平衡态分子动力学 Green-Kubo 方法计算氮化硼单层结构热导率的模型尺寸效应研究

鲁济豹[1] 杨楠楠[1,2] 孙 蓉[1] 汪正平[1,3]

[1](中国科学院深圳先进技术研究院 广东省高密度电子封装关键材料重点实验室 深圳 518055)
[2](中国科学技术大学纳米科学技术学院 苏州 215123)
[3](香港中文大学电子工程系 香港 999077)

摘 要 分子动力学模拟可以直接表征体系原子的行为，因此成为研究氮化硼相关材料微观导热机理的重要工具，但目前尚没有关于氮化硼材料模型尺寸对其热传导相关性质影响规律的研究。该文采用平衡态分子动力学并结合 Green-Kubo 方法，研究了纯净氮化硼单层结构热导率、声子色散关系以及态密度随模拟尺寸的变化规律，并解释了其内部机理。实验发现，氮化硼单层材料热导率随着模拟尺寸的增大而减小，并在单层面积约 4.1 nm×4.1 nm 时收敛于(349±22) W/(m·K)，此收敛值远小于平衡态分子动力学计算中石墨烯热导率的收敛尺寸(10 nm×10 nm)，这说明氮化硼单层中声子之间的散射大于石墨烯。此外，不同于热导率，氮化硼单层结构的声子色散曲线、态密度几乎不受模拟尺寸的影响。该研究结果可为采用平衡态分子动力学研究氮化硼相关材料的微观导热机理提供重要参考。

关键词 氮化硼；平衡态分子动力学；Green-Kubo 方法；热导率
中图分类号 O 736 **文献标志码** A

Effect of Domain Size on Thermal Conductivity of Boron Nitride Monolayer in Equilibrium Molecular Dynamics with Green-Kubo Method

LU Jibao[1] YANG Nannan[1,2] SUN Rong[1] WONG ChingPing[1,3]

[1](*Guangdong Provincial Key Laboratory of Materials for High Density Electronic Packaging, Shenzhen Institutes of Advanced Technology, Chinese Academy of Sciences, Shenzhen* 518055, *China*)
[2](*College of Nanoscience and Technology of University of Science and Technology of China, Suzhou* 215123, *China*)
[3](*Department of Electronics Engineering, The Chinese University of Hong Kong, Hong Kong* 999077, *China*)

Abstract Molecular dynamics simulation can directly model the molecular behavior, making it convenient to investigate the microscopic mechanism of thermal conductance of boron nitride (BN) nanomaterials. However, there still no explicitly investigation to the size effect of the BN monolayer on its thermal properties. In this paper, the equilibrium molecular dynamics (EMD) combined with

收稿日期：2017-12-08 **修回日期**：2018-01-10
基金项目：国家科技重点研发计划(2017YFB0406000)；先进电子封装材料国地联合实验室(深圳市发展和改革委员会[2017-934])；中国科学院前沿科学重点研究项目(QYZDY-SSW-JSC010)；广东省重点实验室(2014B030301014)；深圳市基础研究学科布局(JCYJ20160331191741738)
作者简介：鲁济豹，副研究员，研究方向为粗粒度分子模型构建和材料的分子模拟及第一性原理计算；杨楠楠，硕士研究生，研究方向为导热材料的分子模拟及制备；孙蓉(通讯作者)，研究员，研究方向为先进电子封装技术与材料，E-mail：rong.sun@siat.ac.cn；汪正平，教授，研究方向为先进电子封装技术与材料。

the Green-Kubo method was used to unravel and explain the relations between the system size and the thermal conductivity, phonon dispersion, and phonon density of states (DOS) of pristine BN monolayer. It was found that the thermal conductivity of the BN monolayer decreased with increasing the size of the sturcture, reaching a converged value (349±22) W/(m·K) at 4.1 nm×4.1 nm. This value was much smaller than the converging size (10 nm×10 nm) of graphene in calculating its thermal conductivity using EMD simulations, which implied the phonon-phonon scattering in BN monolayer was larger than that in graphene. Different from the thermal conductivity, the phonon dispersion and phonon DOS of the BN monolayer did not depend on the size of the structure. Our findings provide important reference for investigating the microscopic mechanisms of BN related materials by using the equilibrium molecular dynamics modeling.

Keywords　boron nitride; equilibrium molecular dynamics; Green-Kubo method; thermal conductivity

1　引　言

随着电子元器件的微型化和智能化发展，高密度的电子器件使得集成电路的散热问题成为制约其稳定性、可靠性和寿命长短的关键因素。为使电子器件发挥最佳性能，必须开发具有优良导热性能及机械性能的热界面材料，以确保其产生的热量及时排出。广泛应用的聚合物基热界面复合材料采用聚合物为基底，通过添加高导热率的填料以增加其热导率。在各种备选填料材料中，氮化硼(BN)纳米材料(纳米片、纳米管)由于具有高耐热性、高导热性以及优异的高温绝缘性(满足了电子封装对材料介电性能的要求)，从而在电子封装热传导材料中具有重要的应用价值[1-8]。

复合材料的导热率与多种因素相关。如以氮化硼纳米材料为填料的聚合物基复合材料，其导热率与填料的尺寸、分散程度、是否形成三维导热网络以及填料与聚合物之间的结合强度等密切相关[8-10]。实验中对于氮化硼-聚合物复合材料的热性能研究主要通过表征复合材料宏观热导率来实现。但是，由于复合材料导热性能与材料内部微观结构密切相关，所以想要了解复合材料导热机理，并对材料进行深层次的结构优化设计，需要对界面热阻等热相关量的精准测量以及理论模拟计算。实验中进行界面热阻纳米尺度上的表征对实验设备的要求具有非常大的挑战。另外，实验测量结果强烈依赖于样品质量、样品尺寸、测量方法和测量温度等多种因素，这使得不同的实验结果难以有效对比。而分子动力学模拟由于直接对物质微观结构进行表征，成为研究热界面复合材料导热机理及微观结构设计的重要工具，并对实验测量形成重要补充。

采用分子动力学对热导率以及声子性质的计算通常有两种方法——非平衡态分子动力学(Non-Equilibrium Molecular Dynamics，NEMD)和平衡态分子动力学(Equilibrium Molecular Dynamics，EMD)方法[11-16]。相对于 NEMD 方法来说，EMD 方法可以采用一个平衡态模拟计算得到完整的热导率张量，从而得到材料在各个方向上的热导率。并且，EMD 方法中的周期性边界条件允许声子在边界处穿梭而不受散射，从而计算热导率受体系的边界条件以及尺寸的影响要小很多。但由于计算资源限制，分子动力学模拟所构建的模型尺寸一般在纳米量级，通常远小于实验中测量样品的实际尺寸。所以对于 EMD 方法，仍然要求在计算模拟中对样品尺寸与性质之

间的关系具有清晰的理解。Wang 和 Ruan[11]针对单晶硅、石墨烯以及硅烯，详细研究了模拟尺寸对采用分子动力学计算其热相关性质的影响，发现样品尺寸对 3 种材料的热导率计算具有不同的影响，并且这种影响随所采用计算方法的(EMD 或 NEMD)不同而不同。对于氮化硼纳米结构，虽然文献中有一些针对声子色散及热导率的模拟计算，但尚未有针对热学相关性质与样品尺寸之间依赖关系及规律的明确探讨。因此，在此工作中，采用 EMD 结合 Green-Kubo 方法，对氮化硼单层结构的热导率、声子色散曲线和声子态密度(Density of States，DOS)与模拟样品尺寸之间的关系及影响机理进行了深入探讨，为后续对氮化硼材料以及氮化硼-聚合物复合材料的热相关性质的计算提供重要参考。

2 模型、方法与计算细节

2.1 模型：Tersoff 力场

分子动力学对材料性质的表征精度依赖于所采用的力场是否能够很好地再现材料的相关实验结果或者第一性原理计算结果。Sevik 等[17]基于六方氮化硼的结构、力学和振动性质，优化构建了氮化硼结构的 Tersoff 力场，该力场很好地再现了实验中氮化硼的声子色散关系。随后，Tersoff 力场被广泛用于氮化硼结构的分子动力学模拟中。本文采用 Tersoff 力场描述氮化硼二维单层材料中氮(N)与硼(B)的相互作用[17]。在 Tersoff 力场中，原子之间的相互作用采用势函数 V_{ij} 描述。

$$V_{ij}=f_{ij}^{C}\left(a_{ij}f_{ij}^{R}-b_{ij}f_{ij}^{A}\right) \tag{1}$$

$$f_{ij}^{R}=Ae^{-\lambda_1 r_{ij}} \tag{2}$$

$$f_{ij}^{A}=Be^{-\lambda_2 r_{ij}} \tag{3}$$

其中，r_{ij} 为原子 i 与 j 之间的距离；f_{ij}^{A} 和 f_{ij}^{R} 分别为吸引和排斥相互作用；f_{ij}^{C} 为截断距离(cutoff)，截断距离保证了只有最紧邻原子之间存在相互作用；a_{ij} 是对排斥相互作用势的限制项，在此 $a_{ij}=1$；A、B 表示量纲为[能量]的系数；λ 表示量纲为[1/距离]的系数；e 为自然对数的底数；键长和键角项 b_{ij} 取决于原子 i 周围原子的配位数以及原子 i、j 和 k 之间的夹角。

$$b_{ij}=(1+\beta^n\zeta_{ij}^n)^{-1/2n} \tag{4}$$

$$\zeta_{ij}=\sum_{k\neq i,j} f_{ik}^{C}g_{ijk}e^{\lambda_3^3(r_{ij}-r_{ik})^3} \tag{5}$$

$$g_{ijk}=1+\frac{c^2}{d^2}-\frac{c^2}{d^2+\left(h-\cos\left[\theta_{ijk}\right]\right)^2} \tag{6}$$

其中，θ_{ijk} 为原子 i、j 和 k 之间的夹角；键长和键角项 b_{ij} 使得 Tersoff 模型可以描述 B 和 N 之间的强共价键相互作用，此共价相互作用无法采用中心立场单独描述。角度相关项同时也使得 Tersoff 模型可以描述二维氮化硼的蜂巢型晶格结构。有关 Tersoff 力场的详细参数，请参考文献[14]。

2.2 计算方法

2.2.1 采用平衡态分子动力学与 Green-Kubo 方法计算热导率

相对于 NEMD 模拟，EMD 模拟计算热导率的方法受体系的边界条件以及尺寸的影响要小很多。在此工作中，采用 Green-Kubo 方法[18]结合 EMD，计算氮化硼单层结构的热导率 $\lambda_{\alpha\alpha}$。

$$\lambda_{\alpha\alpha}=\frac{1}{Vk_BT^2}\int_0^{\tau_m}\left\langle J_\alpha(0)J_\alpha(t)\right\rangle \mathrm{d}t \tag{7}$$

其中，k_B、T 分别为玻尔兹曼常数和温度；V 为体系体积；τ_m 为时间；$J_\alpha(t)$ 为热流密度在时间 t 时的 α 项；$\lambda_{\alpha\alpha}$、$\lambda_{\beta\beta}$ 分别为沿 α 和 β 方向的热导率。氮化硼单层的面内热导率由 $\lambda_{\alpha\alpha}$ 和 $\lambda_{\beta\beta}$ 二者平均值得到。

2.2.2 声子色散关系及声子态密度的计算

氮化硼二维单层结构的声子色散关系以及声子态密度(DOS)可以由体系的动态矩阵得出。在

分子动力学中，动态矩阵可以采用涨落耗散理论计算得到。假设晶体中包含 N 个原包，标记为 $l_i=(l_1, l_2, l_3)$，其中 l_i 为整数。每个原包定义在由 3 个线性独立的基矢 a_1、a_2、a_3 组成的平行六面体中，并且每个原包包含的基元原子数目为 K，基元原子标记为 k。基于涨落耗散理论，晶体体系在倒格空间中的力常数系数为[15,19]：

$$\Phi_{k\alpha,k'\beta}(q)=k_B T G^{-1}_{k\alpha,k'\beta}(q) \tag{8}$$

其中，G 为格林函数系数[13,19]。

$$G_{k\alpha,k'\beta}(q)=\left\langle u_{k\alpha}(q)\cdot u^*_{k'\beta}(q)\right\rangle \tag{9}$$

其中，$\langle\cdots\rangle$ 代表系综平均，且 $u_{k\alpha}(\alpha)=\sum_l u_{lk\alpha}\exp(iqr_l)$ 为原包的第 k 个基元原子在倒格空间 q 点处的原子位移的 α 项。在实践中，格林函数系数也可以由如下公式进行测量。

$$G_{k\alpha,k'\beta}(q)=\left\langle R_{k\alpha}(q)\cdot R^*_{k'\beta}(q)\right\rangle-\langle R\rangle_{k\alpha}(q)\cdot\langle R\rangle^*_{k'\beta}(q) \tag{10}$$

其中，R 是原子的瞬时位置；$\langle R\rangle$ 代表原子位置的平均值。这种方法可以给出与位移方法同样的结果，并且便于在分子动力学代码中实现。

一旦得到了力常数矩阵，则动态矩阵 $\boldsymbol{D}$ 可由如下公式得出：

$$\boldsymbol{D}_{k\alpha,k'\beta}(q)=(m_k m_{k'})^{-\frac{1}{2}}\Phi_{k\alpha,k'\beta}(q) \tag{11}$$

此矩阵的本征值即为 q 处的声子频率。所以，通过求解 $\boldsymbol{D}$ 的本征值，可以得到所有声子模式的频率。

$$4\pi^2 v^2 e_{k\alpha}=\sum_{k',\beta}D_{k\alpha,k'\beta}e_{k'\beta} \tag{12}$$

其中，v 为声子频率；e 为极化向量。由此，q 和 v 之间的关系得以求出。声子态密度可由声子色散关系除以频率范围以得到多个小片段，然后计算每个片段内的态数而得到。

2.2.3 分子动力学模拟细节

分子动力学模拟采用 LAMMPS[20]软件包进行。如前所述，N 和 B 之间的相互作用采用 Tersoff-2010 力场进行描述。所有计算均采用 x、y、z 方向的周期性边界条件。为了研究模拟尺寸对氮化硼单层结构热导率、声子色散关系以及声子态密度计算的影响，构建了不同尺寸的氮化硼单层结构，分别为 10×10、18×18、35×35、52×52、70×70。其中，10×10 代表在 x、y 方向上分别包含 10 个氮化硼原包，其他依此类推。这些结构分别对应的面积为 5.24 nm^2、16.99 nm^2、64.20 nm^2、141.71 nm^2、256.80 nm^2。图 1 为 18×18(16.99 nm^2)氮化硼单层结构模型。分子动力学步长为 0.5 fs[11,12,16]。对于每个尺寸的结构，首先采用 Nose-Hoover 恒温恒压方法[21]，在 *NPT* 系综(体系原子数目、压强、温度恒定)中，在 0 bar 压强、300 K 温度下平衡 1 ns，以确保体系完全达到平衡态。

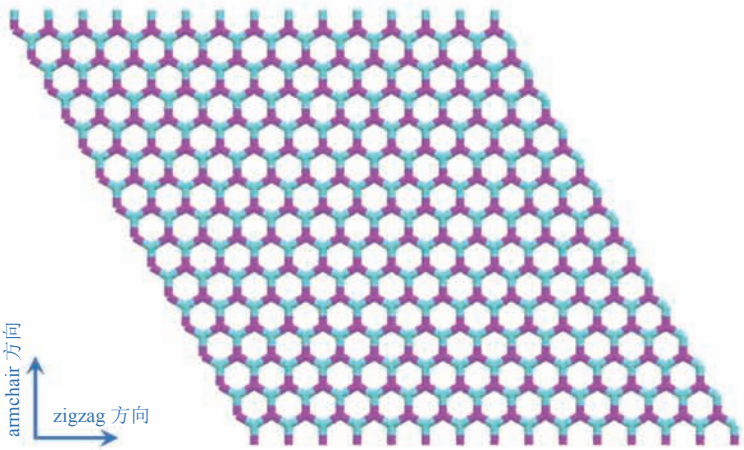

图 1　EMD 模拟中构建的尺寸为 16.99 nm^2 的氮化硼单层结构

Fig. 1　The sturcture of the boron nitride monolayer with the size of 16.99 nm^2 built in EMD simulations

对于动态矩阵的计算，体系在 *NPT* 中平衡后，采用 LAMMPS[20]中的 fix phonon 命令在 *NVE* 系综(体系原子数目、体积以及总能量保持恒定)中进行，并采用辅助代码 phana 进行数据后处理得到声子色散谱和态密度[13,15,22]。对于热导率的计算，体系在 *NPT* 中平衡后，采用 *NVE* 系综运行 6 ns 以进行数据收集。其中，原子位置轨迹每隔 10 个步长记录一次。采用 Green-Kubo 方法计算热导率，其中对热流密度自相关函数积分的时间上限设置为 400 ps。我们分别测试了更长时间上限(如 500 ps、1 ns)，证实 400 ps 的时间积分上限可以得到收敛的热导率值。为了计算氮化硼单层的体系，氮化硼单层的厚度选取为 0.335 nm[11]。热导率的计算没有包含量子修正。为了得到更为精确的热导率值及其误差棒，对每个尺寸的样品，分别进行 5 次独立的计算，其中每次计算具有独立的原子初始位置及初始速度。热导率的最终值以及误差棒由 5 次计算的平均值和标准偏差得出。值得注意的是，氮化硼单层结构的热导率具有轻微的各向异性，即在 armchair 和 zigzag 方向热导率的值略有不同。本文报道的热导率值为两个方向热导率的平均值。

值得说明的是，文中所涉及的计算均在国家超级计算广州中心完成。

3 结果和讨论

3.1 热流密度自相关函数

在 EMD 计算热导率的方法中，热导率由体系中热流密度自相关函数(HCACF)对时间的积分求出(公式 7)。理论上，对时间的积分应该至无穷大，即至 HCACF 衰减为 0 时。但在实际计算中，采用积分至时间 τ_m 代替时间无穷大，并近似认为 HCACF 在时间 τ_m 已衰减至 0。在本工作的 EMD 模拟中，氮化硼单层模型为无缺陷结构，并且采用了周期性边界条件，所以不存在声子-边界以及声子-缺陷散射效应。因此，HCACF 的衰减由非简谐声子-声子散射(Umpklapp 散射)相互作用导致。在本工作中，τ_m 选取为 400 ps。图 2 为 HCACF 随时间的变化情况。由图 2 可看出，在 τ_m=400 ps 时，HCACF 已经近似衰减至 0。值得注意的是，图 2 所示 HCACF 随时间表现出了剧烈的震荡。这种剧烈震荡是由于氮化硼单层结构的高频光学声子所致，并且可以采用傅里叶低通滤波的方法将高频光学声子对 HCACF 的贡献滤去[23]。

3.2 模拟尺寸对氮化硼单层热导率的影响

有文献报道，采用 EMD 方法，硅(Si)晶体热导率随尺寸的增加而增加，而石墨烯热导率则表现出相反的性质[11]。考虑到 Si 晶体为三维结构，而石墨烯为二维，那么对于二维材料来说，由 EMD 方法计算出的热导率是否总是随尺寸的增加而减小呢？以往文献尚没有关于采用 EMD 结合 Green-Kubo 方法计算氮化硼热导率随模拟尺寸变化规律的明确报道。为此，本文采用 EMD 结合 Green-Kubo 方法，计算了广泛应用于热传导材料的氮化硼二维材料的热导率。图 3 为本文在 300 K 温度下计算的氮化硼单层结构热导率随模拟尺寸的变化。由图 3 可以看出，随着模拟尺寸从 5.241 nm^2 开始增加，氮化硼单层热导率迅速下降，并从面积约 17 nm^2 开始，热导率达到一个相对稳定的值；继续增加模拟尺寸不再明显影响热导率的计算。对于这种现象的解释为：随着模拟尺寸的增大，声子数量增多，从而声子之间散射过程增多，这一散射过程是不利于热传导的。在氮化硼单层或石墨烯中，增加的声子之间的散射过程对热导率的阻碍作用，超过了由于尺寸的增加而增加的声子模式对于热导率的贡献，从而使热导率总体上表现出随模拟尺寸的增大而减小的现象。收敛后的氮化硼热导率值为(349±22) W/(m·K)。其中，zigzag 方向为(285±46) W/(m·K)，armchair 方向

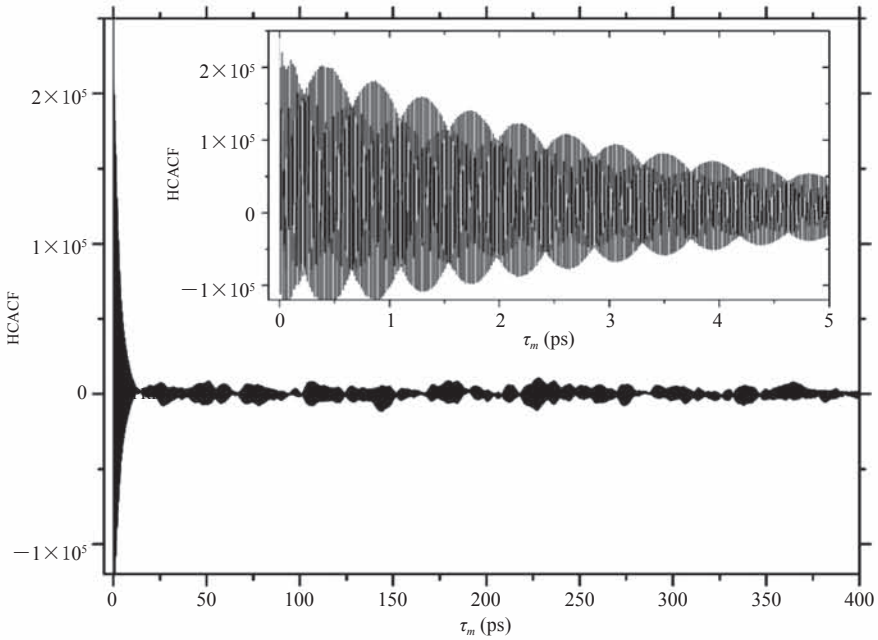

图 2　氮化硼单层结构在 EMD 模拟中的热流自相关函数（HCACF）随时间的变化

（内部插图更详细地显示了 HCACF 的震荡行为）

Fig. 2　The heat flux auto-correlation function（HCACF）as a function of time in the boron nitride monolayer structure

(The inset shows more details of the strong oscillations of the HCACF)

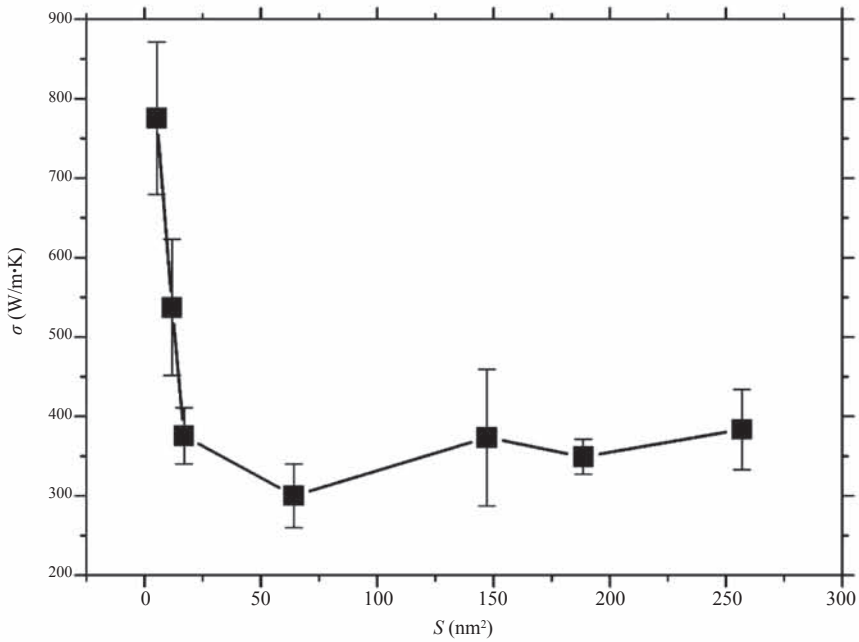

图 3　EMD 方法计算得到的氮化硼单层结构热导率（σ）随模拟体系面积（S）的变化

Fig. 3　Thermal conductivity（σ）of the boron nitride monolayer as a function of the area（S）of the structure

为(413±67) W/(m·K)，与之前文献报道的符合良好[23,24]。相比于 EMD 模拟中石墨烯热导率收敛尺寸(10 nm×10 nm)而言[11]，氮化硼热导率在约 4.1 nm×4.1 nm 即开始达到收敛(图 3)。这从侧面表明，在氮化硼单层结构中，声子之间的散射作用远大于石墨烯中声子之间的散射。

3.3 模拟尺寸对氮化硼单层声子色散关系及声子态密度的影响

图 4 为不同模拟尺寸的氮化硼单层结构的声子色散沿着 *Γ-M-K-Γ* 方向的曲线。由图 4 可以看出，模拟尺寸对氮化硼单层声子色散关系几乎没有影响。进一步对声子态密度(DOS)的计算表明，不同模拟尺寸情况下，计算得到的氮化硼单层结构的声子态密度很好地重合在一起，表明了声子态密度分布对模拟尺寸的不敏感性(图 5)。值得注意的是，本工作中考虑的氮化硼单层结构为无缺陷晶体结构。对于含有缺陷的结构，如掺杂、空位以及表面化学吸附等的氮化硼结构，模拟尺寸对热导率、声子色散和态密度的影响可能会更加复杂，从而需要更多的工作进行进一步研究。

3.4 与国内外相似研究的对比分析

Zhu 和 Ertekin[25]采用 NEMD 方法计算得到氮化硼单层结构热导率值为(600±30) W/(m·K)。而 Li 和 Chen[24]采用第一性原理分子动力学求解线性声子玻尔兹曼方程(LBTE)的方法，计算得到的氮化硼单层结构热导率约为 220 W/(m·K)，远小于 Zhu 和 Ertekin[25]得到的数值。Zhou 等[26]和 Jo 等[27]对氮化硼结构的热导率值进行了实验测量，测得的氮化硼结构的热导率值在 227～280 W/(m·K)，与 Li 和 Chen[24]得到的数值接近。本文采用 EMD 结合 Green-Kubo 方法计算得到的氮化硼单层结构热导率为(349±22) W/(m·K)，和文献报道的实验测量[26,27]和理论计算[24]值有比较好的吻合。本文得到的热导率与实验测量和其他理论计算结果在定量上的差别主要是由于：(1) Tersoff 力场模拟氮化硼实际上采用的是拟合的经典力学方程，而非从第一性原理出发；(2) 由于受计算体系以及采样数目的限制，模拟计算过程中不可避免地受到热涨落影响而引入误差。本文计算的氮化硼声子色散曲线与文献中采用 Tersoff 力场报道的计算结

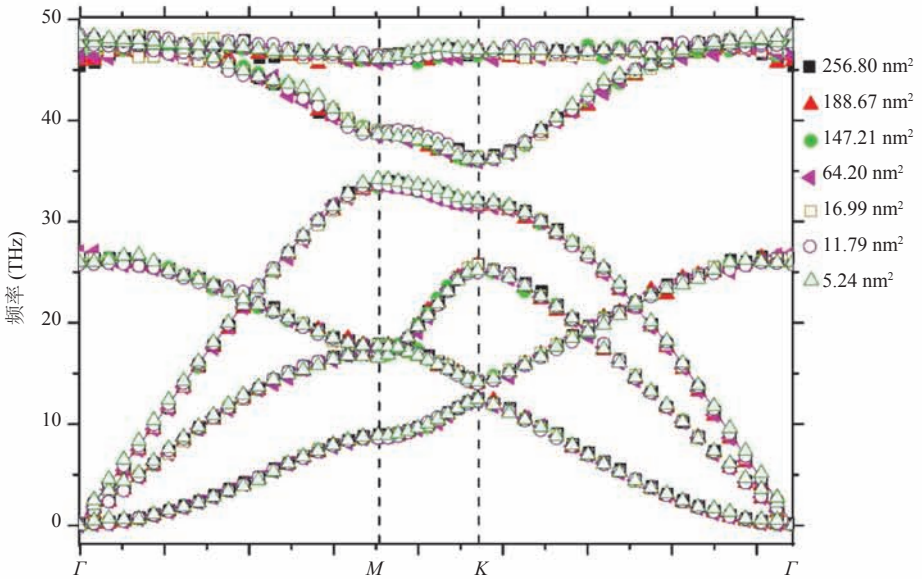

图 4 由格林函数法计算得到的不同模拟尺寸(面积)氮化硼单层结构的声子色散曲线

Fig. 4 The phonon dispersion of the boron nitride monolayer with different sizes calculated with the Green-Kubo method

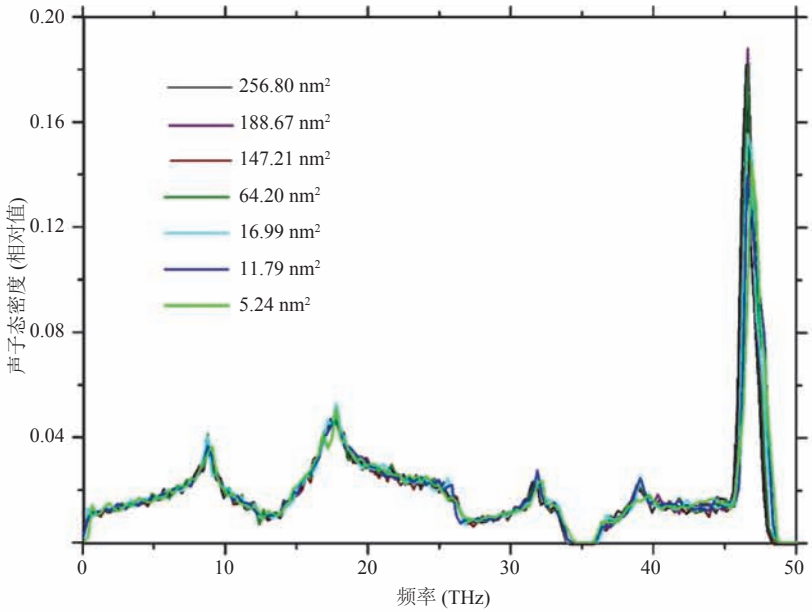

图 5　不同模拟尺寸下氮化硼单层结构的声子态密度

Fig. 5　The phonon density of states of the boron nitride monolayer with different sizes

果吻合非常好[24,28]，并与 Serrano 等[29]实验测量的声子散射有很好的吻合度，说明了本文计算的可靠性。文献尚无明确地针对 EMD 结合 Green-Kubo 方法研究氮化硼单层结构热导率随模拟尺寸变化规律的讨论，只有关于石墨烯的相关详细报道[11]。相比于 EMD 模拟中石墨烯热导率收敛尺寸(10 nm×10 nm)而言[11]，氮化硼热导率在约 4.1 nm×4.1 nm 即开始达到收敛(图 3)。这从侧面表明，在氮化硼单层结构中，声子之间的散射作用大于石墨烯中声子之间的散射。

4　结　论

本工作采用 EMD 结合 Green-Kubo 方法，对纯净氮化硼单层结构的热导率、声子色散、声子态密度进行了计算，研究了模拟尺寸对这些性质的影响规律。研究表明，氮化硼单层结构的声子色散曲线以及声子态密度并不受模拟尺寸的影响。不同的是，氮化硼单层热导率随模拟尺寸的增大而减小，至单层结构面积达到 17 nm^2 时，热导率开始达到收敛值(349±22) W/(m·K)。这不同于硅晶体热导率在 EMD 方法中随着尺寸的增大而增大的现象，但与石墨烯、硅烯等单层结构类似。这是由于在单层结构中，随模拟尺寸的增大，增加的声子之间的散射对热导率的抑制效应超过了其对于热导率的贡献。氮化硼单层热导率收敛尺寸 17 nm^2 小于石墨烯的收敛尺寸(～100 nm^2)，这说明了氮化硼单层结构中的声子-声子散射要大于石墨烯，与氮化硼单层热导率小于石墨烯相符。

参 考 文 献

[1]　孙娜, 曾小亮, 陈鹏, 等. 高导热氮化硼/聚碳酸酯复合材料的制备与性能研 [J]. 集成技术, 2017, 6(6): 15-23.

[2]　Hu JT, Huang Y, Yao YM, et al. Polymer composite with improved thermal conductivity by constructing a hierarchically ordered three-dimensional interconnected network of BN [J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2017, 9(15): 13544-13553.

[3] Zhang J, Wang XN, Yu CP, et al. A facile method to prepare flexible boron nitride/poly(vinyl alcohol) composites with enhanced thermal conductivity [J]. Composites Science and Technology, 2017, 149(Supplement C): 41-47.

[4] Huang T, Zeng XL, Yao XM, et al. A novel h-BN-RGO hybrids for epoxy resin composites achieving enhanced high thermal conductivity and energy density [J]. RSC Advances, 2017, 7(38): 23355-23362.

[5] Wu K, Fang JC, Ma JR, et al. Achieving a collapsible, strong, and highly thermally conductive film based on oriented functionalized boron nitride nanosheets and cellulose nanofiber [J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2017, 9(35): 30035-30045.

[6] Li LH, Chen YL. Atomically thin boron nitride: unique properties and applications [J]. Advanced Functional Materials, 2016, 26(16): 2594-2608.

[7] Chen J, Huang XY, Zhu YK, et al. Cellulose nanofiber supported 3D interconnected BN nanosheets for epoxy nanocomposites with ultrahigh thermal management capability [J]. Advanced Functional Materials, 2017, 27(5): 1604754.

[8] Sun JJ, Yao YM, Zeng XL, et al. Preparation of boron nitride nanosheet/nanofibrillated cellulose nanocomposites with ultrahigh thermal conductivity via eengineering interfacial thermal resistance [J]. Advanced Materials Interfaces, 2017, 4(17): 1700563.

[9] Zeng XL, Sun JJ, Yao YM, et al. A combination of boron nitride nanotubes and cellulose nanofibers for the preparation of a nanocomposite with high thermal conductivity [J]. ACS Nano, 2017, 11(5): 5167-5178.

[10] Yao YM, Zeng XL, Wang FF, et al. Significant enhancement of thermalconductivity in bioinspired freestanding boron nitride papersfilled with graphene oxide [J]. Chemistry of Materials, 2016, 28(4): 1049-1057.

[11] Wang ZY, Ruan XL. On the domain size effect of thermal conductivities from equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulations [J]. Journal of Applied Physics, 2017, 121(4): 044301.

[12] Singh SK, Neek-Amal M, Costamagna S, et al. Thermomechanical properties of a single hexagonal boron nitride sheet [J]. Physical Review B, 2013, 87(18): 184106.

[13] Kong LT. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations [J]. Computer Physics Communications, 2011, 182(10): 2201-2207.

[14] Lindsay L, Broido DA. Optimized tersoff and brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and phonon thermal transport in carbon nanotubes and graphene [J]. Physical Review B, 2010, 81(20): 262-265.

[15] Kong LT, Bartels G, Campañá C, et al. Implementation of green's function molecular dynamics: an extension to LAMMPS [J]. Computer Physics Communications, 2009, 180(6): 1004-1010.

[16] Tabarraei A,Wang XN. Anomalous thermal conductivity of monolayer boron nitride [J]. Applied Physics Letters, 2016, 108(18): 181904.

[17] Sevik C, Kinaci A, Haskins JB, et al. Characterization of thermal transport in low-dimensional boron nitride nanostructures [J]. Physical Review B, 2011, 84(8): 085409.

[18] Kubo R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems

[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1957, 12(6): 570-586.

[19] Campañá C, Müser MH. Practical Green's function approach to the simulation of elastic semi-infinite solids [J]. Physical Review B, 2006, 74(7): 075420.

[20] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1-19.

[21] Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods [J]. The Journal of Chemical Physics, 1984, 81(1): 511-519.

[22] Kong LT, Denniston C, Müser MT. An improved version of the Green's function molecular dynamics method [J]. Computer Physics Communications, 2011, 182(2): 540-541.

[23] Mahdizadeh SJ, Goharshadi EK, Akhlamadi G. Thermo-mechanical properties of boron nitride nanoribbons: a molecular dynamics simulation study [J]. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 2016, 68(Supplement C): 1-13.

[24] Li S, Chen Y. Thermal transport and anharmonic phonons in strained monolayer hexagonal boron nitride [J]. Scientific Reports, 2017, 7: 43956.

[25] Zhu TS, Ertekin E. Resolving anomalous strain effects on two-dimensional phonon flows: the cases of graphene, boron nitride, and planar superlattices [J]. Physical Review B, 2015, 91(20): 205429.

[26] Zhou HQ, Zhu JX, Liu Z, et al. High thermal conductivity of suspended few-layer hexagonal boron nitride sheets [J]. Nano Research, 2014, 7(8): 1232-1240.

[27] Jo I, Pettes MT, Kim J, et al. Thermal conductivity and phonon transport in suspended few-layer hexagonal boron nitride [J]. Nano Letters, 2013, 13(2): 550-554.

[28] Anees P, Valsakumar MC, Panigrahi BK. Effect of strong phonon-phonon coupling on the temperature dependent structural stability and frequency shift of 2D hexagonal boron nitride [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2016, 18(4): 2672-2681.

[29] Serrano J, Bosak A, Arenal R, et al. Vibrational properties of hexagonal boron nitride: inelastic X-ray scattering and ab initio calculations [J]. Physical Review Letters, 2007, 98(9): 095503.