

单层 Janus MoSSe 在不同手性角单轴拉伸应变下力学性质的第一性原理研究*

李祗烁¹⁾ 曹欣睿¹⁾²⁾ 吴顺情¹⁾ 吴建洋¹⁾ 文玉华¹⁾ 朱梓忠^{1)2)†}

1) (厦门大学物理科学与技术学院, 厦门 361005)

2) (厦门大学, 福建省理论和计算化学重点实验室, 厦门 361005)

(2025 年 4 月 3 日收到; 2025 年 5 月 17 日收到修改稿)

单层 Janus MoSSe 不同于其母体材料 MoS₂ 和 MoSe₂, 由于其结构的不对称性, 因此研究其在单轴应变下独特的力学性质具有重要意义. 采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 计算了对称性破坏下的单层 Janus MoSSe 材料在不同手性角下单轴拉伸应变的力学性质. 结果表明, 当应变不超过 5% 时, 应力-应变曲线在不同手性角下表现出各向同性的特点; 当应变超过 5% 且 Mo—S 键与 Mo—Se 键未断裂时, 不同手性角下的应力-应变曲线表现出较强的各向异性的力学响应. 单层 Janus MoSSe 的强度和刚度具有高度的各向异性 and 手性依赖. 相比之下, 其平面内刚度在不同的手性角下保持不变. 计算还表明, 包含电子间多体相互作用的第一性原理计算方法在确定这种材料的强度和刚度方面具有重要的作用. 本研究为单层 Janus MoSSe 基纳米力学器件的构建和开发提供了参考.

关键词: 单层 Janus MoSSe, 应力, 应变, 力学性质, 第一性原理计算

PACS: 62.25.-g, 68.60.Bs, 81.40.Jj, 71.15.Mb

DOI: 10.7498/aps.74.20250437

CSTR: 32037.14.aps.74.20250437

1 引言

2004 年, Novoselov 等^[1] 成功地从石墨中剥离出了稳定的碳原子单层, 即石墨烯. 从那时起, 石墨烯由于具有优异的物理性能引起了极大的关注^[1-4]. 但是由于石墨烯的带隙为零, 这限制了其在电子学等领域中的应用. 对具有较大带隙的新型二维 (2D) 材料的需求促使人们对石墨烯之外的许多二维材料进行了研究, 其中单层 MoS₂ 以及二维过渡金属硫化物 (TMD) 得到了特别的重视. 作为 2D TMDs 家族一个新的衍生物, 单层 Janus MoSSe 已经成功地在实验上得以合成^[5,6]. 单层 Janus MoSSe 是通过 Se 原子取代 MoS₂ 中单侧的

S 原子而得到的. 这种 MoSSe 在 2H 结构相中保持了规则的 MX₂ 型单层结构^[5,6]. 由于 Se 和 S 不同的原子半径和电负性, 在垂直于 MoSSe 平面的方向上产生了平面外电场, 同时由于垂直于 MoSSe 层平面方向上的对称性被打破, 预示着 Rashba 自旋分裂以及巨大的面内和垂直平面的压电性^[7]. 研究者们采用了多种手段来调制 MoSSe 的性质, 并利用其独特的物理性质进行多种实际应用, 例如, 应用在二次谐波 (SHG) 效应的产生中^[5]、作为高效的光催化剂分解水^[8,9]、应用于析氢反应中并表现出优异的电化学催化性能^[10,11]、光电探测及场致发射器件^[12], 以及利用其点缺陷诱导的应变可调铁磁性从而应用于自旋电子学中^[10].

在力学性质方面, 对石墨烯^[13] 和六方氮化硼

* 国家自然科学基金 (批准号: 11874307) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zzh@xmu.edu.cn

(hBN)^[14] 二维材料的各向异性强度和韧度以及分子动力学对于单层 Janus MoSSe 的沿 ZZ 和 AC 方向的力学性质^[15] 已有报道. 但对于单层 Janus MoSSe 的各向异性力学性质 (包括应力-应变关系、平面内刚度、强度和韧度等) 的相关研究还未见报道. 本文采用第一性原理的计算方法, 通过施加不同手性角的拉伸应变, 系统地计算了单层 Janus MoSSe 的面内刚度、强度和韧度. 结果表明, 单层 Janus MoSSe 的强度和韧度具有高度的各向异性和手性依赖. 相比之下, 在不同的手性角下, 它的平面内刚度保持不变. 本研究有助于确定单层 Janus MoSSe 在一些外部极端条件下的可靠性, 从而为基于该材料的二维异质结构设计和力学性能调控策略提供指导.

2 计算方法

本文的计算基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT), 采用基于投影缀加波 (projector augmented-wave, PAW) 的方法框架^[16,17], 其计算程序包为 VASP (Vienna *Ab initio* simulation package)^[18,19]. 交换关联泛函选取的是广义梯度近似下的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函^[20,21]. 平面波截断动能为 500 eV, 布里渊区的积分采用了 Monkhorst-Pack 特殊 k 点取样方法^[20], k 点网格为以 Γ 中心的 $20 \times 20 \times 1$ 格点. 系统总内聚能的收敛标准为 10^{-4} eV, 本计算对原子位置和晶格参数都进行了充分优化, 其中每个原子的 Hellmann-Feynman 力的收敛标准为 0.01 eV/Å. 为了避免相邻单层 Janus MoSSe 之间的相互作用, z 方向使用 20 Å 的真空层. 整个计算考虑电子的自旋极化效应.

3 结果和讨论

2H 相是单层 Janus MoSSe 最稳定的结构相^[5,6,22], 其俯视图如图 1(a) 所示. 本文中计算 MoSSe 的物理性质时仅限于最稳定的 2H 相. 单层 Janus MoSSe 是一种夹层结构, 其中 Mo 原子位于中间层, S 原子和 Se 原子分别位于上表面层和下表面层. S 原子直接位于 Se 原子的正上方, S 和 Se 原子都有 3 个相邻的 Mo 原子.

图 1(a) 为单层 Janus MoSSe 的俯视图和侧视图

图, 其中黑色的菱形框为计算中所采用的原胞. 为了说明在计算中如何实现沿任意手性角施加负载, 如图 1(b) 所示, 将原始晶格中的锯齿型方向定义为 x_0 轴. 接下来, 将 x_0 轴逆时针旋转手性角 θ 到一个新的方向, 形成一个新的坐标轴, 记为 x 轴, 如图 1(c) 所示. x_0 轴是固定沿着锯齿型方向的, 而 x 轴则随着手性角 θ 的变化而变化. 这里, 手性角 θ 即为 x 轴和 x_0 轴之间的夹角. 然后, 沿 x 轴施加一个负载以产生拉伸应变, 参见图 1(c), (d). 本计算中, 系统沿 x 轴方向上做单轴形变, 所施加的每一个应变都比上一步高 1%, 而体系在垂直于 x 轴的方向可以弛豫, 以实现泊松收缩. 根据六角晶格的六重对称性, 只需要研究物理量在手性角 θ 为 0° — 30° 范围内对单轴应变的响应. 本文中计算了 10 个不同手性角下的物理性质, 即 $\theta \in \{0^\circ, 3^\circ, 6^\circ, 9^\circ, 12^\circ, 15^\circ, 18^\circ, 21^\circ, 24^\circ, 27^\circ, 30^\circ\}$. 其中, 0° 的手性角对应于锯齿方向, 而 30° 的手性角对应于扶手椅方向. 对材料施加应变实际上相当于从图 1(b) 到图 1(c) 时人为地给定一定量的变形.

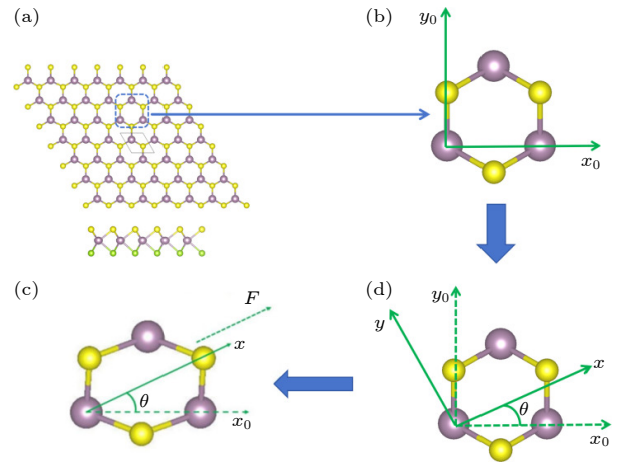


图 1 (a) 单层 Janus MoSSe 的俯视图和侧视图, 图中实线的菱形为计算时的原胞; (b) x_0, y_0 坐标轴示意图; (c), (d) 手性角 θ 的定义和在手性角 θ 下施加在晶格上负载的方向, Mo, S 和 Se 原子分别用紫色、黄色和绿色小球表示

Fig. 1. (a) Top view and side view of Janus monolayer MoSSe, the solid line rhombuses represent the unit cell; (b) x_0, y_0 coordinate system; (c), (d) definition of chiral angle θ and the loading direction applied on the lattice with a chiral angle θ , the Mo, S and Se atoms are shown by purple, yellow and green balls, respectively.

计算得到的单层 Janus MoSSe 的应力-应变曲线如图 2(a) 所示, 在小应变时 (低于 5% 时), 对于所有的手性角, 应力-应变曲线均显示近似的线性行为, 应力-应变响应对所有的手性角均表现出共

同的各向同性的特征, 这时应力-应变关系中的一阶系数主导了体系的力学行为. 对于石墨烯, 将其强度表达至四阶多项式时的结果能够与 DFT 的模拟结果符合良好, 即 DFT 结果可以代表四阶弹性常数, 其公式为 $\sigma(\varepsilon) = C_1\varepsilon + C_2\varepsilon^2 + C_3\varepsilon^3 + C_4\varepsilon^4$, 其中 σ 和 ε 分别表示沿加载方向的应力和应变, C_i 表示第 i 阶弹性系数. 其中一阶弹性模量 C_1 由以下公式计算: $C_1 = \sigma \cdot C/\varepsilon$, 其中 C 表示载荷转换系数 (即完全弛豫后单层 MoSSe 的厚度). 通常, 使用一阶弹性模量 C_1 来描述平面内刚度, 即杨氏模量. 从图 2(a) 看出, 在应变大于 5% 之后曲线出现巨大的非线性行为, 故平面内刚度由零应变下应力-应变曲线的斜率来计算. 当应变超过 5% 时, 应力-应变曲线开始表现出各向异性的力学响应, 而且不同手性角下的力学响应不同. 随着应变的不断增大, 各向异性的力学响应愈加强烈, 手性角越大, 应力也越大. 这可以归因于弹性性能的高阶项 (因为一阶项只给出了体系的线性行为). 这种现象在其他的二维体系中也有发现, 如在石墨烯^[14] 和六方氮化硼 (hBN) 中^[14].

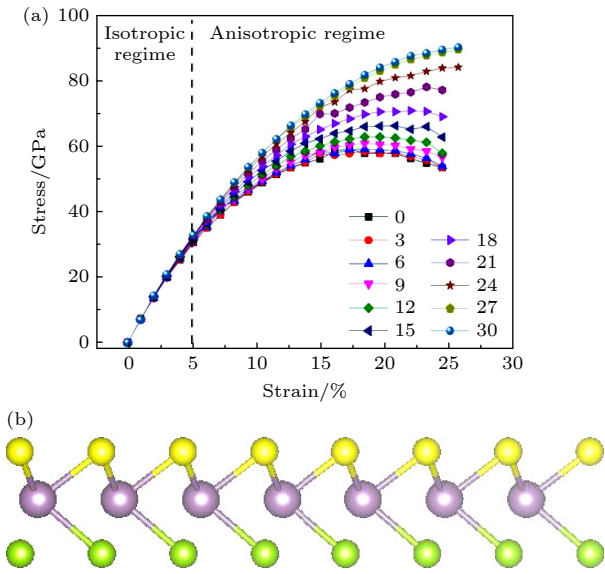


图 2 (a) Janus MoSSe 在不同手性角下 (0° — 30° 范围) 的应力-应变曲线, 垂直虚线表示晶格各向同性和各向异性响应之间的边界; (b) 单层 Janus MoSSe 断裂结构的侧视图
Fig. 2. Stress-strain curve under different chiral angles (between 0° — 30°) of Janus MoSSe, the vertical dashed line indicates the boundary between isotropic and anisotropic response of the lattice; (b) side view of the fractured structure of monolayer Janus MoSSe.

从手性角为 0° 的应力-应变关系 (图 2) 中可以得到 $C_1 = 109.58 \text{ N/m}$, 这与稳定的 2H-MoSSe 相

的结果 106 N/m 相差不到 3.3%^[23]. 为了深入了解 Janus MoSSe 在小应变下弹性模量的手性依赖性, 图 3 为归一化的平面内刚度的手性角依赖关系图, 即用极坐标表示 (数据用 $\theta = 0^\circ$ 处的值归一化, 归一化因子取自 MoS₂ 的 $C_1(0^\circ)$, 其值为 121.01 N/m , 该结果与先前的研究结果 (116 N/m)^[12] 符合得很好). 扶手椅方向和锯齿型方向的弹性模量分别为 109.58 N/m 和 105.897 N/m , 差别只有 3.69 N/m , 因此所有手性角的平面内刚度近似都是各向同性的. 由于 MoSSe 晶体结构的各向异性, 其固有的力学响应应该也是各向异性的, 因此 MoSSe 的非线性力学行为必须由应力-应变关系中的高阶项引起. 为了对比, 还计算了组成 MoSSe 的二维母体材料 MoS₂ 以及 MoSe₂ 的平面内刚度, 如图 3 所示, 在所有手性角下, MoS₂ 的平面内刚度值都大于 MoSe₂ 和 MoSSe. 对于 MoSSe, 其平面内刚度介于其两种母体材料之间, 而 MoSe₂ 的平面内刚度最小. 同时注意到, MoS₂ 以及 MoSSe 的平面内刚度显示出明显的各向同性特征 (其中 MoS₂ 在扶手椅和锯齿型方向的差异只有 0.45%). MoSe₂ 的平面内刚度则呈现出较明显的各向异性, 其中扶手椅和锯齿型方向的差异达到了 3.71%, 在较高手性角下, MoSe₂ 的刚度与 MoSSe 趋于接近. 这些结果说明, MoSe₂ 结构上的各向异性对于其平面内刚度的各向异性的影响比 MoS₂ 和 MoSSe 材料要大.

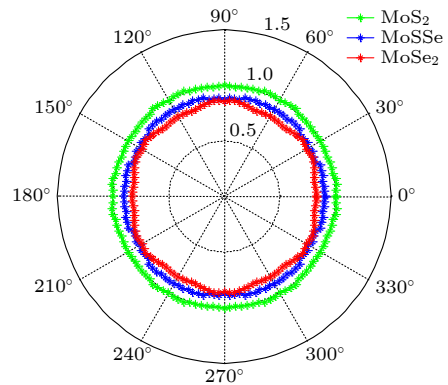


图 3 MoSSe 以及其母体材料 MoS₂ 和 MoSe₂ 的归一化平面内刚度的手性角依赖关系 $C_1(\theta)/C_1(0^\circ)$, 归一化因子取自 MoS₂ 的 $C_1(0^\circ)$, 其值为 121.01 N/m
Fig. 3. Chiral angle dependence of normalized in-plane stiffness $C_1(\theta)/C_1(0^\circ)$ of MoSSe and its parent materials MoS₂ and MoSe₂, the normalization factor is taken from MoS₂, which has a value of 121.01 N/m .

对于所有的手性角, 当体系的应变值达到一定值后, 应力-应变曲线会急剧下降 (即应变软化效

应, 参见图 2). 超过这些临界应变值, Janus MoSSe 中将发生键断裂. 由于 Se 原子的半径较大, Mo—Se 键将比 Mo—S 键为弱, 故 Mo—Se 键将比 Mo—S 键先断裂, 如图 2(b) 所示. 由图 2(a) 可见, 对于 0° — 21° 的手性角, 临界应变值为 17.26%—23.24%, 而对于 24° — 30° 的手性角, 临界应变值均为 25.72% (详见表 1). 该结果与其他二维材料 (例如石墨烯^[16] 和 hBN^[17]) 的结果不同. 在临界应变值方面, 对于石墨烯^[10], 在手性角为 30° 时最大和最小断裂应变分别为 33% 和 24%; 对于 hBN^[17], 在手性角为 30° 时, 最大断裂应变为 60% 以下, 最小断裂应变 (在 0° 时) 在 20% 左右. 对于 MoSSe、石墨烯和 hBN 三种材料, 锯齿型方向 (0°) 的断裂应变最小, 而扶手椅方向 (30°) 的断裂应变最大 (注意到所有这 3 种二维材料的结构均为六角对称).

表 1 手性角为 0° — 30° 时的临界应变值
Table 1. Critical strains for chiral angles from 0° to 30° .

手性角/ $^\circ$	临界应变/%	手性角/ $^\circ$	临界应变/%
0	17.258	18	22.019
3	18.43	21	23.239
6	18.43	24	25.716
9	18.43	27	25.716
12	18.43	30	25.716
15	20.811		

随着手性角的增大应力也会增大, Janus MoSSe 中的裂纹最终会形成并沿锯齿型方向扩展. 对于未施加载荷的 Janus MoSSe 晶格而言, 当施加应力时, 由于系统的对称性 (以及绝对零度下没有随机热涨落造成的能量分布不均或原子位置的随机偏移), 对于由大量六边形结构组成的二维 MoSSe 而言, 每个单胞随着应力的变化情况将是一样的. 变形能均匀分布于各六边形之间, 且不存在局部成核的优先位置. 当施加载荷而出现对称破缺时, 每个六边形的结构变形将是不对称和不均匀的, 但在任意两个六边形之间是相同的. 对于二维蜂窝状结构, 六边形中的 S (或 Se) 原子有 3 个近邻的 Mo 原子, 形成 3 个 Mo—S (或 Mo—Se) 键. 对于沿着扶手椅方向施加应力的情况, 只有一个键伸长最长, 而对于沿着锯齿型方向施加应力有两个键伸长最长, 因此, 对于由大量 MoSSe 晶胞组成的二维材料体系, 当加大应力, 不管是沿着何种手性角, 材料的裂纹都会沿着锯齿型方向传播.

原子间化学键的不均匀形变导致材料宏观强度和韧性的各向异性. 对于由大量 MoSSe 晶胞组成的现实材料, 当不考虑热运动涨落导致的原子间间距不同时, 理想强度表示在断裂前沿着加载方向最大可能的应力. 本研究中, 最大应力来自于计算所得的应力-应变关系 (图 2). 当力 F 以手性角 θ 施加于负载产生单轴应变时, 力沿锯齿型方向的分量为 $F_\theta = F \cos \theta$. 应力 σ_{loading} 对于手性角的依赖关系可以由关于 θ 的应力 σ_{zigzag} 得到:

$$\sigma_{\text{zigzag}} = \sigma(\theta) = \frac{F_\theta}{A_\theta} = \frac{F \cos \theta}{A / \cos \theta} = \sigma_{\text{loading}} \cos^2 \theta, \quad (1)$$

式中, A 为手性角为 0 时垂直于锯齿型方向的平面面积, A_θ 为手性角为 θ 时垂直于加载方向的平面面积. 图 4(a) 给出了 Janus MoSSe 理想强度的手性角依赖关系, 其中离散的红点表示 DFT 的计算结果, 蓝色曲线表示近似线性模型 (见 (1) 式) 的结果. 显然, 手性角越大, 理想强度值越低, 而且理想强度曲线表现出很强的非线性特征. 根据 DFT 的计算结果, 强度的最大各向异性 (定义为沿任意方向和锯齿型方向的强度之差) 为 32.41 GPa. 值得注意的是, 这个各向异性的数值远高于石墨烯^[14] 的 14.062 GPa 和 hBN^[15] 的 13.5 GPa.

韧度为应力-应变曲线中应力对应变的积分, 反映了体系中积累的势能. 在任意加载方向上的韧度的解析模型由文献 [10] 给出:

$$\Pi_c(\theta) = \left(\frac{\lambda_\theta}{\lambda} \right) \Pi_c^{\text{zigzag}} = \left(\frac{1}{\cos \theta} \right) \Pi_c^{\text{zigzag}}, \quad (2)$$

其中, λ_θ 表示以手性角 θ 方向施加应力时, 达到最大应力后材料沿着完全分裂时的断裂路径的总长度, λ 表示所研究的二维材料的宽度, 或是当以垂直于锯齿型方向施加应力时材料的断裂长度, $\Pi_c(\theta)$ 表示手性角 θ 加载下材料的韧度, Π_c^{zigzag} 表示沿着锯齿型方向施加负载时材料的韧度. Janus MoSSe 的韧度随手性角的变化关系如图 4(b) 所示, 其中离散点表示 DFT 的计算结果, 蓝色曲线表示近似线性模型 (见 (2) 式) 的结果. 可以看出, 与理想强度时的情况不同, 手性角越大韧性值越高, 而且韧性曲线同样也表现出较强的非线性特征. 无论是理想强度还是韧性, DFT 的计算结果与近似线性模型的结果之间均存在较大的偏差. 基于 DFT 的第一原理方法, 相较于方程 (1) 和方程 (2) 的经典物理模型来说, 能够比较准确地包含电子之间的多体

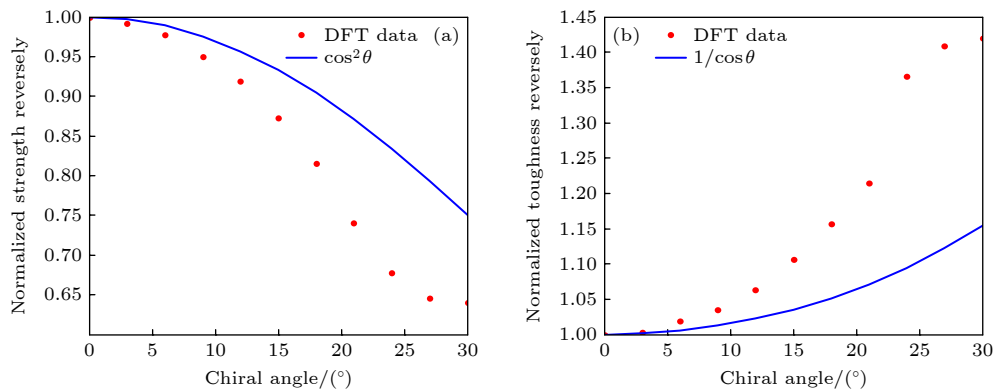


图4 单层 Janus MoSSe 的 (a) 强度和 (b) 韧度与手性角关系. DFT 的第一性原理计算结果为红点所示, 蓝色曲线为近似的线性模型的结果

Fig. 4. Chiral angle dependence of (a) strength and (b) toughness of monolayer Janus MoSSe. DFT first-principles calculation results are plotted in red dots, and the results of approximate linear model are given by blue curves.

相互作用效应. 也就是说, DFT 计算除了包含电子间的直接库仑相互作用之外, 还较好地描述了电子间复杂的交换-关联相互作用. 这里的结果表明基于 DFT 的第一性原理计算方法在确定这种材料的强度和韧度方面具有重要的作用.

4 结 论

单层 Janus MoSSe 由于结构的不对称性, 具有特别的各向异性的力学性质, 研究其在单轴应变下独特的力学行为具有重要意义. 而且, 二维材料平面内各向异性的应力-应变关系和不同手性角下的加载极限对于设计基于新型二维材料的纳米机电系统也有非常重要的意义. 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 计算了单层 Janus MoSSe 材料在不同手性角下单轴拉伸应变的力学响应. 计算结果表明, 在小应变 (低于 5%) 下, 对于所有手性角应力-应变曲线均呈近似线性关系; 当应变超过 5% 且 Mo—S 键与 Mo—Se 键未断裂时, 不同手性角下的应力-应变曲线表现出较强的各向异性的力学响应. 结果还表明, 单层 Janus MoSSe 的强度和韧性具有显著的各向异性特征, 但平面内刚度在不同的手性角下保持不变. 对于强度和韧性, DFT 的计算结果与近似线性模型的结果之间存在较大的偏差, 由于 DFT 理论较好地包含了电子间的多体相互作用, 这个结果说明包含电子间多体相互作用的第一性原理方法在确定这种材料的强度和韧度方面具有重要的作用.

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] Balandin A A, Ghosh S, Bao W Z, Calizo I, Teweldebrhan D, Miao F, Lau C N 2008 *Nano Lett.* **8** 902
- [3] Wang S, Ang P K, Wang Z Q, Tang A L L, Thong J T L, Loh K P 2010 *Nano Lett.* **10** 92
- [4] Osada M, Sasaki T 2012 *Adv. Mater.* **24** 210
- [5] Lu A Y, Zhu H Y, Xiao J, et al. 2017 *Nat. Nanotech.* **12** 744
- [6] Zhang J, Jia S, Kholmanov I, et al. 2017 *ACS Nano* **11** 8192
- [7] Dong L, Shenoy V B 2017 *ACS Nano* **11** 8242
- [8] Guan Z Y, Ni S, Hu S L 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 6209
- [9] Ji Y, Yang M, Lin H, Hou T, Wang L, Li Y, Lee S T 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 3123
- [10] Chen W, Qu L, Yao L, Hou X, Shi X, Pan H 2018 *J. Mater. Chem. A* **6** 8021
- [11] Er D Q, Ye H, Frey N C, Kumar H, Lou J, Shenoy V B 2018 *Nano Lett.* **18** 3943
- [12] Lakshmy S, Mondal B, Kalarikkal N, Rout C S, Chakraborty B 2024 *Adv. Powder Mater.* **3** 100204
- [13] Hossain M Z, Ahmed T, Silverman B, et al. 2018 *J. Mech. Phys. Solids* **110** 118
- [14] Ahmed T, Zhang Z, McDermitt C, Houssain Z M 2018 *J. Appl. Phys.* **124** 185108
- [15] Zhang Y H, Li X B, Zhan C X, Wang M Q, Pu Y X 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 046201 (in Chinese) [张宇航, 李孝宝, 詹春晓, 王美芹, 浦玉学 2023 *物理学报* **72** 046201]
- [16] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [17] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [18] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [19] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [20] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [21] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J, Fiolhais C 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [22] Tang X, Li S, Ma Y, Du A, Liao T, Gu Y, Kou L 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 19153
- [23] Shi W W, Wang Z G 2018 *J. Phys. : Condens. Matt.* **30** 215301

First-principles study of mechanical properties of Janus monolayer MoSSe under uniaxial tensile strains at different chiral angles*

LI Zhishuo¹⁾ CAO Xinrui¹⁾²⁾ WU Shunqing¹⁾ WU Jianyang¹⁾
WEN Yuhua¹⁾ ZHU Zizhong^{1)2)†}

1) (*School of Physical Science and Technology, Xiamen University, Xiamen 361005, China*)

2) (*Fujian Provincial Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Xiamen University, Xiamen 361005, China*)

(Received 3 April 2025; revised manuscript received 17 May 2025)

Abstract

The monolayer Janus MoSSe is different from its parent materials MoS₂ and MoSe₂. It is of great significance to study the unique mechanical properties of monolayer Janus MoSSe under uniaxial strain due to the asymmetry of its structure. Theoretical studies can provide useful support for improving the mechanical properties of monolayer Janus materials under strain. By using the first-principles method based on the density functional theory and combining the classical mechanics analysis, the mechanical properties of monolayer Janus MoSSe with broken symmetry under uniaxial tensile strain at different chiral angles are investigated. The results show that the stress-strain curves are isotropic at different chiral angles when the strain is less than 5%. When the strain exceeds 5% and the Mo—S bond and Mo—Se bond are not broken, the stress-strain curves at different chiral angles show strong anisotropic responses. The strength and toughness of monolayer Janus MoSSe are highly anisotropy- and chirality-dependent. In contrast, its in-plane stiffness remains constant at different chiral angles. By comparing the results from the first-principles method of quantum mechanics with those from the classical mechanics method, it is shown that first-principles calculations involving many-body interactions between electrons play an important role in determining the strength and toughness of this material. This is because the first-principles method can incorporate more accurately the many-body interactions between electrons. This study provides guidance for constructing and developing monolayer Janus MoSSe based nanomechanical devices.

Keywords: monolayer Janus MoSSe, stress, strain, mechanical properties, first-principles calculations

PACS: 62.25.-g, 68.60.Bs, 81.40.Jj, 71.15.Mb

DOI: [10.7498/aps.74.20250437](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250437)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250437](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250437)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11874307).

† Corresponding author. E-mail: zzhu@xmu.edu.cn



单层Janus MoSSe在不同手性角单轴拉伸应变下力学性质的第一性原理研究

李祗烁 曹欣睿 吴顺情 吴建洋 文玉华 朱梓忠

First-principles study of mechanical properties of Janus monolayer MoSSe under uniaxial tensile strains at different chiral angles

LI Zhishuo CAO Xinrui WU Shunqing WU Jianyang WEN Yuhua ZHU Zizhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 166201 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250437

CSTR: 32037.14.aps.74.20250437

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250437>

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

单层MoSSe力学性质的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation study on mechanical properties of Janus MoSSe monolayer

物理学报. 2023, 72(4): 046201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221815>

单层CrI₃电荷输运性质和光学性质应变调控的第一性原理研究

First-principles study of strain-tunable charge carrier transport properties and optical properties of CrI₃ monolayer

物理学报. 2022, 71(20): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221019>

基于机器学习和第一性原理计算的Janus材料预测

Prediction of magnetic Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

物理学报. 2024, 73(23): 230201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241278>

应变诱导单层NbSi₂N₄材料磁转变的第一性原理研究

First principles study of magnetic transition of strain induced monolayer NbSi₂N₄

物理学报. 2022, 71(20): 206303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220939>

双轴应变对单层Janus过渡金属硫族化合物热输运和热电性能的影响

Influence of biaxial strain effects on thermal transport and thermoelectric performance of Janus transition metal dichalcogenide monolayers

物理学报. 2025, 74(13): 137202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250295>

基于第一性原理计算单层IrSCl和IrSI的载流子迁移率

First-principles calculations of carrier mobility in monolayer IrSCl and IrSI

物理学报. 2024, 73(21): 217201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241044>