

現代科學探索

目 錄

- 1 二維材料邊緣缺陷對電子結構演變的理論分析
趙 凱
- 7 城市形態對熱島引發局地對流的理論機制研究
黃振梁
- 15 訓練語料特徵對大型語言模型湧現行為的理論探討
李忻程

DOI: 10.53104/xdkxsts.2026.02.01.001

二維材料邊緣缺陷對電子結構演變的理論分析

趙凱¹

1. 河南工程學院，河南 鄭州 451191

摘要：二維材料因其原子級厚度、特殊晶格結構和可調電子性質，在電子器件、光電轉換、催化反應和新型功能材料等領域具有重要研究價值。邊緣缺陷作為二維材料中普遍存在的結構因素，不僅改變材料局部原子配位元和成鍵狀態，也會引起電子態分佈、能帶結構和電荷密度的重新調整。本文從理論分析角度出發，圍繞邊緣原子缺失、邊緣重構和化學修飾三類典型缺陷，探討其對二維材料電子結構演變的影響機制。研究認為，邊緣缺陷可通過破壞晶格週期性形成局域電子態，通過改變軌道耦合方式調節帶隙和邊緣態分佈，並通過電荷轉移與軌道雜化影響費米能級位置和載流子輸運行為。邊緣缺陷並非單純的結構損傷，而是具有可設計性的電子結構調控單元。對其作用機制的理論認識，有助於推動二維材料在缺陷工程、光電器件和催化功能化設計中的進一步應用。

關鍵字：二維材料；邊緣缺陷；電子結構；缺陷工程；理論分析

Theoretical Analysis of the Influence of Edge Defects on Electronic Structure Evolution in Two-Dimensional Materials

ZHAO Kai¹

1. Henan University of Engineering, Zhengzhou 451191, P. R. China

Correspondence to: ZHAO Kai; Email: z484653135kai@163.com

Abstract: Two-dimensional materials have attracted considerable research attention because of their atomic-scale thickness, unique lattice structures, and tunable electronic properties, showing potential applications in electronic devices, photoelectric conversion, catalytic reactions, and advanced functional materials. As common structural features in two-dimensional materials, edge defects not only alter local atomic coordination and bonding states, but also lead to the redistribution of electronic states, band structures, and charge density. From a theoretical perspective, this paper examines the influence of typical edge defects, including edge vacancies, edge reconstruction, and chemical modification, on the evolution of electronic structures in two-dimensional materials. The analysis suggests that edge defects can induce localized electronic states by breaking lattice periodicity, regulate band gaps and edge-state distributions by changing orbital coupling, and affect Fermi-level positions and carrier transport through charge transfer and orbital hybridization. Edge defects should not be regarded merely as structural damage, but as designable units for electronic structure regulation. A deeper theoretical understanding of their mechanisms may provide useful insights for defect engineering, photoelectric devices, and catalytic functionalization of two-dimensional materials.

Key words: two-dimensional materials; edge defects; electronic structure; defect engineering; theoretical

通信作者：z484653135kai@163.com

引用格式：趙凱. 二維材料邊緣缺陷對電子結構演變的理論分析[J]. 現代科學探索, 2(1): 1-6.

analysis

引言

二維材料因為高度各向異性、原子級厚度和量子限制效應，在基礎物理研究和應用技術中受到廣泛關注^[1]。這些材料在電子遷移率、載流子濃度和熱導率上表現優異，在光學、磁學和催化反應中也有獨特功能。石墨烯零帶隙、高電子遷移率，適合高速電子器件。過渡金屬二硫化物可調帶隙，光吸收強，常用於光電子器件和光催化。黑磷、六方氮化硼等二維晶體的能帶結構和光學回應各異，也引起科研和工程關注。

實際製備過程中難免會出現各種缺陷，尤其是邊緣缺陷。這些缺陷可能來自原子缺失、晶格錯位、邊緣重構或環境化學修飾。邊緣缺陷改變局部原子排列對稱性，也會導致電子態重新分佈和局域化，對整體電子結構影響明顯^[2]。與體內缺陷相比，邊緣缺陷原子不飽和鍵多，局部低對稱性明顯，對載流子行為、能帶形態和局域磁性影響更大。這種調控可能降低材料性能，例如增加散射、降低遷移率，也可能帶來新功能，如帶隙調節、局域磁性甚至拓撲電子態^[3]。

近年的理論研究和計算類比顯示，邊緣缺陷可產生新的局域電子態、改變能帶寬度、影響電子有效品質，甚至在特定條件下誘導磁性或自旋極化。這些變化不僅取決於缺陷類型、位置和密度，還受邊緣化學環境、原子重構和鄰近晶格應力影響。因此，理解邊緣缺陷對電子結構的調控機制，對二維材料性能優化、功能化設計和缺陷工程具有重要價值。本文將基於現有理論，分析邊緣缺陷類型、局域態形成、能帶重排和電子密度調整，為缺陷調控策略提供理論依據。

1 邊緣缺陷類型與電子結構影響

1.1 邊緣缺陷類型與電子結構影響

二維材料邊緣不同於內部晶格。邊緣原子配位元低，化學鍵未飽和，局部對稱性低。邊緣不是

簡單的晶格終止，而是電子結構變化關鍵區域。當邊緣出現原子缺失、重構或外來基團吸附時，週期性勢場被打破，電子態密度、能帶邊緣和載流子輸運會變化。邊緣缺陷影響有兩面：它增加電子散射，降低遷移率，也可能引入局域態、調節帶隙、誘導磁性或催化活性。因此，分析邊緣缺陷應關注缺陷如何改變原子構型，並進一步引起電子結構變化。

1.1 缺失原子與局域態形成

邊緣原子缺失是常見缺陷。二維材料厚度接近原子尺度，邊緣原子對整體電子結構貢獻大。邊緣缺失單個或多個原子時，晶格排列被破壞，周圍原子成鍵狀態改變，未配對電子或懸掛鍵在缺陷附近形成局域化電子態。局域態通常局限在缺陷周圍，能級可能在價帶頂、導帶底或禁帶區域，改變電子躍遷條件。

缺失原子引起局域勢場擾動。完整晶格中電子運動依賴週期勢場，缺陷出現破壞週期性，使電子在缺陷附近散射或束縛。缺陷態在費米能級附近時，直接影響導電性。石墨烯高遷移率，邊緣缺失增加散射，使電子輸運不再理想。過渡金屬二硫化物或黑磷等半導體，邊緣缺陷可能縮小帶隙或形成陷阱態，影響電子和空穴複合。缺失原子還可能改變局部自旋分佈。部分二維材料完整晶格無磁性，但邊緣缺陷未配對電子可形成局域磁矩。鋸齒型邊緣或特定軌道材料，缺失原子增強邊緣態自旋極化，改變磁學回應^[4]。

1.2 邊緣重構與能帶調控

邊緣通常有高表面能。邊緣原子為降低能量，會調整位置，形成新鍵合方式，這叫邊緣重構。重構不同於缺失原子，不一定減少原子數，而是改變原子排列和成鍵，使局部結構穩定。常見重構包括鍵長收縮、鍵角改變、五元環和七元環形成及不同邊緣構型轉換。這些變化影響軌道重疊方式，引起能帶重新排列^[5]。

邊緣重構首先體現在能帶邊緣位置變化。導帶底和價帶頂通常由特定軌道貢獻，邊緣原子配位變化改變軌道雜化。重構可能增強軌道耦合，

頻寬增加，也可能削弱耦合，使電子態局域化。半導體材料中，帶隙增大或減小；金屬邊緣，費米能級態密度增強。邊緣重構還可能改變邊緣態分佈。不同邊緣取向對應不同電子態特徵，鋸齒型和扶手椅型邊緣電子結構不同。重構後，原邊緣態可能被削弱、分裂或重新分佈，改變導電通道。在納米帶中，邊緣重構對輸運影響更明顯。局部應變也可能影響電子能級，強自旋軌道耦合材料，重構可影響自旋相關能帶分裂^[5]。

1.3 化學修飾與電子密度分佈

邊緣缺陷有懸掛鍵和高反應活性，容易與環境原子、分子或基團作用。氫、氧、氮、硫及羥基、羧基可吸附邊緣，改變缺陷電子密度。化學修飾可鈍化缺陷，降低輸運干擾，也可通過電荷轉移引入新電子態，改變導電性和光學回應^[6]。鈍化懸掛鍵減少缺陷態，降低非輻射複合，提高載流子壽命和器件穩定性。某些吸附原子或基團給電子或吸電子，會導致邊緣電子富集或虧損，改變費米能級和載流子類型。化學修飾還可改變電子空間分佈，形成新的雜化態或表面電荷極化，影響輸運、光吸收和催化行為^[6]。

1.4 缺陷耦合效應

實際材料中，邊緣缺陷常多種同時存在。原子缺失可引發邊緣重構，重構又影響化學吸附。化學修飾可穩定缺陷或改變電子結構。因此，電子結構變化由缺陷、重構和化學環境共同控制。缺陷效應不單純有利或有害，取決於應用目標。提高遷移率時，過多缺陷不利；提高催化活性時，適當缺陷有利。

2 理論分析方法概述

二維材料邊緣缺陷影響電子結構有明顯多尺度特徵。一方面，邊緣缺陷表現為局部原子構型改變，如原子缺失、鍵長變化、邊緣重構和外來基團吸附。另一方面，這些結構變化影響電子態密度、能帶邊緣、費米能級位置和載流子輸運。因此，分析不能只停留在結構描述層面，需要聯繫原子結構、電子態分佈和材料宏觀性能。現有研究中，密度泛函理論、緊束縛模型和分子動力學類比是常用方法。三者側重點不同，但可以一起構成完整分析框架。

密度泛函理論是研究二維材料缺陷電子結構的重要方法。它從原子尺度出發，可以計算不同缺陷構型下的總能量、電子態密度、能帶結構和電荷分佈。對於邊緣缺陷，DFT 可以較清楚地顯示缺陷附近電子雲如何重新分佈。例如，邊緣原子缺失時，懸掛鍵可能在禁帶中引入缺陷能級；邊緣氧化或氫化時，電負性差異會導致電荷轉移，改變費米能級。這些變化難以用經驗判斷，而 DFT 可以提供清晰解釋。

DFT 還能判斷缺陷結構是否穩定，並比較不同缺陷對電子結構的影響。例如，鋸齒型邊緣和扶手椅型邊緣在電子態分佈上不同；單空位、雙空位或複雜重構對帶隙影響也不同。計算缺陷形成能可判斷缺陷熱力學穩定性；分析態密度和局域態可看缺陷是否在費米能級附近引入電子態；電荷密度差分分析可看缺陷區域電子積累或耗散情況。這些結果有助理解邊緣缺陷從“結構擾動”到“電子結構變化”的過程。

DFT 也有局限。計算量大，適合小模型，對大尺寸樣品、複雜缺陷分佈和長時間演化描述不足。不同泛函對帶隙結果有差異，半導體二維材料中可能低估帶隙。因此，使用 DFT 時不能只看計算結果，需要結合材料類型和物理意義。本文中，DFT 適合揭示缺陷電子結構變化機制，不是唯一解釋工具。

緊束縛模型適理解邊緣缺陷對能帶結構影響。相比 DFT，緊束縛模型不追求原子和電子作用的高精度計算，而是通過軌道間躍遷解釋電子運動規律。二維材料電子結構與晶格對稱性、邊緣取向和軌道耦合密切相關。邊緣缺陷破壞週期性，也改變局部軌道相互作用，緊束縛模型可直觀解釋邊緣態生成、帶隙變化和局域化現象。

緊束縛模型特別適合規律性問題。例如，二維納米帶寬度、邊緣形貌和缺陷分佈會影響能帶結構。緊束縛模型可比較不同邊緣構型下電子態變化趨勢，分析缺陷如何改變躍遷路徑和能級分裂。石墨烯等典型晶格材料，模型可顯示邊緣態與晶格取向關係。過渡金屬二硫化物多軌道體系，擴展後模型可解釋金屬和硫軌道耦合變化。緊束縛模型雖簡化電子相互作用，但可清楚解釋電子結構演變。

緊束縛模型計算效率高，適合大尺寸體系和缺陷分佈分析。實際材料中，邊緣缺陷不是孤立存在，通常按一定密度分佈。如果只用第一性原理計算，成本高。緊束縛模型可在較大尺度考察缺陷密度、缺陷間距和邊緣無序對輸運的影響。這樣可分析單個缺陷和多個缺陷協同作用下電子態演變規律。

分子動力學類比用於分析邊緣缺陷動態演化。二維材料邊緣不是靜止的，在溫度、應力、化學環境或加工條件下，邊緣原子可能遷移、重構或吸附原子。DFT 和緊束縛模型關注穩定構型，MD 補充構型形成和演化資訊。邊緣缺陷的電子結構變化依賴構型，構型受熱運動和環境影響。

MD 可觀察邊緣原子運動趨勢，判斷缺陷是否容易重構，分析拉伸或彎曲對穩定性影響。熱激發下，懸掛鍵可能重新成鍵，形成穩定環狀結構。應變下，鍵長和鍵角變化，進一步影響電子態。MD 不直接給精細電子結構，但提供接近實際條件的構型，供 DFT 和緊束縛分析。

實際研究中，這些方法通常結合使用。合理路徑：先用 MD 或結構優化獲得穩定缺陷構型；用 DFT 計算能帶、態密度和電荷分佈；再用緊束縛模型解釋物理機制，分析缺陷分佈對電子輸運影響。這樣既保留第一性原理精度，也清楚展示物理規律，還能兼顧實際缺陷複雜分佈。

邊緣缺陷電子結構演變的理論分析，是從結構穩定性到電子態變化，再到材料性能調控的連續過程。DFT 揭示缺陷電子結構細節，緊束縛解釋能帶變化物理機制，MD 補充缺陷形成和演化動態。三者互補，有助建立“缺陷類型—局部原子構型—電子結構回應—材料性能變化”的理論聯繫。

3 邊緣缺陷調控的理論啟示

理論研究顯示，邊緣缺陷不僅是二維材料中常見的結構現象，也可以用來調控電子結構和功能性能。通過控制缺陷類型、缺陷密度、分佈和化學環境，可以在原子尺度上調節材料能帶結構、電子態局域化和載流子輸運。不同缺陷有不同電子效應。單原子缺失或空位缺陷容

易形成局域態，可能增加費米能級附近態密度。邊緣重構可以調整帶隙寬度和重排邊緣態。化學修飾通過電荷轉移和軌道雜化進一步調節電子分佈。這些發現為缺陷工程提供方向。缺陷不僅限制材料性能，也可以成為可設計的功能元素^[7]。

在電子器件設計中，調控邊緣缺陷可以優化二維半導體材料的導電性和光學回應。通過精確控制缺陷密度，研究者可以定量調節局域態，保證電子輸運連續，同時引入足夠的局域能級用於光吸收或光生載流子捕獲。這對場效應電晶體、光電探测器和光催化器件很重要。例如，在過渡金屬二硫化物納米帶中，通過邊緣引入規律性單空位或雙空位缺陷，可調節禁帶寬度，提高特定波長光吸收效率。邊緣缺陷的空間分佈和排列方式還會影響載流子遷移率的方向異性，為電子器件定向導電提供理論依據。

在催化和光電應用中，邊緣缺陷調控可增加活性位元點密度和電子轉移效率。計算顯示，邊緣缺陷引入的未配對電子和局域軌道增強分子吸附，使電催化或光催化活性提高。例如，氧化修飾邊緣增強水分子或氧分子吸附，改變電子雲分佈，使電子轉移路徑短，提高催化效率。調控缺陷類型和化學修飾方式，可以控制催化活性位點佈置，為高效催化體系設計提供理論指導。

邊緣缺陷調控也可能影響材料磁性和自旋電子學性能。部分二維材料在缺陷調控下可能產生局域磁矩或自旋極化態，在自旋閥器件、磁性存儲和量子資訊領域有潛在應用。例如，在鋸齒型石墨烯邊緣中，適度引入邊緣空位和化學修飾可穩定局域自旋態，實現邊緣磁性調控。分析顯示，這種調控不僅取決於缺陷存在，還受缺陷排列、邊緣取向和化學環境的綜合影響。

理論分析還強調多尺度和多參數協同調控的重要性。單一缺陷類型可以改變局部電子結構，但實際材料中缺陷通常多樣且動態。研究表明，通過聯合控制缺陷類型、邊緣重構模式和化學修飾，可形成可預測電子結構演變規律。這為實驗製備提供方向。理論模型可預測哪些缺陷類型和化學環境組合有利於目標性能，從

而指導缺陷工程的精准化和可重複製備。

邊緣缺陷不僅是二維材料性能優化的關鍵變數，也是設計功能化材料的理論基礎。通過理論分析和模擬，研究者可在原子尺度預測缺陷對電子結構的調控效果，明確能帶調節、局域態控制、載流子遷移率優化和自旋特性調控的可行性。這些理論啟示豐富了二維材料物理理解，也為高性能電子器件、光電器件和催化體系設計提供可操作指導。未來研究可結合實驗驗證，建立從缺陷設計到功能性能的完整閉環，為缺陷工程和二維材料功能化開闢應用前景。

4 結論

二維材料邊緣缺陷對電子結構演變影響明顯。邊緣區域原子配位元不飽和，局部對稱性低，電子態分佈不均。當原子缺失、邊緣重構或化學修飾出現時，材料週期性勢場被破壞，電子結構發生變化。理論分析表明，邊緣缺陷對電子結構影響主要有三個方面：一是缺陷附近形成局域電子態，使電子在邊緣區域聚集；二是邊緣重構改變軌道耦合方式，影響能帶寬度、帶隙和邊緣態分佈；三是化學修飾通過電荷轉移和軌道雜化改變電子密度，影響導電性、光學回應和表面反應活性。

從深層次看，邊緣缺陷不僅是結構損傷，也可以調控材料性能。傳統認為缺陷降低材料品質和器件穩定性，因為它增加散射，形成複合中心，降低遷移率。但缺陷工程研究表明，適當缺陷可引入新電子態，調節費米能級，改變帶隙，甚至誘導局域磁矩和催化活性位點。邊

緣缺陷既可能降低性能，也可能賦予材料新功能。關鍵不是消除缺陷，而是理解缺陷作用機制，並通過控制缺陷類型、密度和化學環境實現性能優化。

電子結構演變不是單一因素作用結果，而是局部結構、電子態和外部環境共同作用。原子缺失引發懸掛鍵和局域態，邊緣重構重新分配軌道，化學修飾穩定缺陷或改變電荷分佈。它們之間相互耦合。例如，缺失原子提高邊緣化學活性，使吸附或修飾更容易；化學修飾可鈍化缺陷態或通過電荷轉移改變電子結構。因此，研究邊緣缺陷不能只關注孤立缺陷，要考慮動態演化和多因素協同作用。

邊緣缺陷調控為二維材料在電子器件、光電器件、自旋電子學和催化領域的功能化設計提供理論基礎。在電子器件中，缺陷影響載流子輸運和能帶結構，決定導電穩定性。在光電器件中，缺陷態影響光吸收、載流子分離和複合。在催化體系中，邊緣缺陷提供更多活性位元點，改善電子轉移效率。在自旋相關材料中，特定邊緣構型和缺陷分佈可誘導局域磁性。因此，邊緣缺陷既是理解二維材料微觀電子結構的重要切入點，也對功能應用具有調控意義。

二維材料邊緣缺陷影響呈多層次、可調控和應用導向。分析缺失原子、邊緣重構和化學修飾，可更清楚理解缺陷如何改變局域電子態、能帶和電子密度。邊緣缺陷不應只看作不利因素，而是具有調控潛力的結構單元。實現精準缺陷設計和控制，二維材料將在高性能電子器件、光電轉換、催化反應和量子功能材料中展現應用價值。

參考文獻：

- [1] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K. The electronic properties of graphene[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2009, 81(1): 109-162.
- [2] Yazyev O V, Chen Y P. Polycrystalline graphene and other two-dimensional materials[J]. *Nature Nanotechnology*, 2014, 9(10): 755-767.
- [3] 趙昕. 石墨烯衍生物及其複合材料的製備與性能研究[D]. 上海: 東華大學, 2013.
- [4] Li Y, Zhou Z, Zhang S, Chen Z. MoS₂ nanoribbons: High stability and unusual electronic and magnetic properties[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2008, 130(49): 16739-16744.
- [5] Ataca C, Şahin H, Aktürk E, Ciraci S. Mechanical and electronic properties of MoS₂ nanoribbons and their

defects[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115(10): 3934-3941.

[6] Bhatt M D, Lee J S, Lee G, et al. Various defects in graphene: A review[J]. RSC Advances, 2022, 12(33): 21520-21547.

[7] 葉劍波. MoS₂/石墨烯複合納米材料的製備及其電化學應用研究[D]. 浙江: 浙江大學, 2017.

版權聲明

© 2026 作者版權所有。本文依據“知識共用署名 4.0 國際授權合約”（CC BY 4.0）以開放獲取方式發佈。該許可允許使用者在任何媒介中自由使用、複製、傳播與改編文章（含商業用途），惟須明確署名原作者及出處，並注明所作修改（如有）。完整協議詳見：<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.zh-hans>

出版聲明

所有出版物中的陳述、觀點及資料僅代表作者及供稿者個人立場，與 Brilliance Publishing Limited 及/或編輯人員無關。Brilliance Publishing Limited 及/或編輯人員對因內容所提及的任何理念、方法、說明或產品所導致的人身或財產損害概不負責。

DOI: 10.53104/xdkxsts.2026.02.01.002

城市形態對熱島引發局地對流的理論機制研究

黃振梁¹

1. 湖北工業大學，湖北 武漢 430068

摘要：城市熱島是城市氣候中的重要現象。建築密度增加、地表硬化、綠地減少和人為熱排放集中，都會增強城市地表的吸熱和儲熱能力，使城市區域溫度高於周邊地區。熱島不僅會改變城市熱環境，也會影響近地層空氣運動，並在一定條件下誘發局地對流。本文從理論角度分析城市形態對熱島引發局地對流的作用機制。研究認為，建築密度、街穀結構、地表覆蓋、綠地水體和開放空間共同影響城市熱量積累、通風條件和水汽分佈。城市熱島通過加熱近地層空氣、形成水準溫度差和低層輻合，為空氣抬升提供熱力基礎。建築佈局和城市粗糙度會改變局地風場，增強機械湍流和局部抬升。水汽條件和邊界層變化則決定上升運動能否進一步發展為對流雲和短時降水。城市形態對局地對流的影響不是單一的溫度作用，而是熱力、動力和水汽條件共同作用的結果。合理優化建築密度、通風廊道、綠地水體和熱源分佈，有助於削弱熱島強度，調節局地空氣運動，降低城市局地天氣風險。

關鍵字：城市形態；城市熱島；局地對流；城市邊界層；熱力機制

A Theoretical Study on the Mechanism of Urban Form Affecting Local Convection Induced by Urban Heat Island

Huang Zhen-liang¹

1. Hubei University of Technology, Wuhan 430068, P. R. China

Correspondence to: Huang Zhen-liang; Email: huangzhen68liang@163.com

Abstract: Urban heat island is an important phenomenon in urban climate. Higher building density, hardened surfaces, reduced green space, and concentrated anthropogenic heat release can increase the ability of urban surfaces to absorb and store heat, making urban areas warmer than surrounding regions. Urban heat island not only changes the urban thermal environment, but also affects near-surface air movement and may induce local convection under certain conditions. This paper analyzes the theoretical mechanism through which urban form affects local convection induced by urban heat island. It argues that building density, street canyon structure, land surface cover, green and blue spaces, and open space jointly influence heat accumulation, ventilation conditions, and moisture distribution in cities. Urban heat island provides a thermal basis for air uplift by heating near-surface air, forming horizontal temperature differences, and strengthening low-level convergence. Building layout and urban roughness change the local wind field and enhance mechanical turbulence and local uplift. Moisture conditions and boundary-layer changes further determine whether rising air can develop into convective clouds and short-term precipitation. The influence of urban form on local convection is not only a temperature effect, but also the combined result of thermal, dynamic, and moisture conditions. Optimizing building density, ventilation corridors, green and blue spaces, and heat source distribution can help reduce heat

通信作者：huangzhen68liang@163.com

引用格式：黃振梁. 城市形態對熱島引發局地對流的理論機制研究[J]. 現代科學探索, 2(1): 7-14.

island intensity, regulate local air movement, and lower urban weather risks.

Key words: urban form; urban heat island; local convection; urban boundary layer; thermal mechanism

引言

城市化進程改變了地表特性和城市空間結構，也改變了城市氣候環境。建築密集、道路硬化、綠地減少和人口活動集中，使城市地表吸收和儲存熱量的能力增強。城市中心比周邊地區溫度高，形成熱島效應。熱島不僅影響城市舒適度，也可能改變空氣流動模式，進而影響局地天氣。局地對流是一種空氣垂直運動過程，它可能導致對流雲和短時降水的形成。城市熱島通過加熱近地層空氣、形成溫度差和低層輻合，為局地對流提供熱力基礎。城市形態決定熱量積累的位置、強度和空間分佈，從而影響局地對流的觸發條件和發展特點^[1]。

目前對城市熱島引發局地對流的研究，多集中於觀測和數值模擬。理論機制方面的系統梳理相對較少。瞭解城市形態如何通過熱力、動力和水汽條件影響局地對流，有助於揭示城市空間結構與城市氣象之間的關係，為城市規劃和熱環境管理提供理論參考。本文將從城市形態角度，討論熱島引發局地對流的理論機制，分析建築密度、街穀結構、地表覆蓋和水汽條件等因素如何共同作用，形成可能觸發局地對流的城市環境。

1 城市形態與熱島效應的形成基礎

城市熱島的形成，和城市地表性質有直接關係。自然地表中，植被、土壤和水體可以吸收一部分熱量，也可以通過蒸發和蒸騰帶走熱量。城市地表則不同。道路、廣場、屋頂和建築外牆多由瀝青、水泥、磚石、玻璃等材料構成。這些材料吸熱能力較強，白天容易積累太陽輻射帶來的熱量，夜間又會把儲存的熱量慢慢釋放出來。城市區域因此比周邊鄉村或自然地表更容易保持較高溫度^[2]。

城市形態會影響熱量在城市中的積累方式。建築密度較高時，城市地表和建築表面接收的太陽輻射不容易快速散失。陽光進入街道

和建築之間後，會在牆面、地面和玻璃表面之間發生多次反射。部分熱量被建築材料反復吸收，使街道空間持續升溫。街道越窄，建築越高，熱量越容易被限制在街穀內部。這樣的空間結構會削弱城市散熱能力，也會增強局部熱島強度。

建築高度和建築間距還會影響城市通風。開闊地區的風可以較順利地流動，熱空氣也容易被帶走。密集建築會阻擋風的進入，使近地面空氣交換變弱。風速降低後，地表釋放的熱量不容易擴散，熱空氣便會在建築群之間停留。若街道方向與當地主要風向不一致，通風效果會進一步下降。此時，城市熱量不僅來自地表吸收，也來自空氣流動不暢造成的熱量滯留。

城市地表覆蓋方式同樣重要。大面積硬化地表會減少水分蒸發，使更多能量轉化為顯熱，也就是直接加熱空氣的熱量。綠地和水體較少的區域，地表降溫能力弱，白天升溫快，夜間降溫慢。商業區、交通樞紐和高密度居住區通常硬化比例較高，人流、車流和建築能耗也較集中，因此更容易形成高溫中心。公園、河道、湖面和開敞空間則可以降低周邊溫度，但這種作用受到面積和分佈位置的影響。如果綠地面積過小，或被高密度建築包圍，其降溫作用很難向外擴散。

城市熱島並不是均勻分佈的。不同城市空間具有不同的熱環境。高密度建築區、主幹道路、工業用地和大型商業區往往是熱量集中的地方。低密度居住區、城市綠地和濱水空間則相對較涼。城市形態把這些不同空間連接在一起，形成冷熱交錯的熱力格局。熱島效應因此不只是城市整體升溫的問題，也是城市內部熱量如何分佈的問題。

城市形態對熱島效應的影響主要體現在三個方面。建築和道路材料改變了地表吸熱和儲熱過程；建築密度和街穀結構改變了散熱和通風過程；綠地、水體和開放空間改變了城市內部的冷卻能力。三種作用共同決定城市熱島的

強度、範圍和空間位置。也正因為如此，城市形態成為理解熱島效應的重要基礎。只有弄清城市空間如何造成熱量積累，才能進一步分析熱島怎樣影響近地層空氣運動，並為局地對流提供觸發條件^[3]。

2 熱島影響局地對流的熱力機制

城市熱島會使城市區域的近地面空氣溫度高於周邊地區。地表受熱後，熱量傳給近地層空氣。空氣溫度升高後會膨脹，密度下降，變得更容易向上運動。城市上空因此會形成較明顯的熱力抬升。局地對流的起點，往往就是這種近地面暖空氣的上升。沒有這種抬升，空氣很難突破低層穩定結構，也就難以形成明顯的對流活動。城市熱島造成的抬升，並不是孤立發生的。城市中心較熱，周邊郊區或自然地表相對較涼，兩者之間形成溫度差。溫度差會進一步造成氣壓差。較熱區域近地層氣壓偏低，周邊較涼區域空氣會向城市熱區流動。空氣在城市熱區附近聚集後，不能一直停留在近地面，只能向上抬升。這種低層輻合和上升運動，是熱島誘發局地對流的重要環節^[4]。

熱島強度越大，近地層溫度差越明顯，低層輻合也可能越強。特別是在風速較小、天氣背景較穩定的情況下，城市自身的熱力作用會更加突出。弱風條件下，熱量不容易被水準輸送走，城市熱區可以維持較長時間。近地層空氣不斷受熱，城市上空的上升運動也會持續存在。這種持續抬升雖然不一定直接形成強對流，但可以為局地對流積累條件。

城市熱島還會改變城市邊界層的結構。邊界層是地表和上層大氣之間進行熱量、水汽和動量交換的空間。城市地表持續加熱後，近地層湍流增強，空氣上下混合變得活躍。熱量可以從地面附近向更高位置輸送，邊界層高度也可能升高。邊界層變厚後，城市熱島的影響不再只停留在街道和建築附近，而是可以擴展到城市上空更高的範圍。這種邊界層變化對局地對流很重要。對流雲的形成需要空氣上升到一定高度，並在上升過程中發生冷卻和凝結。如果城市熱島使暖空氣更容易被帶到高處，水汽凝結的機會就會增加。若低層空氣中水汽較多，暖濕空氣在上升過程中會形成雲滴。水汽凝結時

會釋放熱量，這部分熱量又會加強空氣上升，使對流進一步發展^[5]。

不過熱島並不能單獨決定局地對流是否發生。對流形成還需要水汽和大氣不穩定條件。若城市空氣較幹，暖空氣即使上升，也難以形成明顯雲系。若上方大氣較穩定，上升空氣可能在較低高度就被壓制，無法繼續發展。因此，熱島更準確地說是一種觸發條件，而不是唯一原因。它可以提供初始抬升，也可以加強低層擾動，但對流是否發展，還要看水汽、層結和背景風場是否配合。

城市熱島的日變化也會影響局地對流。白天，太陽輻射使道路、屋頂和建築牆面快速升溫，城市近地層空氣被不斷加熱。午後到傍晚，地表溫度較高，邊界層混合較強，是局地對流較容易被觸發的時段。夜間，周邊自然地表降溫較快，城市建築和道路仍會釋放白天儲存的熱量，城市熱島仍然存在。夜間熱島雖然不一定引發強對流，但會改變低層溫度結構，使第二天白天的邊界層發展受到影響。城市內部的熱力分佈並不均勻。商業區、交通幹道、工業用地和高密度居住區往往更熱，公園、水體和開敞空間相對較涼。不同熱區之間會形成小尺度溫度差。局部高溫區上空的空氣更容易上升，周邊較涼空氣會向這些熱區補充。這樣一來，城市內部可能出現多個小型上升中心。局地對流的觸發位置，就可能受到這些熱力中心的位置影響。熱島引發局地對流的位置，也可能不在城市最熱的中心區。若背景風較弱，對流更可能出現在城市熱區上空。若背景風較明顯，城市產生的熱量、湍流和水汽會被風帶向下風方向。空氣經過城市後獲得額外熱量，在下風區域繼續抬升。此時，對流可能在城市邊緣或下風側發展。城市中心提供熱力擾動，下風區域成為對流釋放的位置，這也是城市影響局地天氣的重要表現。

城市形態會直接影響這種熱力機制。高密度建築區容易儲存更多熱量，熱島強度較高，低層空氣上升更明顯。街穀較深、通風較差的區域，熱空氣容易滯留，低層溫度升高更快。大面積硬化地表會減少蒸發，使更多能量用於加熱空氣。綠地和水體較多的區域則會降低近地面溫度，削弱熱島強度。城市中冷熱空間的組合方

式，決定了熱力梯度的大小，也影響低層空氣彙聚和上升的位置。因此，熱島影響局地對流的過程可以理解為一個連續的熱力鏈條。城市地表吸熱和儲熱，使近地層空氣升溫；空氣升溫後密度下降，產生上升運動；城市與周邊地區的溫差引起低層輻合；輻合進一步加強抬升；邊界層混合把熱量和水汽輸送到更高位置；當水汽和大氣不穩定條件具備時，局地對流便可能被觸發。這個過程說明，城市熱島並不是單純的氣溫問題，它還會改變城市上空的空氣運動方式。

3 建築佈局對城市風場和抬升運動的影響

建築佈局不僅會影響城市熱量積累，也會改變城市內部的風場。風進入城市後，會受到建築物高度、間距、排列方向和街道走向的影響。開闊地表上的風可以較順暢地流動，進入高密度建築區後，風速會下降，風向也會變得更複雜。建築物像一個個障礙物，會阻擋、分流和改變空氣運動。空氣在建築之間穿行時，會出現加速、減速、繞流和迴旋等現象。城市風場因此不再是簡單的水準流動，而是形成許多小尺度的氣流變化^[6]。

高層建築對風場的影響更明顯。風遇到高層建築後，一部分空氣會被迫向上運動，一部分空氣會繞過建築兩側，還有一部分空氣會沿著建築表面向下流動。建築背風側常會出現渦旋區，空氣在這裡停留和回流。若這些區域本身溫度較高，熱空氣就容易在建築周圍積聚。積聚到一定程度後，受熱空氣會繼續向上輸送，形成局部抬升。這樣的抬升雖然範圍不大，但可以加強城市邊界層內部的擾動。

建築密度較高時，城市近地層通風能力會下降。通風能力下降後，地面和牆面釋放的熱量不容易被帶走。熱空氣停留在街道和建築之間，近地層溫度持續升高。空氣受熱後密度降低，更容易產生上升運動。此時，建築佈局造成的弱通風和熱島造成的升溫會疊加，使局部區域更容易形成上升氣流。街道較窄、建築較高的區域，這種現象更明顯。

街穀結構是影響城市風場的重要形式。街穀是由道路和兩側建築組成的空間。街穀較深時，外部風不容易直接進入底部，街道內部空氣交換較弱。太陽輻射照射到牆面和路面後，熱量被不斷吸收和釋放，街穀內部容易升溫。若街道方向與主導風向接近，風可以沿街道進入，熱量較容易被帶走。若街道方向與主導風向相差較大，建築會阻擋空氣流動，街穀內部熱量更容易滯留。這樣，街穀不僅是熱量積累的空間，也是局地上升運動形成的基礎空間。

建築排列方式也會影響低層空氣是否彙聚。若建築群排列過於封閉，空氣進入後難以快速排出，容易在局部區域形成停滯。若多個街區之間存在較大的建築高度差，氣流會在高度變化處發生抬升或下沉。較低建築區進入較高建築區時，空氣會受到阻擋，部分氣流被迫向上運動。若這一位置正好處在熱島較強的區域，受熱空氣會更容易抬升，對流觸發條件也會增強。

城市中的道路、廣場和開放空間可以改變風的通道。寬闊道路和連續開放空間有時可以形成通風廊道，使外部空氣進入城市內部。通風廊道可以帶走部分熱量，降低近地層溫度，也可能把周邊濕空氣輸送到城市熱區。若濕空氣進入高溫區域，空氣受熱抬升後，對流發展條件會更容易形成。通風廊道的作用並不只是降溫，也可能改變熱量和水汽的輸送方向，使局地對流的觸發位置發生變化。

建築高度差還會增強機械湍流。機械湍流是空氣受到地表粗糙物影響後產生的不規則運動。城市建築越密集，高度差越明顯，機械湍流越容易增強。湍流可以把近地層熱量向上輸送，使熱島影響擴展到更高位置。湍流也會打破低層空氣的穩定狀態，使暖空氣更容易離開地面附近。對於局地對流來說，這種湍流輸送具有重要意義。它可以把熱量和水汽從街道層帶到城市上空，為後續的雲體形成提供條件。

建築佈局對抬升運動的影響，還會受到背景風速控制。弱風條件下，城市內部熱量不容易擴散，熱島作用更突出。建築造成的渦旋和局地停滯，會使暖空氣在近地層聚集，熱力抬升更容易形成。較強風條件下，城市熱量會被帶向下風方向，建築群產生的擾動也會隨風移

動。此時，局地對流不一定出現在城市中心，可能出現在城市邊緣或下風側。城市建築群相當於改變了空氣經過城市時的熱力和動力狀態，使下風區域更容易出現抬升。

高密度建築區、商務中心區和大型交通樞紐附近，建築佈局與人為熱排放常常同時存在。密集建築削弱通風，交通和建築能耗持續釋放熱量，近地層空氣更容易升溫。若這些區域又存在明顯的建築高度差，空氣擾動會更強。熱量積累、低層輻合和機械抬升在同一空間中出現，局地對流觸發的可能性便會提高。

建築佈局對局地對流的作用並不是單一的。它既可以通過阻擋風來加強熱量積累，也可以通過改變氣流方向來形成局地抬升。它既可能削弱通風，使熱島增強，也可能通過通風廊道把熱量和水汽輸送到特定區域。建築高度、街道方向、街區密度和開放空間共同決定城市風場結構，也決定熱島產生的暖空氣如何向上運動。

4 水汽條件與城市邊界層變化

局地對流的形成不能只看熱量。城市熱島可以提供抬升條件，但空氣中還需要有足夠水汽。暖空氣上升後會逐漸冷卻，水汽達到飽和狀態後才可能凝結成雲。如果近地層空氣比較乾燥，上升運動即使存在，也很難形成明顯的雲體和降水。熱島更像是推動空氣上升的力量，水汽則決定這種上升能否繼續轉化為對流天氣。城市地表覆蓋會影響水汽來源。自然地表中，土壤、植被和水體可以向空氣中釋放水汽。城市中心多為硬化地表，雨水難以下滲，地表蒸發量較小。道路、廣場和建築屋頂不能像植被那樣持續釋放水汽，城市中心的空氣常常偏幹。偏幹的空氣會限制對流雲形成，使熱島的觸發作用受到削弱。綠地和水體可以改善這種狀況。公園、河道、湖泊和濕地能夠增加近地層濕度，也能降低局部溫度。它們不是單純的降溫空間，還會改變城市內部的濕熱條件。若濕空氣可以進入高溫區域，熱島形成的上升運動就更容易帶動水汽向上輸送。暖濕空氣在上升過程中冷卻，雲體形成的可能性會增加。城市中的綠地和水體面積越大，分佈越連續，水汽輸送的作用越明顯^[7]。

水汽能否進入城市熱區，還與城市通風有關。若建築過於密集，外部空氣難以進入城市內部，水汽也不容易輸送到熱島中心。此時，城市中心可能熱量充足，但濕度不足，對流發展受到限制。若城市中存在河道、寬闊道路、綠廊和開敞空間，空氣流動會更順暢。濕空氣可以沿這些通道進入城市內部，與高溫地表形成接觸。熱量和水汽在同一空間內匯合，局地對流的條件會更容易形成。

城市邊界層是理解這一過程的重要空間。邊界層位於地表以上，是地表與大氣直接交換熱量、水汽和動量的區域。城市地表受熱後，近地層空氣溫度升高，空氣上下混合增強。混合增強後，熱量可以從街道和建築表面向上輸送，水汽也可以被帶到更高位置。邊界層高度升高時，城市熱島的影響範圍會擴大，城市上空的空氣結構也會發生改變。

邊界層變厚後，城市上空的空氣更容易出現不穩定狀態。近地面持續受熱，上層空氣相對較冷，上下溫度差會加強空氣垂直運動。暖空氣向上移動時，會攜帶水汽進入較高層。若上升空氣能夠達到凝結高度，雲滴開始形成，對流過程便有了繼續發展的基礎。熱島在這裡起到的作用，是把近地層的暖濕空氣送到更高位置。城市邊界層內部並不均勻。高密度建築區受熱強，邊界層可能較厚；綠地、水體和開闊地區受熱較弱，邊界層可能較薄。不同區域之間的邊界層高度差，會引起空氣流動調整。空氣可能從較冷、較低的邊界層區域流向較熱、較高的邊界層區域，並在熱區附近抬升。這種抬升與熱島本身的上升運動相結合，會增強局地空氣擾動。背景風也會改變水汽和邊界層的作用方式。弱風天氣下，城市熱量不容易擴散，熱島中心附近的上升運動較明顯。若此時空氣中水汽充足，對流可能更接近城市內部形成。風速較大時，熱量、水汽和湍流會被帶到城市下風方向。空氣經過城市後被加熱並產生擾動，離開城市後仍可能繼續上升。對流觸發位置就可能轉移到城市邊緣或下風側。濱水城市和內陸城市的水汽條件也不同。濱水城市附近有江河、湖泊或海面，空氣中水汽來源相對充足。若風把濕空氣送入城市熱區，熱島抬升會更容易與水汽條件結合。內陸城市如果缺少水體和大

面積綠地，熱島可能較強，但空氣濕度不足，對流形成會受到限制。城市形態在這裡起到連接作用，它決定水汽能否被引入熱區，也決定熱量能否被帶入邊界層上部。

城市中的水體具有較複雜的作用。白天水體升溫慢，可以降低周邊溫度，削弱局部熱島。夜間水體降溫也慢，可能維持一定的濕熱環境。若水體周邊分佈著高密度建築和硬化地表，水汽與熱量可能在局部區域交匯。這樣的空間組合會改變邊界層濕度和穩定度，使城市上空的空氣運動更加複雜。

水汽條件和邊界層變化共同決定熱島對局地對流的實際影響。只有熱量而缺少水汽，空氣上升後難以成雲；只有水汽而缺少抬升，濕空氣也難以發展為對流。城市形態通過綠地水體分佈、通風廊道佈局、建築密度和開放空間結構，改變水汽輸入、熱量輸送和邊界層混合過程。熱島引發局地對流的關鍵，就在於這些條件能否在同一時間、同一空間內相互配合^[8]。

5 城市形態調控的理論啟示

城市形態在熱島和局地對流中起著關鍵作用。建築密度、街道排列、建築高度和地表覆蓋都會改變空氣流動和熱量分佈。通過合理安排這些要素，可以改善城市內部通風，降低近地層溫度，同時改善空氣混合，使局地抬升和對流觸發條件得到調控。

街道方向和建築排列可以形成有效的通風通道，使外部空氣進入城市內部，帶走熱量和濕氣。街道寬度、街穀深度以及建築高度差都會影響空氣速度和流動方向。建築間距較大或形成通風廊道時，空氣容易流通，熱量和水汽更容易擴散，街道內部溫度不易長期升高。

綠地、水體和開敞空間對城市熱環境有重要作用。連續分佈的綠地可以增加蒸散作用，降低局部地表溫度，同時提供水汽支援上升空氣。水體通過較大的熱容量減緩日夜溫差，增加空氣濕度。城市規劃中將綠地、水體和建築佈局結合起來，可以形成冷熱和濕度的平衡，減少熱島強度和局地對流形成的可能區域。

高層建築的佈局也需要考慮。高層建築會改變風場，使空氣產生繞流和渦旋。如果高層

建築連續排列，會形成風屏障，削弱通風效果，使熱量和濕空氣在低層滯留。分散佈局的高層建築可以增加局部湍流，把近地層熱量向上輸送，同時不完全阻斷空氣流通。

熱源集中區如交通樞紐、商業區或工業區，需要與通風和水汽條件匹配。熱量過於集中時，會形成局地低壓區，引發空氣抬升。如果這些區域周圍缺少綠地或通風廊道，熱量積累容易增強局地對流觸發。通過規劃熱源分佈和建築佈局，可以控制局地空氣上升的位置和強度。

城市形態調控的目標，是在保證城市功能和土地利用效率的同時，降低局地熱島強度，調整空氣流動和濕度分佈。理論上，熱島強度被削弱後，低層空氣抬升會減弱，邊界層結構更均勻，局地對流發生的條件被調節。綠地、水體和通風通道形成的網路，使熱量和水汽在城市內部更均衡分佈，減少局地上升集中區。

城市形態調控還可以考慮不同區域的組合策略。例如高密度商業區和工業區可以與綠地和開敞空間搭配，熱量和濕度在空間上得到緩解。住宅區和公園區可以形成緩衝帶，降低局地溫度梯度。街道和河道可以形成風廊，將外部濕空氣引入城市內部。建築高度差和排列方式可以用來增強局部空氣混合，避免熱量過度集中。

通過合理規劃城市形態，城市熱島和局地對流的理論機制可以被調節。建築佈局、街道規劃、綠地水體配置和熱源分佈的組合決定了空氣流動、熱量分佈和水汽條件。城市規劃者可以在理論上利用這些關係，減少局地抬升和對流風險，改善城市熱環境，提高城市氣候舒適度。

6 結論

城市形態對熱島引發局地對流具有重要影響。建築密度、街穀結構、地表材料、綠地水體和開放空間，都會改變城市中的熱量積累方式。高密度建築和大面積硬化地表容易增強熱島，使近地層空氣升溫。空氣受熱後密度下降，容易形成上升運動。城市中心與周邊地區之間的溫差，還會造成低層空氣彙聚，為局地對流提供觸發條件。

熱島對局地對流的影響並不只來自溫度升高。建築佈局會改變城市風場，使空氣在建築之間發生繞流、停滯和抬升。高層建築、狹窄街穀和封閉街區會削弱通風，使熱空氣在近地層停留。建築高度差和街區邊界又可能增強局部擾動，把熱量向上輸送。熱力抬升和動力擾動結合後，城市上空的邊界層結構會變得更加活躍。

水汽條件決定熱島觸發作用能否繼續發展。城市熱島可以推動空氣上升，但如果空氣中水汽不足，上升運動難以形成明顯雲體。綠地、水體、河道和通風廊道可以改善城市濕度

條件，也可以影響暖濕空氣進入熱區的路徑。熱量、水汽和上升運動在同一區域內結合時，局地對流更容易發展。對流發生的位置也不一定在城市中心，可能出現在城市邊緣或下風方向。城市形態影響局地對流的過程，是熱力機制、動力機制和水汽條件共同作用的結果。城市空間結構決定熱島強度，也決定熱量、水汽和空氣運動的分佈。合理控制建築密度，保持通風廊道，增加連續綠地和水體，減少大面積硬化高溫區，可以削弱熱島強度，調節局地空氣抬升。城市形態不只是空間規劃問題，也與城市氣候安全和局地天氣風險密切相關。

參考文獻：

- [1] Zhao L, Lee X, Smith R B, et al. Strong contributions of local background climate to urban heat islands[J]. Nature, 2014, 511: 216-219. DOI:10.1038/nature13462.
- [2] 馮悅怡, 胡潭高, 張力小. 城市公園景觀空間結構對其熱環境效應的影響[J]. 生態學報, 2014, 34(12): 3179-3187. DOI:10.5846/stxb201306101641.
- [3] 岳文澤, 徐麗華. 城市典型水域景觀的熱環境效應[J]. 生態學報, 2013, 33(6): 1852-1859. DOI:10.5846/stxb201112141915.
- [4] 東高紅, 劉一瑋, 孫蜜娜, 等. 城市熱島與海風鋒疊加作用對一次局地強降水的影響[J]. 氣象, 2013, 39(11): 1422-1430. DOI:10.7519/j.issn.1000-0526.2013.11.005.
- [5] 佟華, 劉輝志, 李延明, 等. 北京夏季城市熱島現狀及楔形綠地規劃對緩解城市熱島的作用[J]. 應用氣象學報, 2005, 16(3): 357-366. DOI:10.3969/j.issn.1001-7313.2005.03.009.
- [6] 林波榮, 李瑩, 趙彬, 等. 居住區室外熱環境的預測、評價與城市環境建設[J]. 城市環境與城市生態, 2002, 15(1): 41-43.
- [7] 葉建剛, 靳寧. 2013-2016年浙北城市群空氣品質變化特徵及與氣象條件的關係分析[J]. 科技通報, 2019, 35(9): 207-212. DOI:10.13774/j.cnki.kjtb.2019.09.040.
- [8] 王曉峰. 複雜下墊面環境上海局地強對流天氣研究[D]. 中國氣象科學研究院, 2013.

版權聲明

© 2026 作者版權所有。本文依據“知識共用署名 4.0 國際授權合約”（CC BY 4.0）以開放獲取方式發佈。該許可允許使用者在任何媒介中自由使用、複製、傳播與改編文章（含商業用途），惟須明確署名原作者及出處，並注明所作修改（如有）。完整協議詳見：<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.zh-hans>

出版聲明

所有出版物中的陳述、觀點及資料僅代表作者及供稿者個人立場，與 Brilliance Publishing Limited 及/或編

輯人員無關。Brilliance Publishing Limited 及/或編輯人員對因內容所提及的任何理念、方法、說明或產品所導致的人身或財產損害概不負責。

DOI: 10.53104/xdkxsts.2026.02.01.003

訓練語料特徵對大型語言模型湧現行為的理論探討

李忻程¹

1. 江蘇師範大學，江蘇 徐州 221116

摘要：大型語言模型在自然語言處理任務中表現出超出訓練目標的能力，這些能力通常被稱為湧現行為。本文從理論角度探討訓練語料特徵對湧現行為的影響。通過分析語料的資料量、品質、多樣性和結構，討論這些因素如何在模型學習過程中作用，並可能促成模型在未見任務中展現新能力。本文指出，湧現行為不僅受模型規模和結構影響，也受到語料特徵的共同作用。訓練語料設計的量、質、類型和組織方式可能決定模型能力形成的效率和複雜程度。本研究為理解大型語言模型湧現行為提供了語料視角的理論分析，並提出未來可以從語料特徵角度進一步研究模型能力形成的方向。

關鍵字：大型語言模型；訓練語料；湧現行為；理論分析；資料特徵

A Theoretical Study on the Influence of Training Corpus Features on Emergent Behaviors of Large Language Models

LI Xin-cheng¹

1. Jiangsu Normal University, Xuzhou 221116, P. R. China

Correspondence to: LI Xin-cheng; Email: li184463@163.com

Abstract: Large language models exhibit capabilities beyond their direct training objectives, often referred to as emergent behaviors. This paper presents a theoretical study on how training corpus features influence these emergent behaviors. It analyzes corpus characteristics including size, quality, diversity, and structure, and discusses how these factors interact during model learning to enable new abilities on unseen tasks. The study highlights that emergent behaviors are influenced not only by model scale and architecture but also by the combined effects of corpus features. The design of training corpora in terms of quantity, quality, type, and organization may determine the efficiency and complexity of model capability formation. This work provides a theoretical perspective based on training data and suggests directions for future research on how corpus features shape model abilities.

Key words: large language models; training corpus; emergent behaviors; theoretical analysis; data features

引言

大型語言模型近年來在自然語言處理領域取得了顯著進展。這類模型可以生成連貫文本、

回答問題，並展示某些超出訓練目標的能力。這些能力通常被稱為湧現行為^[1]。湧現行為說明模型可以處理未見過的任務，並展現一定的推理或創造能力。研究者對這種現象很關注，他

通信作者：li184463@163.com

引用格式：李忻程. 訓練語料特徵對大型語言模型湧現行為的理論探討[J]. 現代科學探索, 2(1): 15-19.

們想理解它的產生機制和影響因素。訓練語料在模型能力形成中很重要。模型通過在大量文本上學習統計模式和語言規律來獲得知識。語料的量、品質和多樣性會影響模型理解語言、生成文本和應對複雜任務的能力。語料的特徵決定模型能記住什麼，也會影響它在新任務中展現的能力。本文關注的問題是訓練語料特徵如何影響大型語言模型的湧現行為。我們分析語料量、語料多樣性、語料品質和語料結構，探討它們在理論上可能對模型能力產生的作用。討論這些因素可以為理解湧現行為提供理論視角，也可以為訓練資料設計提供參考。

1 湧現行為概述

湧現行為是大型語言模型研究中的一個重要概念。它指模型在規模達到一定程度後，會表現出一些較小模型不明顯具備的能力。這些能力不是訓練目標中直接規定的結果，也不一定來自某一條具體語料。它們更像是模型在大量文本學習後形成的綜合表現。模型學習了詞語關係、句子結構、知識表達和上下文聯繫。這些學習結果在複雜任務中組合時，就可能出現新的能力。

在大型語言模型中，湧現行為可以表現為多種形式。常見的是推理能力。模型可以複述已有知識，也可能根據問題條件進行簡單判斷，完成多步分析，或者在不同資訊之間建立聯繫。語言生成品質也是一種重要表現。模型在規模較小時，生成內容容易重複、斷裂或偏離問題。模型規模提高後，文本可能變得更連貫，語義更完整。少樣本學習能力也是湧現行為的重要類型。模型只看到少量示例，甚至沒有明確訓練過某類任務，也可能根據提示理解任務要求，並給出合適回答。這些現象說明，湧現行為不是單一能力的簡單增加。它涉及語言理解、知識組織、上下文識別和任務遷移等多個層面。模型不能像人一樣真正理解世界，但它可以從語料中學習大量模式。當這些模式在新問題中重新組合時，模型就可能表現出看似“新出現”的能力。這也使湧現行為常常給人一種突然出現的感覺。較小模型難以完成某些任務，較大模型在相似條件下卻能完成，這種差異使湧現行為具有明顯的理論討論價值。

湧現行為的產生機制仍然存在難點。一個難點是很難判斷某種能力究竟來自模型規模，還是來自訓練語料。模型參數增加會提高表達能力，但如果訓練語料缺少足夠豐富的語言材料，模型也難以形成穩定能力。訓練語料中如果包含大量推理文本、問答文本和解釋性文本，模型可能更容易表現出推理和任務遷移能力。由此可見，湧現行為不能只從模型結構本身解釋，也需要從訓練語料角度分析。另一個難點是湧現行為具有不穩定性。同一個模型在不同任務、不同提示和不同語境中，可能表現出不同水準的能力。模型有時可以給出清楚的推理過程，有時也會出現錯誤判斷。這個現象說明，湧現行為不等於模型已經真正掌握某種能力。它更像是一種受條件影響的表現。訓練語料、提示方式、任務難度和上下文安排都會影響這種表現。由於這種不穩定性，湧現行為很難被簡單定義，也很難被完全預測。湧現行為還存在解釋上的問題。模型訓練主要依靠大量文本和統計學習，但模型最後表現出的能力，可能超出單個語料片段能夠解釋的範圍。研究者可以觀察模型輸出結果，但很難完全說明模型內部如何組織這些資訊。訓練語料中的知識、表達方式和任務形式被模型吸收後，會進入參數空間，並以複雜方式保存。模型回答問題時調用的不是某條固定文本，而是大量模式共同作用的結果。這讓湧現行為的理論解釋變得複雜，也讓訓練語料特徵成為理解這一現象的重要入口。

2 訓練語料特徵的維度

訓練語料是大型語言模型能力形成的基礎。語料的不同特徵可能對模型的學習和湧現行為產生影響。語料特徵可以從幾個方面理解。

資料量指訓練文本的總規模。文本學習詞語關係和句子模式^[2]。資料量大時，模型可以接觸到更多語言現象和表達形式，從而積累豐富的語言知識。資料量不足可能限制模型掌握複雜模式的能力，也可能影響其在新任務中的表現。

資料多樣性指語料在主題、風格和語言上的覆蓋範圍。多樣化語料可以讓模型學習不同場景中的語言使用方法。語料覆蓋的主題和文

本類型越多，模型在未見任務中的適應能力就可能越強。風格和語言形式越豐富，模型生成文本時也可能更自然，並減少固定化和重複化表達。

資料品質指語料是否準確、清楚和一致。雜訊、錯誤標注和不一致內容會干擾模型學習，也可能導致模型理解偏差或生成錯誤資訊。高品質語料可以提供穩定的模式和可靠的語言規律，讓模型更容易形成有效能力。

資料結構包括文本順序、上下文長度和文檔組織方式。合理的結構可以說明模型學習長序列關係和上下文關係。上下文長度會影響模型在生成或推理任務中保持資訊的能力。文檔組織方式會影響模型捕捉跨段落或跨文檔語言規律的能力，也會影響複雜任務中的湧現行為。

3 理論機制分析

資料量對模型能力有顯著影響。訓練語料越大，模型接觸的語言模式和表達形式就越豐富。大量文本讓模型能夠學習更多詞語關係和句子結構，並積累更多潛在的組合方式。通過這樣的學習，模型在面對未見任務時可能展現出新的能力。例如，在推理任務中，大模型能夠利用之前學到的模式完成多步推理，而小模型可能無法做到。同樣，在生成任務中，大規模語料提供的多樣例子讓模型生成文本更自然、流暢，也更符合上下文要求。如果語料量不足，模型掌握的模式有限，學習能力受限，難以形成複雜的知識關聯，也難以在新場景中表現出湧現行為^[3]。

資料多樣性影響模型的泛化能力和適應能力。語料中包含不同主題、風格和語言形式時，模型能夠理解在不同情境下如何使用語言^[4]。豐富的主題可以讓模型處理各種類型的問題，例如科學、文學或日常對話等。風格多樣性讓模型在生成文本時能夠呈現不同表達方式，不會一味重複同一種語氣或結構。語言形式的多樣性，比如口語、書面語或不同語言變體，有助於模型在跨領域任務中更靈活地應對。缺乏多樣性的語料容易讓模型生成內容單一，限制新能力的發揮，也可能降低模型在新任務上的表現水準。

資料品質決定模型學習模式的準確性和穩定性。高品質語料提供一致、可靠的語言規律，使模型能夠正確捕捉詞語、句子和上下文之間的關係。低品質語料中存在雜訊、標注錯誤或表達不一致的內容，可能讓模型學習到偏差模式，影響推理能力和創造力^[5]。例如，如果訓練文本中大量出現不合理邏輯或混亂敘述，模型在推理或生成複雜文本時可能出錯，降低其湧現行為的可能性。高品質語料還可以說明模型形成更穩定的知識表示，提高在少樣本任務中的適應能力。

資料結構對模型理解上下文和處理長序列資訊具有重要作用。訓練文本的順序、段落組織和上下文長度影響模型在生成或推理時的表現。合理組織的文檔和較長的上下文可以說明模型捕捉跨句或跨段落的語言關係，從而支援複雜任務。長序列資訊讓模型能夠在生成回答時保持邏輯一致性，避免斷裂或重複。文檔結構的設計也可能影響模型對任務提示的敏感性和理解深度。例如，當模型在結構化的問答文本或解釋性文本上訓練時，它可能更容易形成多步推理能力和任務遷移能力，這些都是湧現行為的基礎條件。

資料量、資料多樣性、資料品質和資料結構之間存在相互作用。大量、豐富、可靠且結構合理的語料可以為模型提供充分的學習條件，使其在複雜任務中表現出新的能力。語料特徵的優化可以提高模型對新任務的適應性，並增加湧現行為出現的可能性。理論上，這些因素共同作用，通過提供多樣化的語言模式和資訊組合方式，使模型形成超越單條語料片段的綜合能力。

4 訓練語料特徵與湧現行為的交互

訓練語料的不同特徵可能相互作用，共同影響模型的湧現行為。資料量大可以讓模型學習更多模式，但如果語料品質低，這些模式可能包含錯誤或不一致資訊。高品質語料可以在一定程度上彌補資料量不足，但當量太少時，模型掌握的模式仍然有限。資料多樣性提供不同情境和表達形式，有助於模型形成靈活的語言使用能力。多樣性不足可能限制模型在新任務中的表現，即使語料量很大或品質很高，也

難以產生複雜湧現能力。資料結構決定模型處理上下文的方式，良好的結構能夠讓模型在長序列和跨段落任務中保持資訊連續。結構不合理可能降低模型利用大量、多樣、優質語料的效果。

理論上，湧現行為可能出現在特定語料條件組合下。例如，大量、高品質、多樣且結構合理的語料有助於模型形成複雜的模式組合。這種模式組合使模型能夠在未見任務中產生新的能力。缺少任一特徵都可能降低湧現行為出現的可能性。語料特徵之間的相互作用決定了模型學習的效率和知識的組織方式。

模型架構對語料特徵的敏感性也會影響湧現行為。相同的語料在不同規模或結構的模型中可能產生不同表現。較大模型能夠更好地捕捉長序列和複雜模式，因此在豐富語料上更容易表現出湧現能力。較小模型可能無法充分利用語料中的資訊，即使語料品質高或多樣性豐富，也難以產生新的能力。模型架構和語料特徵共同作用，決定了湧現行為的強度和範圍。

5 理論啟示與研究展望

訓練語料設計不能只看規模。資料量很重要，但語料的品質、多樣性和結構也會影響模型能力。大量低品質文本可能讓模型學到混亂的表達和錯誤的知識。內容過於單一的語料也可能限制模型在新任務中的適應能力。訓練語料設計需要關注文本來源、主題覆蓋、語言風格和內容可靠性。把這些因素一起考慮，模型才更可能獲得穩定的語言能力和處理複雜任務的能力。

訓練語料的多樣性是湧現行為的重要條件。大型語言模型需要從不同文本中學習不同的表達方式和知識組織方式。新聞文本、學術文本、問答文本、說明文本和對話文本都可以為模型提供不同的學習材料。模型接觸的任務形式越多，就越容易理解新的任務提示。模型接觸的知識場景越廣，也越容易在不同問題之間建立聯繫。這種聯繫可能是推理、遷移和複雜生成能力出現的基礎。

語料品質對湧現行為的影響也很重要。低品質語料可能不會直接阻止模型形成能力，但

會增加模型輸出錯誤的風險。錯誤資訊、重複內容和邏輯混亂的文本會干擾模型學習。模型可能記住錯誤模式，也可能在生成內容時放大這些問題。高品質語料可以為模型提供更穩定的語言樣本，使模型更容易形成清晰的表達方式和可靠的知識聯繫。

語料結構提供理解湧現行為的另一個角度。模型不僅學習詞語和句子，也學習文本內部的資訊關係。段落之間如何銜接，問題和答案如何對應，解釋如何展開，都影響模型處理複雜任務的能力。結構清楚的語料可以說明模型學習問題分析、資訊組織和答案生成的方式。長文本語料還可以說明模型處理跨段落資訊，使模型在長上下文任務中保持連貫性。

從理論上看，湧現行為不應只被理解為模型規模擴大的結果。模型規模提供了能力空間，訓練語料則提供了學習內容。沒有足夠合適的語料，模型規模很難轉化為穩定能力。訓練語料中的知識、表達形式和任務結構會進入模型參數，並在新任務中被重新組合。湧現行為可以被理解為這些模式組合後的表現，而不是一種單獨因素造成的結果。

這一視角可以改變對湧現行為的單一解釋。過去討論湧現行為時，研究者常把注意力放在參數規模、計算資源和模型結構上。訓練語料視角提醒我們，模型能力的形成也受到資料環境的影響。不同語料可能讓同一類模型形成不同能力。相同規模的模型，如果訓練語料不同，最後表現也可能不同。語料特徵可以解釋部分模型能力差異，也可以幫助理解某些能力為什麼只在特定條件下出現。

後續理論研究可以繼續討論訓練語料和模型能力之間的關係。一個重要方向是分析不同語料類型對湧現行為的影響。比如，推理類文本是否更容易促進推理能力，解釋類文本是否更有助於複雜回答生成，對話類文本是否更能提高任務理解能力。這些問題還需要實證研究進一步驗證，但在理論上已經有討論價值。另一個方向是討論語料特徵之間的組合關係。資料量、品質、多樣性和結構不是孤立因素。它們會一起影響模型學習過程。較大的語料規模如果缺少品質控制，可能不會帶來更強能力。高品質語料如果類型過窄，也可能限制模型的遷

移表現。結構清楚的語料如果數量太少，模型也難以形成穩定模式。研究這些因素的組合關係，可以更準確地解釋湧現行為出現的條件。

訓練語料也涉及價值和安全問題。模型從語料中學習語言，也會學習語料中的偏見、錯誤和不平衡表達^[6]。如果訓練語料中有大量偏見內容，模型可能在回答中重複類似傾向。如果語料中缺少某些群體、地區或語言的表達，模型在相關任務中的表現也可能較弱。湧現行為不只代表能力提升，也可能帶來難以預料的錯

誤和風險。訓練語料設計需要考慮能力形成，也需要考慮模型輸出是否可靠，以及它可能產生的社會影響。未來對大型語言模型湧現行為的理解，可以更多回到訓練語料本身。語料不是模型訓練前的簡單材料，而是模型能力形成的基本條件。語料的選擇、清洗、組織和分佈都會影響模型最終表現。把訓練語料作為理論分析對象，可以使湧現行為研究更加具體，也能避免只用模型規模解釋所有問題。

參考文獻：

- [1] Wei J, Tay Y, Bommasani R, et al. Emergent abilities of large language models[J/OL]. arXiv preprint, 2022: arXiv:2206.07682. [2026-06-09]. <https://arxiv.org/abs/2206.07682>
- [2] Kaplan J, McCandlish S, Henighan T, et al. Scaling laws for neural language models[J/OL]. arXiv preprint, 2020: arXiv:2001.08361[2026-06-09]. <https://arxiv.org/abs/2001.08361>
- [3] Hoffmann J, Borgeaud S, Mensch A, et al. Training compute-optimal large language models[C]. Advances in Neural Information Processing Systems. 2022, 35: 30016-30030.
- [4] Gao L, Biderman S, Black S, et al. The Pile: an 800GB dataset of diverse text for language modeling[J/OL]. arXiv preprint, 2020: arXiv:2101.00027[2026-06-09]. <https://arxiv.org/abs/2101.00027>
- [5] Dodge J, Sap M, Marasović A, et al. Documenting large webtext corpora: a case study on the Colossal Clean Crawled Corpus[C]. Proceedings of the 2021 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. Stroudsburg: Association for Computational Linguistics, 2021: 1286-1305.
- [6] Bender E M, Gebru T, McMillan-Major A, Shmitchell S. On the dangers of stochastic parrots: can language models be too big?[C]. Proceedings of the 2021 ACM Conference on Fairness, Accountability, and Transparency. New York: Association for Computing Machinery, 2021: 610-623.

版權聲明

© 2026 作者版權所有。本文依據“知識共用署名 4.0 國際授權合約”（CC BY 4.0）以開放獲取方式發佈。該許可允許使用者在任何媒介中自由使用、複製、傳播與改編文章（含商業用途），惟須明確署名原作者及出處，並注明所作修改（如有）。完整協議詳見：<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.zh-hans>

出版聲明

所有出版物中的陳述、觀點及資料僅代表作者及供稿者個人立場，與 Brilliance Publishing Limited 及/或編輯人員無關。Brilliance Publishing Limited 及/或編輯人員對因內容所提及的任何理念、方法、說明或產品所導致的人身或財產損害概不負責。