

单层二硫化钼力学性能温度和手性效应的分子动力学模拟

李明林 万亚玲 胡建玥 王卫东

Molecular dynamics simulation of effects of temperature and chirality on the mechanical properties of single-layer molybdenum disulfide

Li Ming-Lin Wan Ya-Ling Hu Jian-Yue Wang Wei-Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 176201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.176201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.176201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

聚酰亚胺/钽铌酸钾纳米颗粒复合材料结构与机械性能分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation study on the structure and mechanical properties of polyimide/ $\text{KTa}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ nanoparticle composites

物理学报.2015, 64(12): 126202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126202>

层厚度和应变率对铜-金复合纳米线力学性能影响的模拟研究

Effects of layer thickness and strain rate on mechanical properties of copper-gold multilayer nanowires

物理学报.2015, 64(1): 016201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016201>

界面旋转角对双晶镁力学性质影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of tilt angle on mechanical property of magnesium bicrystals

物理学报.2014, 63(4): 046201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.046201>

纳米铜薄膜塑性变形中空位型缺陷形核与演化的分子动力学研究

Generation and evolution of vacancy-type defects in nano-Cu films during plastic deformation by means molecular dynamics

物理学报.2013, 62(19): 196201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.196201>

聚酰亚胺/铜纳米颗粒复合物的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation study of polyimide/copper-nanoparticle composites

物理学报.2013, 62(18): 186202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.186202>

单层二硫化钼力学性能温度和手性效应的分子动力学模拟*

李明林^{1)2)†} 万亚玲¹⁾ 胡建玥¹⁾ 王卫东^{3)‡}

1) (福州大学机械工程及自动化学院, 福州 350116)

2) (福建省高端装备制造协同创新中心, 福州 350116)

3) (西安电子科技大学机电工程学院, 西安 710071)

(2016年5月4日收到; 2016年6月25日收到修改稿)

针对文献中单层二硫化钼力学性能随温度变化趋势的不明确, 本文基于 Stillinger-Weber 原子间势函数, 采用经典分子动力学方法对单层二硫化钼在不同热力学温度下 (1—800 K) 的力学行为进行了单轴拉伸模拟, 研究温度和手性对其力学性能的影响. 结果表明: 单层二硫化钼的杨氏模量、抗拉强度、拉伸极限应变等力学性能均随温度的升高而显著减小; 单层二硫化钼的杨氏模量和抗拉强度存在明显的手性效应, 而不同手性方向的拉伸极限应变差别不大, 可以忽略; 温度低于 800 K 时, 不同手性二硫化钼断裂之前受拉加载和卸载均没有明显的相变发生; 温度在 1 K 时, 沿锯齿方向受拉的单层二硫化钼在极限强度附近会有明显的局部相变发生, 且卸载时相变结构能保持稳定. 本文也测量出单层二硫化钼在温度 1—800 K 下沿扶手和锯齿方向的线膨胀系数.

关键词: 二硫化钼, 力学性能, 温度效应, 手性效应

PACS: 62.25.-g, 65.40.De, 68.03.Cd, 68.65.Pq

DOI: 10.7498/aps.65.176201

1 引言

二硫化钼 (MoS_2) 粉末具有良好的润滑性, 抗压耐磨, 常被用作固体润滑剂, 适用于高速、重负荷、高温、高真空及有化学腐蚀等工作条件的设备^[1]. 区别于金属性的石墨烯薄膜, 单层 MoS_2 是具有 1.8 eV 带宽的直接带隙半导体, 被认为是取代硅半导体的新一代候选材料之一^[2]. 由于其独特的电学、光学和力学特性, 单层 MoS_2 在场效应晶体管^[2]、光敏晶体管^[3]、纳米谐振器等^[4] 纳米电子器件领域具有广泛的应用前景.

虽然已有文献报道石墨烯薄膜断裂强度的直接拉伸实验^[5], 但由于对原子层厚纳米薄膜力学性

能的直接拉伸测试仍存在着诸多困难和挑战, 目前, 人们主要采用第一性原理计算^[6–9]、纳米压痕实验测试^[10–12] 和分子动力学模拟实验^[13–15] 方法来获得单层 MoS_2 的力学性能参数, 如表 1 所示. 考虑用作纳米电子器件时, 材料在电场作用下自身温度会发生变化, 会发生相应的膨胀收缩, 其力学性能也必将受到温度变化的影响.

Zhao 等^[16] 基于 Stillinger-Weber (SW) 势的分子动力学拉伸和压痕模拟方法, 研究了温度对单层 MoS_2 力学特性的影响. 结果表明, 随着温度的升高 (4.2—500 K), 其杨氏模量出现单调减小. 但 Jiang 和 Park^[15] 在研究单层 MoS_2 /石墨烯异质结材料时, 同样基于 SW 势的分子动力学模拟则呈现出完全不一致的现象: 随着温度升高 (0—300 K),

* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 50903017, 51205302) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liminglin@fzu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wangwd@mail.xidian.edu.cn

单层MoS₂的杨氏模量几乎没有什么变化. 虽然文献并未对此差异做出合理的解释, 但由Gamboa等^[17]的工作或许可以从侧面获得初步的解释, 那就是分子动力学模拟方法和数据处理的些微差异可能导致测量数据的发散.

为了进一步明确温度对单层MoS₂弹性力学特性的影响, 本文基于SW势能函数, 通过经典分子动力学模拟, 研究1—800 K温度下单层MoS₂的弹性模量、拉伸强度、极限应变等力学特性. 此外, 本文也讨论了单层MoS₂的热膨胀系数.

表1 单层二硫化钼力学性能
Table 1. Mechanical properties of single-layered MoS₂(SLMoS₂).

文献	杨氏模量 E/GPa	面内刚度 E^{2D}/Nm^{-1}	泊松比 ν	厚度 $t/\text{Å}$	方法
Ref.[6]	200.3	123.08	0.25	6.145	PBE
Ref.[7]	200	—	—	6.145	PBE
Ref.[8]	—	123	0.25	—	PAW
Ref.[9]	—	120.1	0.254	6.5	PBE
Ref.[10]	270±100	180±60	0.27	6.5	Indentation
Ref.[11]	—	120±30	0.29	6.15	Indentation
Ref.[12]	300±100	—	0.25	—	Indentation
Ref.[13]	229.0	139.4	—	6.09	MD(SW)
Ref.[14]	—	114.5	0.267	—	PBE
	—	161.3	0.139	—	MD(CVFF1)
	—	128.9	0.092	—	MD(CVFF2)
	—	70.4	0.361	—	MD(SW)
	—	121.8	0.274	—	MD(REBO)
Ref.[15]	—	128.75	—	6.09	MD(SW)

注: PBE, Perdew, Burke, Enzerhof 泛函; Indentation, 纳米压痕; PAW, 投影缀射平面波; MD, 分子动力学模拟; REBO, reactive empirical bond-order 势函数; CVFF, constant valence force 势函数.

2 模型和方法

2.1 单层MoS₂原子模型

如图1所示, 类石墨烯单层MoS₂是“三明治夹心”层状结构的准二维晶体材料. 中间的红色钼原子层被夹在绿色上层硫原子和蓝色下层硫原子中, 每一个钼原子与周围6个硫原子形成化学键, 每一个硫原子则与周围3个钼原子形成共价键. 单层MoS₂的厚度 δ 取为实验测得的数据, 约为 $\delta = 6.5 \text{ Å}$ ^[2]. 本文采用的单层MoS₂模型为周期性的近似正方形构型, 分别考虑三个尺寸($54.8 \text{ Å} \times 50.7 \text{ Å}$, $115.2 \text{ Å} \times 129.8 \text{ Å}$ 和 $202.9 \text{ Å} \times 202.6 \text{ Å}$), 总原子个数分别为960, 5166和14208.

2.2 SW原子间势函数

在纳米尺度下, 分子动力学方法是材料科学研究中不可或缺的重要研究手段, 被广泛地用来研究纳米材料的力学性能及其变形机理^[18–21]. 分

子动力学模拟的一个关键步骤是势函数的选取, 它不仅影响计算速度和精度, 也决定着能否揭示出模型的本质特性. Xiong和Cao^[14]分别比较研究了SW, REBO, CVFF2和CVFF1等势函数在模拟MoS₂力学特性时的成效. 结果表明: 在小变形下, REBO和CVFF2等势函数可以有效地描述单层MoS₂的弹性行为, 且适当修改REBO势函数的截断半径可以有效地预测其拉伸极限应变; 在大变形条件下, 采用CVFF2只在双轴拉伸时才可以得到较为正确的拉伸应力, 而SW势函数则可在单轴和双轴拉伸时均获得更加精确的拉伸应力. 此外, Jiang^[22]在综合比较VFF (valence-force field), SW和REBO等势函数以及从头算(*ab initio*) 在计算成本和效率等方面的优劣之后, 基于VFF势函数推导出适用于单层MoS₂力学特性的SW势函数的各项参数. 该SW势函数不仅计算速度较快, 且可以获得材料力学性能的线性和非线性特性. 故此, 本文采用Jiang近期研发的SW势函数^[22]来开展单层MoS₂力学特性的经典分子动力学拉伸模拟实验.

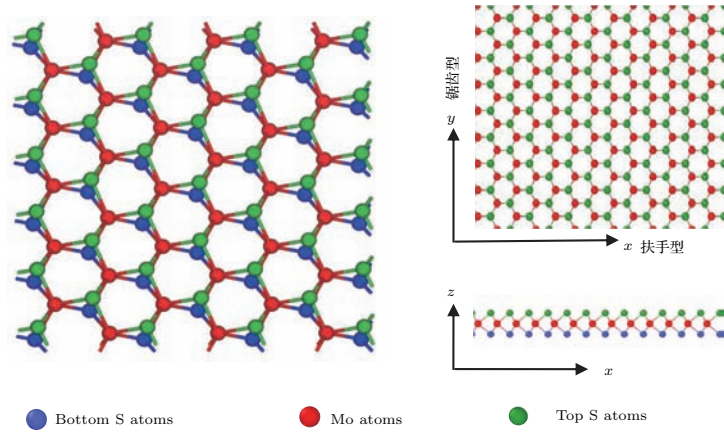


图1 (网刊彩色) 单层 MoS₂ 的原子结构

Fig. 1. (color online) Atomic structure of SLMoS₂.

表2 LAMMPs 所用 SW 势函数的参数 [22]
Table 2. SW potential parameters for LAMMPs [22].

	ε	σ	a	λ	γ	$\cos\theta_0$	A	B_L	p	q
Mo-S-S	1.0	1.252	2.523	67.883	1.000	0.143	6.918	7.223	4	0
S-Mo-Mo	1.0	1.252	2.523	62.449	1.000	0.143	6.918	7.223	4	0

SW 势函数包含了原子间的二体势 $U_2(i, j)$ 和三体势 $U_3(i, j, k)$ [22], 即

$$U = \sum U_2(i, j) + \sum U_3(i, j, k), \quad (1)$$

其中, 二体势 $U_2(i, j)$ 为

$$U_2(i, j) = \varepsilon A (B_L \sigma^p r_{ij}^{-p} - \sigma^q r_{ij}^{-q}) \times e^{[\sigma(r_{ij} - a\sigma)^{-1}]}, \quad (2)$$

三体势 $U_3(i, j, k)$ 为

$$U_3(i, j, k) = \varepsilon \lambda e^{[\gamma\sigma(r_{ij} - a\sigma)^{-1} + \gamma\sigma(r_{jk} - a\sigma)^{-1}]} \times (\cos\theta_{jik} - \cos\theta_0)^2, \quad (3)$$

式中, r_{ij} 为第 i 个原子与第 j 个原子之间的距离, θ_{jik} 为 r_{ij} 与 r_{jk} 之间的夹角, θ_0 为其初始夹角, 其他参数 $\varepsilon, \gamma, \lambda, a, \sigma, A, B_L, p$ 和 q 的取值见表 2 [22].

2.3 模拟方法

单层 MoS₂ 的单轴拉伸通过在拉伸轴向上施加应变的同时, 对其横向压力采用 NPT 系综控压, 以获得较为合理的弛豫构型 [17]. 在拉伸轴向上, 应变速率设为 0.1 ns^{-1} . 拉伸之前, 单层 MoS₂ 首先通过共轭梯度法进行系统能量最小化, 然后经过 50 ns 的弛豫获得稳定的系统压强 (0.1 bar) 和温度 (未特别说明时系统温度均为 0.1 K). 分子动力学模

拟的时间步长设为 1 fs. 温度和压强均采用 Nose-Hoover (NH) 方法调控. 经典的牛顿运动方程的求解采用 Velocity-Verlet 积分运算. 单层 MoS₂ 受拉时各应力分量 σ_i 分别通过 (4) 式获得

$$\sigma_i = \left(\sum_K^N m_k v_{ki} v_{ki} + \sum_K^N r_{ki} f_{ki} \right) / (l_x l_y \delta), \quad (4)$$

式中, N 为系统总原子数; m 为原子质量; v 和 f 分别为原子的速度和所受的力, 下标 k 和 i 分别表示第 k 个原子以及各物理量的第 i 分量; l_x 和 l_y 分别为单层 MoS₂ 的面内长 (AC 方向) 和宽 (ZZ 方向).

本文采用 LAMMPs 软件 [23] 执行所有模拟, 采用 VMD [24] 开源软件可视化模拟中原子构型.

3 结果和讨论

3.1 参数的优化

在用 LAMMPs 软件执行分子动力学模拟时, 需要设置多个控制参数. 虽然多数文献均会列出控制参数的取值, 但参数取值的依据大多没有详述. 我们在模拟过程中发现, 部分参数的取值需要严格筛选, 因其对模拟结果的影响程度很大, 比如控压参数 P_{damp} ; 而部分参数的设定则可不需那么严格, 因其影响程度较低. 为此, 在拉伸模拟之初, 本

文以单层 MoS₂ 拉伸杨氏模量实验数据为参照, 针对控压参数 P_{damp} 、拉伸速率和模型尺寸三个因素, 通过正交实验设计方法, 研究这三个因素对获得较为准确的单层 MoS₂ 杨氏模量的影响程度. 正交实验的三水平设计见表 3.

表 4 为正交实验结果显示, NH 的压控系数 P_{damp} 的影响程度最大. 模型可视化显示出较小的 P_{damp} 数值 (0.1 ps) 可导致单层 MoS₂ 所有原子爆散开来, 同时程序输出时呈现为 nan; 随着 P_{damp} 取值的增大, 系统均能达到弛豫的构型. 尽管较大的 P_{damp} 数值使得弛豫所需时间随之增加, 但其对单层 MoS₂ 弹性模量的影响程度则与周期性盒子尺寸相同. 当剔除不可行的 P_{damp} 时, 在这三个因素中, 拉伸速率对单层 MoS₂ 弹性模量的影响程度最大.

尽管如此, 对于上述三因素三个水平, 所获得的单层 MoS₂ 的弹性模量为 154.5—161.4 GPa, 十分接近文献 [22] 的结果, 最大偏差不超过 10%. 考虑到模型尺寸越大、拉伸应变速率越小、 P_{damp} 数值越大, 分子动力学模拟的计算成本越高, 后续所有模拟均采用 115.2 Å × 129.8 Å 的模型尺寸, 拉伸应变速率为 0.1 ns⁻¹, NH 控压参数 P_{damp} 为 10 ps.

表 3 正交实验的影响因素和水平
Table 3. Elements of orthogonal experiments.

因素/水平	Size/Å × Å	P_{damp} /ps	Strain rate/ns ⁻¹
1	54.8 × 50.7	0.1	0.01
2	115.2 × 129.8	1.0	0.1
3	202.9 × 202.6	10	1

表 4 正交实验结果
Table 4. Results of orthogonal tests.

实验号	Size/Å × Å	P_{damp} /ps	Strain rate/ns ⁻¹	Young's modulus
	1	2	3	E/GPa
1	1 (54.8 × 50.7)	1 (0.1)	1 (0.1)	—
2	1	2	2 (0.01)	154.7
3	1	3	3 (1)	157
4	2 (202.9 × 202.6)	1	2	—
5	2	2 (1.0)	3	156.9
6	2	3	1	154.5
7	3 (115.2 × 129.8)	1	3	—
8	3	2	1	155.6
9	3	3 (10)	2	161.4
(水平和) $K_1 K_2 K_3$	311.7	—	310.1	
	311.4	467.2	316.1	
	317	472.9	313.9	
(水平均值) $k_1 k_2 k_3$	103.9	—	103.4	
	103.8	155.7	105.4	
	105.7	157.6	104.6	
(极差) R_j	1.9	1.9	2.0	

注: 表 4 中的“—”表示在弛豫的过程中出现 nan.

3.2 单层 MoS₂ 拉伸力学特性的温度效应

图 2 给出了单层 MoS₂ 在 1—800 K 温度下的拉伸应力-应变关系曲线. 由图 2 (a) 和图 2 (b) 可明显看出, 与石墨烯强度的温度效应类似 [25], 随着温度增高, 其沿 AC 和 ZZ 方向的拉伸断裂强度均呈线性逐渐减小. 不管是 AC 方向还是 ZZ 方向, 单层 MoS₂ 的拉伸强度温度变化率十分接近, 分别为

-10.39 和 -9.80 MPa/T, 见图 2 (c). 也就是说, 环境温度每升高 1 K, 单层 MoS₂ 沿 AC 方向和 ZZ 方向的拉伸强度将分别降低 10.39 和 9.8 MPa. 此外, 手性对单层 MoS₂ 拉伸强度也存在着影响, 且随着温度升高, 影响度逐渐减弱. 随着温度升高幅度的增大, AC 方向与 ZZ 方向的拉伸强度逐渐趋向同一数值. 1 和 800 K 温度下, AC 方向的拉伸强度高于 ZZ 方向的拉伸强度分别约 1.0 和 0.7 GPa. 然而,

手性对单层 MoS₂ 拉伸极限应变的影响则几乎可以忽略. 图 2 (d) 给出的是单层 MoS₂ 沿 AC 和 ZZ 方向拉伸强度对应的极限应变与温度的关系曲线. 温度低于 200 K 时, 极限应变随温度变化呈抛物线减

小, 高于 200 K 时, 极限应变随温度变化则呈线性缓慢降低. 与拉伸强度不同的是, 极限应变在 AC 方向与 ZZ 方向不仅在数值上十分接近, 而且其温度变化率也十分接近.

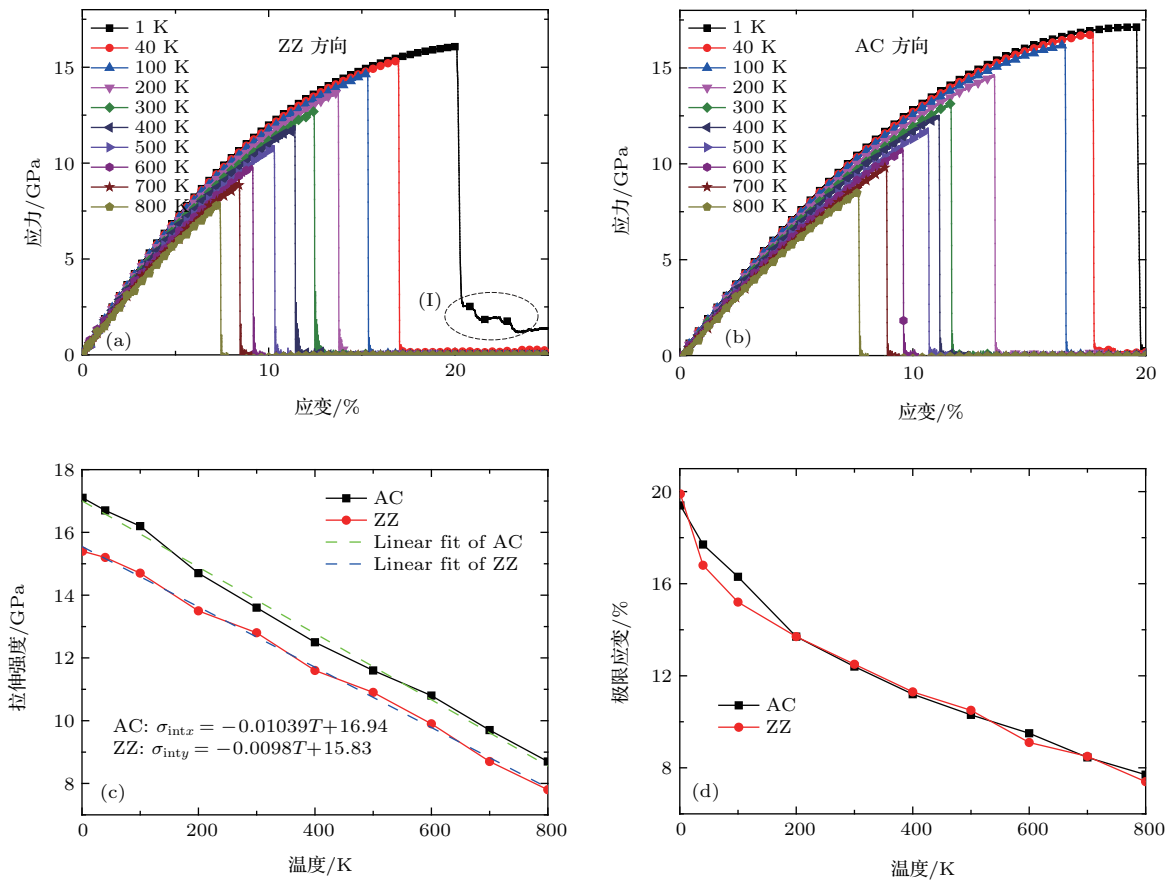


图 2 (网刊彩色) 1—800 K 温度下单层 MoS₂ 的力学特性 (a) 沿锯齿方向和 (b) 沿扶手方向应力-应变关系曲线; (c) 拉伸强度和 (d) 拉伸极限应变与温度关系曲线

Fig. 2. (color online) Mechanical properties of SLMoS₂ at temperatures from 1 K to 800 K, such as, stress-strain relationship curves obtained from stretching along (a) the ZZ direction and (b) the AC direction; (c) the tensile strength and (d) the ultimate strain versus the temperature.

图 3 给出的是通过拟合 0—0.02 应变范围内的应力-应变关系曲线而获得的各温度下单层 MoS₂ 的弹性模量. 随着温度的升高, 其沿 AC 和 ZZ 方向的弹性模量均呈线性逐渐减小. 与拉伸强度温度变化率类似, 单层 MoS₂ 沿 AC 方向和沿 ZZ 方向的弹性模量的温度变化率十分接近, 分别为 -30.4 和 -40.3 MPa/T. 然而, 与强度温度相关性不一致的是, 弹性模量的温度相关性呈现出随着温度升高幅度的增大, AC 方向与 ZZ 方向的弹性模量之差逐渐扩大. 也就是说, 手性对弹性模量存在着较大的影响, 随温度升高, 影响度有扩大的趋势. 在 1 和 800 K 温度下, AC 方向的弹性模量高于 ZZ 方向的弹性模量分别约 1.3 和 9.5 GPa.

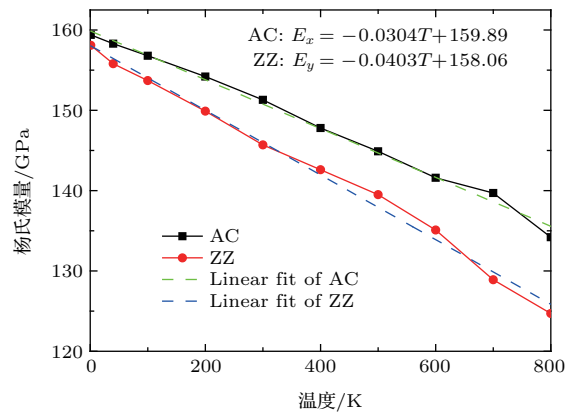


图 3 (网刊彩色) 单层 MoS₂ 弹性模量与温度的关系
Fig. 3. (color online) The Young's modulus of SLMoS₂ versus the temperature.

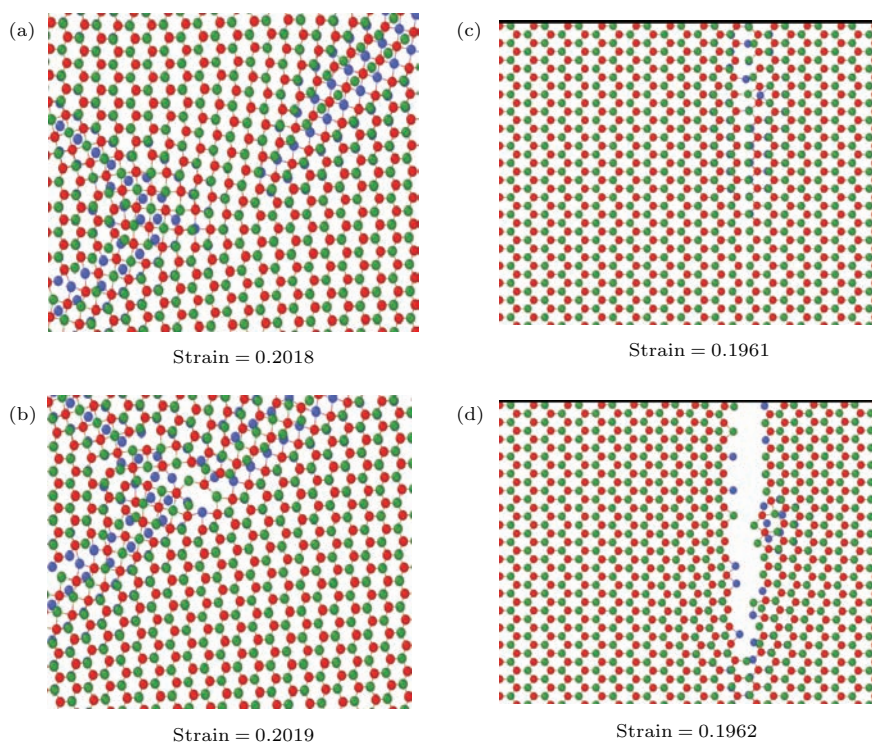


图4 (网刊彩色) 单层 MoS₂ 的拉伸断裂行为, 1 K 时沿锯齿方向拉伸极限应变 (a) 前和 (b) 后的原子构型; 1 K 时沿扶手方向拉伸极限应变 (c) 前和 (d) 后的原子构型

Fig. 4. (color online) The fragtural behavior of SLMoS₂, such as crack propogation when tensiled along the ZZ dircetion, (a) and (b), and along the AC direction, (c) and (d). (a) and (c) show the initial frame of cracks, and (b) and (d) show the next frame of cracts formation.

对于单层 MoS₂ 拉伸断裂行为, 图4显示出了两类完全不同的断裂过程. 图4(a)显示的是沿 ZZ 方向拉伸时单层 MoS₂ 发生的塑性断裂过程. 在裂纹发生之前, 单层 MoS₂ 沿着与 ZZ 拉伸成约 45° 的方向发生晶格畸变. 然而, 这种现象仅存于 1 K 时沿 ZZ 方向的拉伸实验(对应图2(a)区域I), 其他情况下均呈现出类似图4(b)的脆性断裂过程. 图4(b)显示的是沿 AC 方向拉伸时, 在裂纹产生的同时, 裂纹沿垂直拉伸的方向快速传播开来, 使得单层 MoS₂ 发生脆性断裂.

3.3 单层 MoS₂ 的热膨胀系数

基于固体微观物理理论, 晶体材料弹性模量与温度的关系与材料的线膨胀系数直接相关^[26]. 本节在能量最小化的基础上, 采用分子动力学模拟对各温度下单层 MoS₂ 进行弛豫, 且在弛豫后继续执行 10 ps, 记录并平均其边长用于计算获得单层 MoS₂ 的线热膨胀系数和面热膨胀系数. 系统采用巨正则(NPT)系综, 控压策略采用 NH 方法. 图5给出了沿 AC 和 ZZ 方向单层 MoS₂ 边长和面积

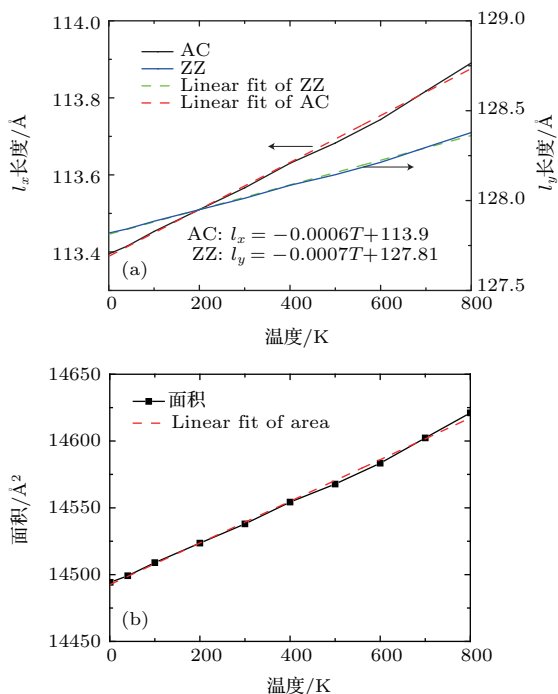


图5 (网刊彩色) 单层 MoS₂ 的热膨胀系数 (a) 扶手和锯齿方向的线膨胀系数; (b) 面积膨胀系数

Fig. 5. (color online) The thermal expansion coefficient (TEC) of SLMoS₂: (a) Linear TEC along the AC and ZZ directions; (b) in-plane area TEC.

随温度的变化曲线. 根据线热膨胀系数的定义, 即 $\alpha_i = (\partial l_i / \partial T) / l_{i0}$, 此处下标 $i = x, y$, 分别代表 AC 和 ZZ 方向; l_{i0} 代表 0 K 时的边长. 据此, 可获得扶手椅型方向上线膨胀系数为 $5.208 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, 锯齿型方向上线膨胀系数为 $5.39 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, 这与 Mahalawy 和 Evans^[27] 的实验结果一致. 此外, 定义面膨胀系数为 $\alpha_A = (\partial A / \partial T) / A_0$, 可得其面积膨胀系数为 $1.0459 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$.

3.4 卸载模拟

文献 [28] 显示在 40 K 温度下, 沿扶手方向拉伸时产生的相变可在卸载时消失, 而沿锯齿方向拉伸到至少 20% 应变时产生的相变则可在卸载时保持稳定. 本文只在 1 K 下沿锯齿方向拉伸单层 MoS₂ 临近断裂 (约 20% 应变) 时才发生相变, 其他温度和方向均未有明显相变发生. 当在相变发生后进行卸载时, 发现相变并不消失, 如图 6 (a) 插图的区域 I 所示. 图 6 中应力-应变卸载曲线则表明, 除沿锯齿方向在约 20% 应变下卸载外, 其他方向和应变下的卸载均可获得完全恢复的原子构型, 表明其具有优良的弹性行为.

4 结 论

本文基于 Stillinger-Weber 原子间势函数, 采用经典分子动力学方法对单层 MoS₂ 在不同热力学温度下 (1—800 K) 的力学行为进行了单轴拉伸模拟, 研究温度和手性对其力学性能的影响.

1) 单层 MoS₂ 的杨氏模量、抗拉强度、拉伸极限应变等力学性能均随温度的升高而显著减小, 单层 MoS₂ 拉伸强度沿 AC 方向和 ZZ 方向的温度变化率分别为 -10.39 和 -9.80 MPa/T , 弹性模量的温度变化率沿 AC 方向和 ZZ 方向分别为 -30.4 和 -40.3 MPa/T .

2) 单层 MoS₂ 的杨氏模量和抗拉强度存在明显的手性效应, 1 和 800 K 温度下, AC 方向的拉伸强度高于 ZZ 方向的拉伸强度分别约 1.0 和 0.7 GPa, 在 1 和 800 K 温度下, AC 方向的弹性模量高于 ZZ 方向的弹性模量分别约 1.3 和 9.5 GPa. 而不同手性方向的拉伸极限应变差别不大, 可以忽略.

3) 温度低于 800 K 时, 不同手性单层 MoS₂ 断裂之前受拉加载和卸载过程中均没有发生明显的相变; 而温度在 1 K 时, 沿锯齿方向受拉的单层

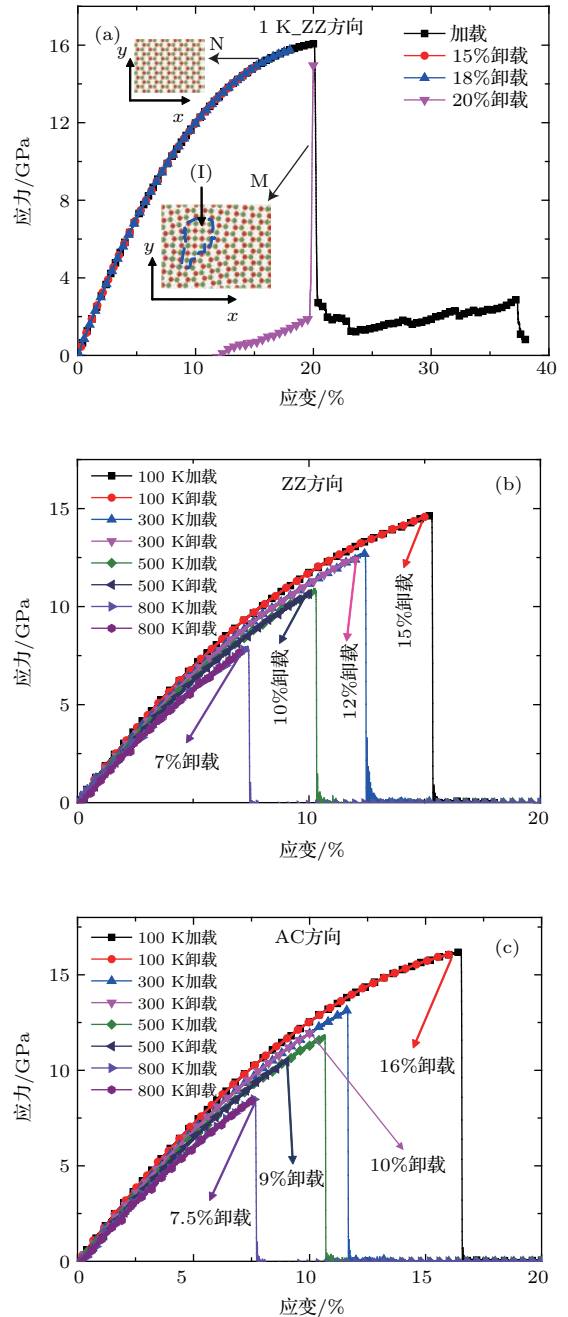


图 6 (网刊彩色) 单层 MoS₂ 受拉和卸载时应力-应变关系曲线 (a) 1 K 下和 (b) 各温度下沿锯齿方向; (c) 各温度下沿扶手方向

Fig. 6. (color online) The stress-strain curves of SLMo₂ under loading and unloading conditions: (a) At 1 K and (b) 100–800 K along the ZZ direction; (c) 100–800 K along AC direction.

MoS₂ 在极限强度附近会有明显的局部相变发生, 且卸载时相变结构保持稳定.

4) 单层 MoS₂ 在温度 1—800 K 下沿扶手和锯齿方向的线膨胀系数分别为 5.208×10^{-6} 和 $5.39 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, 面积膨胀系数为 $1.0459 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, 理论研究 with 实验测试结果一致.

感谢福州大学机械工程学院刘明博士、魏发南博士和庞皓升博士研究生的讨论。

参考文献

- [1] Savan A, Pfüger E, Voumard P, Schröer A, Simmonds M 2000 *Lubr. Sci.* **12** 185
- [2] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 147
- [3] Yin Z, Li H, Li H, Jiang L, Shi Y, Sun Y, Lu G, Zhang Q, Chen X, Zhang H 2011 *ACS Nano* **6** 74
- [4] Lee J, Wang Z, He K, Shan J, Feng P X L 2013 *ACS Nano* **7** 6086
- [5] Zhang P, Ma L, Fan F, Zeng Z, Peng C, Loya P E, Liu Z, Gong Y, Zhang J, Zhang X 2014 *Nat. Commun.* **5**
- [6] Gan Y, Zhao H 2014 *Phys. Lett. A* **378** 2910
- [7] Li T 2012 *Phys. Rev. B* **85** 235407
- [8] Yue Q, Kang J, Shao Z, Zhang X, Chang S, Wang G, Qin S, Li J 2012 *Phys. Lett. A* **376** 1166
- [9] Peng Y, Meng Z, Zhong C, Lu J, Yu W, Jia Y, Qian Y 2001 *Chem. Lett.* 772
- [10] Bertolazzi S, Brivio J, Kis A 2011 *ACS Nano* **5** 9703
- [11] Cooper R C, Lee C, Marianetti C A, Wei X, Hone J, Kysar J W 2013 *Phys. Rev. B* **87** 035423
- [12] Castellanos-Gomez A, Poot M, Steele G A, van der Zant H S, Agraït N, Rubio-Bollinger G 2012 *Nanoscale Res. Lett.* **7** 1
- [13] Jiang J W, Park H S, Rabczuk T 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 064307
- [14] Xiong S, Cao G 2015 *Nanotechnology* **26** 185705
- [15] Jiang J W, Park H S 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 033108
- [16] Zhao J, Jiang J W, Rabczuk T 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 231913
- [17] Gamboa A, Vignoles G L, Leyssale J M 2015 *Carbon* **89** 176
- [18] Li M L, Lin F, Chen Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 016102 (in Chinese) [李明林, 林凡, 陈越 2013 物理学报 **62** 016102]
- [19] Shang F L, Guo X C, Beicun L H, Meiye Y C 2010 *Advances in Mechanics* **40** 263 (in Chinese) [尚福林, 郭显聪, 北村隆行, 梅野宜崇 2010 力学进展 **40** 263]
- [20] Li M L, Wan Y L, Tu L P, Yang Y C, Lou J 2016 *Nanoscale Res. Lett.* **11** 155
- [21] Wang W, Li S, Min J, Yi C, Zhan Y, Li M L 2014 *Nanoscale Res. Lett.* **9** 41
- [22] Jiang J W 2015 *Nanotechnology* **26** 315706
- [23] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [24] Humphrey W, Dalke A, Schulten K 1996 *J. Mol. Graphics* **14** 33
- [25] Han T W, He P F, Wang J, Wu A H 2009 *J. Tongji University(Natural Science)* **37** 1638 (in Chinese) [韩同伟, 贺鹏飞, 王健, 吴艾辉 2009 同济大学学报: 自然科学版 **37** 1638]
- [26] Liu T, Liu M S 2014 *Materials For Mechanical Engineering* **38** 73 (in Chinese) [刘彤, 刘敏珊 2014 机械工程材料 **38** 73]
- [27] El-Mahalawy S, Evans B 1976 *J. Appl. Crystallogr.* **9** 403
- [28] Zhao J, Kou L, Jiang J W, Rabczuk T 2014 *Nanotechnology* **25** 295701

Molecular dynamics simulation of effects of temperature and chirality on the mechanical properties of single-layer molybdenum disulfide*

Li Ming-Lin^{1)2)†} Wan Ya-Ling¹⁾ Hu Jian-Yue¹⁾ Wang Wei-Dong^{3)‡}

1) (School of Mechanical Engineering and Automation, Fuzhou University, Fuzhou 350116, China)

2) (Fujian Collaborative Innovation Center of High-End Manufacturing Equipment, Fuzhou 350116, China)

3) (School of Mechano-Electronic Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 4 May 2016; revised manuscript received 25 June 2016)

Abstract

Recently, the effect of temperature on the mechanical property (the Young's modulus) of the single-layer molybdenum disulfide (SLMoS₂) is shown to be insignificant, which is obviously incompatible with the previously published result, i.e. the Young's modulus of SLMoS₂ decreases monotonically as temperature increases. Aiming at clarifying the relationships between the mechanical properties of the single-layer molybdenum disulfide (SLMoS₂) along the armchair (AC) and zigzag (ZZ) directions and the temperature, classical molecular dynamics (MD) simulations are performed to stretch the SLMoS₂ along the AC and ZZ directions at the temperatures ranging from 1 K to 800 K by using the Stillinger-Weber (SW) interatomic potentials in this paper. The mechanical properties of SLMoS₂ at the temperatures ranging from 1 K to 800 K, including ultimate strength, ultimate strain, and Young's modulus, are calculated based on the stress-strain results obtained from the simulations. Results are obtained and given as follows. (1) The mechanical properties of the SLMoS₂, including the ultimate strength and Young's modulus, are found to monotonically decrease as temperature increases. Increasing the temperature, the ultimate strength of SLMoS₂ in the AC direction drops faster than in the ZZ direction, whereas the Young's modulus of SLMoS₂ in the ZZ direction decreases quicker than in the AC direction, which means that the chirality effect on the ultimate strength is remarkably different from the Young's modulus of SLMoS₂. However, the ultimate strain in the ZZ direction at the temperatures in a range from 1 K to 800 K is close to that in the AC direction, which means that the effect of chirality on the ultimate strain is insignificant. (2) Unlike the published results in the literature, the phase transition of SLMoS₂ is found to only occur at a temperature of 1 K and at the moment of initial crack formation as tensiled along the ZZ direction, and the new phase of quadrilateral structure keeps stable after unloading. (3) The linear thermal expansion coefficients along the ZZ and AC directions are also measured, the magnitudes of which are found to be consistent with the published experimental results. Our simulation results support the viewpoint that the effect of the temperature on the mechanical property of SLMoS₂ is significant, and the SLMoS₂ can be regarded as an anisotropic material as the chirality effect cannot be ignored. The linear thermal expansion coefficients obtained with MD simulation are all in good agreement with the experimental data.

Keywords: molybdenum disulfide, mechanical properties, temperature effect, chirality effect

PACS: 62.25.-g, 65.40.De, 68.03.Cd, 68.65.Pq

DOI: 10.7498/aps.65.176201

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50903017, 51205302).

† Corresponding author. E-mail: liminglin@fzu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: wangwd@mail.xidian.edu.cn