

Vibrational Lifetimes and Phonons Mean Free Path of Graphene Using Molecular Dynamics and Spectral Energy Density

Morteza Mafakheri, Amir Abbas Sabouri Dodaran*

Department of physics, Payame Noor University (PNU), P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran

Received: 10.06.2020 Final revision: 27.03.2022 Accepted: 20.07.2022

DOI: [10.22055/jrmb.2022.17909](https://doi.org/10.22055/jrmb.2022.17909)

Abstract

In this research, we performed molecular dynamics (MD) simulations using phonon spectral analysis aiming at understanding the thermal transport in graphene. Atomic velocities derived from MD and spectral energy density (SED) analysis are used to obtain the lifetimes and mean free paths (MFP) of individual phonon modes. Our calculations show that acoustical ZA, LA, and TA phonons have larger lifetimes and MFP so they have more contribution to thermal conductivity. Among Optical phonons, ZO, out of plane modes, has a longer lifetime than LO and TO phonon modes but because of little group velocity their contribution to thermal conductivity is negligible.

Keywords: Graphene, phonon lifetime, Mean Free Path, molecular dynamics, spectral energy density

*Corresponding author: sabouri@pnu.ac.ir



طول عمر نوسان‌ها و مسیر آزاد میانگین فونون‌های گرافن با استفاده از دینامیک مولکولی و چگالی انرژی طیفی

مرتضی مفاخری، امیرعباس صبوری دودران*

گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، صندوق پستی ۱۹۳۹۵-۳۶۹۷ تهران، ایران

دریافت: ۱۳۹۹/۰۳/۲۱ ویرایش نهائی: ۱۴۰۱/۰۱/۰۷ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۴/۲۹

DOI: [10.22055/jrmb.2022.17909](https://doi.org/10.22055/jrmb.2022.17909)

چکیده

در این تحقیق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با تجزیه و تحلیل طیفی فونون با هدف درک رسانش گرمایی در گرافن انجام شد. برای محاسبه طول عمر و مسیر آزاد میانگین فونون‌های هر مد از سرعت اتم‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تجزیه و تحلیل چگالی انرژی طیفی استفاده گردید. محاسبات انجام شده نشان می‌دهد که فونون‌های آکوستیکی یعنی فونون‌های مربوط به مدهای LA, ZA و TA طول عمر و مسیر آزاد میانگین بیشتری داشته در نتیجه سهم بیشتری در رسانش گرمایی دارند. در بین فونون‌های اپتیکی فونون‌های مربوط به مد ZO یعنی ارتعاش‌های خارج از صفحه گرافن نسبت به مدهای LO, TO طول عمر قابل ملاحظه‌ای دارند ولی به دلیل سرعت گروه پایین نقش آنها در رسانش گرمایی ناچیز است.

کلیدواژگان: گرافن، طول عمر فونون، مسیر آزاد میانگین، دینامیک مولکولی، چگالی انرژی طیفی

مقدمه

را به‌خود جلب می‌کنند. در سیستم‌های نیم‌رسانا و غیرفلزی گرما توسط فونون‌ها از طریق ارتعاش‌های شبکه منتقل می‌شود. فونون‌ها شامل محدوده وسیعی از فرکانس‌ها و محدوده وسیعتری در مقادیر مسیر آزاد میانگین می‌باشند [۱].

گرافن یک لایه جدا شده از اتم‌های کربن هیبریدی شده sp^2 است که به شکل شبکه لانه زنبوری می‌باشد. پیش‌بینی‌های نظری زیادی وجود دارد که گرافن از رسانش گرمایی غیرمعمول بالایی برخوردار است [۲]. گذشته از تحرک الکترونیکی بالا رسانش گرمایی بالایی

در سال‌های اخیر به ویژگی‌های گرمایی مواد در مجامع تحقیقاتی علمی و صنعتی توجه زیادی شده است. این امر بیشتر به دلیل دفع گرما و مدیریت آن در صنایع الکترونیکی و همچنین نیاز به درک انتقال گرما در مقیاس نانو از منظر علمی بوده است. انتقال گرما در سیستم‌های دو بعدی و یک بعدی چالش علمی جالبی است. موادی که دارای رسانایی گرمایی بسیار زیاد یا بسیار کم هستند، به دلیل کاربردهایی که برای عایق گرما دارند، توجه زیادی

*نویسنده مسئول: sabouri@pnu.ac.ir

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کپی‌رایت کامنز اختصاص ۴.۰ بین‌المللی می‌باشد



نیز در گرافن به صورت تجربی اثبات شده است [۳-۵]. پیش‌بینی شده است که چنین رسانش دو بعدی می‌تواند به انتقال گرمای ذاتی بی‌نهایت بزرگ منجر شود [۶-۸]. اهمیت مدل‌های تحلیلی انتقال گرما به دلیل تقریب‌ها و پیش فرض‌های لازم که فقط پیش‌بینی‌های کیفی یا نیمه کمی را مجاز می‌سازد تا حدود زیادی کاهش یافته است [۹،۱۰]. برای محاسبه رسانش گرمایی می‌توان از روش‌های متفاوت مانند گرین-کوبو^۱ و شبیه‌سازی دینامیکی مولکولی و ... استفاده کرد [۱۱-۱۴]. از آنجا که تجزیه و تحلیل در این دو روش در سطح ماکروسکوپی انجام می‌شود، هیچ اطلاعاتی درباره فونون‌ها به دست نمی‌آید. با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و تجزیه و تحلیل مدهای نرمال، می‌توان ویژگی‌های مورد نیاز فونون‌ها (سرعت گروه، طول عمر) را محاسبه کرد که از طریق آنها مقدار رسانش گرمایی را به‌ازای هر مد به دست آورد، اما این روش نیاز به حجم بالای محاسباتی در مورد فرکانس و بردارهای قطبش مدهای نوسانی نمونه دارد. فرکانس و طول عمر فونون‌ها را می‌توان از محاسبات دینامیک شبکه^۲ هماهنگ^۲ و غیرهماهنگ، به دست آورد [۱۵-۲۱]. اما این روش‌ها از نظر تئوری و محاسباتی پیچیده هستند. رسانش گرمایی و انتقال فونون در گرافن با روش‌های کلاسیک مانند معادله بولتزمن [۲۲] و دینامیک مولکولی کلاسیک مورد مطالعه قرار گرفته است [۲۳-۳۰]. اما در این کار ما از دینامیک مولکولی آغازین^۳ (AIMD) یا کوآنتومی استفاده می‌کنیم زیرا در

دمای اتاق باید اثرات کوآنتومی در نظر گرفته شود در غیر این صورت باید از اصلاحات کوآنتومی استفاده شود [۲۴]. در بیشتر موارد، انتقال ذاتی فونون در بلورها تحت تأثیر فرایند نرمال سه فونون یا واگرد قرار می‌گیرد. بنابراین، فقط در نظر گرفتن ثابت‌های نیروی ناهماهنگ مرتبه سوم معمولاً تقریب خوبی است. با این حال، در نانولوله‌های کربنی^۴ (CNT)، بی‌توجهی به برهم‌کنش‌های ناهماهنگ مرتبه بالاتر، باعث شده تا طول عمر فونون بیش از مقدار واقعی برآورد شود [۲۵]. با توجه به رابطه نزدیک بین CNT و گرافن، اگر شبیه‌سازی کاملاً ناهماهنگ نباشد، انتظار داریم که همان خطا برای گرافن هم رخ دهد. برای پیش‌بینی روابط بین پراکندگی فونون و طول عمر گرافن، از تحلیل چگالی انرژی طیفی^۵ استفاده می‌کنیم که همراه با شبیه‌سازی‌های AIMD، به‌طور کامل همه برهم‌کنش‌های بین اتمی را در نظر می‌گیرد. چنین تحلیل‌ها و فرمول‌بندی‌های مشابهی همراه با شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به‌منظور پیش‌بینی ویژگی‌های فونون برای مواد مختلف با موفقیت انجام شده است [۱۱، ۱۵، ۱۶، ۱۷، ۲۱]. چگالی انرژی طیفی، که ما در اینجا مورد استفاده قرار می‌دهیم، روش ساده‌ای را ارائه می‌دهد که با استفاده از آن می‌توان فرکانس فونون‌ها و طول عمر را با استفاده از سرعت اتم‌های حاصل از یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به دست آورد [۳۲-۳۴].

¹ Green-Kubo

² Harmonic

³ Ab-initio Molecular Dynamics

⁴ Carbon Nano Tubes

⁵ Spectral energy density

روش محاسباتی

$$\bar{T}(\kappa) = \sum_{\alpha} \sum_b \frac{1}{\sqrt{\tau}} \left| \int_{\frac{1}{\sqrt{\tau}}}^{\tau} \dot{q}(\kappa \begin{matrix} b \\ \alpha \end{matrix}; t) \times \exp(-i\omega t) dt \right|^2 \quad ۴$$

که در آن فرکانس زاویه‌ای است. با قراردادن مشتق زمانی معادله ۱ در معادله ۴ و میانگین گیری روی N_T چگالی انرژی طیفی را نتیجه می‌دهد [۲۱].

$$\Phi(\kappa, \omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi\tau} N_T} \sum_{\alpha} \sum_b m_b \times \left| \int_{\frac{1}{\sqrt{\tau}}}^{\tau} \sum_{n_{x,y,z}}^{N_T} u_{\alpha} \left(\begin{matrix} n_{x,y,z} \\ b \end{matrix}; t \right) \times \exp[i\kappa \cdot \mathbf{r} \left(\begin{matrix} n_{x,y,z} \\ \cdot \end{matrix} \right) - i\omega t] dt \right|^2 \quad ۵$$

چگالی انرژی طیفی میانگین انرژی جنبشی به‌ازای سلول واحد و به‌صورت تابعی از بردار موج و فرکانس است و باید ترکیبی از \mathbf{n}^3 تابع لورنتزی^۲ با مراکز در ω_c با نیم پهنایی در نیم بیشینه γ باشد که در آن \mathbf{n} تعداد اتمها در سلول واحد است در نتیجه می‌توان آن را با معادله ۶ مدل سازی کرد [۱۵، ۱۸].

$$L(\omega, \nu) = \frac{I}{[\gamma\tau(\omega - \omega_c)]^2 + 1} \quad ۶$$

که در آن I شدت ستیغها و τ طول عمر فونون است. در سیستم‌های هماهنگ فونون‌ها پراکنده نمی‌شوند در نتیجه طول عمر نامتناهی خواهند داشت و به‌صورت ستیغ‌هایی از نوع تابع دلتا در طیف ارتعاشی ظاهر می‌شوند. در سیستم‌های واقعی به‌دلیل برهم‌کنش‌های ناهماهنگ، فونون‌ها پراکنده می‌شوند و بنابراین طول عمر متناهی دارند که باعث افزایش پهنای ستیغها در طیف ارتعاشی می‌گردد. با محاسبه پهنای ستیغها و با استفاده از رابطه

چگالی انرژی طیفی با تصویر کردن مکان اتمها در یک بلور بر روی مدهای نرمال ارتعاشات $q(\kappa \begin{matrix} b \\ \alpha \end{matrix}; t)$ به‌دست می‌آید، که در آن κ بردار موج، ν بیانگر مد فونون و t زمان است.

$$q(\kappa \begin{matrix} b \\ \alpha \end{matrix}; t) = e \left(\begin{matrix} \kappa & b \\ \nu & \alpha \end{matrix} \right) \sqrt{\frac{m_b}{N_T}} \times \left\{ \sum_{n_{x,y,z}}^{N_T} u_{\alpha} \left(\begin{matrix} n_{x,y,z} \\ b \end{matrix}; t \right) \exp[i\kappa \cdot \mathbf{r} \left(\begin{matrix} n_{x,y,z} \\ \cdot \end{matrix} \right)] \right\} \quad ۱$$

که e مؤلفه مربوط به بردار قطبش، $\mathbf{r} \left(\begin{matrix} n_{x,y,z} \\ \cdot \end{matrix} \right)$ مکان تعادلی هر سلول واحد، $N_T (= N_x N_y N_z)$ تعداد کل سلول واحدها و $u_{\alpha} \left(\begin{matrix} n_{x,y,z} \\ b \end{matrix}; t \right)$ دامنه نوسانات مدهای نرمال، که همان جابه‌جایی اتم \mathbf{b} (با جرم m_b) در جهت α در داخل سلول واحد $n_{x,y,z}$ است، می‌باشد. دامنه مد نرمال کل برابر است با

$$q(\kappa \begin{matrix} \kappa \\ \nu \end{matrix}; t) = \sum_{\alpha} \sum_b q \left(\begin{matrix} \kappa & b \\ \nu & \alpha \end{matrix}; t \right) \quad ۲$$

و میانگین انرژی جنبشی مد نرمال $\left(\begin{matrix} \kappa \\ \nu \end{matrix} \right)$ عبارتست از

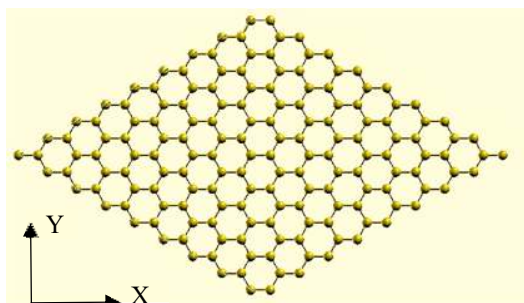
$$\bar{T}(\kappa) = \sum_{\alpha} \sum_b \bar{T} \left(\begin{matrix} \kappa & b \\ \nu & \alpha \end{matrix}; t \right) = \sum_{\alpha} \sum_b \left[\frac{1}{\tau} \int_{\frac{1}{\sqrt{\tau}}}^{\tau} \dot{q}^* \left(\begin{matrix} \kappa & b \\ \nu & \alpha \end{matrix}; t \right) \times \dot{q} \left(\begin{matrix} \kappa & b \\ \nu & \alpha \end{matrix}; t \right) dt \right] \quad ۳$$

که در آن \dot{q}^* مزدوج مختلط \dot{q} است. انرژی جنبشی را که برحسب زمان است می‌توان با استفاده از قضیه پارسوال^۱ برحسب فرکانس بیان کرد.

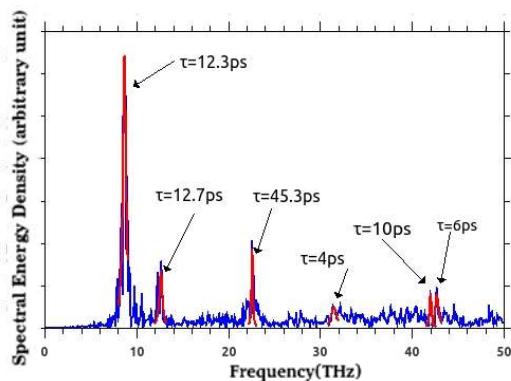
¹ Parseval

² Lorentzian

که در آن $N = 9$ تعداد سلول‌ها در جهت بردارهای شبکه و n_1 و n_2 اعداد صحیح هستند به گونه‌ای که باید در نامعادله $\frac{N}{3} < (n_1, n_2) < \frac{N}{3} - 1$ صدق کنند. با توجه به اندازه نمونه که یک ابرسلول 9×9 می‌باشد تعداد ۱۲ بردار موج مجاز به دست آمد سپس با استفاده از معادله ۵ طیف چگالی انرژی برای هر بردار موج رسم گردید (شکل ۲).



شکل ۱. شکل هندسی شبیه سازی انجام شده. سطح گرافن موازی صفحه X-Y در نظر گرفته شده است



شکل ۲. نمودار چگالی انرژی طیفی گرافن برای بردار موج با اندازه $k = 0.983 \text{ (\AA)}^{-1}$ در مسیر $\Gamma-M$.

می‌توان طول عمر فونون‌ها را محاسبه کرد [۱۵، ۱۸].

$$\tau(\vec{k}) = \frac{1}{\gamma(\vec{k})}$$

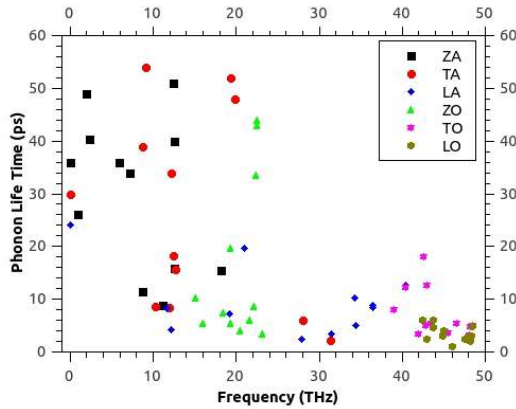
در محاسبات ما از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی آغازین و آنالیز چگالی انرژی طیفی استفاده شده است. تجزیه و تحلیل مدهای نرمال و روش چگالی انرژی طیفی، مسیرهای دینامیک مولکولی را بر روی هر مد نرمال هر فونون ترسیم می‌کند، که این امر باعث می‌شود تا بتوان طول عمر فونون‌ها را به دست آورد. بنابراین، تمام مرتبه‌های فرایندهای فونونی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در نظر گرفته می‌شوند. از این رو، طول عمر پیش‌بینی شده با این روش اثر پراکندگی π -فونون را نیز در برمی‌گیرد. به این ترتیب، روش چگالی انرژی طیفی یک روش قدرتمند برای محاسبه طول عمر ارتعاشی است.

بحث و نتیجه‌گیری

این شبیه‌سازی با استفاده از تئوری تابع چگالی (DFT) و کد SIESTA در دمای $T = 300 \text{ K}$ و برای گرافن با ابعاد صفحه 2.214×2.214 نانومتر در تقریب GGA¹ با رویکرد Perdew-Zunger انجام شد (شکل ۱). مدت زمان این شبیه‌سازی ۹۰ ps با طول گام زمانی ۰.۳ fs بود. برای تثبیت دما در محاسبات از روش Nose-Hoover استفاده شد. پس از این که سرعت اتم‌ها با روش دینامیک مولکولی به دست آمد، بردارهای موج مجاز را با استفاده از معادله ۷ محاسبه کردیم.

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{Na} \left[(n_1 + n_2) \frac{\vec{l}}{\sqrt{3}} + (n_1 - n_2) \vec{j} \right] \quad \forall$$

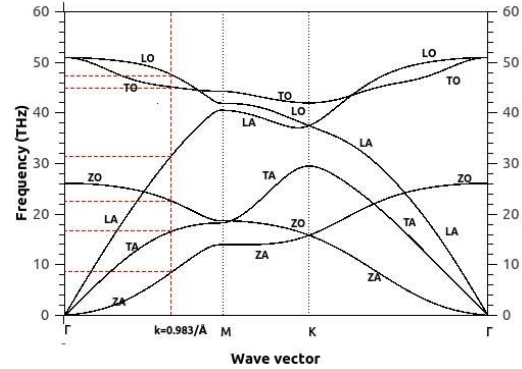
¹ Generalized gradient approximation



شکل ۴. طول عمر فونون‌ها برحسب فرکانس برای کل مدهای ارتعاشی.

با افزایش فرکانس طول عمر فونون‌های LA و TA کاهش می‌یابد که دلیل آن می‌تواند نقش مؤثرتر فرایند واگرد باشد. در نزدیکی‌های مرکز ناحیه بریلوین و برای فرکانس‌های کوچک طول عمر فونون‌های LA و TA افزایش می‌یابد دلیل آن این است که این فونون‌ها بردار موج کوچکی دارند و به دلیل قوانین بقای تکانه و انرژی به‌ندرت توسط سایر فونون‌ها پراکنده می‌شوند.

با محاسبه سرعت گروه هر فونون با استفاده از شیب نمودار پاشندگی فونونی (شکل ۳) و طول عمر هر فونون مسیر آزاد میانگین فونون‌ها به‌دست آمد (شکل ۵). همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود محدوده مسیر آزاد میانگین برای فونون‌های آکوستیکی و فونون‌های مد ZO از ۱۰ nm تا ۱۰۰۰ nm می‌باشد در صورتی که همین کمیت برای فونون‌های مدهای TO و LO کمتر از ۵۰ nm است که دلیل آن سرعت گروه کمتر و طول عمر کوتاه‌تر این دو مد ارتعاشی است. هنگامی که $\omega \rightarrow 0$



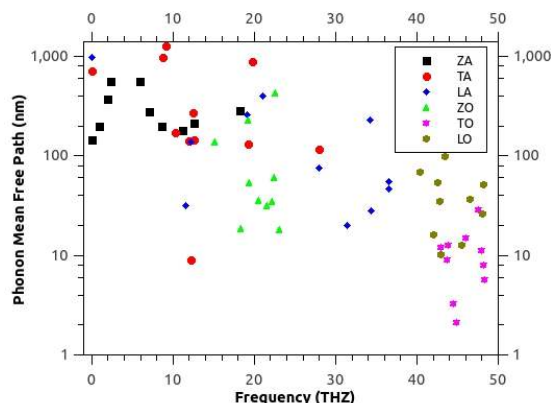
شکل ۳. نمودار پاشندگی فونونی گرافن تک لایه. بسامد فونون‌های مربوط به عدد موج $k = 0.983 (\text{\AA})^{-1}$ نشان داده شده است.

مکان ستیغ‌ها با استفاده از نمودار پاشندگی (شکل ۳) مشخص شد سپس طول عمر فونون‌های مختلف با استفاده از برازش کردن ستیغ‌ها با تابع لورنتس و محاسبه پهنای هر ستیغ به‌دست آمد. شکل ۲ نشان می‌دهد که ارتعاش گرافن در دمای 300K برای بردار موج $k = 0.983 (\text{\AA})^{-1}$ (نمایه شده در شکل ۳) در مسیر ΓM دارای فرکانس‌های ۸،۵۲، ۱۲،۳۵، ۲۲،۶۵، ۳۱،۳۴، ۴۲، ۴۲،۵ تراهرتز با طول عمر به‌ترتیب ۱۲،۳، ۱۲،۷، ۴، ۴۵،۳، ۱۰، ۶ پیکوثانیه است.

شکل ۴ نشان می‌دهد که طول عمر فونون‌های ZA محدوده ۱۰ تا ۵۰ پیکوثانیه را شامل می‌شود طول عمرهای طولانی این مد به دلیل همبستگی نسبتاً ضعیفی است که بین ارتعاشات خارج صفحه و داخل صفحه گرافن وجود دارد که همین امر باعث کاهش پراکندگی فونون‌های این مد می‌گردد. به‌همین دلیل فونون‌های مد ارتعاشی ZO نیز دارای طول عمرهای نسبتاً زیاد می‌باشد.

مرجع‌ها

- [1] C. Wonbong, J. Lee. *Graphene Synthesis and Applications*, Taylor & Francis Group, (2012).
[https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(12\)70044-5](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(12)70044-5)
- [2] S.K. Pati, T. Enoki, C.N.R. Rao. *Graphene and its Fascinating Attributes* World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2011).
<https://doi.org/10.1142/7989>
- [3] A.K. Geim, K.S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Mater* 6 (2007) 11-19.
https://doi.org/10.1142/9789814287005_0002
- [4] A.A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C.N. Lau, Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene, *Nano Letters* 8 (2008) 902-907.
<https://doi.org/10.1021/nl0731872>
- [5] J.H. Seol, I. Jo, A.L. Moor, Lindsay, Z.H. Aitken, M.T. Pettes, X. Li, Z. Yao, R. Huang, D. Broido, et al., Two-Dimensional Phonon Transport in Supported Graphene, *Science* 328 (2010) 213-216. <https://doi.org/10.1126/science.1184014>
- [6] A.A. Balandin, Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials, *Nature Mater* 10 (2011) 569-581.
<https://doi.org/10.1038/nmat3064>
- [7] G. Basile, C. Bernardin, S. Olla, Momentum Conserving Model with Anomalous Thermal Conductivity in Low Dimensional Systems, *Physical Review Letters* 96 (2006) 204303
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.204303>
- [8] W. Cai, A.L. Moore, Y. Zhu, X. Li, S. Chen, L. Shi, R.S. Ruoff, Thermal Transport in Suspended and Supported Monolayer Graphene Grown by Chemical Vapor Deposition, *Nano Letters* 10 (2010) 1645-1651.
<https://doi.org/10.1021/nl9041966>
- [9] J. Callaway, H.C. von Baeyer, Effect of Point Imperfections on Lattice Thermal Conductivity, *Physical Review* 120 (1960) 1149.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.120.1149>
- [10] M.G. Holland, Phonon Scattering in Semiconductors from Thermal Conductivity



شکل ۵. نمودار لگاریتمی مسیر آزاد میانگین فونون‌ها بر حسب فرکانس برای کل مدهای ارتعاشی.

مسیر آزاد میانگین مربوط به مدهای آکوستیکی TA و LA و اگر می‌شوند که دلیل آن ثابت ماندن سرعت گروه و افزایش طول عمر آنها است. در حالی که در مورد مد ارتعاشی ZO این واگرایی در مسیر آزاد میانگین فونون‌ها مشاهده نمی‌شود که دلیل آن این است که با کاهش بسامد افت سرعت گروه این مد با توجه به رابطه $v_g \sim \sqrt{\omega}$ خیلی سریع‌تر از افزایش طول عمر آنها رخ می‌دهد.

به‌طور کلی مشاهده شد که طول عمر فونون‌های گرافن لزوماً بیشتر از سایر جامداتی که رسانش گرمایی کمتری دارند نیست [۳۸،۳۷] بلکه دلیل رسانش گرمایی بالای گرافن وزن اتمی کوچک کربن و نیز نیروی قوی پیوند کربن-کربن می‌باشد که باعث افزایش سرعت گروه فونون‌ها می‌شود.

سپاس‌گزاری

از راهنمایی‌های ارزشمند دکتر محمدرضا رحیمی تبار در این تحقیق سپاس‌گزاریم.

<https://doi.org/10.1103/PhysRev.128.2589>

[19] D.C. Wallace, *Thermodynamics of Crystals*. Cambridge, (1972).

[20] M.T. Dove, *Introduction to Lattice Dynamics*. Cambridge (1993).
<https://doi.org/10.1017/CBO9780511619885>

[21] J.E. Turney, E.S. Landry, A.J.H. McGaughey, C.H. Amon, Predicting phonon properties and thermal conductivity from anharmonic lattice dynamics calculations and molecular dynamics simulations, *Physical Review B* 79 (2009) 064301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.064301>

[22] B. Lindsay, N. Mingo, Flexural phonons and thermal transport in graphene, *Physical Review B* 82 (2010) 115427.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.115427>

[23] Z. Wei, B. Yang, Y. Chen, Phonon mean free path of graphite along the c-axis, *Journal of Applied Physics* 116 (2014) 153503.
<https://doi.org/10.1063/1.4866416>

[24] T. Feng, X. Ruan, Four-phonon scattering reduces intrinsic thermal conductivity of graphene and the contributions from flexural phonons, *Physical Review B* 97 (2018) 045202.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.045202>

[25] E. Koukaras, G. Kalosakas, C. Galiotis, K. Papagelis, Phonon properties of graphene derived from molecular dynamics simulations, *Scientific Reports* 5 (2015) 12923.
<https://doi.org/10.1038/srep12923>

[26] R. Qiu, Reduction of spectral phonon relaxation times from suspended to supported graphene, *Applied Physics Letters* 100 (2012) 193101.
<https://doi.org/10.1063/1.4712041>

[27] Z. Ji-Hang, X. Xin-Tong, C. Bing-Yang, Size-dependent mode contributions to the thermal transport of suspended and supported graphene, *Applied Physics Letters* 115 (2019) 123105.
<https://doi.org/10.1063/1.5115060>

[28] C. Bing-Yang, Z. Ji-Hang, H. Guo-Jie, C. Gui-Xing, Enhanced thermal transport across multilayer graphene and water by interlayer functionalization, *Applied Physics Letters* 112

Studies, *Physical Review* 132 (1963) 2461.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.134.A471>

[11] A.J.H. McGaughey, M. Kaviani, Quantitative validation of the Boltzmann transport equation phonon thermal conductivity model under the single-mode relaxation time approximation, *Physical Review B* 69 (2004) 094303
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.094303>

[12] E.S. Landry, M.I. Hussein, A.J.H. McGaughey, Complex superlattice unit cell designs for reduced thermal conductivity, *Physical Review B* 77 (2008) 184302.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.184302>

[13] P.K. Schelling, S.R. Phillpot, P. Keblinski, Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity, *Physical Review B* 65 (2002) 144306.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.144306>

[14] D.P. Sellan, E.S Landry, J.E. Turney, A.J.H. McGaughey, C.H. Amon, Size effects in molecular dynamics thermal conductivity predictions, *Physical Review B* 81 (2010) 214305.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.214305>

[15] A.J.C. Ladd, B. Moran, W.G. Hoover, Lattice thermal conductivity: A comparison of molecular dynamics and anharmonic lattice dynamics, *Physical Review B* 34 (1986) 5058.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.5058>

[16] A.S. Henry, G. Chen, Spectral Phonon Transport Properties of Silicon Based on Molecular Dynamics Simulations and Lattice Dynamics, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* 5 (2008) 1-12.
<https://doi.org/10.1166/jctn.2008.2454>

[17] J.V. Goicochea, M. Madrid, C.H. Amon, Thermal Properties for Bulk Silicon Based on the Determination of Relaxation Times Using Molecular Dynamics, *Journal of Heat Transfer*, 132 (2010) 012401.
<https://doi.org/10.1115/1.3211853>

[18] A.A. Maradudin, A.E. Fein, Scattering of Neutrons by an Anharmonic Crystal, *Physical Review* 128 (1962) 2589.

035312.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.035312>
- [37] J.E. Turney, E.S. Landry, A.J.H. McGaughey, C.H. Amon, Predicting phonon properties and thermal conductivity from anharmonic lattice dynamics calculations and molecular dynamics simulations, *Physical Review B* **79** (2009) 064301.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.064301>
- [38] B. Qiu, H. Bao, G. Zhang, Y. Wu, X. Ruan, Molecular Dynamics Simulations of Lattice Thermal Conductivity and Spectral Phonon Mean Free Path of PbTe: Bulk and Nanostructures, *Computational Materials Science* **53** (2012) 278-285.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.08.016>
- [29] Z. Ji-Hang, C. Bing-Yang, Phonon thermal properties of graphene on h-BN from molecular dynamics simulations, *Applied Physics Letters* **110** (2017) 103106.
<https://doi.org/10.1063/1.4978434>
- [30] Z. Ji-Hang, Y. Zhen-Qiang, C. Bing-Yang, Phonon thermal properties of graphene from molecular dynamics using different potentials, *Journal of Chemical Physics* **145** (2016) 134705.
<https://doi.org/10.1063/1.4963918>
- [31] S. Maruyama, A molecular dynamics simulation of heat conduction of a finite length single-walled carbon nanotube, *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering* **7** (2003) 41-50.
<https://doi.org/10.1080/10893950390150467>
- [32] J. Shiomi, S. Maruyama, Non-Fourier heat conduction in a single-walled carbon nanotube: Classical molecular dynamics simulations, *Physical Review B* **73** (2006) 205420.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.205420>
- [33] N. de Koker, Thermal Conductivity of MgO Periclase from Equilibrium First Principles Molecular Dynamics, *Physical Review Letters* **103** (2009) 125902.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.125902>
- [34] J.A. Thomas, J.E. Turney, R.M. Iutzi, C.H. Amon, A.J.H. McGaughey, Predicting phonon dispersion relations and lifetimes from the spectral energy density, *Physical Review B* **81** (2010) 081411.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.081411>
- [35] P. Mukherjee, I. Kass, I. Arkin, M.T. Zanni, Picosecond dynamics of a membrane protein revealed by 2D IR, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **103** (2006) 8571.
<https://doi.org/10.1073/pnas.0508833103>
- [36] B. Qiu, L. Sun, X. Ruan, Lattice thermal conductivity reduction in Bi₂Te₃ quantum wires with smooth and rough surfaces: A molecular dynamics study, *Physical Review B* **83** (2011) 041603.
<https://doi.org/10.1063/1.5018749>