

石墨烯层间显著的弹道热传输：纳米孔和锂插层的影响

John Crosby,^{1, a)} Haoran Cui,^{1, b)} and Yan Wang^{1, c)}

Department of Mechanical Engineering, University of Nevada, Reno, Reno, NV 89557,

USA

(10Dated: 2025 年 4 月 15 日)

多孔石墨烯和石墨由于其独特的结构和热性能，在电化学储能和光热应用中越来越受到重视。在这项研究中，我们对带有纳米孔的石墨和多层石墨烯的晶格热传输和谱声子特性进行了全面分析。我们的结果表明，相对于石墨烯基面斜向传播的声子模式是跨平面热传输的主要贡献者。这些模式表现出主要是弹道性质，导致跨平面热导率随着层数的增加几乎呈线性增长。石墨烯中的纳米孔会广泛抑制跨平面声子传输，而锂离子插层则有可能增强它。这些发现为关键石墨烯基结构中控制跨平面热传导的机制提供了关键见解，为范德华材料的热管理和工程设计提供了宝贵的指导。

arxiv:2504.08244v1 中译本

^{a)}Electronic mail: johncrosby@unr.edu

^{b)}Electronic mail: hcui@unr.edu; co-first author with equal contribution; co-corresponding author

^{c)}Electronic mail: yanwang@unr.edu; co-corresponding author

范德瓦尔斯 (vdW) 材料由通过弱的范德瓦尔斯力结合在一起的堆叠原子层组成，而强烈的共价键或离子键则主导每一层内的结构。这些材料在其电子、光学、热和机械性能方面表现出显著的多样性和可调性，使其对广泛的应用极具吸引力。它们的物理行为特别敏感于热力学条件、化学成分、结构缺陷、堆叠顺序和层数——这些特性已导致纳米电子学、光子学和量子技术方面的重大进步。在 vdW 材料中，石墨烯作为一种单层 sp^2 -杂化的碳原子以蜂窝状晶格排列的模型系统脱颖而出。石墨烯可调性的一个关键属性在于其电子和光学性质对堆叠顺序¹⁻³ 和层数⁴ 的强烈依赖。

近年来，多层石墨烯以各种方式被设计来满足特定应用的需求。例如，纳米孔石墨烯结构——在石墨烯层上穿有纳米级孔的架构——已被开发出来以增强锂离子在各层之间的传输⁵。这些结构表现出卓越的离子电导率和储能能力，使其成为用于超级电容器和锂离子电池的理想候选材料。此外，石墨和多层石墨烯长期以来一直被用作锂离子电池中的电极材料，在这里锂离子嵌入到石墨烯层之间⁶。这种嵌入过程内在地改变了原本纯净的多层石墨烯的热导率 (κ)。

原始石墨 (PG) 的热传输特性已通过实验^{7,8} 和理论方法⁹⁻¹² 进行了广泛研究。单层和少层石墨烯以及石墨的面内热导率 (κ_{\parallel}) 已经使用各种测量技术^{10,13} 和计算方法，包括从头算计算和原子模拟^{11,13} 进行了表征。一致的研究结果表明，随着层数的增加， κ_{\parallel} 会降低，并最终在石墨极限处饱和^{9,14}。这种减少主要归因于多层结构中镜像对称性的破坏，这使得额外的非谐散射机制得以实现，而在单层石墨烯中这些机制是被禁止的⁹。

相比之下，层间热导率 (κ_{\perp}) 仍然更难测量且理解不够充分。因此，层间声子传输对层数的依赖关系尚未完全解决¹⁵⁻¹⁷。原子模拟报告称，在原始多层结构中，随着石墨烯层数的增加， κ_{\perp} 显著增加¹⁵，没有观察到明显的饱和现象。这一趋势表明，参与层间传输的声子可能具有超出微米尺度的平均自由程。尽管这种现象非常有趣，但进一步的研究仍然有限。先前的研究显示，锂离子插层和纳米孔引入可以显著影响平面内热传输^{11,12,18}，然而它们对层间导电性的影响尚未进行系统量化。

尽管取得了这些进展，多层石墨烯中跨平面声子输运的几个关键问题仍然没有答案。具体来说：纳米尺度的孔洞及其空间排列如何影响 κ_{\perp} ？锂离子插层如何改变 κ_{\perp} 对层数的依赖性？哪些声子模式对堆叠变化最敏感，它们如何贡献于观察到的热输运变化？在这项工作中，我们使用分子动力学 (MD) 模拟结合光谱声子分析来解决这些问题。

为了研究 κ_{\perp} 对石墨烯层数的依赖性，我们使用 LAMMPS 软件包进行了非平衡分子动力学 (NEMD) 模拟¹⁹。考察了四种代表性的基于石墨的结构：原始石墨 (PG)、具有排列孔洞的多孔石墨 (AHG)、具有错位孔洞的多孔石墨 (SHG)，以及嵌锂离子石墨 (LiC_6)，如图 1 所示。此比较分析旨在阐明范德华键合系统中 κ_{\perp} 的声子传输机制，并为分层碳基材料的热设计提供信息。

对于 PG、AHG 和 SHG，每层石墨烯的横截面积固定为 $A_g = 42.6 \text{ \AA} \times 34.4 \text{ \AA}$ 。AHG 和 SHG 结构是通过移除每层 7% 的原子来创建圆形纳米孔而生成的。虽然先前的研究表明较小的模拟域足以使 EMD 和 NEMD 仿真收敛，但这里对 PG 和多孔石墨使用了更大的横截面积以防止由于弱 vdW 力导致不现实的层间滑动。对于 LiC_6 ，使用的横截面积为 $A_{LiC_6} = 15.9 \text{ \AA} \times 15.9 \text{ \AA}$ ，这足以保持结构完整性和实现收敛。在 LiC_6 中的每个层间空间均匀插层了 16 个锂离子，得到了与先前工作⁶ 一致的化学计量比 $Li:C = 1:6$ 。

层内碳-碳相互作用使用 Tersoff 势能²⁰ 进行建模，而层间 vdW 相互作用则由 Lennard-Jones (LJ) 势能描述：

$$E = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

其中 r 是原子间距，截止半径 r_c 设置为 10 \AA 。在 LiC_6 系统中，LJ 势能与库仑项结合以模拟碳原子和

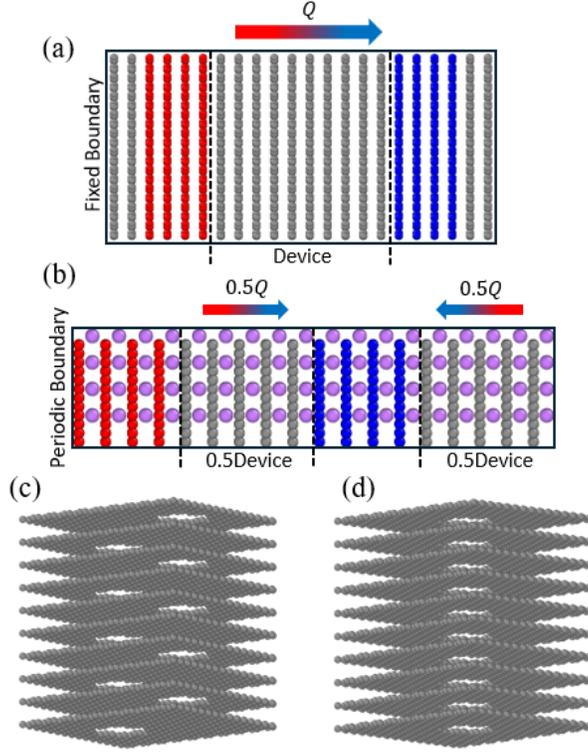


图 1. (a) 和 (b): 计算 PG、AHG 和 SHG 的面外热导率 (κ_{\perp}) 以及 LiC₆ 的 NEMD 模拟设置 (a) 和 (b)。设置 (b) 对 LiC₆ 使用完全周期性边界条件, 以避免由固定边界的 (a) 引入的长程库仑相互作用的人为截断。(c) 和 (d): AHG 和 SHG 的原子结构, 分别。AHG 结构具有贯穿孔洞, 而 SHG 结构包含错位的孔洞, 不形成连续的穿孔。

锂原子之间的长程静电相互作用:

$$E = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \frac{Cq_i q_j}{\epsilon r}, \quad (2)$$

其中 q_i 和 q_j 是相互作用的原子 ($q_C = -0.147e$, $q_{Li} = 0.882e$) 的电荷, C 是库仑常数。

PG、AHG 和 SHG 的模拟设置如图 1(a) 所示, 其中包括两端各有两个固定层以模仿刚性边界以及 50 层热库和冷库来捕捉短波长和长波长声子 (为了清晰起见, 图中只显示了四层)。系统使用 Nosé-Hoover 恒温器和恒压器^{21,22} 在两个 NPT 阶段达到平衡: (1) 从 5 K 到 300 K 的线性升温, 持续时间 0.5 ns; (2) 在 300 K 下进行额外 0.5 ns 的平衡。所有模拟采用 0.5 fs 的时间步长。

平衡后, NEMD 模拟通过简单的时程积分进行。温度梯度通过在热库和冷库内分别以 $T_{hot} = 320$ K 和 $T_{cold} = 280$ K 的速度重新缩放来施加, 从而产生 $\Delta T = 40$ K 的热偏差。热量流过结构持续 20 ns, 在此期间, 添加到热浴的能量 (Q_{in}) 和从冷浴移除的能量 (Q_{out}) 被记录下来。热量电流通过 Q_{in} 和 Q_{out} 随时间的线性拟合来计算。横向平面热导率则获得为

$$\kappa_{\perp} = \frac{\dot{Q}L}{A\Delta T}, \quad (3)$$

其中 $\dot{Q} = \frac{1}{2}(\dot{Q}_{in} + \dot{Q}_{out})$ 是平均稳态热流, L 是从热浴到冷浴的距离。

对于 LiC₆, 由于长程库仑相互作用的影响, 需要采用不同的方法, 这可能导致在周期性边界处出现虚假的能量转移。为了解决这个问题, 使用了一个完全周期性的配置 (图 1b), 其中热量沿着 $+z$ 和 $-z$ 两个方向对称传导。这样可以消除固定的层, 并在保证物理准确性的同时提高计算效率。 κ_{\perp} 使用公式 3 计算, 但增加了一个 0.5 的因子以考虑在两个方向上对 \dot{Q} 的对称分配。

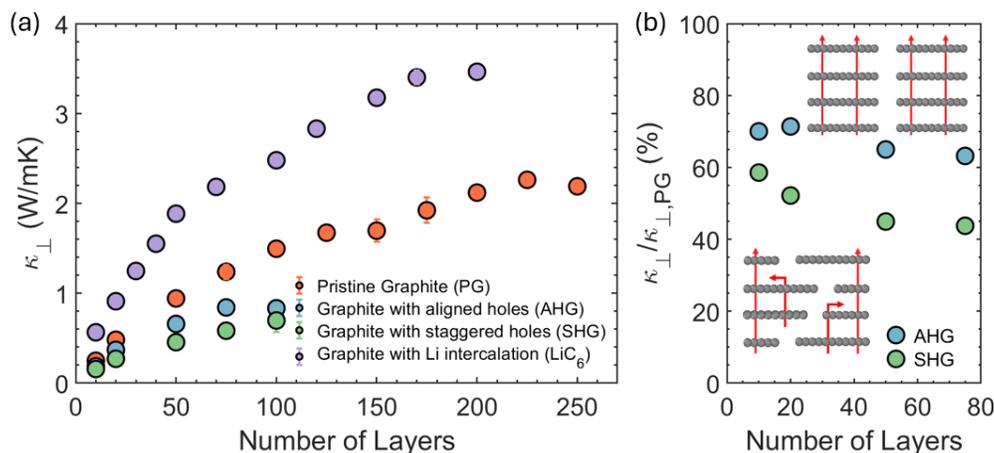


图 2. (a) PG、AHG、SHG 和 LiC_6 的层间热导率 κ_{\perp} 随层数变化的函数。块状 κ_{\perp} 值通过 EMD 获得分别为 PG、AHG、SHG 和 LiC_6 的值是 $6.9 \pm 0.4 \text{ W/m-K}$ 、 $3.0 \pm 0.1 \text{ W/m-K}$ 、 $2.3 \pm 0.2 \text{ W/m-K}$ 和 $7.13 \pm 0.16 \text{ W/m-K}$ 。(b) AHG 和 SHG 中 κ_{\perp} 对 PG 中 κ_{\perp} 的百分比比率作为层数的函数。插图说明了 AHG 和 SHG 中典型的面外声子传播路径，表明声子在 SHG 中更常被错位纳米孔阻挡。

平衡分子动力学 (EMD) 模拟也通过 Green-Kubo 形式主义来确定体极限 κ_{\perp} 。模拟了 PG、AHG、SHG 和 LiC_6 的十二层结构配置⁶。类似于 NEMD 程序，经过一个结构弛豫过程后，在微正则系综中每隔 10 个时间步 (5 飞秒) 采样瞬时热流，总持续时间为 30 纳秒。在补充材料中，我们展示了 Green-Kubo 曲线随石墨烯层数变化的收敛性，证实了 12 层足以获得体极限 κ_{\perp} 。

图 2a 显示了 PG、AHG、SHG 和插锂石墨 LiC_6 的层间热导率 κ_{\perp} 随层数的变化。在所有情况下， κ_{\perp} 都随着层数的增加而显著增加。特别是对于 PG， κ_{\perp} 随层数线性增加至 80 层，表明存在强烈的弹道传输机制。

此外，如图 2a 所示，纳米孔的存在显著抑制了垂直方向的热传输。在所有模拟厚度下，多孔石墨结构的 κ_{\perp} 始终低于原始石墨的值。EMD 仿真验证了 NEMD 的结果，并能够估计体积极限行为。PG 的体积极限 κ_{\perp} 为 $6.9 \pm 0.4 \text{ W/m-K}$ ，与之前报道的值^{23,24} 一致，而 AHG 和 SHG 表现出显著较低的体积极限热导率分别为 $3.0 \pm 0.1 \text{ W/m-K}$ 和 $2.3 \pm 0.2 \text{ W/m-K}$ ，证实了纳米孔对层间热传导的负面影响。

SHG 的 κ_{\perp} 显著低于 AHG。这归因于 SHG 中孔的错位配置，增加了横平面或斜向传播声子遇到空洞并发生散射的可能性，如图 2b 插图示意性比较所示。为进一步突出抑制效果，图 2b 给出了含孔石墨与相同层数 PG 中 κ_{\perp} 的比值。AHG 的 κ_{\perp} 约为 PG 的 60-70%，而 SHG 仅保留了 PG κ_{\perp} 的大约 40-60%。随着层数增加，这些比率进一步下降，接近各自的体限。因此，AHG 和 SHG 在 κ_{\perp} 中显示出比 PG 更弱的层数依赖性，这与图 2a 的趋势一致。

与多孔结构相比，锂的嵌入显著增强了面外热导率。EMD 模拟表明， LiC_6 的体 κ_{\perp} 达到 $7.13 \pm 0.16 \text{ W/m-K}$ ，超过了 PG 的值。这一观察结果支持了先前报道在 1:6 Li:C 比例下 κ_{\perp} 增加的研究^{25,26}，尽管在类似条件下也有抑制效应的报告⁶。值得注意的是，我们模拟的 LiC_6 结构假设了一个理想的周期性晶格，并且锂离子分布均匀。在实际系统中，锂离子排列的无序和偏离 1:6 化学计量比可能导致观察到的热导率增强程度降低。

为了阐明跨平面热传输机制和纳米孔的影响，我们计算了谱热导率 $\kappa(\omega)$ ，即 κ_{\perp} 分解为声子频率

贡献。具体来说，光子热流 $Q(\omega)$ 是通过以下表达式从 NEMD 模拟中提取的^{27,28}：

$$Q(\omega) = \sum_{i \in \tilde{L}} \sum_{j \in \tilde{R}} \left(-\frac{2}{t_{\text{simu}} \omega} \sum_{\alpha, \beta} \text{Im} \left\langle \hat{v}_i^\alpha(\omega) * K_{ij}^{\alpha\beta} \hat{v}_j^\beta(\omega) \right\rangle \right), \quad (4)$$

其中 i 和 j 是中央横截面左侧 (\tilde{L}) 和右侧 (\tilde{R}) 半部分的原子索引， t_{simu} 是总模拟时间， α 和 β 表示笛卡尔方向 (x, y, z)， \hat{v} 是傅里叶变换后的原子速度， $*$ 表示复共轭，而 $K_{ij}^{\alpha\beta}$ 是力常数矩阵。

热流贡献可以通过振动极化进一步分解²⁹：

$$Q_x(\omega) = \sum_{i \in \tilde{L}} \sum_{j \in \tilde{R}} \left(-\frac{2}{t_{\text{simu}} \omega} \sum_{\beta=x,y,z} \text{Im} \left\langle \hat{v}_i^x(\omega) * K_{ij}^{x\beta} \hat{v}_j^\beta(\omega) \right\rangle \right), \quad (5)$$

$$Q_y(\omega) = \sum_{i \in \tilde{L}} \sum_{j \in \tilde{R}} \left(-\frac{2}{t_{\text{simu}} \omega} \sum_{\beta=x,y,z} \text{Im} \left\langle \hat{v}_i^y(\omega) * K_{ij}^{y\beta} \hat{v}_j^\beta(\omega) \right\rangle \right), \quad (6)$$

$$Q_z(\omega) = \sum_{i \in \tilde{L}} \sum_{j \in \tilde{R}} \left(-\frac{2}{t_{\text{simu}} \omega} \sum_{\beta=x,y,z} \text{Im} \left\langle \hat{v}_i^z(\omega) * K_{ij}^{z\beta} \hat{v}_j^\beta(\omega) \right\rangle \right). \quad (7)$$

为了比较不同厚度的结构，我们将 $Q(\omega)$ 归一化以获得光谱热导率：

$$\kappa(\omega) = \frac{\kappa}{\int_0^\infty Q(\omega) d\omega} \cdot Q(\omega). \quad (8)$$

图 3a 显示了用于 $\kappa(\omega)$ 计算的示意图设置。选择了位于设备中心附近的四层石墨烯：LL (左-左)、LC (左-中)、RC (右-中) 和 RR (右-右)。计算了不同间隔的各层对之间的热导率：LC-RC (相邻)，LL-RC 和 LC-RR (两层间隔)，以及 LL-RR (三层间隔， $\sim 10.05 \text{ \AA}$)。鉴于 Lennard-Jones 势能的 10 \AA 截止值，预计在此范围之外的热交换最少。

图 3b 显示，在原始石墨中，频率低于 17 THz 的声子主导了垂直热传导，而较高频模式 ($22\text{--}38 \text{ THz}$) 仅贡献了一部分。如图 3c 所示，大多数热量是由相邻层之间相互作用的声子 (LC-RC) 携带的，而第二和第三近邻的贡献可以忽略不计。这一观察结果对于理解纳米孔对垂直声子传输的影响具有重要意义：单个石墨烯层中的一个孔会严重阻碍热传导，因为声子无法有效地跨越超过一层间距进行传输。

图 3d 展示了 $\kappa(\omega)$ 的极化分解。主要贡献来自于平面外 (zz) 振动，而混合 (zx, zy) 和纯平面内 (xx, yy) 的贡献则微乎其微。这表明面内纵向和横向模式对 κ_\perp 的贡献并不显著。然而，不仅仅是每个石墨烯层内的弯曲模式负责——后续部分揭示了斜向传播的声学声子是主要的热载体。

图 3e 展示了 $\kappa(\omega)$ 随层数增加的演化。从 10 层到 20 层和 30 层 PG 观察到的近似均匀光谱增强表明了主导频率范围内声子的弹道传输。这种在光谱热导率上的一致性增长解释了整体面外热导率 κ_\perp 随石墨烯层数几乎线性的增长。

为了进一步阐明导致跨平面热传输的主要因素，我们分析了详细的声子谱，包括振动态密度 (vDOS) 和声子色散关系。如图 4a 所示，在 $0\text{--}17 \text{ THz}$ 范围内，vDOS 主要由非平面模式主导。图 4b 比较了从晶格动力学计算获得的声子色散关系和通过光谱能量密度 (SED) 分析提取的关系³⁰。沿 $\Gamma\text{--}A$ 方向 (垂直于基面)，由于这种 vdW 键合材料特有的弱层间剪切耦合特性，声学模式被限制在低于 3 THz 的低频范围内。因此，在跨平面 (正常) 方向传播的声子仅对图 3b 中的光谱热导率 $\kappa(\omega)$ 的 $0\text{--}3 \text{ THz}$ 部分有贡献。

为了识别出负责在 $\kappa(\omega)$ 中占据主导地位的 $3\text{--}17 \text{ THz}$ 贡献的声子，我们检查了沿斜向方向的色散。如图 4b 所示，在斜向 $\Gamma\text{--}H$ 方向上的声学支延伸到了更高的频率，很好地对应于 $\kappa(\omega)$ 的主要光谱范围。这表明跨平面热传输主要由斜向传播的声学声子介导。

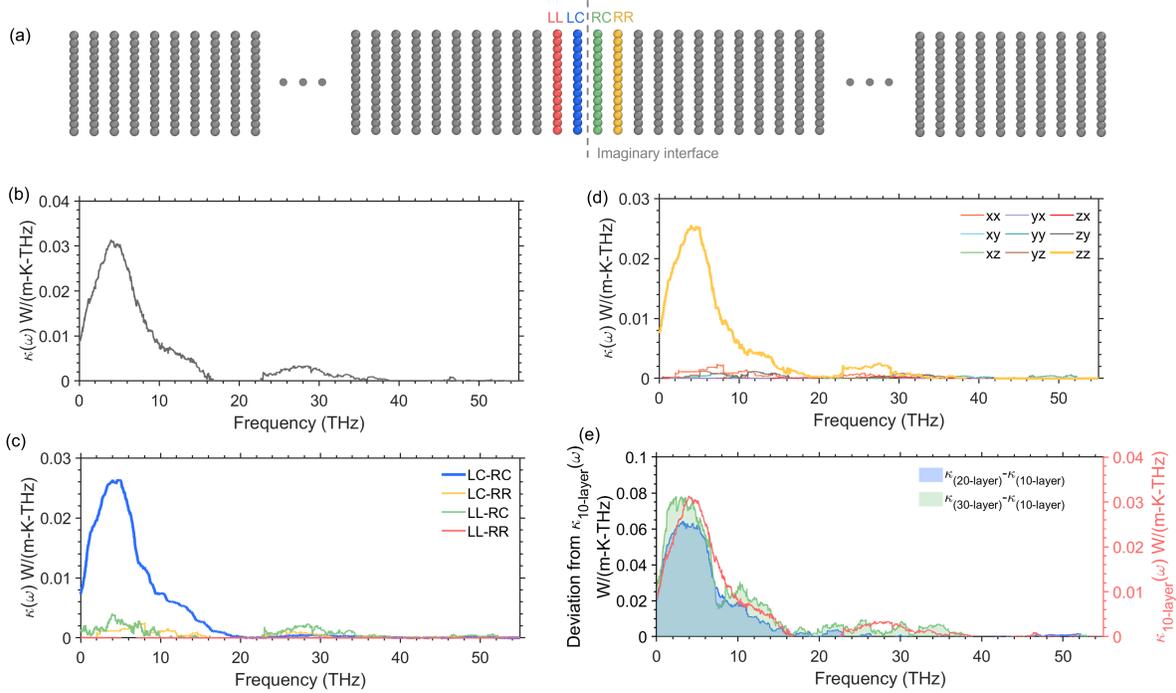


图 3. 面内热传导 $\kappa(\omega)$ 在原始石墨 (PG) 中的跨平面热输运。(a) 示意图显示了在 NEMD 模拟中用于计算 $\kappa(\omega)$ 的四个相邻的石墨烯层。虚线垂直线标记了用于通过方程 4 评估光谱热流 $Q(\omega)$ 的假想界面。(b) 10 层 PG 的 $\kappa(\omega)$ 。(c) 按照层间分离分解 $\kappa(\omega)$: LC - RC (最近邻, 一个层间距), LC - RR 和 LL - RC (次近邻, 两个间距), 以及 LL - RR (第三近邻, 三个间距)。(d) 按振动极化分解 $\kappa(\omega)$ 。红色曲线 (右侧轴): 10 层 PG 的 $\kappa(\omega)$; 阴影区域 (左侧轴) 显示了 20 层和 30 层 PG 光谱相对于 10 层情况的偏差。

进一步支持斜声子主导作用的证据见图 2b。AHG 结构包含穿透孔, 占据了石墨烯层横截面积的大约 7%。如果跨平面传输主要由严格沿法线方向传播的声子控制, 则预期会有相应的 $\sim 7\%$ 减少 κ_{\perp} 。然而, 图 2b 显示 AHG 结构中的 κ_{\perp} 与原始石墨相比减少了 30–40%。如图 4b 示意所示, 这种显著减少的原因是斜向传播的声子遇到并被穿透孔散射的概率大大增加, 从而更大幅度地削弱了 κ_{\perp} 。

为了理解纳米孔对各声子模式贡献的热输运的影响, 我们也进行了 AGH 和 SHG 结构的谱热导率分析。图 5a 比较了 30 层 PG、AHG 和 SHG 的 $\kappa(\omega)$ 。显然, 纳米孔在整个频谱范围内降低了 $\kappa(\omega)$, SHG 由于其错位孔结构表现出最大的抑制作用。与 AHG 不同, SHG 阻碍直接的跨平面路径, 增加了声子散射。图 5b 和 5c 显示, 在 AHG 和 SHG 中, $\kappa(\omega)$ 都随着层数的增加而增加, 这与尽管存在结构无序但仍符合弹道输运机制的情况一致。

总结, 在这项工作中, 我们系统地研究了原始石墨、孔状石墨和锂插层石墨 (LiC_6) 的面外热传输特性, 使用分子动力学模拟。我们的结果表明所有基于石墨的系统的 κ_{\perp} 强烈依赖于层数, 突显了即使在扩展到 300 层的多层结构中也存在显著的声子弹道输运贡献。在这些石墨结构中, κ_{\perp} 随层数几乎线性增加, 表明声子平均自由路径较长且基面内散射极小。频谱热导率分析进一步揭示了这种行为源自低于 17 THz 的声子模式, 主要贡献来自斜传播的声学声子。这些声子表现出显著的群速度和延长的平均自由路径, 导致高效的面外热传输。AHG 和 SHG 中纳米孔的引入通过直接破坏面外声子输运显著抑制了 κ_{\perp} 。在 SHG 中的抑制更为明显, 由于跨平面连续性的破坏。有趣的是, 在 1:6 的 Li-to-C 比下锂插层导致 κ_{\perp} 增强, 这归因于由锂离子引起的层间耦合增加。总体而言, 这项研究为分层石墨系统中的声子输运机制提供了关键见解, 并为通过结构修改如纳米孔图案化和插层来调节 κ_{\perp} 提供了指导。

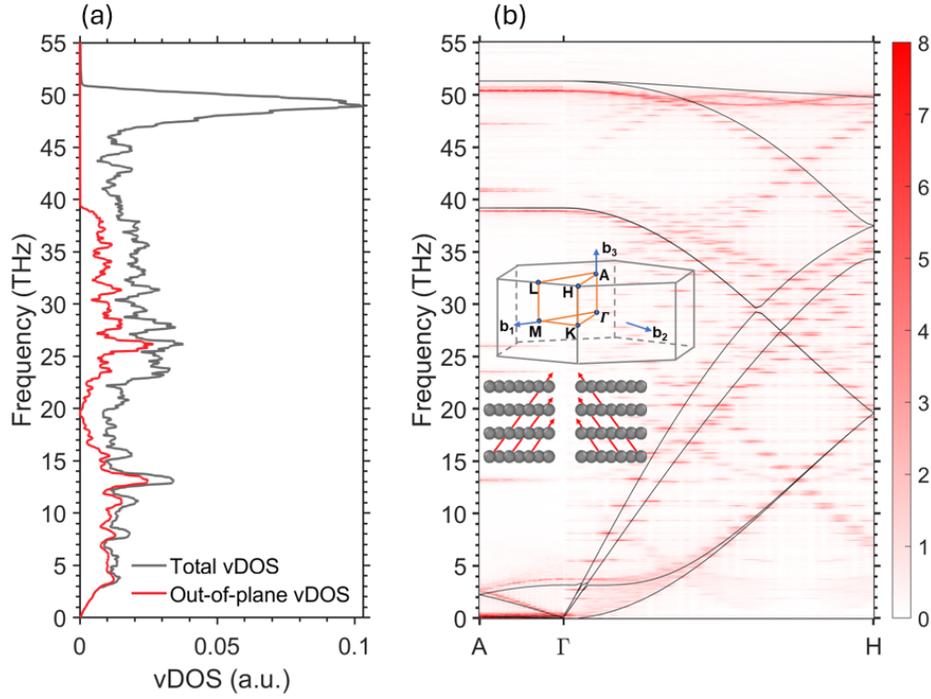


图 4. 声子特性研究：10 层原始石墨。(a) 振动态密度。(b) 从频谱能量密度（热图）和晶格动力学（黑色线条）沿 $A-\Gamma-H$ 路径获得的声子色散关系。上嵌图显示了石墨的第一布里渊区。下嵌图示意性地说明了斜向声子的传输路径，突出了它们对贯穿孔洞散射的敏感性。

致谢

作者感谢国家自然科学基金 (CBET-2211696) 的经济支持。约翰·克罗斯比感谢美国航空航天局 (NASA) 通过内华达空间拨款联盟为内华达空间拨款本科生奖学金提供的支持。作者感谢内华达大学雷诺分校信息科技办公室的研究与创新和网络基础设施团队的支持，他们提供了便利和访问 Pronghorn 高性能计算集群的机会。

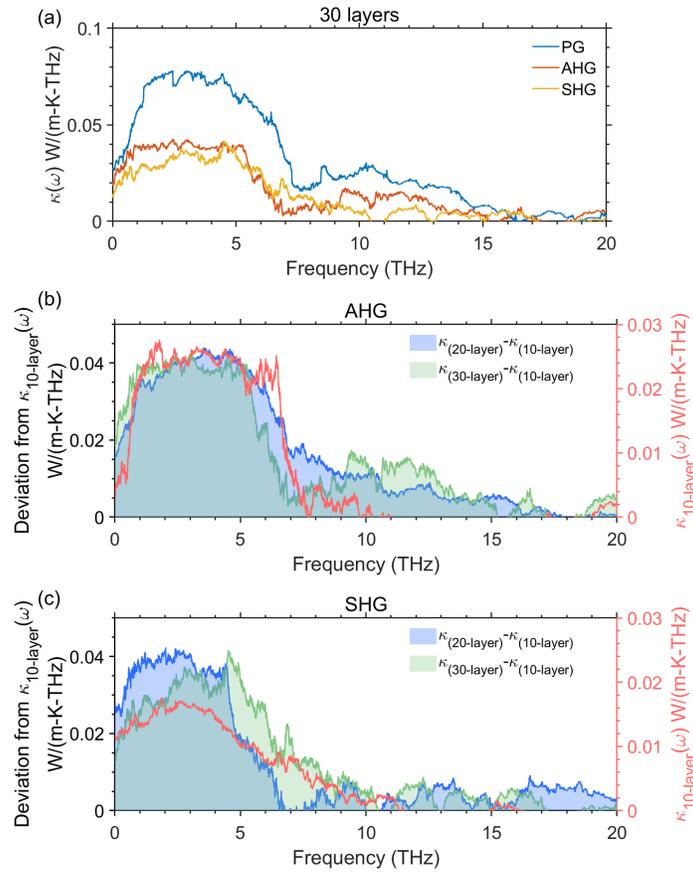


图 5. 面内热导率 $\kappa(\omega)$ 对于原始石墨 (PG)、对齐孔石墨 (AHG) 和交错孔石墨 (SHG) 的垂直热传输。(a) 比较 30 层 PG、AHG 和 SHG 样本的 $\kappa(\omega)$ 。(b) 红色曲线 (右侧轴): 10 层 AHG 的垂直热传输 $\kappa(\omega)$; 阴影区域, 绘制于左侧轴上, 表示 20 层和 30 层 AHG 光谱与 10 层情况的偏差。(c) 与面板 (b) 相同, 但针对 SHG。

REFERENCES

- ¹K. F. Mak, J. Shan, and T. F. Heinz, *Physical review letters* **104**, 176404 (2010).
- ²W. Bao, L. Jing, J. Velasco Jr, Y. Lee, G. Liu, D. Tran, B. Standley, M. Aykol, S. Cronin, D. Smirnov, *et al.*, *Nature Physics* **7**, 948 (2011).
- ³Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
- ⁴K. F. Mak, M. Y. Sfeir, J. A. Misewich, and T. F. Heinz, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **107**, 14999 (2010).
- ⁵D. Wang, Y. Dou, X. Zhang, K. Bi, I. R. Panneerselvam, H. Sun, X. Jiang, R. Dai, K. Song, H. Zhuang, *et al.*, *Nano Today* **55**, 102162 (2024).
- ⁶X. Qian, X. Gu, M. S. Dresselhaus, and R. Yang, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **7**, 4744 (2016).
- ⁷C. Y. Ho, R. W. Powell, and P. E. Liley, *J. Phys. Chem. Ref. Data, Suppl.*, v. 3, no. 1, pp. 1-796 (1974).
- ⁸G. Fugallo, A. Cepellotti, L. Paulatto, M. Lazzeri, N. Marzari, and F. Mauri, *Nano letters* **14**, 6109 (2014).
- ⁹L. Lindsay, D. Broido, and N. Mingo, *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* **83**, 235428 (2011).
- ¹⁰D. L. Nika and A. A. Balandin, *Journal of Physics: Condensed Matter* **24**, 233203 (2012).
- ¹¹Y. Wang, A. K. Vallabhaneni, B. Qiu, and X. Ruan, *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering* **18**, 155 (2014).
- ¹²X. Qian, X. Gu, M. S. Dresselhaus, and R. Yang, *The journal of physical chemistry letters* **7**, 4744 (2016).
- ¹³E. Pop, V. Varshney, and A. K. Roy, *MRS bulletin* **37**, 1273 (2012).
- ¹⁴S. Ghosh, W. Bao, D. L. Nika, S. Subrina, E. P. Pokatilov, C. N. Lau, and A. A. Balandin, *Nature materials* **9**, 555 (2010).
- ¹⁵Z. Wei, Z. Ni, K. Bi, M. Chen, and Y. Chen, *Physics Letters A* **375**, 1195 (2011).
- ¹⁶Y. Ni, Y. Chalopin, and S. Volz, *Applied Physics Letters* **103** (2013).
- ¹⁷K. Shen, Q. Ren, L. Zhao, Y. Qiu, X. Yao, P. Jiang, Z. Huang, Y. Li, J. Li, S. Yu, *et al.*, *Advanced Materials* , 2418569 (2025).
- ¹⁸H. Cui, T. Ma, and Y. Wang, *2D Materials* **11**, 035026 (2024).
- ¹⁹A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, and S. J. Plimpton, *Comp. Phys. Comm.* **271**, 108171 (2022).
- ²⁰A. Knac, J. B. Haskins, C. Sevik, and T. Çan, *Physical Review B* **86**, 115410 (2012).
- ²¹S. Nosé, *The Journal of chemical physics* **81**, 511 (1984).
- ²²W. G. Hoover, *Physical Review A* **31**, 1695 (1985).
- ²³C. Y. Ho, R. W. Powell, and P. E. Liley, *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **1**, 279 (1972).
- ²⁴A. J. Schmidt, X. Chen, and G. Chen, *Review of Scientific Instruments* **79**, 114902 (2008).
- ²⁵W. Ju, C. Zhu, and Z. Wei, *AIP Advances* **10**, 095225 (2020), https://pubs.aip.org/aip/adv/article-pdf/doi/10.1063/5.0023229/12862434/095225_1_online.pdf.
- ²⁶Z. Wei, F. Yang, K. Bi, J. Yang, and Y. Chen, *The Journal of Physical Chemistry C* **122**, 1447 (2018).
- ²⁷K. Sääskilahti, J. Oksanen, J. Tulkki, and S. Volz, *Physical Review B* **90**, 134312 (2014).
- ²⁸K. Sääskilahti, J. Oksanen, S. Volz, and J. Tulkki, *Physical Review B* **91**, 115426 (2015).

²⁹H. Cui, T. Maranets, T. Ma, and Y. Wang, Phys. Rev. B **110**, 075301 (2024).

³⁰J. A. Thomas, J. E. Turney, R. M. Iutzi, C. H. Amon, and A. J. H. McGaughey, Phys. Rev. B **81**, 081411 (2010).