Archive of SID

بررسی خواص الاستیک دی‌سولفید مولیبدن چند لایه تحت تنش عمودی فشاری

قبادی ، نیره[1]

[1] گروه برق، دانشکده مهندسی، دانشگاه زنجان، زنجان

چکیده

در این مقاله خواص الاستیک دی سولفید مولیبدن (MoS_2) تحت تنش عمودی فشاری مورد بررسی قرار می‌گیرد. برای محاسبه منحنی تنش-کرنش این ساختار از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است. وابستگی منحنی تنش-کرنش و خواص الاستیک به تعداد لایه‌های MoS_2، ترتیب پشته‌سازی لایه‌ها و دما مورد مطالعه قرار می‌گیرد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که ثابت الاستیک عمودی، کرنش و تنش شکست به شدت وابسته به ترتیب پشته‌سازی لایه‌ها می‌باشند. همچنین با وجود اینکه افزایش دما موجب کاهش کرنش و تنش شکست می‌شود، افزایش تعداد لایه‌های MoS_2 استحکام ساختار را بهبود می‌بخشد.

Investigation of Elastic Properties of Multilayer Molybdenum Disulfide under Normal Compressive Stress

Ghobadi, Nayereh[1]

[1] *Department of Electrical and Computer Engineering, University of Zanjan, Zanjan*

Abstract

In this work the elastic properties of multilayer molybdenum disulfide (MoS_2) under normal compressive stress is investigated. Molecular dynamic simulation is used to calculate the strain distribution and stress-strain relation of structures. The dependency of the stress-strain curve and elastic properties on the number of MoS_2 layers, stacking order of layers and temperature are studied. The results reveal that the vertical elastic constants, yield strain and stress strongly depend on staking order of the MoS_2 layers. Furthermore, it can be concluded from the results that while the rise in temperature results in the decrease of yield strain and stress, the increase in the number of MoS_2 layers improve the stiffness of the structure.

PACS No .6225.

مقدمه

دی سولفید مولیبدن (MoS_2) ماده‌ای با ساختار کریستالی لانه زنبوری دوبعدی و همانند گرافین می‌باشد. در این ساختار یک لایه Mo بین دو لایه S قرار گرفته است و خصوصیات منحصر به فردی ارائه می‌دهد. برای مثال MoS_2 بالک یک نیمه هادی با شکاف انرژی ۱/۲ الکترون ولت می باشد [۱] که شکاف انرژی آن می تواند با تغییر تعداد لایه‌ها [۲]، ترتیب پشته‌سازی لایه‌ها [۳] و یا با اعمال تنش تغییر کند [٤و٥]. MoS_2 تک لایه که می‌تواند با تکنیک تراشیدن ساخته شود نیز شکاف انرژی مستقیم برابر ۱/۸ الکترون ولت [۲] و قابلیت تحرک حامل‌های بالایی دارد و می‌تواند به خوبی در ساخت ترانزیستور مورد استفاده قرار گیرد [٦]. ترانزیستورهای اثر میدانی و مدارات مجتمع بر پایه MoS_2 با نسبت جریان روشن به خاموش و چگالی جریان روشن بسیار بالا با موفقیت ساخته شده‌اند [٦-٩].

علاوه بر خصوصیات بسیار خوب الکترونیکی، MoS_2 خواص مکانیکی منحصر به فردی ارائه می‌کند که این ساختار را به ماده‌ای مهم در ساخت سیستم‌های نانومکانیکی تبدیل کرده است. MoS_2 ماجول الاستیکی حدود ۰/۲ تراپاسکال و تنش شکست حدود ۱۰ گیگا پاسکال دارد. MoS_2 در مقایسه با گرافین مقاومت بیشتری در برابر خم‌شدگی دارد و ماجول خمش حدود ۷ برابر گرافین دارد [۱۰]. تنش نقش مهمی در تغییر خصوصیات ترانزیستورهای بر پایه MoS_2 ایفا می‌کند [۱۱]، بنابراین ما در این مقاله با انجام

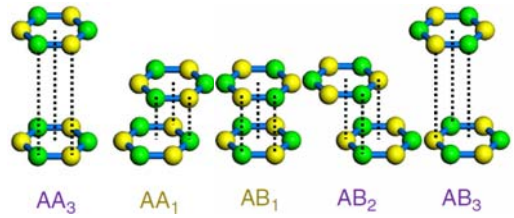
www.SID.ir

Archive of SID

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص الاستیک MoS_2 چند لایه تحت تنش عمودی فشاری می‌پردازیم و اثر تغییر تعداد لایه‌های MoS_2، ترتیب پشته‌سازی لایه‌ها و دما را بررسی می‌کنیم. ادامه مقاله شامل روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مشخصه تنش-کرنش MoS_2 و خواص الاستیک این ساختار می‌باشد.

روش شبیه سازی

لایه‌ها در MoS_2 چند لایه با ترتیب‌های پشته‌سازی مختلفی بر روی هم قرار گرفته‌اند که در شکل ۱ نشان داده شده است [۳].



شکل ۱. MoS_2 دو لایه با ترتیب‌های پشته‌سازی مختلف. اتم Mo با دایره سبز و اتم S با دایره زرد مشخص شده است. ۲ اتم S که روی هم قرار گرفته‌اند با یک دایره مشخص شده‌اند [۳].

در ساختارهای AA_1، AA_2 (مشابه AA_1 با تغییر مکان Mo و S) و AB_1 اتم‌های S در لایه بالا روی اتم Mo از لایه پایین قرار گرفته‌اند. در ساختارهای AA_2 و AB_2 اتم‌های S روی مرکز حلقه شش گوشه قرار گرفته‌اند و بالاخره در AA_3 و AB_3 اتم‌های S روی هم قرار گرفته‌اند. در میان این ساختارها AA_1 و AB_1 کمترین انرژی را داشته و پایدارترند [۳]. طول پیوند Mo-S و S-S به ترتیب ۲/۳۷٦٤ و ۳/۱۱ آنگستروم می‌باشند [۱۲]. فاصله بین لایه‌ای در MoS_2 چند لایه به صورت فاصله بین دو اتم Mo در دو لایه مجاور تعریف می‌شود و به شدت به ترتیب پشته‌سازی بستگی دارد و در جدول ۱ دیده می‌شود [۳]. ساختارهای AA_3 و AB_3 با بالاترین انرژی بزرگترین فاصله بین لایه‌ای، و ساختارهای AA_1 و AB_1 با کمترین انرژی کوچکترین فاصله بین لایه این را دارند.

جدول ۱ : فاصله بین لایه‌ای در MoS_2 چند لایه با ترتیب پشته‌سازی مختلف [۳]

	AA_1	AA_2	AA_3	AB_1	AB_2	AB_3
فاصله بین لایه ای (Å)	٦/١	٦/١	٦/٨	٦/١	٦/٢	٦/٨

با اعمال تنش عمودی فشاری لایه ها جابه جا می‌شوند. با اندازه‌گیری تغییرات فاصله بین لایه‌ای به صورت تابعی از فشار، مشخصه تنش-کرنش ساختار به دست می‌آید. کرنش برابر با $\varepsilon = (d_0 - d)/d_0$ خواهد بود که در این رابطه d_0 فاصله بین لایه‌ای در حالت تعادل و d فاصله بین لایه‌ای بعد از اعمال تنش است. برای شبیه سازی خواص الاستیک ساختار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم افزار LAMMPS انجام شده است [۱۳]. برای برهم کنش‌های صفحه‌ای بین اتم های Mo و S در صفحه MoS_2 پتانسیل استیلینگر-وبر (SW) استفاده شده است [١٤]. این پتانسیل نسبت به پتانسیل‌های ترسف و برنر ساده تر بوده و پارامترهای کمتری دارد. برهم کنش‌های بین لایه‌ای اتم‌ها با استفاده از پتانسیل لنارد-جونز ٦-١٢ (LJ12-6) مدل شده است. پارامترهای استفاده شده برای این پتاسیل در جدول ۲ آمده است [١٥].

جدول ۲. پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز ٦-١٢ (LJ12-6) [١٥]

	Mo-Mo	S-S	Mo-S
ε(eV)	۰/۰۰۰۵۸۵۹۵	۰/۰۲۰	۰/۰۰۲۸
σ(Å)	٤/٢٠	٣/١٣	٣/٦٦٥

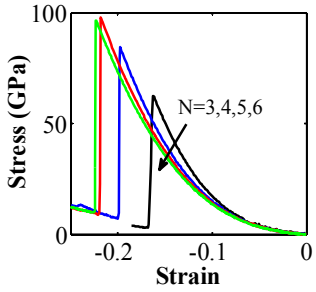
اندازه سلول واحد MoS_2 در جهت آرمچر ٥/٤٠ آنگستروم می‌باشد. سلول شبیه‌سازی شده شامل ۸×۸ سلول واحد در صفحه xy می‌باشد. قطر سلول شبیه‌سازی شده ٥ نانومتر می‌باشد که سبب می‌شود تاثیر اندازه سلول روی خواص مکانیکی به حداقل برسد [١٦]. ارتفاع سلول شبیه‌سازی شده به تعداد لایه‌های MoS_2 بستگی دارد. در دو جهت صفحه xy شرایط مرزی پریودیک در نظر گرفته شده است و برای جهت z از شرط مرزی ثابت استفاده شده است. شبیه سازی‌ها در دمای ۳۰۰ درجه کلوین و با ترموستات Nose-Hoover انجام شده است [۱۷]. گام زمانی برابر ۱ فمتو ثانیه در نظر گرفته شده است. انرژی سلول شبیه‌سازی ابتدا با روش کمینه‌سازی گرادیان انرژی کمینه شده است و سپس تنش عمودی فشاری اعمال شده است. برای اعمال تنش ابتدا دو صفحه MoS_2 بالا و پایین در جهت عمودی ثابت شده‌اند در حالیکه امکان حرکت در صفحه xy را دارا می‌باشند. سپس لایه MoS_2 بالا با سرعت ثابت در جهت پایین فشرده می‌شود که نتیجه آن کرنشی با نرخ برابر 10^9 بر ثانیه می‌باشد [۱۸].

www.SID.ir

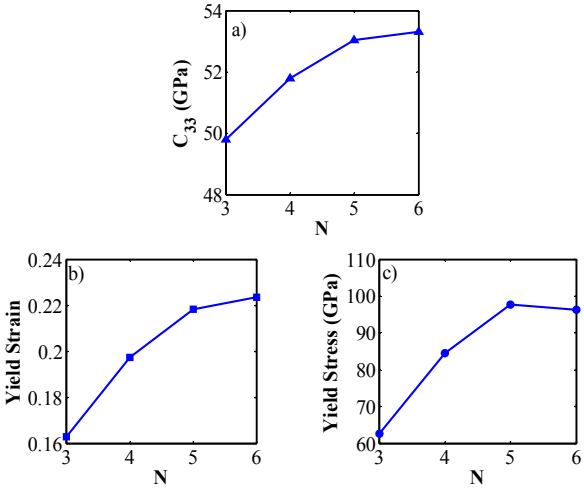
Archive of SID

نتایج و بحث

مشخصه تنش-کرنش عمودی MoS_2 چند لایه با ترتیب پشته‌سازی AB_1 و با تعداد لایه‌های مختلف در شکل ۲ نشان داده شده است. در ابتدا با افزایش کرنش، تنش به صورت خطی افزایش می‌یابد. سپس با افزایش بیشتر کرنش این افزایش غیر خطی شده و تقریبا سهموی می‌شود.



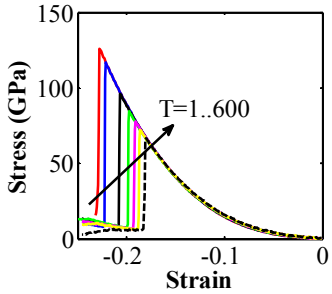
شکل ۲ : مشخصه تنش-کرنش MoS_2 چند لایه با ترتیب پشته سازی AB_1 و تعداد لایه‌های مختلف تحت تنش عمودی فشاری.



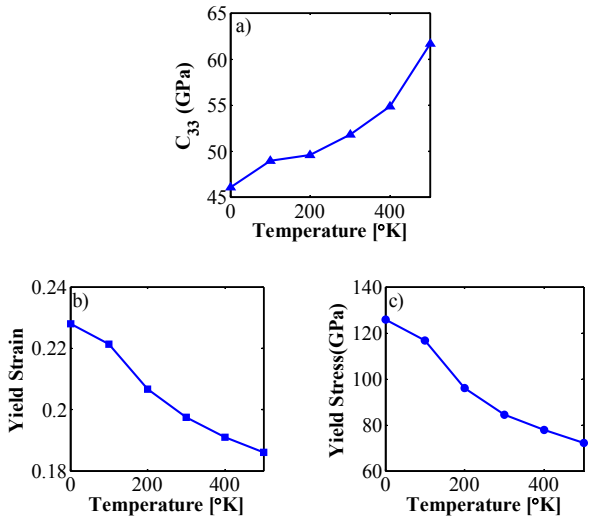
شکل ۳ : تغییرات الف) ثابت الاستیک C_{33}، ب) کرنش شکست و ج) تنش شکست با تعداد لایه‌های MoS_2 با ترتیب پشته سازی AB_1

C_{33} بیانگر استحکام ساختار در جهت عمودی می‌باشد. این پارامتر می‌تواند با استفاده از قانون هوک ($\sigma=C_{33}\times\varepsilon$) در کرنش‌های کوچک به دست آید. استفاده از مشخصه تنش-کرنش در کرنش‌های کوچک از این جهت حائز اهمیت است که بتوان اطمینان حاصل کرد که در منطقه خطی قرار داریم و قانون هوک صادق است. بیشینه کرنش و تنشی که ساختار قبل از شکست و تغییر شکل می‌تواند تحمل کند با کرنش و تنش شکست مشخص می‌شود. در شکل ۳ تغییرات C_{33} و کرنش و تنش شکست با تغییر تعداد لایه‌های MoS_2 دیده می‌شود. MoS_2 با تعداد لایه‌های بیشتر استحکام بیشتری دارد که این به دلیل تاثیر بیشتر برهم کنش وان در والس در این ساختارها می‌باشد. C_{33} به دست آمده برای این ساختار با مقدار به دست آمده در نتایج عملی یعنی ۵۲ گیگاپاسکال تطابق خوبی دارد [۱۹].

شکل‌های ٤ و ٥ مشخصه تنش- کرنش و خواص الاستیک ساختار AB_1 با ٤ لایه MoS_2 را در دماهای مختلف نشان می‌دهد. با افزایش دما نوسانات حرارتی اتم‌ها بیشتر می‌شود و بنابراین باعث کاهش کرنش و تنش شکست می‌شود [۱۲]



شکل ٤ : مشخصه تنش-کرنش MoS_2 ٤ لایه با ترتیب پشته سازی AB_1 بر حسب دما



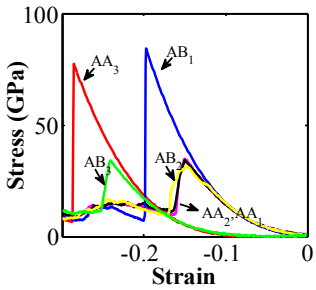
شکل ٥. تغییرات الف) ثابت الاستیک C_{33}، ب) کرنش شکست و ج) تنش شکست MoS_2 ٤ لایه با ترتیب پشته سازی AB_1 با تغییرات دما

منحنی تنش-کرنش تحت تنش عمودی فشاری برای ترتیب‌های پشته‌سازی شکل ۱، در شکل ٦ دیده می‌شود. در ساختارهای AA_3 و AB_3 اتم‌های S لایه بالا روی اتم‌های S لایه پایین قرار

www.SID.ir

Archive of SID

گرفته‌اند که منجر به نیروی دافعه شدید و فاصله بین لایه‌ای بزرگتر [۳] و در نتیجه کرنش شکست بزرگتر می‌شود. در ساختارهای AA_1، AA_2 و AB_2 اتم‌های S لایه بالا روی مرکز حلقه شش گوشه لایه پایین قرار گرفته‌اند که باعث نیروی دافعه کمتر و در نتیجه کاهش کرنش شکست می‌شود. تنش و کرنش شکست برای ساختارهای مختلف پشته‌سازی در جدول ۳ دیده می‌شود.



شکل ٦ : مشخصه تنش-کرنش MoS_2 ٤ لایه با ترتیب‌های پشته‌سازی مختلف تحت تنش عمودی فشاری

جدول ۳ : کرنش و تنش شکست MoS_2 ٤ لایه با ترتیب‌های پشته‌سازی مختلف

	AA_1	AA_2	AA_3	AB_1	AB_2	AB_3
کرنش شکست	۰/۱۵	۰/۱۵	۰/۲۸٦۱	۰/۱۹۷۵	۰/۱٤۸٤	۰/۲٤۱
تنش شکست (GPa)	۳٤/۸۷	۳٤/۳٤	۷۷/۵۸	۸٤/٤٤	۳۱/٤۳	۳٤/۱۱

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر تعداد لایه‌ها، دما و ترتیب پشته‌سازی روی خواص الاستیک MoS_2 چند لایه تحت تنش عمودی فشاری مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان داد که استحکام MoS_2 چند لایه با افزایش تعداد لایه‌ها افزایش و با افزایش دما کاهش می‌یابد. همچنین نیروی دافعه شدید بین اتم‌های S در ترتیب‌های پشته‌سازی AA_3 و AB_3 منجر به افزایش فاصله بین لایه‌ای و کرنش شکست در این ساختارها می‌شود. از تحقیق انجام شده این نتیجه به دست می‌آید که با تغییر دما، ترتیب پشته‌سازی و تعداد لایه‌های MoS_2 می‌توان خواص مکانیکی این ماده را به شدت تغییر داد.

مرجع‌ها

[1] K. K. Kam and B. A. Parkinson, "Detailed photocurrent spectroscopy of the semiconducting group VIB transition metal dichalcogenides," *J. Phys. Chem.,* vol. **86**, no. 4, (1982) 463–467.

[2] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, "Atomically Thin MoS2: A New Direct-Gap Semiconductor," *Phys. Rev. Lett.,* vol. **105**, (2010) 136805.

[3] Liu, Kaihui, et al. "Evolution of interlayer coupling in twisted molybdenum disulfide bilayers," *Nature communications*, vol. **5**, (2014) 4966.

[4] P. Lu, X. Wu, W. Guo, and X. C. Zeng, " Strain-dependent electronic and magnetic properties of MoS2 monolayer, bilayer, nanoribbons and nanotubes," *Phys. Chem. Chem. Phys*., vol. **14**, no. 37, (2012) 13035-40.

[5] S. Bhattacharyya and A. K. Singh, "Semiconductor-metal transition in semiconducting bilayer sheets of transition-metal dichalcogenides," *Phys. Rev. B*, vol. **86**, (2012) 075454.

[6] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis, "Single-layer MoS_2 transistors," *Nat. Nanotechnol*., vol. **6**, (2011) 147-150.

[7] L. Liu, S. Kumar, Y. Ouyang, and J. Guo, "Performance Limits of Monolayer Transition Metal Dichalcogenide Transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. **58**, no. 9, (2011) 3042-3047.

[8] Y. Yoon, K. Ganapathi, and S. Salahuddin, "How good can monolayer MoS2 transistors be?," *Nano Lett.,* vol. **11**, no. 9, (2011) 3768-3773.

[9] B. Radisavljevic, M. B. Whitwick, and A. Kis, "Integrated circuits and logic operations based on single-layer MoS2,"*ACS nano,* vol. **5**, no. 12, (2011) 9934-9938.

[10] J.-W. Jiang, Z. Qi, H. S. Park, and T. Rabczuk, "Elastic bending modulus of single-layer molybdenum disulfide (MoS2): finite thickness effect," *Nanotechnology,* vol. **24**, no. 43, (2013) 435705.

[11] H. J. Conley, B. Wang, J. I. Ziegler, R. F. Haglund, S. T. Pantelides, and K. I. Bolotin, "Bandgap engineering of strained monolayer and bilayer MoS2," *Nano letters*, vol. **13**, no.8, (2013) 3626-3630.

[12] J. W. Jiang, and H. S. Park, "Mechanical properties of MoS2/graphene heterostructures," *Applied Physics Letters*, vol. **105**, vol. 3, (2014) 033108.

[13] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics," *Journal of Computational Physics*, vol. **117**, no. 1, (1995) 1-19.

[14] J. W. Jiang, H. S. Park, and T. Rabczuk, "Molecular dynamics simulations of single-layer molybdenum disulphide (MoS2): Stillinger-Weber parametrization, mechanical properties, and thermal conductivity," *Journal of Applied Physics*, vol. **114**, no. 6, (2013) 064307.

[15] T. Liang, S. R. Phillpot, and S. B. Sinnott, "Parametrization of a reactive many-body potential for Mo–S systems," *Phys. Rev. B*, vol. **79**, no. 24, (2009) 245110 (Erratum: Phys. Rev. B, vol. **85**, (2012) 199903.)

[16] H. Zhao, K. Min, and N. Aluru, "Size and chirality dependent elastic properties of graphene nanoribbons under uniaxial tension," *Nano Lett.,* vol. **9**, no. 8, (2009) 3012-3015.

[17] W. G. Hoover, "Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions," *Phys. Rev. A*, vol. **31**, no. 3, (1985) 1695.

[18] N. Ghobadi, and M. Pourfath. "Vertical Tunneling Graphene Heterostructure-Based Transistor for Pressure Sensing." *IEEE Electron Device Letters,* vol. **36**, no. 3, (2015) 280-282.

[19] Y. Zhao, et al. "Interlayer breathing and shear modes in few-trilayer MoS2 and WSe2," *Nano letters*, vol. **13**, no. 3, (2013) 1007-1015.

www.SID.ir