

学校编码: 10384

分类号 _____ 密级 _____

学号: 19820121152760

UDC _____

廈門大學

碩 士 學 位 論 文

低维系统热输运的理论及数值研究

Theoretical and numerical study of heat transport
in low-dimensional systems

曹小东

指导教师姓名: 贺达海 副教授

专业名称: 理论物理

论文提交日期: 2015年 月

论文答辩日期: 2015年 月

学位授予日期: 2015年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2015年 月

厦门大学博硕士学位论文摘要库

Typeset by L^AT_EX 2_ε at June 18, 2015

With package XMUthesis v0.2 from Yu Chen

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其他个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

- 1、保密()，在 年解密后适用本授权书。
- 2、不保密()。

(请在以上相应括号内打“√”)

作者签名： 日期： 年 月 日

导师签名： 日期： 年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

摘 要

对低维系统热输运性质的研究一直以来都受到人们的普遍关注，特别是在近年来实验上对低维系统的制备和操控日趋成熟，纳米尺度小系统呈现的丰富的新奇物理现象以及其蕴藏的巨大应用潜能越来越受到研究者重视的背景下，对低维系统的热输运性质的研究就显得越发的重要。对于低维小系统，量子效应，非平衡态效应，以及非线性效应等都对体系的热输运性质有着极其重要的影响。本文对实际体系中普遍存在的界面热阻，热膨胀，以及近年来受到广泛关注的物质态的拓扑性质对低维系统的热输运性质的影响做了研究，并对一维简谐链中的涨落-耗散定理的成立与否做了讨论。此外，除了对上述具体问题的讨论外，我们还研究了低维系统热传导的一般性理论，发展了能够处理热膨胀效应的自洽声子方法，并将泛函重整化群理论成功的运用到一维系统的热传导的研究当中。

关键词： 热传导，重整化群，热膨胀，界面热阻，涨落-耗散定理

厦门大学博硕士学位论文摘要库

Abstract

In recent decades, intense attention has been paid to the thermal transport in low-dimensional systems. Progress on the experimental realization and manipulation of systems at the micro- or nano- scale have stimulated exploration of the zoo of novel phenomena and their potential application. The impact of quantum effect, non-equilibrium effect, and anharmonic effect on the thermal transport in low-dimensional system can not be overestimated for the micro- or nano- scale nature of these systems. In this thesis, we explored the impact of boundary resistance, thermal expansion, and topological aspect of matter on thermal transport in low-dimensional systems. We also discussed the fluctuation-dissipation theorem of thermal transport in one-dimensional harmonic chain. Further more, we developed a self-consistent phonon theory which can handle thermal expansion effect, and we also succeed in developing the functional renormalization group theory of thermal transport in low-dimensional systems.

Keywords: thermal transport, renormalization group, thermal expansion, thermal boundary resistance, fluctuation-dissipation theorem

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目 录

摘要	i
Abstract	iii
目录	v
第一章 研究背景简介和论文安排	1
第二章 热膨胀对一维系统热输运性质的影响	5
2.1 研究背景	5
2.2 模型和方法	6
2.3 结果和讨论	9
2.4 本章小结	12
第三章 界面热阻及负温度跳跃	19
3.1 研究背景	19
3.2 模型和理论方法	20
3.3 结果和讨论	21
3.4 本章小结	27
第四章 铁磁绝缘体中的磁振子霍尔效应	31
4.1 研究背景	31
4.2 模型和能带结构	32
4.3 拓扑性质	36
4.4 纵向热导率	38
4.5 平能带	42
4.6 本章小结	44

第五章 一维简谐链中涨落耗散定理的检验	49
5.1 研究背景	49
5.2 理论模型	50
5.3 含时热流表达式	50
5.4 稳态下的平均热流	52
5.5 稳态下的热流涨落	54
5.6 本章小结	60
第六章 一维系统热输运的泛函重整化群理论	63
6.1 研究背景	63
6.2 非平衡态晶格热传导的泛函重整化群理论	64
6.3 截断参数和流方程	66
6.4 泛函重整化群在热传导中的运用:一维 ϕ^4 模型	70
6.5 单粒子检验	72
6.6 本章小结	74
致谢	79
硕士期间发表文章目录	81

第一章 研究背景简介和论文安排

近年来，对低维系统的研究引起了人们的广泛兴趣。在低维系统中，量子效应，非平衡态效应，强关联效应等对体系的物理性质有着及其重要的影响。由于维度上的限制，低维材料能够具有一般体材料所不具备的新奇物理性质，例如在准二维铜氧平面上的高温超导电性，强磁场下二维电子气中的整数，分数霍尔效应，以及稀有重金属氧化物二维平面上可能存在的自旋液体相等等。在这些新奇的物理现象中，受物理维度限制的一个典型代表为遵循非阿贝尔统计的任意子，因为只有在二维这个特殊的维度下才有可能实现其任意子统计。同时，相比于宏观体系，量子小系统的自由度很少，所以在外界的干扰下，这些系统很容易偏离平衡态，这使得传统上处理近平衡态的线性响应理论失效。基于上述的一系列实际运用和理论上的需求，关于低维系统的理论和实验研究得到了极大地发展。

热输运理论在很早便受到了人们的关注 [1]。对于宏观体系中的非平衡态现象，我们对其的理解依赖于基于现象学的连续性方程。如果我们所研究的系统并没有远离全局平衡，那么我们可以假设系统中的流正比于其广义上的热力学力。据此，对于热流，我们有著名的傅里叶定律 $J = -\kappa \nabla T$ [1, 2]。其中 J 为热流， κ 为系统的热导率， ∇T 为温度梯度。但是，如果我更细致的分析此定律，我们会发现，首先此定律只能运用于具有局域平衡的系统中，因为只有在这种系统中我们才能够定义温度这一物理量，而对于远离局域平衡的物理系统中温度的定义现在仍处于讨论当中，关于这点我们将会在第 3 章做具体的讨论。并且由于此定律是基于现象学上的考虑，所以其并不能把握住系统的物理微观机制。进一步，我们可以问：对于低维系统，傅里叶定理是不是能够适用？或者对于什么样的系统傅里叶定律才能适用？导致系统遵循傅里叶定律的背后微观物理机制是什么？对于这一系列问题的回答正是低维系统热输运理论和实验研究的一个重要课题。

虽然近年来在关于低维热输运的实验研究方面取得了很大的进展，但是受限于实验样本的大小，纯净度和实验测量手段等方面的限制，实验上现在还不能确切的回答上述问题。我们现有的对低维系统热输运性质的了解主要来自于理论分析和数值计算。关于这方面的理论，从历史发展的角度来讲，主要包括

早期的波尔兹曼气体输运方程 [3, 4], Debye声子气理论 [4], 以及在此基础上R. Peierls提出的声子气波尔兹曼方程 [4], 这些理论主要是基于动理学的。同时, 也有相当的研究是基于流体力学的, 典型的为流体力学方程组的重整化群理论 [5], 以及模耦合理论 [6]等。这些理论普遍认为对于动量守恒的一维晶格体系, 其热传导为反常的, 而动量不守恒系统则一般遵循正常的热传导行为。同时, 基于平衡态的流关联和时空关联 [7]的数值计算以及直接的非平衡态数值模拟 [6]也在低维系统热输运性质的理解上扮演着重要的角色, 其提供的数值证据也为上述结论提供了支持。然而, 最近的研究发现 [8], 非对称的粒子间相互作用势对于低维系统的热输运性质有着极其重要的影响。对于特定温度区间和非对称度下的动量守恒系统, 系统也可以具有正常的热传导行为。这些新的研究结果使得我们需要重新审视以前的研究结果。虽然, 现在对于导致正常热传导的物理机制还没有一个普遍接受的定论, 但是这方面的研究已经极大的加深了我们对于低维系统热输运性质的认识。另一方面, 从理论发展的角度来讲, 对于强相互作用的物理体系的理解始终是物理学的一个研究中心。对于这类系统, 由于不存在一个小的可供作微扰展开的能量尺度, 及多能量尺度之间的耦合, 传统的微扰论将失效。而对于这类系统的理解, 重整化群理论扮演着极其重要的角色, 例如早期的Wilson动量壳重整化群对Kondo效应的解释, Kadanoff实空间重整化群对二维Ising模型的讨论, 到现在的密度矩阵重整化群对一维强关联系统物理性质的精确计算, 泛函重整化群对二维Hubbard模型中自旋涨落诱导d-波超导的肯定和铁基超导电子配对模式的研究, 张量重整化群对强关联系统中量子纠缠重要性的揭示等。而在低维系统热传导的研究中, 目前还没有一个基于体系哈密顿量, 能够处理强非线性和量子效应的理论, 这正是我们发展一维非简谐链的泛函重整化群理论的初衷。

下面我们对本文的安排做一简单概述:

第二章: 非对称的粒子间相互作用势在有限温度下的一个具体物理效应便是热膨胀。因此, 我们在本章中对具有非对称相互作用势的一维FPU- $\alpha\beta$ 链做了理论和数值的研究。具体的, 我们通过数值模拟和自洽声子理论, 讨论了相互作用的非对称性对系统热导的影响。

第三章: 在实际材料中, 界面是广泛存在的, 而在界面上由于材料间具体性质的不同, 会导致界面热阻的出现。针对这一问题, 我们在本章中, 通过量子郎之万理论和数值模拟, 对两节和三节一维链中界面上热流和温度跳跃做了

具体的研究。

第四章：最近对于以拓扑绝缘体为代表的物质态的拓扑性质的研究引起了研究者的广泛兴趣，并且由于其在自旋电子学，拓扑量子计算中的巨大运用潜能受到了各个领域的关注。作为拓扑绝缘体的波色类似，磁振子霍尔效应也受到了理论和实验研究的极大兴趣。在本章中，我们对Lieb晶格上的磁振子霍尔效应做了具体的研究，并着重讨论了体系纵向热导率和拓扑相图之间的关系。

第五章：热传导中的涨落-耗散定理成立与否在最近也引起了大家的关注。其出发点为，温差作为热流的共轭热力学力，其并不对应具体的微观或者动力学自由度。所以热输运在线性响应理论中可能扮演者比较特殊的角色。在本章中，我们主要通过量子郎之万理论，具体的计算了一维谐振子链上稳态热流的涨落，并将其与涨落-耗散定理的结果做了对比。

第六章：重整化群做为处理多体问题的一套标准理论，其最大优点是能够处理具有多尺度耦合的物理系统，并且其一般能够给出超出微扰论范围的结果。而对于热传导，现有的理论很多是基于平均场近似和多体微扰论的。基于此，在本章中，我们尝试发展了热输运的泛函重整化群理论。

参考文献

- [1] Joseph Fourier. *Theorie analytique de la chaleur, par M. Fourier.* Chez Firmin Didot, père et fils, 1822.
- [2] Sybren Ruurds De Groot and Peter Mazur. *Non-equilibrium thermodynamics.* Courier Corporation, 2013.
- [3] Sauro Succi. *The Lattice-Boltzmann Equation.* Oxford university press, Oxford, 2001.
- [4] Rudolf Ernst Peierls. *Quantum theory of solids.* Clarendon, 1955.
- [5] Onuttom Narayan and Sriram Ramaswamy. Anomalous heat conduction in one-dimensional momentum-conserving systems. *Physical review letters*, 89(20):200601_1–200601_4, 2002.
- [6] Stefano Lepri, Roberto Livi, and Antonio Politi. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Phys. Rep.*, 377(1):1 – 80, 2003.

- [7] Hong Zhao. Identifying diffusion processes in one-dimensional lattices in thermal equilibrium. *Physical review letters*, 96(14):140602, 2006.
- [8] Yi Zhong, Yong Zhang, Jiao Wang, and Hong Zhao. Normal heat conduction in one-dimensional momentum conserving lattices with asymmetric interactions. *Phys. Rev. E*, 85:060102, Jun 2012.

厦门大学博硕士学位论文摘要库

Degree papers are in the “[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)”.

Fulltexts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.