理、数学与自然科学类, [S.l.], 第A5页, （2018年）, doi: 10.1478/AAPP.96S1A5。