

分子动力学模拟研究孪晶界对单层 二硫化钼拉伸行为的影响

邵宇飞 孟凡顺 李久会 赵星

Molecular dynamics simulations for tensile behaviors of mono-layer MoS₂ with twin boundary

Shao Yu-Fei Meng Fan-Shun Li Jiu-Hui Zhao Xing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 216201 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20182125

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182125>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

石墨烯封装单层二硫化钼的热稳定性研究

Thermal stability of MoS₂ encapsulated by graphene

物理学报. 2018, 67(22): 226501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181255>

高质量单层二硫化钼薄膜的研究进展

Research progress of high-quality monolayer MoS₂ films

物理学报. 2018, 67(12): 128103 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180732>

二硫化钼/石墨烯异质结的界面结合作用及其对带边电位影响的理论研究

Interfacial cohesive interaction and band modulation of two-dimensional MoS₂/graphene heterostructure

物理学报. 2017, 66(8): 087101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.087101>

非共振圆偏振光作用下单层二硫化钼电子结构及其自旋/谷输运性质

Electronic structure and spin/valley transport properties of monolayer MoS₂ under the irradiation of the off-resonant circularly polarized light

物理学报. 2018, 67(10): 107101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180213>

等离子体谐振腔对二硫化钼的荧光增强效应

Fluorescence enhancement of monolayer MoS₂ in plasmonic resonator

物理学报. 2019, 68(23): 237801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191121>

分子动力学模拟研究孛晶界对单层二硫化钼拉伸行为的影响*

邵宇飞^{1)†} 孟凡顺²⁾³⁾ 李久会²⁾ 赵星²⁾

1) (辽宁工程技术大学应用物理与技术研究所, 葫芦岛 125105)

2) (辽宁工业大学理学院, 锦州 121001)

3) (东北大学材料科学与工程学院, 沈阳 110819)

(2018年12月3日收到; 2019年8月25日收到修改稿)

孛晶界是单层过渡金属二硫族化合物材料中的一种重要结构缺陷. 本文通过分子动力学模拟结合 Stillinger-Weber 势函数研究单轴拉伸过程中孛晶界对单层 MoS₂ 力学行为的影响. 结果表明: 1) 孛晶界能够诱发裂纹在孛晶界附近形核, 并促使裂纹沿界面扩展, 从而降低晶体的断裂应变; 2) 温度的升高能够加剧孛晶界附近的裂纹形核过程, 从而进一步减弱单层 MoS₂ 的断裂强度和断裂应变; 3) 孔洞能够造成应力集中, 从而进一步触发断裂过程, 但孛晶界能够阻碍孔洞应力场的扩散, 从而延缓单层 MoS₂ 材料的断裂过程; 4) 孛晶片层间距对单层 MoS₂ 断裂应变具有重要影响, 特别是对于含孔洞的单层 MoS₂ 材料, 材料断裂应变能够随着片层间距的减小而显著提高.

关键词: 单层二硫化钼, 孛晶界, 力学性能, 分子动力学

PACS: 62.25.-g, 68.35.Gy, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.68.20182125

1 引言

石墨烯的出现带来了二维材料的蓬勃发展^[1,2]. 近年来, 与石墨烯结构相似的单层过渡金属二硫族化合物 (transition metal dichalcogenide crystals, TMDCs) 由于其独特的物理性能展示出广阔的应用前景, 从而引起了材料科学和物理学界的极大关注^[3-6], 相应地其结构和力学性能亦成为研究的焦点. 一方面, 良好的结构稳定性能够提高单层 TMDCs 器件的使用寿命, 是器件发挥物理功效的基础; 另一方面, 单层 MoS₂ 的能带结构^[7] 和磁通量^[8] 的应变调控研究结果表明单层 TMDCs 结构和力学性能的研究能够促进柔性电子器件的发展.

在此背景下, 国内外若干研究单位相继开展了关于单层 TMDCs 材料结构和力学性能的研究工作. 例如, Dang 等^[9] 研究了晶界和点缺陷对单层 MoS₂ 拉伸行为的影响; Casillas 等^[10] 研究了单层至少数几层的 MoS₂ 弹性变形过程; 李明林等^[11] 研究了单层 MoS₂ 力学性能随温度的变化趋势以及手性的影响; Wang 等^[12] 研究了单层 MoS₂ 结构相变导致的晶体塑性问题; Wu 等^[13] 研究了晶粒尺寸对单层多晶 MoS₂ 拉伸强度的影响. 由于单层 TMDCs 样品仅几个原子层厚, 在制备和测试过程中存在诸多困难和挑战^[14-16], 因此以第一性原理计算和分子动力学模拟为代表的纳米尺度计算模拟方法成为分析单层 TMDCs 材料结构和力学性能的重要手段^[17,18].

* 国家自然科学基金 (批准号: 51801091) 和辽宁省自然科学基金 (批准号: 201602360, 20180550484) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yfshao@alum.imr.ac.cn

过去几年来,人们对单层 TMDCs 的结构缺陷进行了大量计算模拟研究工作^[19,20].晶界是单层 TMDCs 材料的重要结构缺陷之一,几乎不可避免地存在于一些广为使用的制备方法(如化学气相沉积法)所制备出的实验样品之中,因而日益引起人们的关注^[21,22].其中,孪晶界是一种具有低应变能的特殊晶界,界面两侧晶体呈镜像对称结构,在 2013 年 van der Zande 等^[23]的电镜实验中被观察到,并根据 Barja 等^[24]的研究展示出独特的电学性能.然而,孪晶界对单层 TMDCs 力学行为的影响机制却缺乏深入系统的研究^[25].本文以单层二硫化钼为模型材料,利用分子动力学拉伸模拟为上述问题的解答提供了有益参考.

2 模型与方法

如图 1(a) 所示,类石墨烯的单层 MoS₂ 具有“夹心三明治”形貌的层状结构,中间的红色 Mo 原

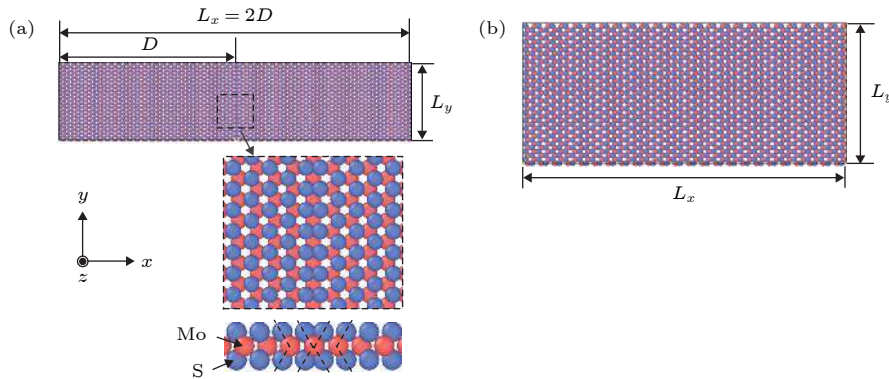


图 1 单层 MoS₂ 的分子动力学模型 (a) 含孪晶界; (b) 不含孪晶界

Fig. 1. Molecular dynamics model of mono-layer MoS₂: (a) With twin boundaries; (b) without twin boundary.

表 1 模型平面内初始尺寸
Table 1. Initial in-plane size of model.

	L_x/nm	L_y/nm
含孪晶模型	25.96	5.70
不含孪晶模型	13.16	5.70

根据 Virial 应力原理计算整个试样的拉伸应力^[30]

$$\sigma = - \left[\sum_{k=1}^N m_k v_{kx} v_{kx} + \sum_{k=1}^{N'} r_{kx} f_{kx} \right] / (L_x L_y L_z), \quad (1)$$

其中, N 表示系统原子总数; 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 表示第

子层被夹在上下两层蓝色 S 原子中间,模型沿 x 轴镜像对称,其中 D 表示界面单侧的晶体尺寸.模型沿 x, y, z 三个方向采用周期性边界条件,为了在 z 方向上避免薄膜周期镜像彼此之间的影响,保证薄膜的单层属性,设置毗邻镜像之间的真空层厚度 $L_z = 4 \text{ nm}$.为了对比孪晶界的影响,本文还实施了理想单晶模型的拉伸模拟,晶体构型如图 1(b) 所示. L_x 和 L_y 的具体参数列于表 1 中.单层 MoS₂ 原子间相互作用过程由 Jiang 等^[26]开发的 Stillinger-Weber (SW) 势函数^[27]描述.拉伸过程通过 Lammmps 软件^[28]完成,模拟结果通过 OVITO 软件^[29]输出原子构型.模型以每皮秒 0.1% 的应变率对单层 MoS₂ 沿 x 轴施加应变,通过 NPT 系综获得较为合理的弛豫构型.分子动力学模拟的时间步长设为 0.5 fs,拉伸过程最大持续 800000 步,相应最大应变不超过 40%.系统温度设为 1 K,温度和压强均采用 Nose-Hoover 方法调控.

k 个原子序数; L_x, L_y 和 L_z 分别为模型拉伸过程中的即时构型尺寸.

3 结果

图 2 给出了单层 MoS₂ 在拉伸过程中的应变能和应力曲线.开始阶段,理想模型和含孪晶界模型的应变能、应力曲线均单调上升,表示材料处于弹性变形过程,当应变约为 18% 时,两曲线出现第一次突降,这是由于少数局部原子的位置在拉伸过程中出现了微小变化,从而造成了应变能和应力的释放.与含孪晶界的模型相比,理想模型尺寸较小,原子数量相对也较少,所以释放的应变能在总能量

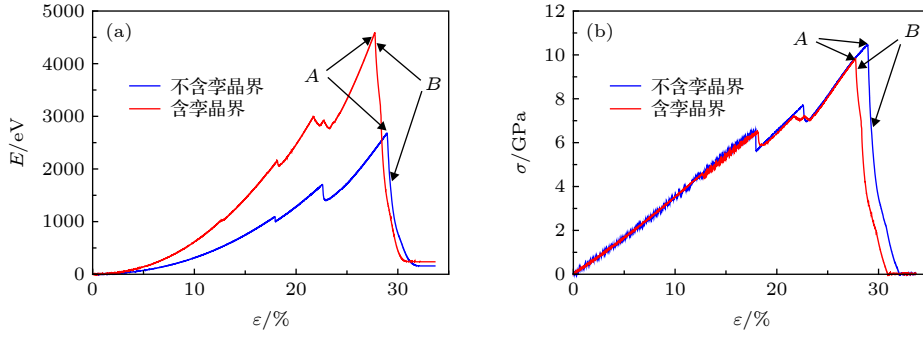


图 2 (a) 应变能 E ; (b) 应力 σ , 其中 ε 表示应变
 Fig. 2. (a) Strain energy E and (b) stress σ , where ε denotes strain.

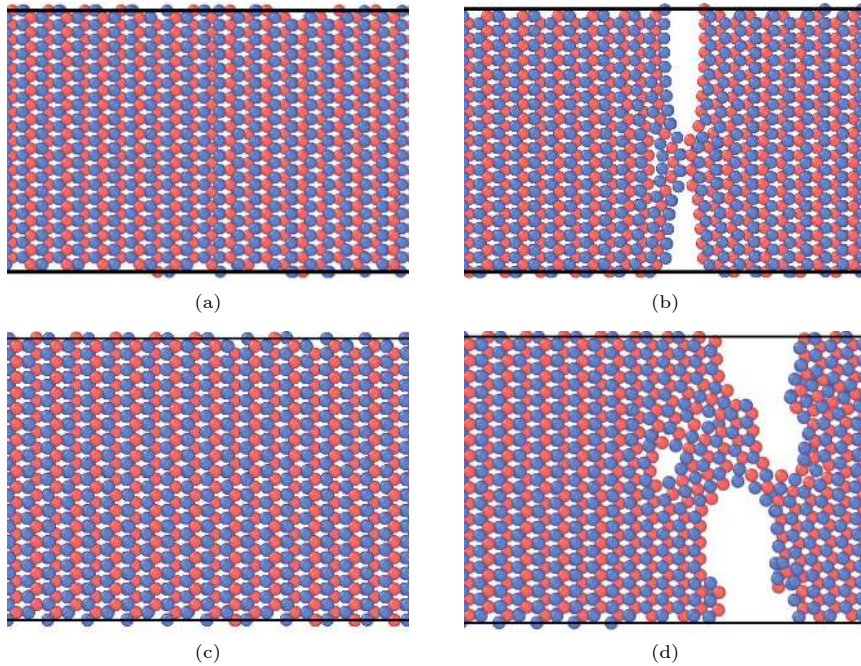


图 3 与拉伸曲线相对应的原子结构 (a) 孪晶界, A 点, $\varepsilon = 27.74\%$; (b) 孪晶界, B 点, $\varepsilon = 27.79\%$; (c) 不含孪晶界, A 点, $\varepsilon = 28.94\%$; (d) 不含孪晶界, B 点, $\varepsilon = 29.24\%$

Fig. 3. Atomic structures corresponding to the tensile curves: (a) With twin boundary, point A , $\varepsilon = 27.74\%$; (b) with twin boundary, point B , $\varepsilon = 27.79\%$; (c) without twin boundary, point A , $\varepsilon = 28.94\%$; (d) without twin boundary, point B , $\varepsilon = 29.24\%$.

中的比重更大, 因此图 2(a) 中的曲线突降更显著. 两模型的应变能和应力曲线经过 A 点后迅速下降, 这意味着材料发生了脆性断裂过程, 因此 A 点对应的应力和应变标记为晶体的断裂强度和断裂应变. 对于不含孪晶界的理想晶体, 断裂应变约为 29%, 与 Xiong 等 [30] 的研究结论 (断裂应变约为 32%、应力曲线首次突降发生于应变 17% 处) 相当一致, 表明了当前模型参数选择的可靠性. 单层 TMDCs 材料在拉伸过程中的脆性断裂行为最近已经被实验和模拟所证实 [16]. 与理想晶体相比, 含孪晶界晶体的断裂强度和断裂应变均略有下降, 表明两者断裂过程的微观机制可能存在差异.

图 3 给出了断裂应变前后的模型原子结构. 从图 3 可以看出, 两模型的微观断裂机制确实存在差别. 对于含孪晶界的模型, 裂纹沿孪晶界形成, 并迅速扩展; 对于不含孪晶界的理想材料, 模拟结果与前人研究报道一致 [11], 裂纹的形成形核于微观孔洞, 并在周围基体中激发新的微观孔洞.

4 分析和讨论

4.1 温度和孪晶片层间距的影响

上面模拟结果显示了孪晶界在 1 K 条件下对脆性断裂的影响. 过去一些研究工作表明温度是单层 TMDCs 材料结构、物理性能的重要影响因素 [11,31].

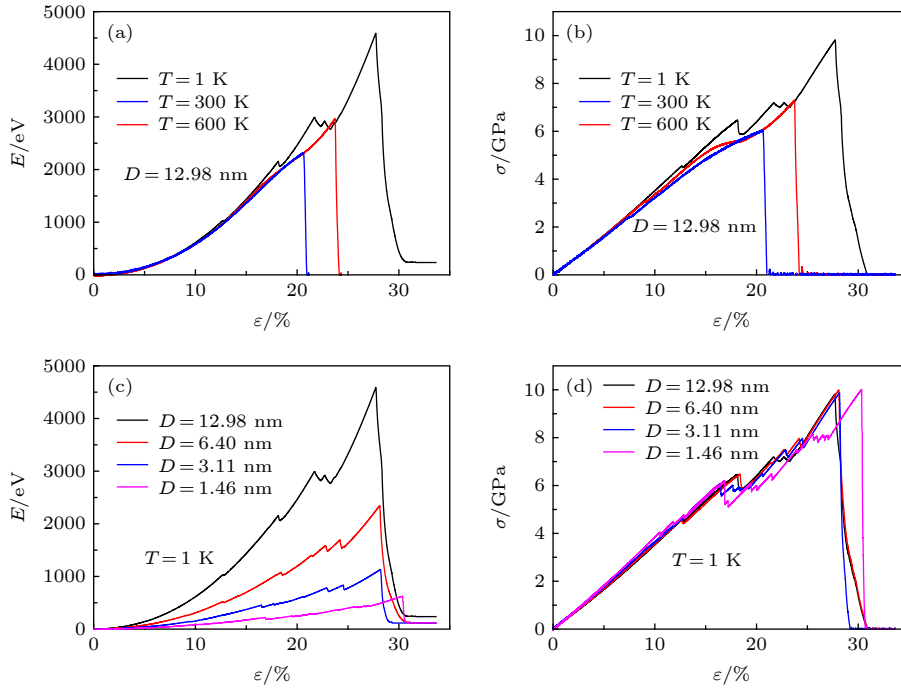


图 4 温度和孪晶界面间距的影响 (a) 不同温度下的应变能; (b) 不同温度下的应力; (c) 不同孪晶片层间距下的应变能; (d) 不同孪晶片层间距下的应力

Fig. 4. Effects of temperature and the twin lamellar spacing: (a) Effect of temperature on strain energy; (b) effect of temperature on stress; (c) effect of twin lamellar spacing effect on strain energy; (d) effect of twin lamellar spacing effect on stress.

受此启发, 本文针对 $25.96 \text{ nm} \times 5.70 \text{ nm}$ 尺寸模型分别调整系统温度为 300 和 600 K, 获得不同温度下的应变能和应力曲线, 结果见图 4. 从图 4 可知, 随温度的升高, 材料仍表现出脆性断裂行为, 但断裂强度和断裂应变显著下降, 同时曲线变得光滑, 表明局部原子位置扰动造成应变能释放的影响随着温度升高而减弱. 此外, 对于纳米金属晶体, 孪晶界能够显著提升材料强度^[32]. 本文在系统温度保持为 1 K 的条件下, 改变模型 x 方向的尺寸 L_x , 观察孪晶片层间距 $D (= L_x/2)$ 的影响, 结果见图 4(c) 和图 4(d), 可见, 随着孪晶片层间距的减小, 断裂应变有所增加.

4.2 微观孔洞的影响

孔洞是晶体中常见的缺陷, 通常会显著改变材料的力学性能^[9,33]. 为了观察孔洞对含孪晶界晶体拉伸行为的影响, 本文在基体中引入一个 Mo_3S_2 型空洞, 即在理想晶体中去掉上下 2 个 S 原子以及与其形成价键的 3 个 Mo 原子, 再按照前述方式进行拉伸, 系统温度设为 1 K. 整个试样的拉伸应力曲线见图 5, 其中, 显示了图 2(b) 所示应力曲线, 以便于比较. 对比可见, 虽然孔洞较小, 在模型中体积占比不足 1%, 但由于孔洞的存在, 含/不含孔

孪晶界的两个晶体断裂强度降幅均超过 35%, 断裂应变降幅超过 22%. Peron-Luhrs 等^[34] 发现孔洞相对于整个样品的体积占比与金属晶界临界切应力的衰减呈线性关系^[34], 然而对于单层 MoS_2 , 孔洞体积占比对晶界弹性行为的影响规律仍有待进一步研究.

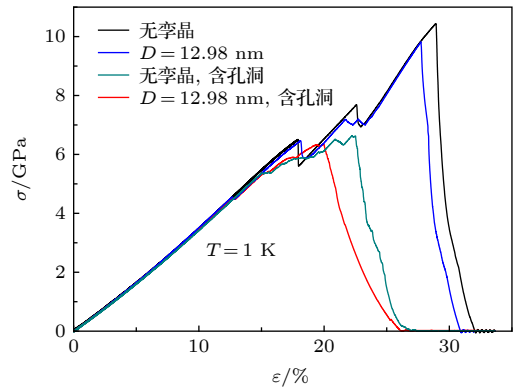


图 5 孔洞对拉伸应力的影响

Fig. 5. Effect of a Mo_3S_2 void on the tensile stress of specimen.

图 6、图 7 和图 8 依次给出了材料断裂前后的原子结构和应力分布状态, 其中, 应力分布状态通过 (1) 式去掉求和符号并将试样体积代之以原子体积而求得. 可以看到, 即使存在孪晶界, 孔洞的

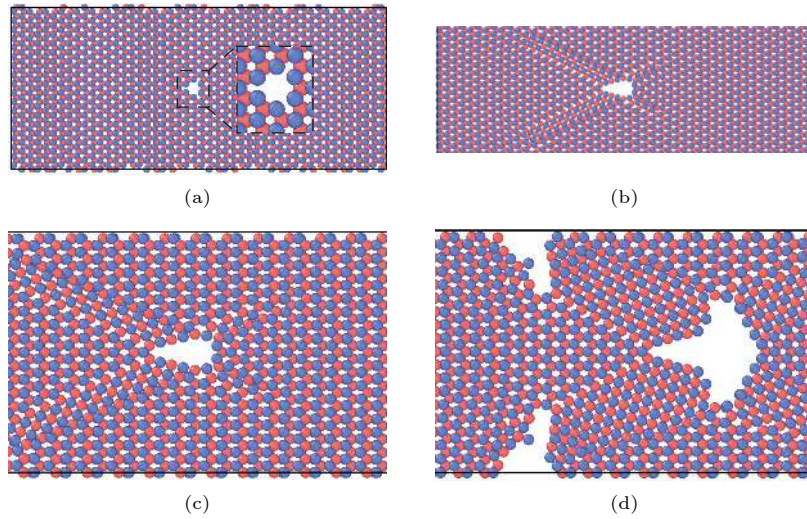


图 6 不含孪晶界的带孔洞的单层 MoS₂ (a) $\epsilon = 0$; (b) $\epsilon = 22.514\%$; (c) $\epsilon = 22.514\%$, 放大视图; (d) $\epsilon = 23.345\%$, 放大视图
 Fig. 6. Voided mono-layer MoS₂ without twin boundary: (a) $\epsilon = 0$; (b) $\epsilon = 22.514\%$; (c) $\epsilon = 22.514\%$, enlarged view; (d) $\epsilon = 23.345\%$, enlarged view.

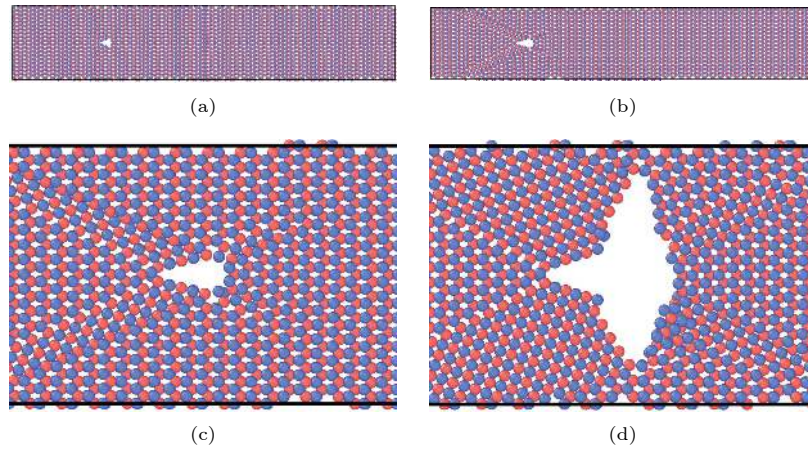


图 7 含孪晶界的带孔洞的单层 MoS₂ (a) $\epsilon = 0$; (b) $\epsilon = 19.971\%$; (c) $\epsilon = 19.971\%$, 放大视图; (d) $\epsilon = 20.779\%$, 放大视图
 Fig. 7. Voided mono-layer MoS₂ with twin boundaries: (a) $\epsilon = 0$; (b) $\epsilon = 19.971\%$; (c) $\epsilon = 19.971\%$, enlarged view; (d) $\epsilon = 20.779\%$, enlarged view.

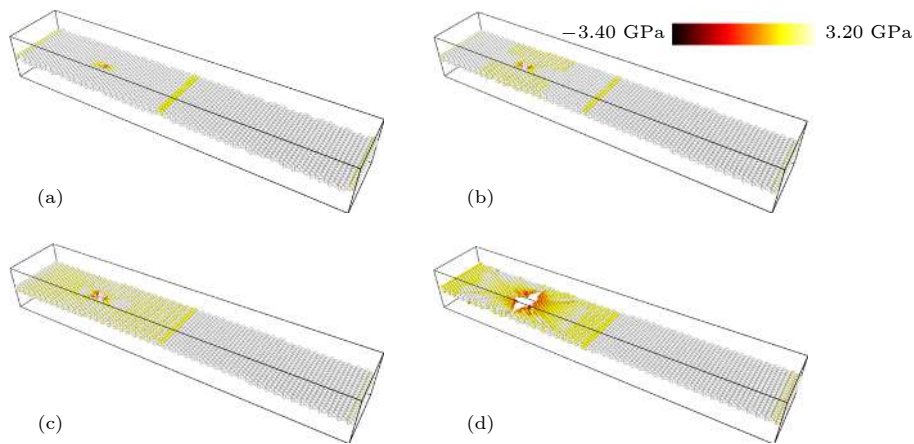


图 8 带孔洞的含孪晶界模型断裂前后应力分布状态 (a) $\epsilon = 14.34\%$; (b) $\epsilon = 16.92\%$; (c) $\epsilon = 18.25\%$; (d) $\epsilon = 20.87\%$
 Fig. 8. Distribution of tensile stress in the voided mono-layer MoS₂ sheet with twin boundaries: (a) $\epsilon = 14.34\%$; (b) $\epsilon = 16.92\%$; (c) $\epsilon = 18.25\%$; (d) $\epsilon = 20.87\%$.

存在仍会造成应力集中, 并率先引起局部相变^[35], 当局部相变不足以释放积累的应变能时, 诱发裂纹在其附近萌生, 催化脆性断裂过程. 值得注意的是, 红色曲线断裂阶段的斜率要明显小于蓝色曲线断裂阶段的斜率, 说明 $D = 12.98 \text{ nm}$ 的含孪晶界模型的断裂过程明显受到了延滞, 图 8 显示这是由于孪晶界对孔洞的应力场传播起到了明显的阻碍作用, 孪晶片层间距越小, 这种阻碍作用越明显.

4.3 断裂应变与孪晶片层间距之间的关系

对于块体纳米孪晶金属来说, 由于孪晶界对位错、层错等缺陷的运动具有强烈的阻碍作用, 因此可以显著提高材料屈服强度, 并且在孪晶片层间距不小于 15 nm 时^[36], 屈服强度 σ_y 与孪晶片层间距 λ 存在如下关系:

$$\sigma_y \propto \lambda^{-1/2}. \quad (2)$$

具有准二维结构的单层 MoS_2 材料, 也可以尝试寻找类似的关联, 如图 9 所示, 断裂应变 ε_A 可以看作孪晶片层间距 D 的函数, 即 $\varepsilon_A = \varepsilon_A(D^{-1})$. 图 4(d) 的应力曲线已经表明, 几个不同孪晶片层间距的样品具有几乎相同的断裂强度. 这意味着样品的断裂过程均沿着孪晶界发生, 且均需达到孪晶界裂纹形核的临界应力. 尽管当应变超过 18% 时, 应力与应变不再呈理想的线性关系, 但仍然可以做近似线性分析: 假设孪晶界裂纹形核的临界应力为 σ_A , 且 $\sigma_A = \mu\varepsilon_A$, μ 为有效弹性模量, 由于样品内部渐次发生局部结构转变, 造成应力释放, 有效弹性模量 μ 会低于理想晶体杨氏模量 μ_0 , D^{-1} 越大, 则单位体积内的孪晶界越多, 局部结构转变越容易发生, 应力释放越频繁, 有效弹性模量 μ 越小, 达到 σ_A 需

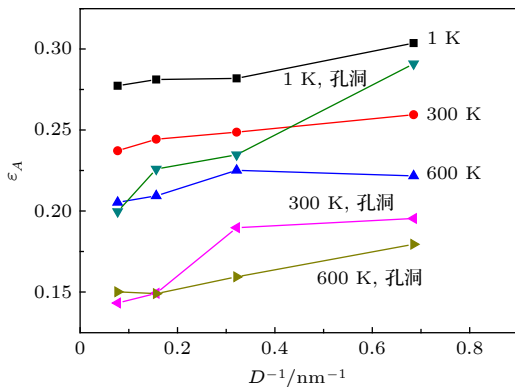


图 9 断裂应变 ε_A 与孪晶片层间距 D 的关联

Fig. 9. Correlation of the fracture strain ε_A and the twin lamellar spacing D .

要的 ε_A 越大. 然而根据图 9, 这种片层间距对断裂应变的影响仅在 D 很小时比较明显, 更加值得注意的是由于孪晶界与孔洞存在相互作用, 孪晶界密度的增加能够显著提高含 Mo_3S_2 孔洞晶体的断裂应变.

5 总结

本文通过分子动力学模拟方法结合 SW 势函数研究了单轴拉伸过程中孪晶界对单层 MoS_2 力学行为的影响, 主要得出以下结论.

1) 与理想晶体相比, 孪晶界能够诱发裂纹在孪晶界附近形核, 并促使裂纹沿界面扩展, 从而降低晶体的断裂强度和断裂应变; 温度的升高能够加剧孪晶界附近的裂纹形核过程, 从而进一步显著减弱单层 MoS_2 的断裂强度和断裂应变.

2) 少量原子缺失造成的孔洞能够造成应力集中, 从而进一步触发脆性断裂过程, 降低含孪晶界单层 MoS_2 的断裂强度和断裂应变, 但是对于孪晶界包围的孔洞, 孪晶界能够有效阻碍孔洞应力场的传播, 进而延缓脆性断裂过程.

3) 孪晶片层间距对单层 MoS_2 断裂应变具有重要影响, 特别是对于含孔洞的单层 MoS_2 材料, 材料断裂应变能够随着片层间距的减小显著提高.

需要指出的是, 真实的单层 MoS_2 孪晶界可能存在其他类型或其他晶体取向, 还有可能处于表面褶皱或临近杂质原子的环境中, 晶体甚至可能存在片层交叠, 这些结构变化均可能对材料拉伸行为造成影响. 如何考虑这些影响是本文后续工作拟研究解决的问题.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [3] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotech.* **6** 147
- [4] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotech.* **7** 699
- [5] Yin X B, Ye Z L, Chenet D A, Ye Y, Brien K O, Hone J C, Zhang X 2014 *Science* **344** 488
- [6] Wei Z, Wang Q Q, Guo Y T, Li J W, Shi D X, Zhang G Y 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 128103 (in Chinese) [魏争, 王琴琴, 郭玉拓, 李佳蔚, 时东霞, 张广宇 2018 *物理学报* **67** 128103]
- [7] Wu M S, Xu B, Liu G, Ouyang C Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 227102 (in Chinese) [吴木生, 徐波, 刘刚, 欧阳楚英 2012 *物理*

- 学报 **61** 227102]
- [8] Tao P, Guo H, Yang T, Zhang Z 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 054305
- [9] Dang K Q, Spearot D E 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 013508
- [10] Casillas G, Santiago U, Barron H, Alducin D, Ponce A, José-Yacamán M 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 710
- [11] Li M L, Wan Y L, Hu J Y, Wang W D 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 176201 (in Chinese) [李明林, 万亚玲, 胡建玥, 王卫东 2016 物理学报 **65** 176201]
- [12] Wang W D, Li L L, Yang C G, Soler-Crespo R A, Meng Z X, Li M L, Zhang X, Ketten S, Espinosa H D 2017 *Nanotechnology* **28** 164005
- [13] Wu J Y, Cao P Q, Zhang Z S, Ning F L, Zheng S S, He J Y, Zhang Z L 2018 *Nano Lett.* **18** 1543
- [14] Zhang R, Koutsos V, Cheung R 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 042104
- [15] Hao S, Yang B, Gao Y 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 153105
- [16] Yang Y, Li X, Wen M, Hacopian E, Chen W, Gong Y, Zhang J, Li B, Zhou W, Ajayan P M, Chen Q, Zhu T, Lou J 2017 *Adv. Mater.* **29** 1604201
- [17] Yun W S, Han S W, Hong S C, Kim I G, Lee J D 2012 *Phys. Rev. B* **85** 033305
- [18] Wang X, Tabarraei A, Spearot D E 2015 *Nanotechnology* **26** 175703
- [19] Zhou W, Zou X, Najmaei S, Liu Z, Shi Y, Kong J, Lou J, Ajayan P M, Yakobson B I, Idrobo J C 2013 *Nano Lett.* **13** 2615
- [20] Lin Z, Carvalho B R, Kahn E, Lü R, Rao R, Terrones H, Pimenta M A, Terrones M 2016 *2D Mater.* **3** 022002
- [21] Ly T H, Chiu M H, Li M Y, Zhao J, Perello D J, Cichocka M O, Oh H M, Chae S H, Jeong, Hye Yun, Yao F, Li L J, Lee Y H 2014 *ACS Nano* **8** 11401
- [22] Cheng J, Jiang T, Ji Q, Zhang Y, Li Z, Shan Y, Zhang Y, Gong X, Liu W, Wu S 2015 *Adv. Mater.* **27** 4069
- [23] van der Zande A M, Huang P Y, Chenet D A, Berkelbach T C, You Y M, Lee G H, Heinz T F, Reichman D R, Muller D A, Hone J C 2013 *Nat. Mater.* **12** 554
- [24] Barja S, Wickenburg S, Liu Z F, Zhang Y, Ryu H, Ugeda M M, Hussain Z, Shen Z X, Mo S K, Wong E, Salmeron M B, Wang F, Crommie M F, Ogletree D F, Neaton J B, Weber-Bargioni A 2016 *Nat. Phys.* **12** 751
- [25] Hong J, Wang Y, Wang A, Lü D, Jin C, Xu Z, Probert M I J, Yuan J, Zhang Z 2017 *Nanoscale* **9** 10312
- [26] Jiang J W, Park H S, Rabczuk T 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 064307
- [27] Stillinger F H, Weber T A 1985 *Phys. Rev. B* **31** 5262
- [28] Plimpton S 1995 *J. Comp. Phys.* **117** 1
- [29] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [30] Xiong S, Cao G X 2015 *Nanotechnology* **26** 185705
- [31] Du L J, Yu H, Xie L, Wu S, Wang S, Lu X, Liao M, Meng J, Zhao J, Zhang J, Zhu J, Chen P, Wang G, Yang R, Shi D, Zhang G 2016 *Crystals* **6** 115
- [32] Dao M, Lu L, Asaro R J, De Hosson J T M, Ma E 2007 *Acta Mater.* **55** 4041
- [33] Wang S S, Qin Z, Jung G S, Martin-Martinez F J, Zhang K, Buehler M J, Warner J H 2016 *ACS Nano* **10** 9831
- [34] Peron-Luhrs V, Sansoz F, Noels L 2014 *Acta Mater.* **64** 419
- [35] Dang K Q, Simpson J P, Spearot D E 2014 *Scripta Mater.* **76** 41
- [36] Lu L, Chen X, Huang X, Lu K 2009 *Science* **323** 607

Molecular dynamics simulations for tensile behaviors of mono-layer MoS₂ with twin boundary*

Shao Yu-Fei^{1)†} Meng Fan-Shun²⁾³⁾ Li Jiu-Hui²⁾ Zhao Xing²⁾

1) (*Institute of Applied Physics and Technology, Liaoning Technical University, Huludao 125105, China*)

2) (*College of Sciences, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China*)

3) (*College of Materials Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China*)

(Received 3 December 2018; revised manuscript received 25 August 2019)

Abstract

Grain boundary (GB) plays a key role in determining the electrical and mechanical properties of mono-layer transition metal dichalcogenide (TMDC), however it is still a challenge to uncover the GB-mediated TMDC material experimentally. In this paper, the effect of twin boundary on the tensile behaviors of mono-layer MoS₂ is investigated by using the molecular dynamics simulation combined with the Stillinger-Weber potential. Mono-layer MoS₂ model under the varied size and temperature condition is adopted. Stress calculation is performed by using Virial theorem. The results are obtained as follows. 1) Twin boundary promotes the brittle fracture of an undefected mono-layer MoS₂ sheet by inducing the nucleation of the crack near boundaries, thus the fracture strength and strain are weakened. 2) Increasing the ambient temperature from 1 K to 600 K, the crack nucleation process near the twin boundary is intensely accelerated, and the fracture strength and strain are further declined. 3) Twin lamellar spacing also plays an important role in the tensile process of mono-layer MoS₂, and the specimen with dense twin boundary, especially with void, shows higher fracture strain. 4) Stress analysis at an atomic level outlines the stress concentration caused by voids and the shielding effect of twin boundary. Because of the interactions between voids and twin boundary, the fracture strength and strain of a voided mono-layer MoS₂ sheet can be greatly improved.

Keywords: mono-layer MoS₂, twin boundary, mechanical properties, molecular dynamics

PACS: 62.25.-g, 68.35.Gy, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.68.20182125

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51801091) and the Provincial Natural Science Foundation of Liaoning of China (Grant Nos. 201602360, 20180550484).

† Corresponding author. E-mail: yfshao@alum.imr.ac.cn