新提出的 $MoSi_2N_4/WSi_2N_4$ 场效应晶体管的可靠性研究：一项蒙特卡罗研究

Zahra Shomali[a,b,*]

[a]塔比阿特莫达勒斯大学基础科学学院物理系，伊朗德黑兰 *14115-175*[b]基础科学研究所（*IPM*）物理学院，伊朗德黑兰 *19395-5531*

arXiv:2305.04327v1 [cond-mat.mtrl-sci] 7 May 2023

摘要

近期，有研究提出将二维复杂 MA_2Z_4 结构用作场效应晶体管（FET）中硅沟道的合适替代材料。其中，$MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 这两种材料因具有十分理想的电学和热学性质而受到关注。另一方面，晶体管的可靠性取决于其工作过程中达到的最高温度，这也决定了新提出的沟道能否适用于热管理方案。本研究采用声子玻尔兹曼方程的蒙特卡罗模拟，对采用 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 沟道的场效应晶体管进行研究。具体而言，我们开展了声子分析，以考察峰值温升。计算结果证实，$MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 的最高温度低于此前提出的候选材料蓝磷烯（BP）；蓝磷烯本身的温度也较低。具体来说，声子分析表明，主要热载流子的速度及其对应频率之间的竞争决定了最高温度。WSi_2N_4 材料中 TA 模的声子数量更多，其速度近乎较高、频率相对较低，因此热特性良好，峰值温度仅为 110 K，比黑磷低。$MoSi_2N_4$ 材料的最高温度仅比黑磷的峰值温度低 10 K。这一现象归因于占主导地位的 LA声子：它们速度较快，但频率也较高，因此温度高于 WSi_2N_4。总之，峰值温度极低的 WSi_2N_4, , 以及其次的 $MoSi_2N_4$, , 二者均具有有益的电学和热学性质，因此被认为是制造更可靠场效应晶体管、实现热管理的理想候选材料。

关键词：，低维、MOS器件、$MoSi_2N_4$,WSi_2N_4,声子玻尔兹曼方程、蒙特卡罗、纳米尺度热输运、热管理

1. 引言

1954年，首款商用硅晶体管问世，其设计目标是能够在高温下工作并降低生产成本。此后，这类晶体管的尺寸不断缩小，使得密集型集成电路中的晶体管数量每两年翻一番。目前，单个芯片上的晶体管数量已高达一千亿个 [1]。另一方面，三维（3D）晶体管尺寸的缩小，加上静态功耗和漏电流的增加，导致其散热速率降低。作为一种解决方案，有人提出采用漏电流几乎为零的二维（2D）半导体[2, 3, 4]。近年来，采用低维材料基沟道的场效应晶体管受到广泛关注。

除了需要满足适当的电气条件外，场效应晶体管的热管理也是一个关键问题。通常，初始能量中有 90% 以上会以热量的形式耗散，因此，场效应晶体管最关键且普遍的热问题是如何处理自加热过程 [5]。因此，人们一直在尝试提出能够减少耗散的机制和材料。芯片上组装的数亿个晶体管总会面临功率问题。这会导致芯片温度异常升高，从而影响器件的正常工作。热生成由多种过程引起，例如焦耳热、电流拥挤和热电效应。据报道，焦耳热是低维系统中主要的自加热来源 [6]。此外，冷却技术尚未跟上晶体管微型化的步伐，许多电子器件也因芯片上形成毫米级热点而变得不实用[7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18]。

正如芯片级热点存在问题一样 [19, 20], , 单个晶体管内部纳米尺度上的热管理问题也同样存在。鉴于最新二维材料沟道的热导率低于块体硅，新型二维场效应晶体管设计使热扩散变得困难。在纳米电子技术中，芯片裸片上最热区域的温度决定了整体可靠性。因此，建议通过材料选择和散热器设计 [21], 来控制这些被称为热点的区域的温度，以此作为热管理解决方案。除了尝试寻找更好的散热方法之外，寻找

*通讯作者，电话： +98(21) 82883147。电子邮箱：shomali@modares.ac.ir (Zahra Shomali)

温升最低的低维硅替代材料候选者，是纳米电子产业最恰当、最理想的选择。确实，最高温度较低的晶体管更容易保持在阈值温度以下 [22, 3]。因此，必须研究电学效率高的场效应晶体管的热行为，以确保其同时具备能量效率，从而实现更好的冷却和运行。

人们已从电学和热学角度研究了场效应晶体管，包括采用石墨烯、锗烯、硅烯、磷烯同素异形体和二硫化钼（MoS_2）等二维材料作为沟道的场效应晶体管。每种提出的候选材料都有其优点和缺点。例如，尽管石墨烯在晶体管自热作用下表现出最低的最高温度，但由于缺乏带隙，它并不是合适的候选材料。除石墨烯外，研究人员还设计了具有可接受带隙、从而具备合适开关比的二维材料，例如硅烯、磷烯同素异形体和二硫化钼（MoS_2） [23]。除了适当的带隙和开关比之外，MoS_2, 与其他过渡金属二硫属化物类似，其迁移率也存在不足。在其顶部使用高介电常数栅极可以提高迁移率 [16], ，但这会使使用MoS_2 作为沟道的成本较高，并因此使MoS_2 不适合作为新开发的场效应晶体管候选材料。

此外，硅烯及其姊妹材料锗烯作为硅替代材料解决方案，已得到广泛研究。硅烯是石墨烯的硅基类似物，其带隙为 0.21 eV，因此开关比为 10。已报道的电子和空穴迁移率约为 1000 cm^2/V.S，这一数值低于石墨烯和蓝磷烯 [24, 25] ，但高于单层 MoS_2。另一方面，锗烯具有较窄的带隙，可通过施加外部电场或将材料缩减为纳米带来拓宽。与硅烯相比，锗烯的优势在于具有高得多的迁移率。然而，纳米带制备方面的实验挑战使其并非硅替代材料的理想候选者。相较于锗烯，硅烯的情况更为合适，因为它与现有的硅基微技术更加兼容。

在低维材料中，磷烯同素异形体被认为是更合适的候选材料。这是因为它们具有较大的本征带隙（不同于石墨烯和锗烯）以及较高的载流子迁移率（与大多数过渡金属硫族化合物相比）。尽管具备这些理想条件，并非所有磷烯同素异形体都具有良好的热行为。黑磷烯各向异性的热学性质会降低器件的可靠性和性能，因为椅式方向上较低的热导率会导致局部焦耳热。在所有被提议用作沟道的磷烯同素异形体中，蓝磷烯（BP）被认为是较理想的选择。这是因为将BP用作沟道时，其各向同性的热性能也能带来很高的热效率。含有BP沟道的晶体管自热较少，温升也较低 [3]。尽管具有诸多热学和电学优势单层磷烯在环境条件下不稳定，这是其缺点 [26]。因此，寻找一种稳定且热效率高、具有适宜带隙和高载流子迁移率的单层二维材料，仍是一个有待解决的问题。

最近，实验合成了两种新型二维（2D）层状半导体材料 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4，。此外，理论上还预期存在一大类此类二维材料，称为 MA_2Z_4, [27, 28, 29, 30]。这些材料展现出的性质似乎能够弥补此前提出的低维沟道材料的不足。有趣的是，$MoSi_2N_4$，和 WSi_2N_4具有优异的环境稳定性、适中的带隙、较高的载流子迁移率以及良好的热导率[31, 32]。具体而言，计算得到的 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 的带隙分别为 1.73 eV 和 2.06 eV，与 MoS_2 的带隙 [33, 34]相当。此外，研究发现，单层 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 均具有约 100 $cm^2\ V^{-1}s^{-1}$ 的适中电子迁移率，远高于单层 MoS_2 晶体管所报道的 1–10 $cm^2\ V^{-1}s^{-1}$ 迁移率 [35, 36]。此外，尽管 Mo 和 W 具有复杂的晶体结构且原子质量较大，但在 300 至 800 的温度范围内，它们的热导率仍然较高。更具体地说，在 300 K 时，$MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 的晶格热导率分别为 224 $Wm^{-1}K^{-1}$ 和 219 $Wm^{-1}K^{-1}$。

这些特性使 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 单层材料成为在电学性能方面适合替代场效应晶体管沟道中硅的候选材料。然而，只有当 MA_2Z_4 在晶体管运行期间具有相对较低的最高温度时，才能证明它们非常适合用作沟道。本研究旨在探明场效应晶体管的热效率，研究对象包括采用 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 单层材料的沟道，并考察此类场效应晶体管的峰值温度以及热加热/冷却情况。研究采用声子玻尔兹曼方程的非平衡蒙特卡罗模拟。由于场效应晶体管的整体可靠性和热效率取决于晶体管最热点的温度，因此在热源区施加均匀热流，计算 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 的最高温度。随后通过声子分析，研究 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 单层场效应晶体管的热状况，并与黑磷单层低维场效应晶体管进行比较。本文结构如下：第 2 节介绍几何结构和边界条件；第 3 节和第 4 节阐述数学建模和数值方法；第 5 节和第 6 节分别给出研究结果和结论。

2. 几何和边界条件

对称为 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4，的两种六方非中心对称单层通道中的热传递进行了模拟。由于纳米尺度效应，应采用非傅里叶方法 [37]。本文使用声子玻尔兹曼方程的蒙特卡罗模拟进行计算。研究区域的宽度和长度分别为 L_x=200 nm 和

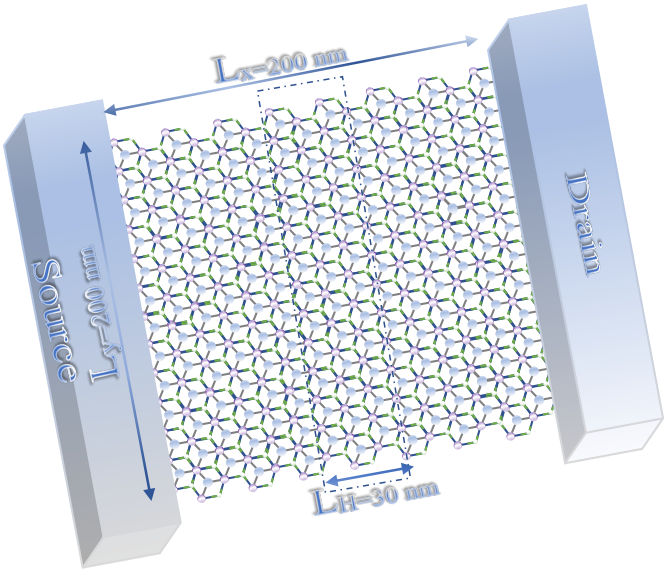

图 1：典型的 MOSFET，其沟道由 $MoSi_2N_4$ 或 WSi_2N_4构成。除底部边界外，所有边界均为绝热边界。参数 L_x、L_y 和 L_H分别表示沿 x 方向的长度、沿 y 方向的长度以及热产生区的宽度。

L_y=200 nm，$MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 的厚度分别为 0.679 和 0.702。在所研究单层的中心，通道中心施加了体积为 30×200×0.53 nm 的均匀热生成。将深度 d=0.53 nm（即黑磷的厚度）作为参数，以使所有材料的热产生区条件保持一致。热源产生的热流等于 $Q=1\times10^{19}$ W/m^3。除底部边界外，所有边界均为绝热边界，温度等于环境温度。系统还通过底部边界 [38, 39] 与环境交换能量。纳米器件各部分的初始温度均为 299 K。晶体管内部产生的大部分热量向周围区域及底部扩散。此外，在我们的模拟中，低维通道被视为平边缘（矩形形状），并采用镜面反射。

3. 数学建模

材料中的热输运通过声子的行为来描述。这里采用声子玻尔兹曼输运方程来描述声子 [38, 40, 41]。求解该方程以确定声子分布函数 $f_b(\mathbf{r},\mathbf{q},t)$；该函数取决于每个声子支 b 的位置 **r**、波矢 **q** 和时间 t。声子玻尔兹曼输运方程（PBTE）写作

$$\frac{\partial f_b(\mathbf{r},\mathbf{q},t)}{\partial t} + v_{b,\mathbf{q}} \cdot \nabla_r f_b(\mathbf{r},\mathbf{q},t) = \frac{\partial f_b(\mathbf{r},\mathbf{q},t)}{\partial t}\Big|_{scat}, \quad (1)$$

其中，$v_{b,\mathbf{q}}$表示声子的群速度，取决于$\omega_{b,\mathbf{q}}$，即支b的角频率及波矢**q**。参数 $\omega_{b,\mathbf{q}}$ 同时取决于波矢的大小和方向。不过，此处考察的是各向同性极限，即频率仅取决于波矢的大小。换言之，我们对大面积 $MoSi_2N_4$, WSi_2N_4, 薄层以及此前提出的蓝磷烯 [3] 等具有近乎各向同性声子色散、因而热导率也呈各向同性的低维材料进行了模拟 [42, 43]。本研究采用随机声子蒙特卡罗（PMC）方法求解 PBTE。PMC 模拟中最重要的输入是声子色散曲线。这些曲线反映了晶格的对称性，呈现第一布里渊区（1BZ）内频率 ω 与波矢 $\vec{q}$ 之间的关系。根据色散关系，可计算群速度和态密度等特性，随后将所得结果用于求解 BTE。与其他低维材料一样，$MoSi_2N_4$, WSi_2N_4,和蓝磷烯均具有六条声子支。温度低于 600 K 时，光学声子的贡献微乎其微。因此，我们的模拟仅考虑声学支 [44]。此外，我们对所有模拟的低维材料的完整色散曲线进行二次拟合 [45]。由此，为每种低维材料得到关系式 $\omega_b=c_bk^2+v_bk$，并将计算所得系数列于表 1 中。

模拟区域为一大块区域，其宽度、长度和厚度分别为 W 、 L 和 D。在蒙特卡罗模拟过程中，将声子视为统计样本，并将其分配到六个独立的随机空间中：三个波矢和三个位置矢量。采样得到的声子最初经历漂移（弹道运动），随后发生散射过程。 [3, 39]中说明了低维材料沟道薄片的 MC 模拟步骤。对于每条色散曲线，将从零到 ω_{max} 的频率区间划分为 N_{int}=1000。本文中，离散频率间隔 $\Delta\omega_i$分别取 5.917×10^{10}、4.94×10^{10} 和 3.93×10^{10}，对应 $MoSi_2N_4$, 、WSi_2N_4, 和蓝磷烯。此外，还考虑权重因子 $W=\frac{N_{actual}}{N_{prescribed}}=1$。这里，$N_{prescribed}$ 是实际初始化到系统中的随机样本数。

表 1：针对所研究的两种低维材料拟合得到的二次公式 $\omega_b=c_bk^2+v_bk$ 的系数。

二维材料	$MoSi_2N_4$	WSi_2N_4	BP
c_{LA}(m^2/s)	-4.252×10^{-7}	-3.392×10^{-7}	-5.9×10^{-7}
c_{TA}(m^2/s)	-2.562×10^{-7}	-2.256×10^{-7}	-3.5×10^{-7}
c_{ZA}(m^2/s)	-1.259×10^{-7}	-1.4×10^{-7}	1.61×10^{-7}
v_{LA}(m/s)	10031	8188	9668
v_{TA}(m/s)	6982	5816	5897
v_{ZA}(米/秒)	5660	4886	896

在输运过程中，声子可能与其他声子碰撞，也可能在边界处发生散射。在蒙特卡罗模拟中，漂移和散射事件随后会分别进行处理 [3, 39]。这里，边界是平坦的，并会产生镜面反射。因此，沿边界方向的声子速度保持不变。此外，由于假设低维材料纯净且完美，因空位、位错和杂质引起的散射均被

忽略。在所关注的温度范围 300 K–600 K 内，对于悬空低维系统而言，声子-声子散射是最重要的机制。本研究考虑的机制包括三声子 Umklapp/正常散射以及边界散射。尽管通过弛豫时间近似简化描述散射动力学，无法充分描述低温下的热输运 [46], ，但由于研究处理的是接近高温的情况 [47]，我们采用了这一近似。Umklapp 声子-声子散射率通过 $\tau_b^{-1},_U(\omega) = \frac{\hbar\gamma_b^2}{M\Theta_b v_{s,b}^2}\omega^2 Te^{-\Theta_b/3T}$[42]计算。其中，$v_{s,b}$, M和 Θ 分别表示 b 支的声速、平均原子质量和德拜温度。方程的第一部分是标准的 Umklapp 相互作用强度，而指数项则表示 N 过程导致的再分布贡献。本研究采用的参数 Θ、M 以及 Grüneissen 参数 γ列于表 2 中。

表 2：用于计算弛豫时间的热学特性。

二维材料	$MoSi_2N_4$	WSi_2N_4	蓝磷烯
Θ	335.33	433.33	550
M(克)	29.74	42.29	51.4102
γ	0.41	0.4916	1.05

由于在远高于德拜温度以及大多数纳米电子器件工作温度的温度下，高阶声子散射会变得重要，因此本文不予考虑。采用蒙特卡洛技术，可得在时间 t 和 t+Δt 之间，以速率 τ_b 散射声子的概率为 $P_{scat} = 1 - \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})$。若散射概率 P_{scat}大于选定的随机数 R_{scat}，则发生散射。声子的频率、支和方向将根据累积分布函数 [38]重新抽样。我们选取的时间步长 Δt 小于声子的最小散射速率。散射后的分布函数 F_{scat} 根据散射概率进行修正：$F_{scat}(\tilde{T}) = \sum_{j=1}^{i} N \sum_{j=1}^{N_b} j \tilde{} \times scat(\tilde{T}) \times P,N(T) P,j$。在此过程中，声子的形成速率应等于其消亡速率。更多详情见 [48, 38]。

4. 数值方法

LA、TA 和 ZA 支的频率范围被划分为 1000 个区间。针对每个支中所有可能的 1000 个频率，计算声子的散射率。据此，通过对散射率取倒数，计算声子弛豫时间。此外，还求得了 LA、TA 和 ZA 支中 1000 种不同频率下所有声子的速度。用网格尺寸除以速度，即可得到声子的传播时间。计算所得时间的最小值即为所考虑的时间步长。因此，$MoSi_2N_4$, 、WSi_2N_4, 和蓝磷烯的时间步长分别为 3.47×10^{-13}、2.07×10^{-13}和 3.46×10^{-13} 。此外，还对每个模拟沟道进行了网格无关性测试。

在整个模拟过程中，发现采用 XY平面内大小为 200×200 的均匀网格，可获得网格无关的图形。此外，热源区域位于沟道中央，尺寸为 30×200×0.53 nm^3。该项被模拟为一个热源，通过向目标区域释放声子使其升温。该方法已在 [49, 50]中作了完整描述。

5. 结果与讨论

本节介绍新提出的具有 MA_2Z_4 沟道的场效应晶体管中温度分布以及达到的最高温度结果。所得结果将与此前提出的、采用热学上合适的蓝磷烯沟道 [3]的场效应晶体管进行比较。模拟情形与实际场效应晶体管中的情况较为接近。在计算时间的前 200 ps 内，所模拟的纳米器件受到自生热的影响，该热量主要由焦耳热过程产生。随后，在接下来的 200 ps 内，低维场效应晶体管逐渐冷却。

通过在低维材料中实现声子玻尔兹曼方程的蒙特卡罗模拟，计算并展示了对热输运有贡献的声子类型，如表 3 所示。如表 3(a) 所示，在材料 $MoSi_2N_4$ 加热的 200 ps 内，参与热输运的大多数声子为 LA声子。更具体地说，在最初阶段，三种声子支的贡献几乎相同。随后不久，LA声子的百分比急剧增加，在 200 ps 时达到 70%。与此同时，ZA声子在热载流子中的占比从 2 ps 时的 35% 降至 200 ps 时的 17%。当热产生区关闭并开始冷却时，过程变得不同，声子的分布也随之发生变化。LA支中的声子比例降低至 40%，而 TA模中的声子数量则增加到加热时的三倍。因此，快速载流子的总数仍保持在约 70%–80%。尽管如此，缓慢的弯曲面外声学声子的参与度要低得多，在冷却和加热期间一直保持在约 20%–30%。

因此，WSi_2N_4 沟道也呈现出几乎相似的情况。在最初几个皮秒内，ZA声子的参与不容忽视，但随着时间推移，其参与程度开始下降。例如，在 t=200 ps 时关闭加热后，参与热传递的 ZA声子数量减少了一半。与此同时，加热期间 LA声子的贡献增加了一倍。另一方面，关闭热生成后，在整个 200 ps 的冷却过程中，主要热载流子转变为 TA声子。总而言之，在整个模拟过程中，近 70–80 % 的热输运由高频和低频的快 LA声子与 TA声子承担。当晶体管在 200–400 ps 之间冷却时，LA声子的数量几乎减半，而 TA声子的数量则翻倍。然而，与采用 $MoSi_2N_4$ 沟道的晶体管相似，快声子的总数仍远多于慢ZA声子。至于 $MoSi_2N_4$, , 贡献则更多来自

(a) $MoSi_2N_4$			
时间（皮秒）	纵向声学支（%）	横向声学支（%）	面外声学支（ZA，%）
2	40	25	35
10	62	14	24
50	66	15	19
70	70	11	19
100	72	10	18
150	70	13	17
200	70	13	17
210	80	8	12
240	71	14	15
250	47	28	25
300	44	32	24
350	40	34	26
400	42	32	26

(b) WSi_2N_4			
时间（皮秒）	纵向声学支（%）	横向声学支（%）	面外声学支（ZA，%）
2	30	32	38
10	50	24	26
50	52	23	25
70	51	25	24
100	53	24	23
150	54	23	23
200	54	25	21
210	56	23	21
240	44	33	23
250	34	38	26
300	32	41	27
350	25	45	30
400	24	46	30

(c) 蓝磷烯			
时间（皮秒）	LA（%）	TA（%）	ZA（%）
2	24	25	51
10	32	20	48
50	33	22	45
70	35	20	45
100	28	30	42
150	34	18	48
200	35	17	48
210	32	34	34
240	30	34	36
250	23	38	39
300	21	24	55
350	14	24	55
400	10	29	61

表 3：沟道由 (a) $MoSi_2N_4$, 、(b) WSi_2N_4，和 (c) 蓝磷烯构成时，对热传递有贡献的 LA、TA 和 ZA 声子数量所占的百分比。颜色由浅到深表示各沟道中各支的贡献由最小到最大。

低频 TA模。总体而言，MA_2Z_4 类材料中的主要热载流子是LA声子和TA声子；而在加热期间，$MoSi_2N_4$ 的 LA模态占比比 WSi_2N_4 沟道高出最多 20%。具体来说，在模拟过程中，WSi_2N_4 和 $MoSi_2N_4$中 LA声子与 TA声子数量差值的绝对值分别为 2–30% 和 6–62%。因此，$MoSi_2N_4$ 材料中的高频声子显著更多。

接下来，对蓝磷烯沟道进行声子分析。如表 3(c) 所示，黑磷呈现出相反的趋势。具体而言，在几乎整个模拟过程中，约有一半的热载流子是频率较低、速度较慢、沿弯曲方向振动的 ZA 振动模式声子。与此同时，LA 和 TA 声子的贡献大致相同，且远低于弯曲方向声子的贡献，因此二者的总贡献约等于 ZA 声子的单独贡献。这种行为在加热和冷却过程中均保持不变。

此外，本研究还分析了来自不同支、对热传递有贡献的热载流子的频率。该表展示了三种材料 $MoSi_2N_4$,、WSi_2N_4，和蓝磷烯中 LA、TA 及 ZA 支声子的频率范围。$MoSi_2N_4$ 的情况在表 4(a) 中进行了详细描述。此前已有研究表明，$MoSi_2N_4$ 中的大多数热载流子为纵向声学声子。显然，在加热和冷却过程中，参与热传递的 LA声子中始终有超过 90% 的频率处于 3.74-4.94$\times10^{13}$ Hz 之间，这一频率始终高于 TA 或 ZA 振动模式中任意声子的频率。因此，参与热输运的声子速度快、频率高，它们彼此竞争，共同决定最高温度的数值。表 4(b) 证实了材料 WSi_2N_4的这一结果。携带热量的 LA声子的频率情况与 $MoSi_2N_4$, 中的情况相似，其中 93-98% 的 LA声子频率高于 TA声子和 ZA声子的频率。与 $MoSi_2N_4$, 相比，参与热传递的 TA声子数量最多增加了一倍。色散曲线中频率范围最低的 TA声子同样速度很快，能够迅速离开热点区域。在这两种 MA_2Z_4 材料中，尽管慢ZA声子对热输运的贡献较低，但其中 80-85% 的频率低于 TA振动模式的最高频率。与材料 MA_2Z_4中快速且高频的 LA声子相比，ZA声子的速度与较低频率在此处以相反的方式争夺最高温度。

尽管蓝磷烯中参与热输运的声子组合及主导声子的类型与 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4, 截然不同，但不同类型声子的频率范围特征相同。如表 4(c) 所示，当 LA声子的贡献占 10% 到 35% 时，这些数量几乎最少的声子，其频率高于 TA 和 ZA模式的最高频率。此外，TA模中的大多数声子，其频率低于 ZA 的最大频率——

表 4：(a) $MoSi_2N_4$, 、(b) WSi_2N_4，和 (c) 蓝磷烯各声子支频率范围所占的百分比。颜色由浅到深依次表示频率范围由低到高。所有贡献均以百分比表示，%

(a) $MoSi_2N_4$		时间（皮秒）										
Mode	频率范围（赫兹）	2	10	50	70	100	150	200	250	300	350	400
LA	0≤ ω ≤4.66E13 ($\omega_{LA,TA,ZA}$)	2.1	1	0.7	0.6	0.2	0.5	0.4	4.4	1.3	3	3.2
	4.66E13≤ ω ≤4.80E13 ($\omega_{LA,ZA}$)	0.2	0.2	0.1	0.2	0.1	0.1	0.1	0.4	0.4	0.5	0.6
	4.80E13≤ ω ≤5.917E13 (ω_{LA})	97.7	98.8	99.2	99.2	99.7	99.4	99.5	95.2	98.3	96.5	96.2
ZA	0≤ ω ≤4.66E13 ($\omega_{LA,TA,ZA}$)	99.8	99.7	99.7	99.7	99.6	99.9	99.9	99.7	99.6	99.7	99.7
	4.66E13≤ ω ≤4.80E13 ($\omega_{LA,ZA}$)	0.2	0.3	0.3	0.3	0.4	0.1	0.1	0.3	0.4	0.3	0.3
TA	0≤ ω ≤4.66E13 ($\omega_{LA,TA,ZA}$)	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
(b) WSi_2N_4		时间（皮秒）										
Mode	频率范围（赫兹）	2	10	50	70	100	150	200	250	300	350	400
LA	0≤ ω ≤3.74E13 ($\omega_{LA,TA,ZA}$)	0.62	1.7	1	0.9	1.2	1.1	1.15	7	4	6	1.6
	3.74E13≤ ω ≤3.91E13 ($\omega_{LA,ZA}$)	0.18	0.4	0.3	0.3	0.4	0.1	0.25	1	1	1	0.6
	3.74E13≤ ω ≤4.94E13 (ω_{LA})	98.2	97.9	98.7	98.8	98.6	98.8	98.6	92	95	93	97.8
ZA	0≤ ω ≤3.74E13 ($\omega_{LA,TA,ZA}$)	84.4	85.8	86.1	86.2	85.3	85.8	85.1	78.6	83.2	77.85	76.5
	3.74E13≤ ω ≤3.91E13 ($\omega_{LA,ZA}$)	15.6	14.2	13.9	13.8	14.7	14.2	14.9	21.4	16.8	22.15	23.5
TA	0≤ ω ≤3.74E13 (ω_{TA})	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
(c) 蓝磷烯		时间（皮秒）										
Mode	频率范围（赫兹）	2	10	50	70	100	150	200	250	300	350	400
LA	0≤ ω ≤2.48E13($\omega_{LA,TA,ZA}$)	1.3	0.6	0.4	0.51	0.5	0.4	0.5	0.3	1.3	1.3	1.1
	2.48E13≤ ω ≤2.94E13($\omega_{LA,ZA}$)	1	0.7	1.0	0.4	0.49	0.48	0.3	0.5	0.3	1.2	1.5
	2.94E13≤ ω ≤3.93E13(ω_{LA})	97.7	98.7	99.1	99.2	99.3	99	99.4	97.5	97.2	97.8	97
ZA	0≤ ω ≤2.48E13($\omega_{LA,TA,ZA}$)	40	92.5	93.8	94.6	95.3	95.1	95.4	91.7	91.4	89.6	91.1
	2.48E13≤ ω ≤2.94E13($\omega_{LA,ZA}$)	62	7.5	6.2	5.4	4.7	4.9	4.6	8.3	8.6	10.4	8.9
TA	0≤ ω ≤2.48E13($\omega_{LA,TA,ZA}$)	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100

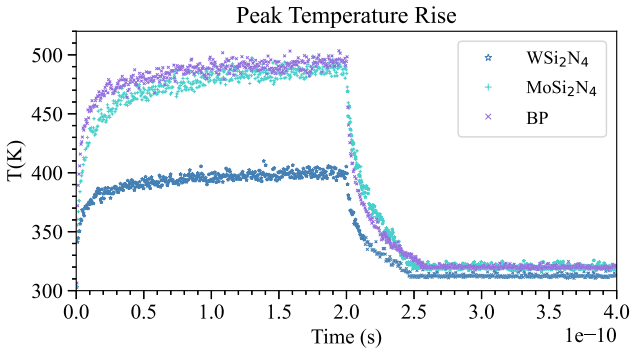

图2：XY平面上的最高温度随时间的变化。 +、星号和 × 标记分别展示了$MoSi_2N_4$, 、WSi_2N_4, 和蓝磷烯的结果。WSi_2N_4 沟道达到的峰值温度较低，因此可作为极具热效率的硅替代材料。

值。最后，ZA声子是黑磷中热传递的主要贡献者，其频率处于最低频率范围 0-2.48×10^{13} Hz。同样，$MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 材料中的 ZA 声子行为也表明，ZA 声子的低速度会使其滞留在热点中，而其低频特性则与之共同决定最高温度。

如前所述，晶体管的可靠性取决于其达到的最高温度 [21]。因此，峰值

详细分析了加热和冷却过程中的温升。图2展示了$MoSi_2N_4$, 、WSi_2N_4, 和作为测试材料的蓝磷烯沟道的最高温度随时间的变化。图中给出的是十次完整模拟运行的平均结果。如图所示，除$MoSi_2N_4$ 材料达到最高温度和稳态峰值温度所需时间较长外，三种材料的变化趋势几乎相同。前200 ps为加热阶段，温度不断升高；随后200 ps为冷却阶段，温度下降至稳态值。WSi_2N_4 材料的温度最高，但远低于$MoSi_2N_4$ 和蓝磷烯。根据表3所示的前述热载流子分析，速度快得多的LA和TA声子占主导并共存，是最高温度较低的原因之一。一方面，TA支声子能迅速离开热点；另一方面，如表4所示，其频率与ZA声子相近，且不及LA模态的频率高。如前所述，在$MoSi_2N_4$ 沟道中，大部分热量通过LA声子传递。这些载流子的高速度使其能够逃离热点，但其频率高得多，导致温升更大。因此，热载流子速度与相应频率之间的竞争决定了所达到的最高温度。如图2所示，对于WSi_2N_4 材料，其载流子速度较高，同时频率值相对较低。因此，

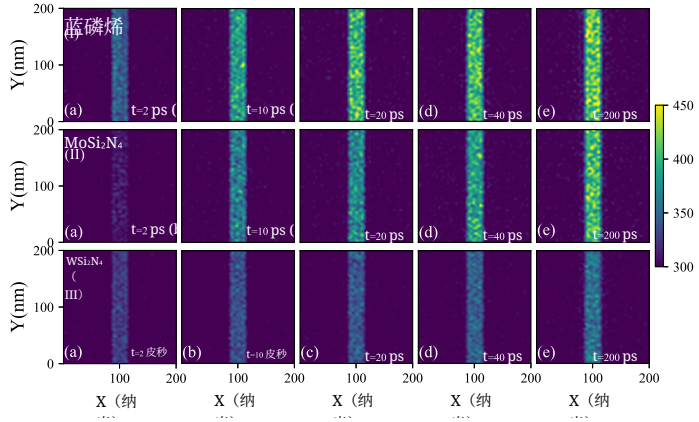

图 3：在 (a) t=2 ps、(b) t=10 ps、(c) t=20 ps、(d) t=40 ps 和 (e) t=200 ps 时 XY平面上热点的变化。上方 (I)、中间 (II) 和下方 (III) 的图依次展示了蓝磷、$MoSi_2N_4$，和 WSi_2N_4 材料的情况。WSi_2N_4 形成的热点在加热和冷却过程中温度较低。

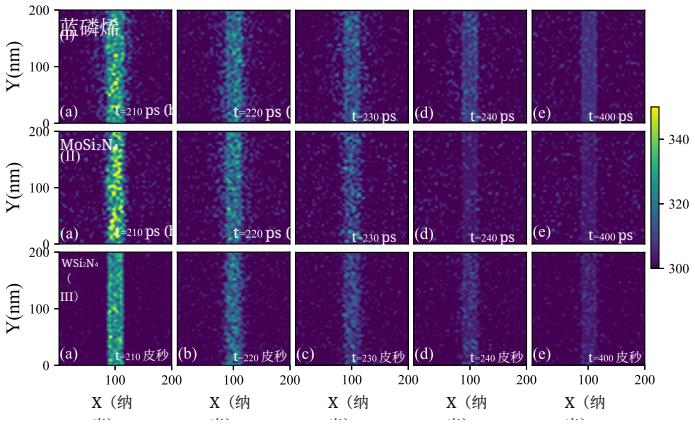

图4：蓝磷烯（I）、$MoSi_2N_4$（II）和 WSi_2N_4（III）在冷却过程中，(a) t=210 ps、(b) t=220 ps、(c) t=230 ps、(d) t=240 ps、(e) t=400 ps 时 XY平面上的热点。请注意，图3和图4中的色标不同。

这两个参数共同带来了非常理想的热学状态，使WSi_2N_4的最高温度远低于其他受研究材料。这与$MoSi_2N_4$ 沟道中LA声子所形成的状态形成对比；该沟道具有理想的热学和电学性质。对于$MoSi_2N_4$，，高频LA声子的频率效应超过了其速度效应，而这些声子是热传递现象的主要承担者。因此，$MoSi_2N_4$材料的峰值温度明显低于其他材料，排名第二。所得最高温度分别显著低于和略高于WSi_2N_4 与蓝磷烯。对于黑磷，重要的TA声子较少，同时频率与TA声子相近的低速ZA声子数量较多且占主导。因此，这两方面的热学表现都不如$MoSi_2N_4$ 和WSi_2N_4 材料，从而导致温度高得多。由此可见，蓝磷烯此前曾在锗烯、硅烯、MoS_2 和石墨烯等候选二维沟道中被选为最佳选择，但与 MA_2Z_4 材料，尤其是WSi_2N_4相比，其热学状态最差。此外，图2显示，WSi_2N_4 材料达到稳态时的温度，比 $MoSi_2N_4$ 和蓝磷烯的稳态最高温度低10 K。

图 3-I(a-e) 展示了所提出晶体管中热点的形成情况。如图所示，晶体管开启后立即形成热点。包含稳定且热效率高的 MA_2Z_4, 型单层二维材料 WSi_2N_4，的场效应晶体管，其热点的最高温度显著较低。具体而言，如图 3(e) 所示，热导率为 75 Wm^{-1} K^{-1} 的热各向同性材料黑磷在 t=200 ps 时达到最高温度。在最初的 200 ps 内，热点区域持续产生高频声子，但由于面外声学支声子占主导，散热非常缓慢。因此，声子

困在热点中而无法离开。因此，温度会在热点处大幅升高。对于 $MoSi_2N_4$ ，在 t=2ps 时，也就是刚开始加热时，热点温度较低。这一现象可在图 3-II(a) 中观察到。相较于较长时间后的情况，这种行为可归因于 TA 和 LA 振动模式声子的显著贡献。换言之，LA声子占主导地位，参与率为 40%；TA声子的贡献也接近 25%，两者共同导致较低的温度。随着时间推移，高频LA声子的贡献急剧增加，而TA声子的贡献则降至 10%。因此，高频纵向声学声子占据主导地位，热点温度也大幅升高。由于这种情况持续存在，TA相对于LA的优势，以及LA中高频声子相对于高速声子的独占优势，始终保持不变。WSi_2N_4 在整个加热过程中的情况和声子分析，与 $MoSi_2N_4$ 加热初始几个皮秒内的情况相同。因此，在 WSi_2N_4沟道的整个加热模拟过程中都会形成温度较低的热点，如图 3-III(a-e) 所示。具体而言，热导率高达 224 Wm^{-1} K^{-1} 的 WSi_2N_4 材料，其热点温度最低，见图 3-III(e)。

此外，正如图 4 所示，在所研究的三种沟道中，冷却期间热点的行为也十分显著。当停止加热后，热点便开始消散。图 4(I-III)(a-b) 和图 2 表明，冷却开始后的近 30 ps 内，情况有所不同。关注参与热输运的声子类型，便可解释这种现象。为使情况更加清楚，下面将给出 t=210 ps 时的声子分析。图 4 (I-II)(a)证实，在 t=210 ps 时，$MoSi_2N_4$中的热点比 BP 中的热点温度更高。而在 t=200 ps 时，也就是停止加热时，BP 中形成的热点温度更高。因此，尽管在 t=200ps 时，$MoSi_2N_4$ 中的热点温度较低，但到 t=210 时情况发生逆转，BP 中热点的温度更低。这一发现证实，热扩散过程

在冷却期间，BP通道的热扩散明显比 $MoSi_2N_4$中的热传播更有利、更高效。表 3 中给出的结果也证实了这一情况。对于 $MoSi_2N_4$, ，当时间经过 t=200 ps 后，LA声子的数量持续增加，而 TA声子的数量持续减少。具体而言，在 t=210ps 时，LA声子和 TA声子的参与比例分别为 80% 和 8%。相反，BP 中 TA声子的数量在开始冷却后有所增加。具体来说，在 t=210 ps 时，热点中的 TA声子数量是 t=200ps 时的两倍。与此同时，LA声子和 ZA声子的数量减少。如前所述，TA声子几乎都是低能粒子，其存在会降低能量，使热扩散更容易，因而降低峰值温升。此外，$MoSi_2N_4$ 和 BP 中慢速且能量几乎较低的 ZA声子的占比分别为 22% 和 39%。尽管如此，显然，更多 TA声子的存在足以抵消 ZA声子占比较大的影响。这也可归因于 TA声子的能量较低。因此，正如预期，在这段时间内，蓝磷烯中的热传播增强，热点也冷却得更多。这一趋势在冷却开始后的近 30 ps 内持续存在。在更长时间下，高能 LA声子的占比降低，而对于 $MoSi_2N_4$, ，慢ZA声子的占比也很小。另一方面，对于 BP通道，LA声子的数量也有所减少，但与此同时，慢ZA声子的参与比例增加至 60%。由于 ZA声子相较于 ZA 和 LA 声子都非常缓慢，它们离开热点的速度也更慢。图 4 (I-II)(c-e)证实，在 t=230ps 之后，ZA声子数量对热点温度的影响超过了其他因素。因此，相较之下，预计在 t=230ps 之后，由于缺少 ZA声子，$MoSi_2N_4$ 中的热点温度较低。换言之，在更长时间下，两种 MA_2Z_4 材料中的热扩散速度都快于蓝磷烯，因此稳态温度更低。此外，如图 4 (a-e)所示，WSi_2N_4 沟道的表现与 $MoSi_2N_4$沟道相似。而由 WSi_2N_4, 、$MoSi_2N_4$,和 BP 制成的沟道中，晶体管达到稳态所需的时间依次增加。简而言之，图 3 和图 4 证实，最高温度较低的 MA_2Z_4 材料是最可靠的硅替代材料，甚至比具有良好热学和电学特性的候选蓝磷烯更具优势。图 3 (a-c)表明，MA_2Z_4 系列中最高温度极低的 WSi_2N_4 是最可靠的硅替代材料，甚至比具有良好热学和电学特性的候选蓝磷烯更具优势。

最后，讨论通道不同位置处的温度分布。WSi_2N_4, 、WSi_2N_4,和黑磷这三种材料的厚度分别为 0.679、0.702 和 0.53。正如前文所指出的，除底部边界外，所有边界均被视为绝热；底部边界可与环境交换能量。这些材料的厚度非常小，因此，一些声子几乎在热点中产生的同时就到达了底部边界。然而，直到时间 t=200 ps，热产生区会连续地产生声子，从而相应地使顶部边界保持较高温度（见图 5 (I-III)(a)）。与此同时，到达底部边界的热声子可以离开沟道。因此，如图 5 (I-III)(c) 所示，底部边界处的热点要冷得多。对于 z=d/2 处形成的热点，情况也相同，其中 d 为沟道厚度。与顶部/底部边界相比，离开该区域的声子较少/较多。因此，如图 5 (I-III)(b) 所示，该处温度高于/低于底部/顶部边界的温度。换言之，热量在热点区域产生的同时，也会从底部边界散去。这就是沟道温度不会失控升高的原因。总之，图 5 (I-III) 表明，对所有材料而言，满足绝热条件的顶部边界始终具有更高的温度。此外，具有开放边界条件的沟道非常适合作为候选方案，因为最高温升甚至可以降低 100 K。

6. 结论

本研究对复杂 MA_2Z_4 系列中的两种材料 $MoSi_2N_4$ 和 WSi_2N_4 进行了热学研究。通过对声子玻尔兹曼方程进行蒙特卡罗模拟，开展了声子分析。值得注意的是，我们全面研究了各支声子对热传递过程的贡献。研究结果证实，在加热区产生的热量作用下，WSi_2N_4,的最高温度比黑磷和 $MoSi_2N_4$低近 100 K。快速、低频 TA声子的大量参与，是峰值温度极低的原因。此外，快速但高频的 LA声子的存在，则会导致相对较高的最高温度。由于晶体管的可靠性取决于其在加热过程中达到的峰值温度，因此建议采用以 WSi_2N_4 为沟道的晶体管，作为最佳硅替代材料。

参考文献

[1] Y.C. Huang, M.H. Chiang, S.J. Wang, J.G. Fossum, 《5 nm Si基CMOS技术节点上的GAAFET与实用型FinFET》, IEEE J. Electron Devices Soc. 5(3), 164, 2017. [2] J. Ghazanfarian, Z. Shomali, A. Abbassi, 《从宏观到纳米尺度的热质传递：滞后行为》, Int. J. Thermophys, 36, 1416, 2015. [3] Z. Shomali, R. Asgari, 《低维材料沟道对纳米器件能耗的影响》, International Communications in Heat and Mass Transfer, 94, 77-84, 2018. [4] M. Acar, 《一步溅射制备的MoS2场效应晶体管》, Micro and Nanostructures, 165, 207203, 2022. [5] P.Y. Sulima, J.L. Battaglia, T. Zimmer, J.C. Batsale, 《SiGe异质结双极晶体管的自热建模》, Int. Commun. Heat Mass 34(5), 553, 2007. [6] K.L. Grosse, M.H. Bae, F. Lian, E. Pop, W.P. King, 《石墨烯-金属接触处的珀尔帖冷却与电流拥挤》, Nat Nanotechnol. 6 287, 2011 5( ), .[7] T.C. Balachandra, K. Ravindran, G.R. Nagabhushana, 《真空中脉冲电子束加热作用下电极热点温度的数值估算》, Int. Commun. Heat Mass 18(3), 397, 1991.

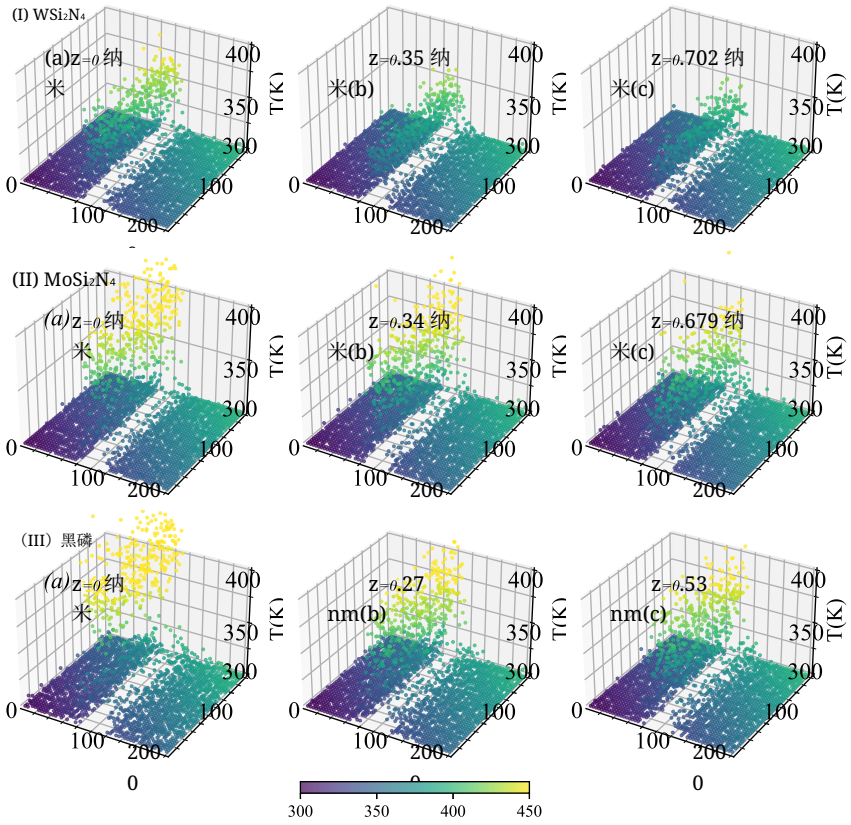

图5：在加热关闭时，t=200 ps时（I）WSi_2N_4,、（II）$MoSi_2N_4$和（III）蓝磷烯在（a）底部边界，z=0处，（b）厚度的一半处，以及（c）顶部边界，z=厚度处的XY平面温度分布。

[8] E. Pop, S. Sinha, K.E. Goodson, 《纳米级晶体管中的热生成与传输》, Proc. IEEE 94(8), 1587, 2006. [9] E. Pop and K.E. Goodson, 《纳米尺度晶体管中的热现象》, J. Heat Transfer, 128, 102, 2006.[10] E. Pop, 《纳米尺度器件中的能量耗散与传输》, Nano Res. 3(3), 147, 2010. [11] J. Ghazanfarian, A. Abbassi, 《边界声子散射对用于模拟微纳尺度热传导的双相滞后模型的影响》, International Journal of Heat and Mass Transfer, 52(15-16), 3706- 11, 2009. [12] J. Ghazanfarian and Z. Shomali, 《纳米尺度金属氧化物半导体场效应晶体管中双相滞后热传导模型的研究》, International Journal of Heat and Mass Transfer, 55(21-22), 6231-7, 2012.[13] R.S. Samian, A. Abbassi, J. Ghazanfarian, 《利用纳米尺度玻尔兹曼输运方程对常见二维场效应晶体管和新一代三维场效应晶体管进行热学研究》, Int. J. Mod. Phys. C 24, 1350064, 2013. [14] R.S. Samian, A. Abbassi, J. Ghazanfarian, 《采用有限体积格子玻尔兹曼方法对纳米尺度热点进行瞬态传导模拟》, Int. J. Mod. Phys. C 25 (04), 1350103, 2014. [15] M. Moghaddam, J. Ghazanfarian, A. Abbassi, 《用于纳米尺度MOS器件模拟的DPL-DD模型实现》, IEEE Transac- tions on Electron Devices, 61(9), 3131-3138, 2014. [16] Z. Shomali, J. Ghazanfarian, A. Abbassi, 《纳米尺度器件中高度非线性DPL模型的体材料/薄膜温度依赖性参数研究：高介电常数金属栅MOSFET案例》, 超晶格与微结构, 83, 699, 2015.[17] M. H. Fotovvat and Z. Shomali, 《采用时间分数阶双相滞后框架研究具有TMTC沟道（TiS_3, In_4Se_3）和尺寸依赖性参数的晶体管》, 168, 207304, 2022. [18] S. Valasa, S. Tayal, L.R. Thoutam, J. Ajayan, and S. Bhattacharya, 《面向未来模拟/数字集成电路应用的纳米片场效应晶体管性能、可靠性与制造挑战述评》, Micro and Nanostructures, 170, 207374, 2022.[19] R. Mahajan, R. Nair, V. Wakharkar, J. Swan, J. Tang, G. Vandentop, 封装技术的新兴方向，Intel Technol. J. 6, 2, 2002。[20] E. Pop、R.W. Dutton、K.E. Goodson，体硅和应变硅中焦耳热的蒙特卡罗模拟，Appl. Phys. Lett. 86, 082101, 2005。[21] A.L. Moore、L. Shi，电子器件热管理面临的新挑战及相关材料，Mater. Today 17(4), 163, 2014。[22] Z. Shomali、A. Abbassi、J. Ghazanfarian，三维和石墨烯基MOS器件非傅里叶热态的发展，Appl. Therm. Eng. 104, 616, 2016。[23] M. Chhowalla、D. Jena、H. Zhang，用于晶体管的二维半导体，Nat. Rev. Mater. 17(1), 16052, 2016。[24] G.L. Lay，二维材料：硅烯晶体管，Nat. Nanotechnol. 10 (3), 202, 2015。[25] L. Tao、E. Cinquanta、D. Chiappe、C. Grazianetti、M. Fanciulli、M. Dubey、A. Molle、D. Akinwande，在室温下工作的硅烯场效应晶体管，Nat. Nanotechnol. 10 (3), 227, 2015。[26] R. Jain、Y. Singh、S. Y. Cho、S. P. Sasikala、S. H. Koo、R. Narayan 和 S. O. Kim，通过表面活性剂的非共价功能化实现少层磷烯的环境稳定：水分散液中的系统性二维核磁共振表征。Chemistry of Materials, 31(8), 2786-2794, 2019。[27] Y.L. Hong、Z. Liu、L. Wang、T. Zhou、W. Ma、C. Xu、S. Feng、L. Chen、M.L. Chen、D.M. Sun 和 X.Q. Chen，层状二维$MoSi_2N_4$材料的化学气相沉积，Science, 369(6504), 670-674, 2020。[28] L. Wang、Y. Shi、M. Liu、A. Zhang、Y.-L. Hong、R. Li、Q. Gao、M.-X. Chen、W. Ren、H.-M. Cheng、Y. Li 和 X.-Q. Chen，Wang, L., Shi, Y., Liu, M., Zhang, A., Hong, Y.L., Li, R., Gao, Q., Chen, M., Ren, W., Cheng, H.M. and Li, Y., 2021. 具有新兴拓扑、磁性和超导性质的MA_2Z_4族层状范德华材料的插层结构，Nat. Commun., 12(2361), 2021。[29] Y. Yin、Q. Gong、M. Yi 和 W. Guo，多功能新兴二维MoSi 2 N 4族材料，arXiv预印本 arXiv:2211.00827, 2022。[30] C. Shen、L. Wang、D. Wei、Y. Zhang、G. Qin、X.Q. Chen 和 H. Zhang，二维层状MSi_2N_4 (M= Mo, W)作为有前景的热管理材料：比较研究，Physical Chemistry Chemi-

cal Physics, 24(5), 3086-3093, 2022。[31] Y. Hong、Z. Liu、L. Wang、T. Zhou、W. Ma、C. Xu、S. Feng、L. Chen、M. Chen、D. Sun、X. Chen、H. Cheng 和 W. Ren，层状二维MoSi2 369, 670, 2020 4 N材料的化学气相沉积，Science, 。[32] J. Yu、J. Zhou、X. Wan 和 Q. Li，单层MoSi2 033005, 2021 4, 23 3 N中的高本征晶格热导率，New Journal of Physics, ( ), 。[33] Q. Wang、L. Cao、S.-J. Liang、W. Wu、G. Wang、C. H. Lee、W. L. Ong、H. Y. Yang、L. K. Ang、S. A. Yang等，针对二维半导体$MoSi_2N_4$ 和WSi_2N_4 单层设计高效金属接触，arXiv预印本 arXiv:2012.07465, 2020。[34] S.B. Touski 和 N. Ghobadi，垂直应变诱导的单层$MoSi_2X_4$ (X= N, P, As and Sb)电学和自旋性质变化，Journal of Physics D: Applied Physics, 54(48), 485302, 2021。[35] C. Li 和 L. Cheng，单层$MoSi_2N_4$ 和WSi_2N_4, 中的本征电子输运，Journal of Applied Physics, 132(7), 075111, 2022。[36] J. H. Kim、T. H. Kim、H. Lee、Y. R. Park、W. Choi 和 C. J. Lee，单层和少层MoS_2 薄膜晶体管中与厚度相关的电子迁移率，Aip Advances, 6(6), 065106, 2016。[37] Z. Shomali、R. Kovács、P. Ván、I.V. Kudinov 和 J. Ghazanfarian，热力学与生物热传递中滞后热模型的最新进展与未来方向，Continuum Mechanics and Thermodynamics, 34, 637–679, 2022。[38] Z. Shomali、B. Pedar、J. Ghazanfarian、A. Abbassi，声子输运的三维纳米器件蒙特卡罗并行模拟，《国际热科学杂志》，114, 139-154, 2017。[39] Z. Shomali、J. Ghazanfarian、A. Abbassi，硅金属氧化物半导体场效应晶体管的三维原子尺度研究，ICHMT数字图书馆在线版，Begel House Inc., 2017。[40] J. Ghazanfarian、Z. Shomali、S. Xiong，《21世纪纳米科学手册：纳米物理学资料集》（第一卷），Sattler, K. D.（编），第4章，CRC出版社，2019。[41] Sattler, K. D.（编），《21世纪纳米科学：手册》（十卷套），CRC出版社，2022。[42] T.H. Liu、C.h.C.h. Chang，磷烯中的各向异性热输运：晶体取向的影响，《纳米尺度》7(24), 10648, 2015。[43] J. Zhang、H.J. Liu、L. Cheng、J. Wei、J.H. Liang、D.D. Fan、P.H. Jiang、J. Shi，基于第一性原理计算的磷烯同素异形体热导率：比较研究，Sci. Rep. 7(1), 4623, 2017。[44] S. Mei、L.N. Maurer、Z. Aksamija、I. Knezevic，包含色散的微米级石墨烯纳米带声子输运全色散蒙特卡罗模拟，J Appl Phys, 116, 164307, 2014。[45] X.J. Ge、K.L. Yao 和 J.T. L¨*u*，石墨烯、硅烯、锗烯和蓝磷烯的声子谱与热膨胀比较研究，Phys. Rev. B, 94(16), 165433, 2016。[46] A. Cepellotti、N. Marzari，纳米结构中的玻尔兹曼输运作为摩擦效应，《纳米快报》17(8), 4675, 2017。[47] S. Mazumder、A. Majumdar，包括色散和极化在内的固体薄膜声子输运蒙特卡罗研究，J. Heat Transfer, 123, 749, 2001。[48] A. Mittal，硅薄膜中声子热传导的蒙特卡罗研究，博士论文，俄亥俄州立大学，2009。[49] B.T. Wong、M. Francoeur、M.P. Mengüç，纳米尺度含热量生成的硅结构内声子输运蒙特卡罗模拟，Int. J. Heat Mass Transfer 54(9), 1825, 2011。[50] B.T. Wong，内部极化单色声学声子发射对纳米尺度散热的影响，Int Commun Heat Mass, 53, 87, 2014。