电子–声子耦合的半隐式 Lax-Wendroff 动理学格式

Jiaming Li[a]、Hong Liang[a, *]、Meng Lian[b]、Chuang Zhang[c, *]、Jiangrong Xu[a, d]

[a]*Department of Physics, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China*[b]*School of Physics, Institute for Quantum Science and Engineering and Wuhan National High Magnetic Field Center, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China*[c]*College of Energy Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China*[d]*College of Energy Environment and Safety Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China*

arXiv:2602.01220v1 [physics.comp-ph] 1 Feb 2026

摘要

基于双温动理学方程，针对金属中的电子-声子耦合过程，本文提出了一种半隐式 Lax-Wendroff 格式。该方法的核心是将物理方程的演化信息融入数值建模过程，因此时间步长或单元尺寸不受弛豫时间和平均自由程的限制。具体而言，在重构界面分布函数时，再次采用有限差分法求解动力学模型，从而在单个时间步长内耦合粒子迁移、散射和电子-声子耦合过程。数值测试表明，该方法能够高效捕捉从弹道区到扩散区的电子-声子耦合或热传导过程。它为描述微电子器件中的电子–声子耦合或热管理提供了一种新工具。

关键词：　电子–声子耦合，多尺度热传导，玻尔兹曼输运方程　　n,
半隐式 Lax-Wendroff 动理学格式

1. 引言

随着芯片的摩尔定律逐渐逼近物理极限 [1, 2] ，封装或激光技术的突破推动应用从毫米或秒尺度转向纳米或超快时间尺度，非平衡热输运已成为工业化进程中的关键前沿基础 [3, 4, 5, 6, 7, 8]。在微/纳尺度下，热载流子（如电子和声子）的平均自由程或弛豫时间与系统的特征长度或时间尺度相当，经典傅里叶热传导理论不再适用，因此亟需从根本上转向将热载流子的非平衡输运与散射 [9, 10] 视为决定器件性能和使用寿命的首要因素。因此，理解这些输运与相互作用机制，是推动下一代电子设备热管理和精密激光加工发展的关键瓶颈 [11, 12, 13, 14]。

*通讯作者*Email addresses:* 780867508@qq.com (JiamingLi), lianghongstefanie@163.com (Hong Liang), lianmeng@hust.edu.cn(Meng Lian), zhangc26@zju.edu.cn (Chuang Zhang), 21A3100028@cjlu.edu.cn (Jiangrong Xu)

过去，人们已建立许多理论模型来描述电子-声子耦合的基本过程 [15, 16, 17, 18, 19, 20, 21]。Anisimov 等人提出的双温模型（TTM） [22], 通过耦合扩散方程描述电子和声子的温度场，已成为超快激光加热等情景下实用而简明的工具。然而，传统双温模型在复杂材料体系中的局限性日益显现。它忽略了光学声子与声学声子之间的热非平衡 [23, 24, 25]。为解决这一问题，人们提出了非热晶格模型 [20]或多温模型 [13] ，通过分别为电子、光学声子和声子建立能量方程，更精确地描述能量弛豫路径。然而，双温模型和多温模型都依赖扩散假设，忽略了能量传递的非瞬时特性 [26]，且无法捕捉弹道输运、非局域效应或非线性效应。与宏观模型相比，玻尔兹曼输运方程（BTE）为电子–声子耦合提供了更具基础性的理论框架 [27, 28, 29, 30, 31]。声子/电子玻尔兹曼输运方程通过分布函数演化，自然涵盖载流子散射、输运和耦合过程，从而能够统一描述从弹道区到扩散区的热输运行为。这一动力学模型详细描述了非平衡分布，捕捉尺寸效应和边界散射，并以自洽方式耦合多载流子输运。然而，玻尔兹曼输运方程是一种高维积分微分方程，给解析求解或数值求解带来了巨大挑战。

过去几十年间，人们开发了众多求解玻尔兹曼输运方程的数值方法 [32, 33, 34],，例如格子玻尔兹曼方法 [31, 35], 、显式离散坐标法 [29, 36] 和蒙特卡罗方法 [37]。这些方法在不同尺度上发挥了重要作用，并取得了显著成效。然而，由于数值建模过程中引入了一些近似或假设 [38, 39]，它们难以在所有努森数范围内同时保持极高的计算效率和精度。由于动量空间中的离散点有限，格子玻尔兹曼方法无法准确描述高度非平衡或弹道区中的热传递现象 [35]。后两种方法在数值时间步长尺度上将粒子迁移与散射解耦。因此，时间步长受到弛豫时间的限制，使得它们难以高效模拟努森数极小的非稳态热输运问题 [40, 33, 34]。

最近，研究人员开发了一种用于求解玻尔兹曼输运方程的半隐式 Lax-Wendroff 动理学格式 [41], , 该格式能够捕捉瞬态传热从弹道输运到扩散输运的转变，且不受弛豫时间约束 [42]。鉴于该方法在单一物理场中的出色表现 [42, 41], , 本研究进一步拓展了该方法，并将其应用于电子-声子耦合的多尺度热传导问题。本文其余部分安排如下：第 2 节介绍动力学模型以及半隐式 Lax-Wendroff 格式；第 3 节展示数值模拟与测试；第 4 节给出结论。

2. 模型与数值算法

2.1. 电子与声子玻尔兹曼输运方程

电子-声子耦合的玻尔兹曼输运方程表示如下 [9, 32, 33, 27, 28,29, 30, 31],

$$\frac{\partial f_e}{\partial t}+\boldsymbol{v_e}\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}f_e=\frac{1}{\tau_e}\left(f_e^{eq}-f_e\right)-\frac{G}{4\pi}(T_e-T_p), \tag{1}$$

$$\frac{\partial f_p}{\partial t}+\boldsymbol{v_p}\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}f_p=\frac{1}{\tau_p}\left(f_p^{eq}-f_p\right)+\frac{G}{4\pi}(T_e-T_p). \tag{2}$$

其中，下标 e 和 p 分别表示电子和声子。本文后续内容将始终采用这些下标。电子和声子的能量密度分布函数分别为 $f_e=f_e(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{v_e},\ t)$ 和 $f_p=f_p(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{v_p},\ t)$，它们取决于空间位置 $\boldsymbol{x}$、时间 t 以及群速度 $\boldsymbol{v_e}=|\boldsymbol{v_e}|\,\boldsymbol{s}$ 或 $\boldsymbol{v_p}=|\boldsymbol{v_p}|\,\boldsymbol{s}$。 $\boldsymbol{s}=(\cos\theta,\ \sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi)$ 是极角 θ 和方位角 φ对应的单位方向矢量。 τ 为弛豫时间，电子-声子耦合常数记为 G。电子和声子的平衡分布函数如下:

$$f_e^{eq}=\frac{C_eT_e}{4\pi},\quad f_p^{eq}=\frac{C_pT_p}{4\pi}. \tag{3}$$

其中， C 为比热容， T 为温度。在电子-电子和声子-声子散射过程中满足能量守恒,

$$\int\frac{f_e^{eq}-f_e}{\tau_e}d\Omega=0,\quad \int\frac{f_p^{eq}-f_p}{\tau_p}d\Omega=0. \tag{4}$$

其中， $d\Omega$ 表示对整个立体角空间的积分。通过对分布函数取矩，可得到局部能量密度 U、热流 $\boldsymbol{q}$ 和温度 T 等宏观变量。

$$U_e=\int f_e d\Omega,\quad q_e=\int v_e f_e d\Omega,\quad T_e=\frac{1}{C_e}\int f_e d\Omega=\frac{U_e}{C_e}, \tag{5}$$

$$U_p=\int f_p d\Omega,\quad q_p=\int v_p f_p d\Omega,\quad T_p=\frac{1}{C_p}\int f_p d\Omega=\frac{U_p}{C_p}. \tag{6}$$

2.2. 半隐式 *Lax-Wendroff* 动理学格式

本文详细介绍用于电子–声子耦合的半隐式 Lax–Wendroff 动理学格式 [41] 。为便于理解并保持一般性，以下以二维动理学模型为例，介绍该格式的离散化过程:

$$\frac{\partial f_e}{\partial t}+u_e\frac{\partial f_e}{\partial x}+v_e\frac{\partial f_e}{\partial y}=\frac{1}{\tau_e}\left(f_e^{eq}-f_e\right)-\frac{G}{4\pi}(T_e-T_p), \tag{7}$$

$$\frac{\partial f_p}{\partial t}+u_p\frac{\partial f_p}{\partial x}+v_p\frac{\partial f_p}{\partial y}=\frac{1}{\tau_p}\left(f_p^{eq}-f_p\right)+\frac{G}{4\pi}(T_e-T_p), \tag{8}$$

其中，$u = |v|\cos\theta$和 $v = |v|\sin\theta\cos\varphi$分别为群速度在 $x-$方向和 $y-$方向上的分量。在有限体积法框架下，空间和时间均采用均匀笛卡尔网格，其中（$\Delta x,\ N_x,\ i$）和（$\Delta y,\ N_y,\ j$）分别表示 x 方向和 y 方向上的（单元尺寸、单元总数、单元中心索引）。立体角空间也采用索引 k进行离散化。

对控制体积在时间区间 t^n 到 $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ 内的控制方程进行积分，可得：

$$\frac{f_{e,i,j,k}^{n+1} - f_{e,i,j,k}^{n}}{\Delta t} + u_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j,k}^{n+1/2}}{\partial x} + v_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j,k}^{n+1/2}}{\partial y} = \frac{1}{2}\left(\frac{f_{e,i,j,k}^{eq,n+1} - f_{e,i,j,k}^{n+1}}{\tau_e} + \frac{f_{e,i,j,k}^{eq,n} - f_{e,i,j,k}^{n}}{\tau_e}\right) - \frac{G}{8\pi}\left(T_{e,i,j}^{n+1} - T_{p,i,j}^{n+1} + T_{e,i,j}^{n} - T_{p,i,j}^{n}\right), \tag{9}$$

$$\frac{f_{p,i,j,k}^{n+1} - f_{p,i,j,k}^{n}}{\Delta t} + u_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j,k}^{n+1/2}}{\partial x} + v_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j,k}^{n+1/2}}{\partial y} = \frac{1}{2}\left(\frac{f_{p,i,j,k}^{eq,n+1} - f_{p,i,j,k}^{n+1}}{\tau_p} + \frac{f_{p,i,j,k}^{eq,n} - f_{p,i,j,k}^{n}}{\tau_p}\right) + \frac{G}{8\pi}\left(T_{e,i,j}^{n+1} - T_{p,i,j}^{n+1} + T_{e,i,j}^{n} - T_{p,i,j}^{n}\right), \tag{10}$$

其中 $f_{e,\ i,\ j,\ k}^{n} = f_e(x_i,\ y_j,\ u_{e,\ k},\ v_{e,\ k},\ t^n)$、$f_{p,\ i,\ j,\ k}^{n} = f_p(x_i,\ y_j,\ u_{p,\ k},\ v_{p,\ k},\ t^n)$。上述方程右侧采用梯形法则离散，通量项采用中点法则处理。分布函数的空间梯度为

$$\frac{\partial f_{i,j,k}^{n+1/2}}{\partial x} = \frac{f_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - f_{i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x}, \quad \frac{\partial f_{i,j,k}^{n+1/2}}{\partial y} = \frac{f_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - f_{i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y}, \tag{11}$$

其中，$(i \pm 1/2,\ j)$ 或 $(i,\ j \pm 1/2)$ 表示与单元中心 $(i,\ j)$ 相连的单元界面的索引，分别位于$x-$ 和 $y-$ 方向。

将式（9、10）重新表述，

$$f_{e,i,j,k}^{n+1} = \frac{\tau_e}{\tau_e + h}f_{e,i,j,k}^{n} + \frac{h}{\tau_e + h}f_{e,i,j,k}^{eq,n+1} + \frac{h}{\tau_e + h}\left(f_{e,i,j,k}^{eq,n} - f_{e,i,j,k}^{n}\right) - \frac{2h\tau_e}{\tau_e + h}\left(u_{e,k}\frac{f_{e,i+1/2,j,k}^{n+1/2} - f_{e,i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} + v_{e,k}\frac{f_{e,i,j+1/2,k}^{n+1/2} - f_{e,i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y}\right) - \frac{h\tau_e}{\tau_e + h}\frac{G}{4\pi}\left(T_{e,i,j}^{n+1} - T_{p,i,j}^{n+1} + T_{e,i,j}^{n} - T_{p,i,j}^{n}\right), \tag{12}$$

$$f_{p,i,j,k}^{n+1} = \frac{\tau_p}{\tau_p + h}f_{p,i,j,k}^{n} + \frac{h}{\tau_p + h}f_{p,i,j,k}^{eq,n+1} + \frac{h}{\tau_p + h}\left(f_{p,i,j,k}^{eq,n} - f_{p,i,j,k}^{n}\right) - \frac{2h\tau_p}{\tau_p + h}\left(u_{p,k}\frac{f_{p,i+1/2,j,k}^{n+1/2} - f_{p,i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} + v_{p,k}\frac{f_{p,i,j+1/2,k}^{n+1/2} - f_{p,i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y}\right) + \frac{h\tau_p}{\tau_p + h}\frac{G}{4\pi}\left(T_{e,i,j}^{n+1} - T_{p,i,j}^{n+1} + T_{e,i,j}^{n} - T_{p,i,j}^{n}\right), \tag{13}$$

其中 $h=\Delta t/2$。对式（9、10）取矩，可得到单元中心处的宏观控制方程，

$$U_{e,i,j}^{n+1}=U_{e,i,j}^{n}-\Delta t\sum_{k}\left(u_{e,k}\frac{f_{e,i+1/2,j,k}^{n+1/2}-f_{e,i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x}+v_{e,k}\frac{f_{e,i,j+1/2,k}^{n+1/2}-f_{e,i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y}\right)\phi_k$$
$$-hG\left(T_{e,i,j}^{n+1}-T_{p,i,j}^{n+1}+T_{e,i,j}^{n}-T_{p,i,j}^{n}\right), \tag{14}$$

$$U_{p,i,j}^{n+1}=U_{p,i,j}^{n}-\Delta t\sum_{k}\left(u_{p,k}\frac{f_{p,i+1/2,j,k}^{n+1/2}-f_{p,i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x}+v_{p,k}\frac{f_{p,i,j+1/2,k}^{n+1/2}-f_{p,i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y}\right)\phi_k$$
$$+hG\left(T_{e,i,j}^{n+1}-T_{p,i,j}^{n+1}+T_{e,i,j}^{n}-T_{p,i,j}^{n}\right), \tag{15}$$

其中，$\sum_k$ 表示对离散化立体角空间进行数值求积，ϕ_k 为相应的权重。

根据式（3、5、6），平衡态完全由局部温度或能量密度决定。结合上述两个方程（14、15），可得到一个关于下一时间步长电子温度和声子温度的二元线性方程组。因此，关键步骤是在半时间步（$t^{n+1/2}$）处计算单元界面上的未知电子和声子分布函数。对单元界面（$x_{i+1/2}$，y_j）和（x_i，$y_{j+1/2}$）处的玻尔兹曼输运方程从 t^n 到 $t^{n+1/2}=t^n+h$ 积分，得到：

$$\frac{f_{e,i+1/2,j,k}^{n+1/2}-f_{e,i+1/2,j,k}^{n}}{h}+u_{e,k}\frac{\partial f_{e,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial x}+v_{e,k}\frac{\partial f_{e,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial y}=\frac{1}{\tau_e}\left(f_{e,i+1/2,j,k}^{eq,n+1/2}-f_{e,i+1/2,j,k}^{n+1/2}\right)$$
$$-\frac{G}{4\pi}\left(T_{e,i+1/2,j}^{n+1/2}-T_{p,i+1/2,j}^{n+1/2}\right), \tag{16}$$

$$\frac{f_{e,i,j+1/2,k}^{n+1/2}-f_{e,i,j+1/2,k}^{n}}{h}+u_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial x}+v_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial y}=\frac{1}{\tau_e}\left(f_{e,i,j+1/2,k}^{eq,n+1/2}-f_{e,i,j+1/2,k}^{n+1/2}\right)$$
$$-\frac{G}{4\pi}\left(T_{e,i,j+1/2}^{n+1/2}-T_{p,i,j+1/2}^{n+1/2}\right), \tag{17}$$

$$\frac{f_{p,i+1/2,j,k}^{n+1/2}-f_{p,i+1/2,j,k}^{n}}{h}+u_{p,k}\frac{\partial f_{p,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial x}+v_{p,k}\frac{\partial f_{p,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial y}=\frac{1}{\tau_p}\left(f_{p,i+1/2,j,k}^{eq,n+1/2}-f_{p,i+1/2,j,k}^{n+1/2}\right)$$
$$+\frac{G}{4\pi}\left(T_{e,i+1/2,j}^{n+1/2}-T_{p,i+1/2,j}^{n+1/2}\right), \tag{18}$$

$$\frac{f_{p,i,j+1/2,k}^{n+1/2}-f_{p,i,j+1/2,k}^{n}}{h}+u_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial x}+v_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial y}=\frac{1}{\tau_p}\left(f_{p,i,j+1/2,k}^{eq,n+1/2}-f_{p,i,j+1/2,k}^{n+1/2}\right)$$
$$+\frac{G}{4\pi}\left(T_{e,i,j+1/2}^{n+1/2}-T_{p,i,j+1/2}^{n+1/2}\right), \tag{19}$$

其中，上述方程的右端项采用前向欧拉格式离散，通量项则通过后向欧拉格式处理。对上述方程进行变换可得，

$$f_{e,i+1/2,j,k}^{n+1/2}=\frac{\tau_e}{\tau_e+h}f_{e,i+1/2,j,k}^{n}-\frac{\tau_e h}{\tau_e+h}\left(u_{e,k}\frac{\partial f_{e,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial x}+v_{e,k}\frac{\partial f_{e,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial y}\right)+\frac{h}{\tau_e+h}f_{e,i+1/2,j,k}^{eq,n+1/2}$$
$$-\frac{\tau_e h}{\tau_e+h}\frac{G}{4\pi}(T_{e,i+1/2,j}^{n+1/2}-T_{p,i+1/2,j}^{n+1/2}), \tag{20}$$

$$f_{e,i,j+1/2,k}^{n+1/2} = \frac{\tau_e}{\tau_e+h} f_{e,i,j+1/2,k}^{n} - \frac{\tau_e h}{\tau_e+h}\left(u_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial x} + v_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial y}\right) + \frac{h}{\tau_e+h} f_{e,i,j+1/2,k}^{eq,n+1/2} - \frac{\tau_e h}{\tau_e+h}\frac{G}{4\pi}(T_{e,i,j+1/2}^{n+1/2} - T_{p,i,j+1/2}^{n+1/2}), \tag{21}$$

$$f_{p,i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \frac{\tau_p}{\tau_p+h} f_{p,i+1/2,j,k}^{n} - \frac{\tau_p h}{\tau_p+h}\left(u_{p,k}\frac{\partial f_{p,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial x} + v_{p,k}\frac{\partial f_{p,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial y}\right) + \frac{h}{\tau_p+h} f_{p,i+1/2,j,k}^{eq,n+1/2} + \frac{\tau_p h}{\tau_p+h}\frac{G}{4\pi}(T_{e,i+1/2,j}^{n+1/2} - T_{p,i+1/2,j}^{n+1/2}), \tag{22}$$

$$f_{p,i,j+1/2,k}^{n+1/2} = \frac{\tau_p}{\tau_p+h} f_{p,i,j+1/2,k}^{n} - \frac{\tau_p h}{\tau_p+h}\left(u_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial x} + v_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial y}\right) + \frac{h}{\tau_p+h} f_{p,i,j+1/2,k}^{eq,n+1/2} + \frac{\tau_p h}{\tau_p+h}\frac{G}{4\pi}(T_{e,i,j+1/2}^{n+1/2} - T_{p,i,j+1/2}^{n+1/2}), \tag{23}$$

对方程（24、25、26、27）取矩，可得单元界面处的宏观控制方程,

$$U_{e,i+1/2,j}^{n+1/2} = U_{e,i+1/2,j}^{n} - h\sum_k \left(u_{e,k}\frac{\partial f_{e,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial x} + v_{e,k}\frac{\partial f_{e,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial y}\right)\phi_k - hG\left(T_{e,i+1/2,j}^{n+1/2} - T_{p,i+1/2,j}^{n+1/2}\right), \tag{24}$$

$$U_{e,i,j+1/2}^{n+1/2} = U_{e,i,j+1/2}^{n} - h\sum_k \left(u_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial x} + v_{e,k}\frac{\partial f_{e,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial y}\right)\phi_k - hG\left(T_{e,i,j+1/2}^{n+1/2} - T_{p,i,j+1/2}^{n+1/2}\right), \tag{25}$$

$$U_{p,i+1/2,j}^{n+1/2} = U_{p,i+1/2,j}^{n} - h\sum_k \left(u_{p,k}\frac{\partial f_{p,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial x} + v_{p,k}\frac{\partial f_{p,i+1/2,j,k}^{n}}{\partial y}\right)\phi_k + hG\left(T_{e,i+1/2,j}^{n+1/2} - T_{p,i+1/2,j}^{n+1/2}\right), \tag{26}$$

$$U_{p,i,j+1/2}^{n+1/2} = U_{p,i,j+1/2}^{n} - h\sum_k \left(u_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial x} + v_{p,k}\frac{\partial f_{p,i,j+1/2,k}^{n}}{\partial y}\right)\phi_k + hG\left(T_{e,i,j+1/2}^{n+1/2} - T_{p,i,j+1/2}^{n+1/2}\right). \tag{27}$$

为了获得 $U^{n+1/2}$或 $T^{n+1/2}$，根据上述四个方程，必须计算 n–时间步长（t^n）处的界面分布函数及其空间梯度。幸运的是，界面分布函数及其空间梯度的详细计算公式已在前一篇论文 [41]中给出。

本方案的流程可总结如下:

1. 在 t^n处，采用二阶插值方法计算界面分布函数及其相关空间梯度，方法与先前的研究 [41]相同。

2. 在 $t^{n+1/2}$，根据公式 (24,25,26,27,5,6) 更新单元界面处的宏观场。然后，根据公式 (3) 更新声子/电子的平衡分布函数。

3. 在 $t^{n+1/2}$，根据公式 (20,21,22,23) 更新单元界面处的电子/声子分布函数。4. 在 t^{n+1}，根据公式 (14,15,5,6) 更新单元中心处的宏观场。然后，根据公式 (3) 更新声子/电子的平衡分布函数。5. 在 t^{n+1}，根据公式 (12,13) 更新单元中心处的声子/电子分布函数。

3. 数值测试

本节通过数值测试验证了当前电子-声子耦合方案的性能。将数值结果与先前文献 [33] 中典型双温模型（TTM）、显式离散纵标法（DOM）和离散统一气体动力学（DUGKS）的预测结果进行比较。在准一维模拟中，采用高斯-勒让德求积将 cos $\theta \in [-1,1]$ 离散为 N_θ 个点。在准二维或三维模拟中，由于对称性，也采用高斯-勒让德求积将方位角$\varphi \in [0,\pi]$ 离散为 $N_\varphi/2$ 个点。所有模拟均使用 AMD Ryzen 7 5800H with Radeon Graphics 的单核运行。努森数定义为平均自由程$\lambda = |\boldsymbol{v}|\tau$ 与系统特征长度之比，即 Kn $= \lambda/L$。物理时间步长 Δt 为

$$\Delta t = \mathrm{CFL} \times \frac{\{\Delta x, \Delta y\}_{min}}{\{|v_e|, |v_p|\}_{max}} \tag{28}$$

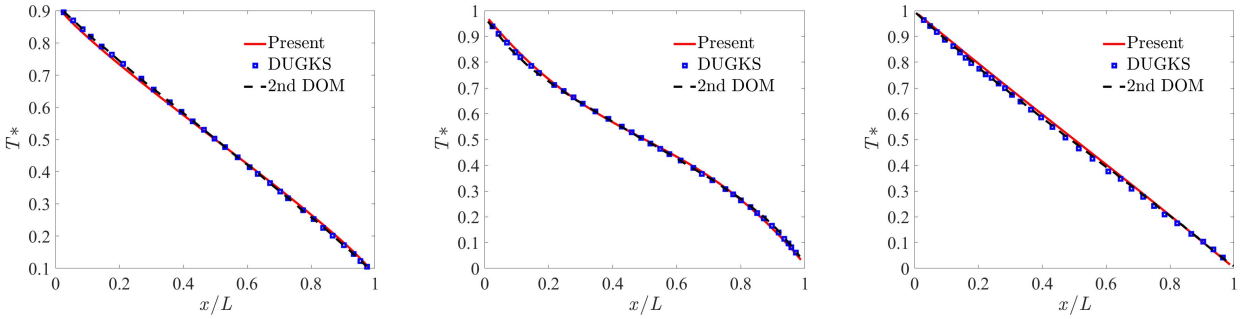
其中 $0 <$CFL < 1 表示库朗-弗里德里希斯-刘易数。在没有特殊说明的情况下，CFL=0.40。

3.1. 准一维热传导

研究了不同厚度金膜中的准一维跨平面热传导。对金膜的左右两端分别施加恒定温度$T_L = T_0 + \Delta T$和 $T_R = T_0 - \Delta T$的等温边界条件。金属金的详细热物性参数如下：电子平均自由程 λ_e=33 纳米米，声子平均自由程 λ_p=1.5 纳米米，电子弛豫时间τ_e=0.0243 ps，声子弛豫时间 τ_p=0.679 ps。采用40个离散单元和 N_θ=48 个离散角度。当满足以下条件时，计算达到收敛：

$$\epsilon = \frac{\sqrt{\sum_i \left(T_i^n - T_i^{n+1}\right)^2}}{\sqrt{\sum_i \left(\Delta T\right)^2}} < 10^{-8} \tag{29}$$

图1绘出了不同厚度下声子温度的空间分布。随着薄膜厚度从纳米尺度增加到微米尺度，声子温度分布由非线性逐渐过渡到近似线性，这表明主导热传导机制从弹道输运转变为扩散输运。具体而言，当 L=100 纳米米时，温度曲线呈现显著的非线性，表明能量载流子存在明显的弹道输运效应。相比之下，当厚度为 10 μ米时，温度分布趋近于线性，这与傅里叶扩散定律的描述一致，表明该尺度下扩散机制占主导。本方法与以往方法在



(a) L=10 纳米米， Δx=0.25 纳米米　(b) L=100 纳米米， Δx=2.5 纳米米　(c) L=10 μ米 Δx=250 纳米米

图1：不同厚度 L 下声子温度的空间分布，其中 $T^* = (T - T_R)/(T_L - T_R)$。

从弹道区到扩散区的宽广尺度范围内均表现出可靠的一致性，证实了其适用于多尺度热传导分析。

3.2. 瞬态热光栅

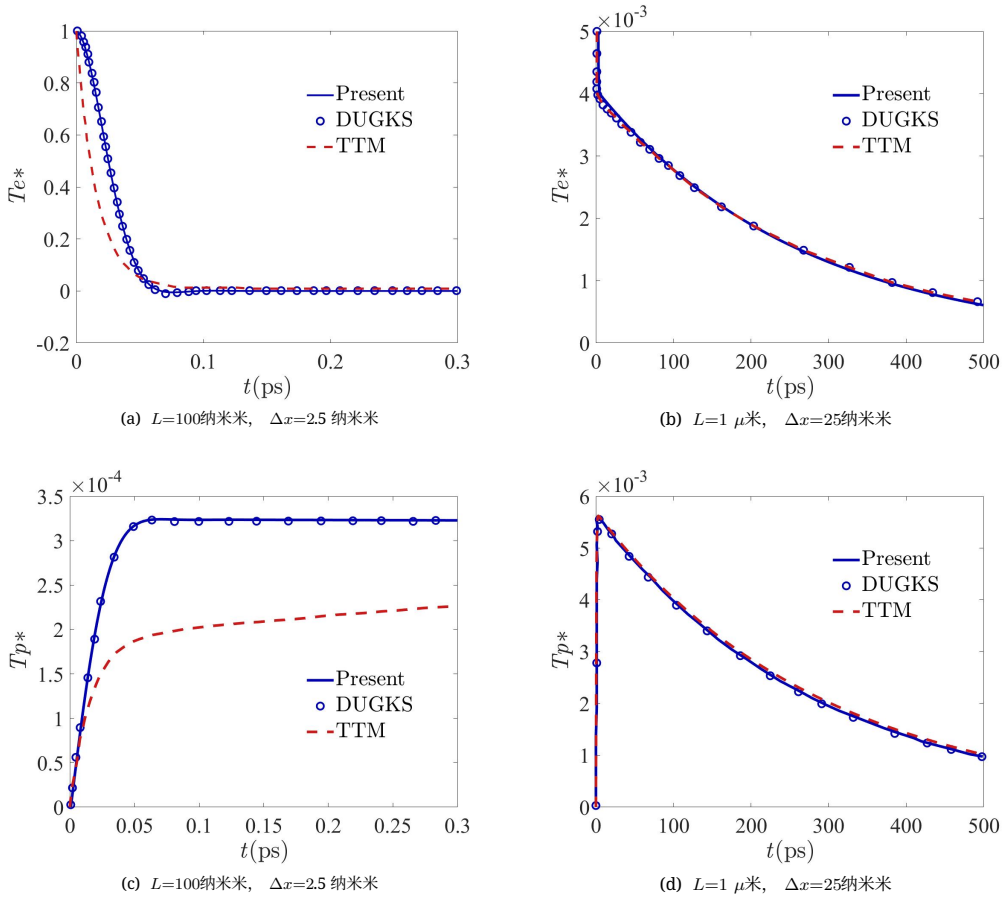
瞬态热光栅技术是一种用于测量纳米材料热学性质的先进方法 [43, 44, 45]。周期性温度分布（例如正弦或余弦形状），

$$T_e(x, t = 0) = T_{ref} + \Delta T \sin(2\pi x/L), \quad T_p(x, t = 0) = T_{ref}. \tag{30}$$

通过基本原理在样品表面实现：两束相干泵浦光束产生光学干涉条纹，其中 ΔT 为温度振幅， L 为空间光栅周期长度，而激光加热系统最初仅加热电子系统。为模拟瞬态热现象，采用20-100个离散单元和 N_θ=8-100个离散角度。对单个空间光栅周期的左右边界施加周期性边界条件。Au金属在300 K和25 K下的玻尔兹曼输运方程物理参数取自先前的参考文献。

图2和图3系统地展示了常温或极低温下，电子/声子温度从纳米尺度到微米尺度的演变。可以发现，该算法的结果与DUGKS在各种尺度下的结果高度一致，从而验证了算法的准确性。如100 nm尺度下图2a、2c、3a和3d所示，两种方法预测的电子冷却速率、最大声子温升及其起始时间几乎完全相同。在其他更大的尺度下，两者的曲线也高度吻合。此外可以看出，在较低温度下，热载流子平均自由程增大，使电子-声子热平衡所需时间缩短，从而增强了非平衡弹道效应。这表明温度会显著影响非平衡输运现象的强度。

在纳米尺度下，传统双温模型的结果与当前结果或 DUGKS 的结果存在显著偏差，而在更大尺度下则逐渐趋于一致。对于 L=100 纳米米（图 2a、2c,



(a) L=100纳米米, Δx=2.5 纳米米

(b) L=1 μ米, Δx=25纳米米

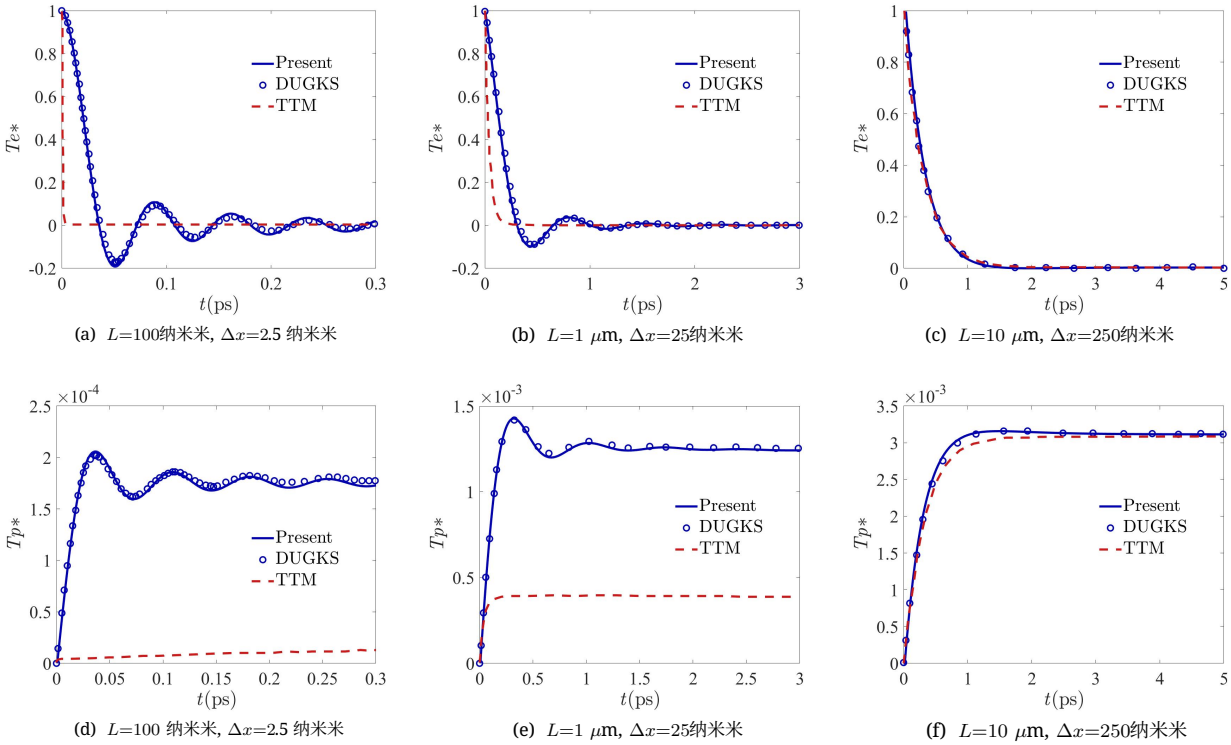
(c) L=100纳米米, Δx=2.5 纳米米

(d) L=1 μ米, Δx=25纳米米

图2: $x = L/4$处不同 L条件下随时间变化的电子和声子温度，其中 T_{ref}= 300 K, ΔT= 1 K, $T_e^* = (T_e - T_{ref})/\Delta T$, $T_p^* = (T_p - T_{ref})/\Delta T$。DUGKS和双温模型预测的数据取自先前的参考文献 [33]。

3a 和 3d），双温模型低估了电子冷却速率和声子峰值温度；当尺度增大到 1 μm（图 2b、2d、3b 和 3e）时，偏差有所减小，但双温模型的预测仍系统性偏低；在 10 μm 尺度下（图 3c 和 3f），三种方法的结果基本一致。这表明，双温模型适用于宏观扩散占主导的区域，但其在纳米尺度的超快非平衡过程中存在局限性。

通过比较电子温度和声子温度曲线，可以直观地展示能量传递过程。与声子温度变化（升高）相比，电子温度变化（降低）的特征时间显著更短。在小尺度下，该过程由极快的电子-声子耦合主导，其特征是电子温度在亚皮秒内骤降，声子温度则迅速响应（图 2a、2c、3a 和 3d）。在介观尺度下，观察到两种温度都在数十皮秒内缓慢变化，呈现出明显的耦合弛豫特征（图 2b、2d、3b 和 3e）。在宏观尺度下，温度变化非常缓慢，逐渐接近经典扩散行为（图 3c 和 3f）。瞬态光栅激发后的完整弛豫链如下：



(a) L=100纳米米, Δx=2.5 纳米米　(b) L=1 μm, Δx=25纳米米　(c) L=10 μm, Δx=250纳米米

(d) L=100 纳米米, Δx=2.5 纳米米　(e) L=1 μm, Δx=25纳米米　(f) L=10 μm, Δx=250纳米米

图3： x=L/4处随时间变化的电子和声子温度，不同 L，其中 T_{ref}= 25 K、 ΔT= 1 K、$T_e^* = \left(T_e - T_{ref}\right)/\Delta T$、$T_p^* = \left(T_p - T_{ref}\right)/\Delta T$。DUGKS与双温模型预测的数据取自先前文献 [33]。

能量最初沉积在电子子系统中，随后通过电子-声子耦合传递至声子子系统，直至最终达到热平衡。

总之，本算法实现了对多尺度热输运行为的精确捕捉。其结果与DUGKS高度一致，同时在模拟纳米尺度超快非平衡热过程方面优于传统双温模型。

4. 结论

本文提出了一种半隐式 Lax–Wendroff 动理学格式，为跨越弹道区和扩散区的耦合电子–声子输运热模拟提供了统一的计算框架。该方法的独特之处在于将热载流子的物理演化信息融入数值建模过程。具体而言，在重构界面分布函数时，采用有限差分法再次求解电子-声子耦合动力学模型。因此，粒子迁移、散射和电子–声子耦合过程在单个时间步长内实现耦合，在不损失解的精度的前提下，成功突破了弛豫时间和平均自由程带来的时间与空间限制。该方法在

多尺度热传导方面的稳健性和计算效率已通过数值测试得到验证。预计这项工作将有助于深入理解电子-声子相互作用，并为新一代微电子器件的热管理提供更精良的工具。

致谢

C. Z. 感谢国家自然科学基金委员会（52506078）和浙江省自然科学基金（项目编号：LMS26E060012）的资助。C. Z. 感谢在线微信交流群“器件仿真快乐交流组”的成员，并感谢北京并行科技股份有限公司提供的高性能计算资源。H. L. 感谢国家自然科学基金委员会（12572285）的资助。

参考文献

[1] M. M. Waldrop，摩尔定律的芯片发展陷入困境，《自然》新闻 530（2016年）144。URL：http: // www.nature.com/news/the-chips-are-down-for-moore-s-law-1.19338。doi:10.1038/530144a。

[2] Q. Zhang，Y.Zhang，Y. Luo，H. Yin，面向先进技术节点的新型晶体管结构，《国家科学评论》11（2024年）nwae008。URL：https://doi.org/10.1093/nsr/nwae008。doi:10. 1093/nsr/nwae008。

[3] M. A. Stettler, S. M. Cea, S. Hasan, L. Jiang, P. H. Keys, C. D. Landon, P. Marepalli, D. Pantuso, C. E. Weber，《工业技术计算机辅助设计：从原子到芯片建模》，《IEEE电子器件汇刊》68（2021年）5350–5357。doi:10.1109/TED.2021.3076976。

[4] M. Kaviany，《传热物理学》，剑桥大学出版社，2008年。URL: https://doi.org/10. 1017/CBO9780511754586。doi:10.1017/CBO9780511754586。

[5] E. Pop, R. W. Dutton, K. E. Goodson，考虑声学声子和光学声子色散的硅中电子输运解析能带蒙特卡洛模型，《应用物理学杂志》96（2004年）4998–5005。URL: http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1788838。doi:10.1063/1.1788838。

[6] V. Chiloyan、S. Huberman、A. A. Maznev、K. A. Nelson、G. Chen，由非热微纳尺度声子群体引起的超过体材料热传导的热输运，Appl. Phys. Lett. 116 (2020) 163102. URL: https://doi.org/10.1063/1.5139069. doi:10.1063/1.5139069.

[7] E. Pop，纳米尺度器件中的能量耗散与输运，Nano Res. 3 (2010) 147–169. URL: https://doi.org/10.1007/s12274-010-1019-z. doi:10.1007/s12274-010-1019-z.

[8] B. Cao，《电子设备多尺度热管理的热设计自动化 (tda)》，《应用物理学杂志》138 (2025年) 180901。网址：https://doi.org/10.1063/5.0288828。doi:10.1063/5. 0288828。

[9] G. Chen, 《纳米尺度能量输运与转换：对电子、分子、声子和光子的并行处理》，牛津大学出版社，2005年。网址：https://global.oup.com/ushe/product/ nanoscale-energy-transport-and-conversion-9780195159424?cc=cn&lang=en&。

[10]J. M. Ziman, 《电子与声子：固体输运现象理论》，牛津大学出版社，1960年。网址：https://global.oup.com/academic/product/ electrons-and-phonons-9780198507796?cc=cn&lang=en&.
[11] F. Giustino，第一性原理视角下的电子-声子相互作用，《现代物理评论》89 (2017) 015003。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.89.015003。doi:10.1103/RevModPhys.89.015003。[12] S. Ono，简单金属中的热化：电子-声子和声子-声子散射的作用，《物理评论B》97 (2018) 054310。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.054310。doi:10.1103/PhysRevB.97.054310。

[13] Z. Lu, A. Vallabhaneni, B. Cao, X. Ruan, 《声子支分辨电子-声子耦合与多温度模型》，《物理评论B》98 (2018) 134309。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevB.98.134309。doi:10.1103/PhysRevB.98.134309。

[14] A. K. Vallabhaneni, D. Singh, H. Bao, J. Murthy, X. Ruan, 《选择性电子-声子耦合对单层石墨烯热导率拉曼测量可靠性的影响：一项第一性原理研究》，《物理评论B》93 (2016年) 125432。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93. 125432。doi:10.1103/PhysRevB.93.125432。

[15] P. B. Allen, 《金属中电子热弛豫理论》，《物理评论快报》59 (1987) 1460–1463。URL：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.1460。doi:10.1103/PhysRevLett.59. 1460。

[16] E. Carpene, 《金属的超快激光辐照：超越双温模型》，《物理评论B》74 (2006年) 024301。URL：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.024301。doi:10.1103/PhysRevB.74.024301。

[17] R. W. Schoenlein、W. Z. Lin、J. G. Fujimoto、G. L. Eesley, 《金属中非平衡电子过程的飞秒研究》，《物理评论快报》58 (1987) 1680–1683。URL：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.1680。doi:10.1103/PhysRevLett.58.1680。

[18] R. H. M. Groeneveld, R. Sprik, A. Lagendijk, 《非热电子分布对贵金属中电子-声子能量弛豫过程的影响》，《物理评论B》45 (1992) 5079–5082。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.45.5079。doi:10.1103/PhysRevB.45.5079。

[19] F. Caruso, D. Novko, 《电子和声子的超快动力学：从双温模型到含时玻尔兹曼方程》, Advances in Physics: X 7 (2022) 2095925。网址：https: //doi.org/10.1080/23746149.2022.2095925。doi:10.1080/23746149.2022.2095925。

[20] L. Waldecker、R. Bertoni、R. Ernstorfer、J. Vorberger, 《超越双温近似的简单金属中的电子-声子耦合与能量流》, Phys. Rev. X 6（2016年）021003。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.6.021003。doi:10.1103/PhysRevX.6.021003。

[21]T. Qiu、C. Tien, 《多层金属的飞秒激光加热——I. 分析》, Int. J. Heat Mass Transfer 37（1994）2789–2797。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ 0017931094903964。doi:https://doi.org/10.1016/0017-9310(94)90396-4。

[22] S. I. Anisimov、B. L. Kapeliovich、T. L. Perelman, 《暴露于超短激光脉冲下的金属表面的电子发射》, Sov. Phys.-JETP 39（1974）375–377。

[23]R. Wang、H. Zobeiri、Y. Xie、X. Wang、X. Zhang、Y. Yue, 《光子激发下纳米米二维材料中光学声子与声学声子温度及其能量耦合因子的区分》, Advanced Science 7（2020）2000097。URL：https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ advs.202000097。doi：https://doi.org/10.1002/advs.202000097。

[24] H. Zobeiri、N. Hunter、R. Wang、T. Wang、X. Wang, 《光子激发下石墨烯纸中光学声子与声学声子之间热非平衡的直接表征》, Advanced Science8（2021年）2004712。URL：https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/advs. 202004712。doi：https://doi.org/10.1002/advs.202004712。

[25] S. Sullivan, A. Vallabhaneni, I. Kholmanov, X. Ruan, J. Murthy, L. Shi, 《悬空石墨烯中局域非平衡声子的光学生成与探测》, Nano Letters 17 (2017) 2049–2056。URL：https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b00110。doi:10.1021/acs.nanolett.7b00110。

[26] D. D. Joseph, L. Preziosi, 《热波》, 《现代物理评论》61 (1989年) 41–73。URL：https://link.aps. org/doi/10.1103/RevModPhys.61.41。doi:10.1103/RevModPhys.61.41。

[27] J. Chen, D. Tzou, J. Beraun, 《超快激光加热的半经典双温模型》, Int. J. Heat Mass Transfer 49 (2006年) 307–316。URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S001793100500445X。doi:https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.06.022。

[28] A. Pattamatta、C. K. Madnia，使用玻尔兹曼输运模型对金薄膜中的电子-声子非平衡进行建模, 《传热学杂志》131（2009年）082401。网址：https://doi.org/10.1115/1. 3111258。

[29]W. Miao、M. Wang，非平衡效应对金属中电子-声子耦合常数的影响，《物理评论B》103（2021年）125412。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.125412。doi:10.1103/PhysRevB.103.125412。

[30] X. Tong、M. Bernardi，面向材料中电子与原子振动耦合超快动力学的精确模拟，《物理评论研究》3（2021年）023072。URL：https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevResearch.3.023072。doi:10.1103/PhysRevResearch.3.023072。

[31] Y. Wang、Z. Lu、A. K. Roy、X. Ruan，层间层对金属-介电系统中界面热输运和热电子冷却的影响：电子-声子耦合视角，《应用物理学杂志》119（2016年）065103。URL：https://doi.org/10.1063/1.4941347。doi:10.1063/1.4941347。

[32] C. Zhang、H. Rezgui、M. Lian、H. Liang，基于多温度动力学模型的非平衡输运与声子支分辨尺寸效应，《今日材料：物理》59（2025年）101893。URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2542529325002494。doi：https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2025.101893。

[33] C. Zhang, R. Guo, M. Lian, J. Shiomi，《超快加热系统中的电子–声子耦合与非平衡热传导》，《应用热工程》249（2024年）123379。URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431124010470。doi：https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.123379。

[34]Z. Guo, K. Xu，《多尺度流动离散统一气体动理学格式的进展》，《航空动力学进展》3（2021年）6。URL：https://doi.org/10.1186/s42774-020-00058-3。doi：10.1186/ s42774-020-00058-3。

[35] S. Succi, I. V. Karlin, H. Chen，《专题综述：H定理在格子玻尔兹曼流体动力学模拟中的作用》，《现代物理评论》74（2002年）1203–1220。URL：https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.1203。doi：10.1103/RevModPhys.74.1203。

[36]W. Miao、M. Wang，电子-声子耦合在金属/半导体多层薄膜热输运中的重要性，Int. J. Heat Mass Transfer 200 (2023) 123538。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931022010079。doi：https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123538。

[37] A. Muthukunnil Joseph, B.-Y. Cao，《氮化镓热输运的电子-声子蒙特卡罗研究》，国际热科学期刊181 (2022) 107742。URL: https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S1290072922002757。doi:https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2022.107742。

[38] F. Filbet, S. Jin, 《适用于动力学方程及相关刚性源项问题的一类渐近保持格式》, 计算物理学杂志 229 (2010) 7625 – 7648。URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110003323。doi:10.1016/j.jcp.2010.06.017。[39] Z. Guo, J. Li, K. Xu, 《动力学格式的统一保持性质》, 《物理评论E》107 (2023) 025301。URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.107.025301。doi:10.1103/PhysRevE. 107.025301。[40]G. A. Bird, 《分子气体动力学与气体流动直接模拟》, 牛津大学出版社, 1994。URL: https://doi.org/10.1093/oso/9780198561958.001.0001。doi:10.1093/oso/ 9780198561958.001.0001。

[41]S. Peng、S. Chen、H. Liang、C. Zhang, 《多尺度声子输运的半隐式 Lax-Wendroff 动理学格式》, 《计算机与应用数学》187（2025年）72–84。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122125001130。doi：https://doi.org/10.1016/j.camwa.2025.03.019。

[42] S. Chen、Z. Guo、K. Xu、Z. Li, 《用于含弛豫项动理学方程的半隐式 Richtmyer（Lax-Wendroff）格式》, ResearchGate（2022）。网址：https://www.researchgate.net/publication/365195373_Semi-implicit_Richtmyer_Lax-Wendroff_scheme_for_kinetic_equation_with_relaxation_term。doi：10.13140/RG.2.2.33938.94403。

[43] K. C. Collins, A. A. Maznev, Z. Tian, K. Esfarjani, K. A. Nelson, G. Chen, 《利用玻尔兹曼输运方程分析瞬态热光栅的非扩散弛豫》, 《应用物理学杂志》114 (2013) 104302。网址：https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4820572。doi:10.1063/1.4820572。[44] A. A. Maznev, J. A. Johnson, K. A. Nelson, 《金属中的非平衡瞬态热光栅弛豫》, 《应用物理学杂志》109 (2011) 073517。网址：https://doi.org/10.1063/1.3569731。doi:10.1063/ 1.3569731。[45] Y. Sivan, M. Spector, 《金属中光诱导热光栅的超快动力学》, ACS Pho- tonics 7 (2020) 1271–1279。网址：https://doi.org/10.1021/acsphotonics.0c00224。doi:10.1021/ acsphotonics.0c00224。