



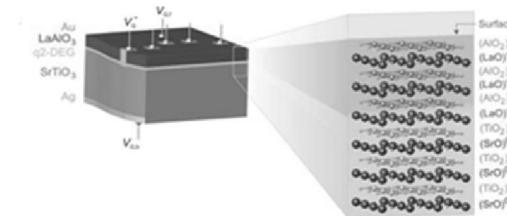
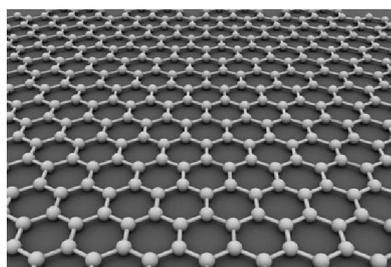
中国科学技术大学  
University of Science and Technology of China

# 利用二维电子气平衡态计算 电导率

物理学院 赵汗青  
指导老师：徐春凯

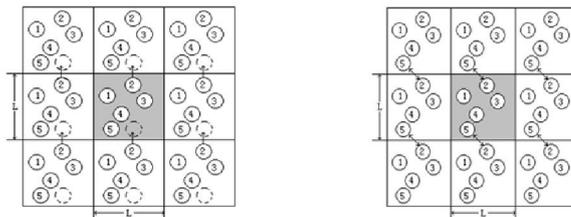
## 二维电子气

- 随着2004年，英国曼彻斯特大学物理学家安德烈·海姆和康斯坦丁·诺沃肖洛夫，成功地在实验中从石墨中分离出石墨烯，二维及低维材料领域受到越来越多的关注。
- 电子气模型则是研究材料性质的一个重要的方法，利用电子气模型可以很好地对电子运动状态，微观电流等性质进行数值分析。

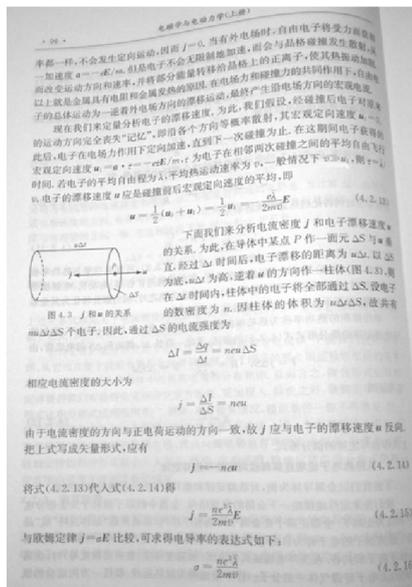


## 二维电子气的模拟方法

- 从计算数学的观点来看，MD方法是一个初值问题，主要用有限差分方法来求解。能够求解Newton运动方程的有限差分算法很多，但分子动力学计算原子数目较多，所以对时间和空间要求都比较高，需要研究适合于分子动力学的时间积分算法。



## 原有经典理论对电导率的推导



在目前比较广泛使用的大学教材中给出的金属电导率为

- $\sigma = \frac{ne^2\tau}{2m}$
- 或者
- $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$
- 其中 $\tau$ 是电子和正离子平均碰撞时间间隔， $m$ 为电子质量. 这两组式子显然相差一个1/2因子。
- 在文献中指出，这两个式子都属于经典理论，差别在于近似程度不同. 前者是认为碰撞时间间隔没有分布，即所有碰撞的时间间隔都为 $\tau$ 所得的结果，而后者是认为所有碰撞时间间隔服从泊松分布的结果。

在平衡态下对于电导率的推导

在平衡态下对于电导率的推导

## 结果与讨论

- 我们利用MD方法进行模拟，对其中若干个粒子进行追踪，得到了速度、加速度随着时间的关联：

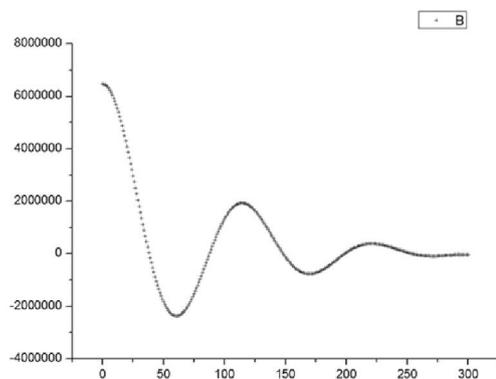


图3-1速度随着时间的关联

## 结果与讨论

## 结果与讨论

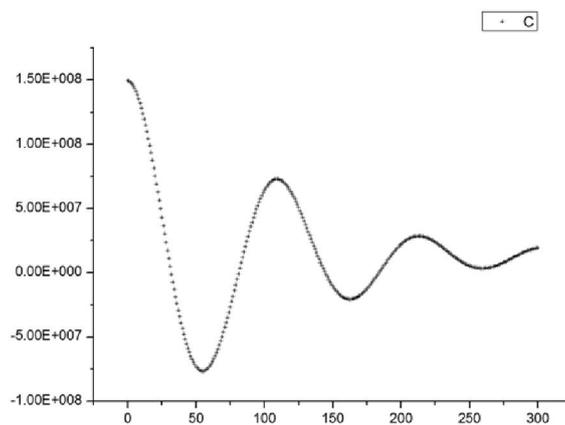


图3-2加速度随着时间的关联

## 结果与讨论

- 我们将两条曲线放在一起比较：

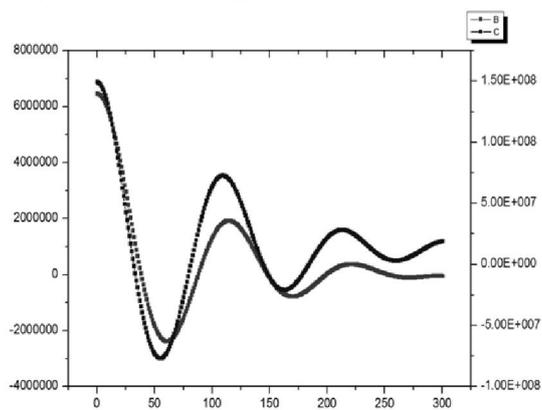


图3-3速度、加速度随着时间的关联

## 结果与讨论

## 小结

**谢谢！**