

文章编号: 1000-5862(2019)04-0388-06

基底材料对 MoS_2 的应变场影响

吴亚俊¹, 周 行^{1, 2*}

(1. 江西师范大学物理与通信电子学院, 江西 南昌 330022; 2. 江西师范大学微纳材料与传感器件重点实验室, 江西 南昌 330022)

摘要: 利用有限元法分析对生长在 Au、Cu、 Al_2O_3 、 SiO_2 、Ni 这 5 种不同基底上的层状 MoS_2 的应变分布进行模拟仿真. 研究表明: 基底材料的泊松比不同会使得基底和 MoS_2 的 y 方向形变都不相同; 基底的杨氏模量不同会使得不同基底底部与二硫化钼(MoS_2) 顶部的应变差别不同. 在膨胀过程中, y 方向底端的拉伸应变大于中间的拉伸应变, 这会导致基底与顶端应变高于中间的应变. 因此, 基底材料的杨氏模量和泊松比与 MoS_2 的应变分布密切相关. 根据仿真结果可得, 由于 MoS_2 在 Au 和 SiO_2 基底上所受到的应变较小, 导致 MoS_2 的顶端和基底底部应变差较大, 因此容易造成剥离脱落; 而在 Al_2O_3 基底上, 由于基底材料具有较高的杨氏模量, 且与 MoS_2 比较接近, 所以 MoS_2 顶端和基底底部呈现的应变差接近. 由此可见, 在这些材料当中, Al_2O_3 更适合作为 MoS_2 的基底材料. 通过研究基底材料的应变场分布, 能更好地对纳米材料进行调控, 从而改善器件的相关性能.

关键词: 基底; MoS_2 ; 杨氏模量; 泊松比; 应变; 有限元

中图分类号: O 469 **文献标志码:** A **DOI:** 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2019.04.10

0 引言

2 维材料是指电子仅可在 2 个维度的非纳米尺度(1 ~ 100 nm) 上自由运动(平面运动) 的材料, 如纳米薄膜、超晶格、量子阱等^[1]. 由于这类材料单层可以达到 1 nm 以下的厚度, 因此不仅拥有极佳的物理性质, 还被广泛地应用在器件方面, 也是近年来最受关注的材料之一. 其中, 石墨烯拥有较好的导电性和光学性能, 被认为是极具潜力的材料. 然而, 由于零带隙特性, 石墨烯难以应用在电子器件等方面^[2]. 针对这一问题, 有着类似的层状结构且拥有直接带隙的单层 MoS_2 在纳米电子学和光电子器件方面具有更为出色的表现, 例如在高开关比、低功耗逻辑器件等领域中. 二硫化钼块材原本是间接带隙半导体, 层与层之间依靠范德华力相结合, 通过机械剥离^[3-4] 的方式可以得到正好是直接带隙半导体(带隙宽为 1.9 eV) 的单层.

近年来, 随着科技的发展, 有关 MoS_2 的研究日新月异, 相关的应用更是层出不穷. B. Radisavljevic 等^[5] 和 Zhang Xian 等^[6] 将单层 MoS_2 应用在场效应晶体管中. 而通过文献 [7] 对单层 MoS_2 进行研究,

Yin Zongyu 等^[8] 则进一步将其改进成可用于光检测的光晶体管^[9]. Hee Sung Lee 等^[10] 又将双层 MoS_2 和 3 层 MoS_2 制作成光晶体管并加以应用. W. Choi 等^[11] 将 MoS_2 做成薄膜晶体管, 可以制成新型光传感器. MoS_2 不仅在器件上有所应用, 而且在析氢方面也有着极大的潜能^[12-16], 例如 Tan Yongwen 等^[17]、Yang Ya 等^[18] 和 Shi Jianping 等^[19] 做了很多相关研究.

对于各种 MoS_2 的器件而言, 采用不同的基底生长会导致 MoS_2 受到的应变不同, 因而也会影响器件的性能. 因此, 研究生长基底对 MoS_2 器件性能的影响, 分析 2 者之间的内在关联有十分重要的意义. 通过对此力学性能的研究, 有可能将 MoS_2 器件制成功能元件^[20]. 应变为调控纳米结构的形态和微观结构提供了一种思路, 改善器件的相关性能^[21-22].

1 模拟实验

通过有限元分析(FEA, Finite Element Analysis) 模拟了 MoS_2 和 WS_2 在 Au、Cu、 Al_2O_3 、Ni、 SiO_2 这 5 种不同的基底上施加 1% 的横向广义平面应变的条件下 Von Mises 总应变场分布. 近年来, 有限元

收稿日期: 2018-11-16

基金项目: 国家自然科学基金(51761017, 51661012, 51461019) 资助项目.

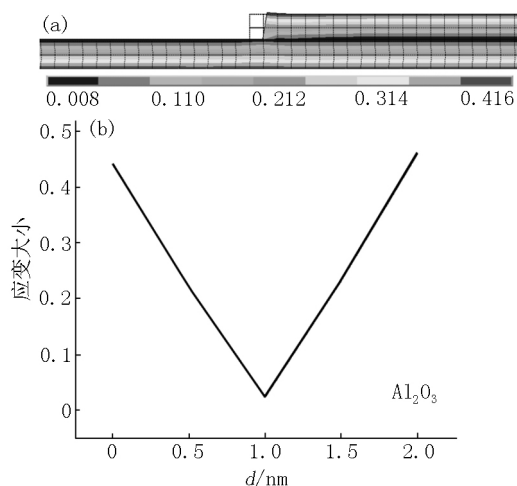
通信作者: 周 行(1988-), 男, 江西南昌人, 博士, 主要从事纳米材料研究. E-mail: 408958049@qq.com

计算已成功地应用于材料变形的连续建模^[23],例如利用有限元对纳米材料的应变分布进行仿真模拟^[24-25].通过连续弹性 FE 方法和原子应变方程可以使得仿真结果与实验较为吻合^[26-27],并且仿真结果能够更加直观地反映出纳米材料的弹性各向异性、热膨胀和 3 维形貌等参数.应变分布的有限元模型基于如下假设:将层状 MoS_2 和 WS_2 转移到 Au、Cu、 Al_2O_3 、Ni、 SiO_2 基底上,施加载荷使基底边界固定,对 MoS_2 则不施加边界固定,再施加 1% 的横向广义平面应变的条件. Au、Cu、 Al_2O_3 、 SiO_2 、Ni 的杨氏模量分别为 79.5、123.0、360.0、55.6、200.0 GPa. Au、Cu、 Al_2O_3 、 SiO_2 、Ni 的泊松比分别为 0.42、0.35、0.24、0.16、0.31^[28-33].在仿真模拟中最为关键的是设置广义平面应变的元素类型和施加广义平面应变载荷.

2 结果与讨论

图 1 ~ 图 5 分别展示了层状 MoS_2 在 Al_2O_3 、Ni、Cu、Au、 SiO_2 基底上施加 1% 的横向广义平面应变条件下 Von Mises 总应变分布图和应变分布数据图.

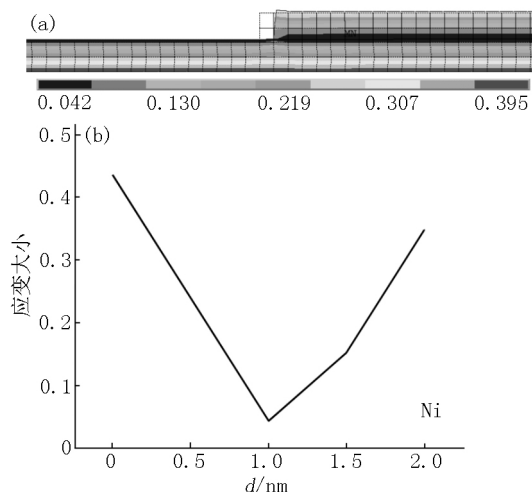
从层状 MoS_2 在 Al_2O_3 上的 Von Mises 总应变分布图 1(a) 和应变分布数据图 1(b) 中可以看出,在 Al_2O_3 基底最下方 $y=0$ 时应变非常大,在层状 MoS_2 最上方 $y=2.0$ 时应变也非常大,在 $0 \leq y \leq 1.0$ 区间中 Al_2O_3 基底的应变减小速度非常快,在 $1.0 \leq y \leq 2.0$ 区间中层状 MoS_2 的应变增加速度非常快,在 Al_2O_3 基底和层状 MoS_2 的中间 $y=1.0$ 时产生的应变最小.



(a) 层状 MoS_2 在 Al_2O_3 上的 Von Mises 总应变分布图; (b) 应变分布数据图.

图 1 层状 MoS_2 在 Al_2O_3 上的 Von Mises 应变分布示意图

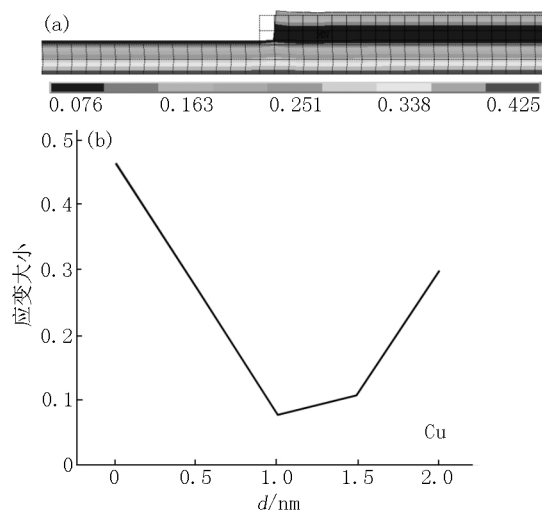
从层状 MoS_2 在 Ni 上的 Von Mises 总应变分布图 2(a) 和应变分布数据图 2(b) 可以看出,在 Ni 基底最下方 $y=0$ 时应变非常大,在层状 MoS_2 最上方 $y=2.0$ 时应变较大,在 $0 \leq y \leq 1.0$ 区间中 Ni 基底的应变减小速度非常快,在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中层状 MoS_2 的应变增加速度较快,在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中层状 MoS_2 的应变增加速度非常快,在 Ni 基底和层状 MoS_2 的中间 $y=1.0$ 时产生的应变最小.



(a) 层状 MoS_2 在 Ni 上的 Von Mises 总应变分布图; (b) 应变分布数据图.

图 2 层状 MoS_2 在 Ni 上的 Von Mises 应变分布示意图

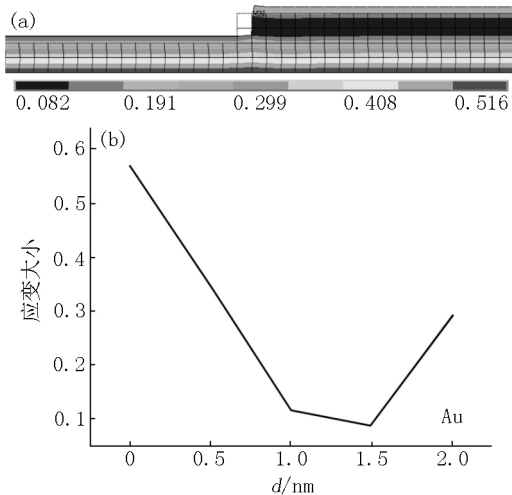
从层状 MoS_2 在 Cu 上的 Von Mises 总应变分布图 3(a) 和应变分布数据图 3(b) 可以看出,在 Cu 基底最下方 $y=0$ 时应变非常大,在层状 MoS_2 最上方 $y=2.0$ 时应变较小,在 $0 \leq y \leq 1.0$ 区间中 Cu 基底的应变减小速度非常快,在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中层状 MoS_2 的应变增加速度较慢,在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中层状 MoS_2 的应变增加速度非常快,在 Cu 基底和层状 MoS_2 的中间 $y=1.0$ 时产生的应变最小.



(a) 层状 MoS_2 在 Cu 上的 Von Mises 总应变分布图; (b) 应变分布数据图.

图 3 层状 MoS_2 在 Cu 上的 Von Mises 应变分布示意图

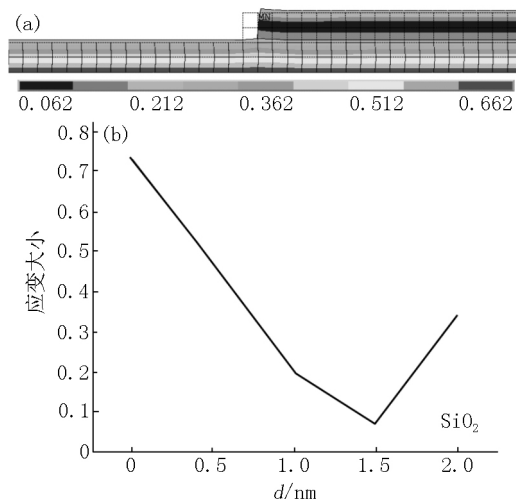
从层状 MoS_2 在 Au 上的 Von Mises 总应变分布图 4(a) 和应变分布数据图 4(b) 可以看出, 在 Au 基底最下方 $y=0$ 时应变非常大, 在层状 MoS_2 最上方 $y=2.0$ 时应变较小, 在 $0 \leq y \leq 1.0$ 区间中 Au 基底的应变减小速度非常快, 在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中层状 MoS_2 的应变减小速度较慢, 在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中层状 MoS_2 的应变增加速度非常快, 在层状 MoS_2 的中间 $y=1.5$ 时产生的应变最小。



(a) 层状 MoS_2 在 Au 上的 Von Mises 总应变分布图; (b) 应变分布数据图。

图 4 层状 MoS_2 在 Au 上的 Von Mises 应变分布示意图

从层状 MoS_2 在 SiO_2 上的 Von Mises 总应变分布图 5(a) 和应变分布数据图 5(b) 可以看出, 在 SiO_2 基底最下方 $y=0$ 时应变非常大, 在层状 MoS_2 最上方 $y=2.0$ 时应变较大, 在 $0 \leq y \leq 1.0$ 区间中 SiO_2 基底的应变减小速度非常快, 在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中层状 MoS_2 的应变减小速度较快, 在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中层状 MoS_2 的应变增加速度非常快, 在层状 MoS_2 的中间 $y=1.5$ 时产生的应变最小。



(a) 层状 MoS_2 在 SiO_2 上的 Von Mises 总应变分布图; (b) 应变分布数据图。

图 5 层状 MoS_2 在 SiO_2 上的 Von Mises 应变分布示意图

比较图 1 ~ 图 5 的 (a) 图, 显示了对各种不同的基底施加 1% 的横向广义平面应变之后, 观察到 MoS_2 在 y 方向上的形变变化。其中, Au 基底上的 MoS_2 顶端有非常明显的形变突出, 而 Cu 基底上的 MoS_2 的顶端有较为明显的形变突出, Ni 基底、 Al_2O_3 基底、 SiO_2 基底上的 MoS_2 的顶端形变突出则不明显。这是因为 MoS_2 的顶端形变突出与基底材料的泊松比有较大的关系, 5 种基底材料按泊松比从大到小的排列顺序依次为 Au、Cu、Ni、 Al_2O_3 、 SiO_2 。一般情况下, 使用泊松比大的基底材料会使得 MoS_2 产生更大的顶端形变突出。

再比较图 1 ~ 图 5 的 (b) 图, 对比 5 种基底材料底部所受应力和 MoS_2 顶部所受应力之间的应变差。在对 Al_2O_3 、Ni、Cu、Au、 SiO_2 基底施加 1% 的横向广义平面应变之后, 比较基底和 MoS_2 在 y 方向上所受到的应变 (见表 1)。对表 1 进行分析, 可以发现 SiO_2 基底底部与 MoS_2 顶部的应变差非常明显, Au 和 Cu 基底底部与 MoS_2 顶部的应变差较为明显, Ni 基底底部与 MoS_2 顶部的应变差差别不大, 而 Al_2O_3 基底底部与 MoS_2 顶部的应变差几乎为 0, 这是因为 SiO_2 的杨氏模量和 MoS_2 的杨氏模量之间的差值最大, Au、Cu 的杨氏模量和 MoS_2 的杨氏模量之间的差值较大, Ni、 Al_2O_3 的杨氏模量和 MoS_2 的杨氏模量之间的差值较小。在总应变能不变情况下, 杨氏模量大的材料所对应的应变应该更小, 如 Al_2O_3 的杨氏模量比 MoS_2 的杨氏模量大, 所以 Al_2O_3 基底底部的应变比 MoS_2 顶部的应变小。然而, 对于 Ni 来说, 尽管其杨氏模量比 MoS_2 的杨氏模量大, 但是结果却是 Ni 基底底部的应变比 MoS_2 顶部的应变大, 这是因为固定边界条件只对基底底部施加载荷导致的。在一般情况下, 基底的杨氏模量与 MoS_2 的杨氏模量的差值越大, 基底底部与 MoS_2 顶部应变的差别就越明显。

如图 6 所示, 所有基底在 $0 \leq y \leq 1.0$ 区间中的应变线性持续减小, 这是因为在基底的膨胀过程中底端受到的拉伸应变大于中间位置的拉伸应变, 而且这种应变的曲线是一种线性递减的。在 $0 \leq y \leq 1.0$ 区间中, SiO_2 基底的应变曲线均在其他基底的曲线之上, 其次是 Au、Cu 基底的应变曲线, Al_2O_3 和 Ni 基底的应变曲线在所有基底曲线的最下方, 这是因为 SiO_2 的杨氏模量最小, Au、Cu 的杨氏模量为其次, Al_2O_3 和 Ni 杨氏模量较大。在一般情况下, 在层

状 MoS₂ 下的基底的杨氏模量越小,基底所受的线性拉伸应变就越大.

表 1 对 Al₂O₃、Ni、Cu、Au、SiO₂ 基底施加 1% 的横向广义平面应变后,基底和 MoS₂ 在 y 方向上所受应变

基底材料	0(基底底部)	0.5	1.0	1.5	2.0(MoS ₂ 顶部)	基底底部与 MoS ₂ 顶部的应变差
Al ₂ O ₃	0.443 58	0.221 33	0.025 57	0.234 72	0.461 60	0.018 02
Ni	0.436 68	0.240 74	0.044 84	0.156 09	0.350 56	0.086 12
Au	0.569 13	0.347 49	0.117 92	0.092 93	0.294 74	0.274 39
SiO ₂	0.734 98	0.471 13	0.200 84	0.077 68	0.344 64	0.390 34
Cu	0.467 11	0.274 48	0.078 58	0.113 06	0.299 26	0.167 85

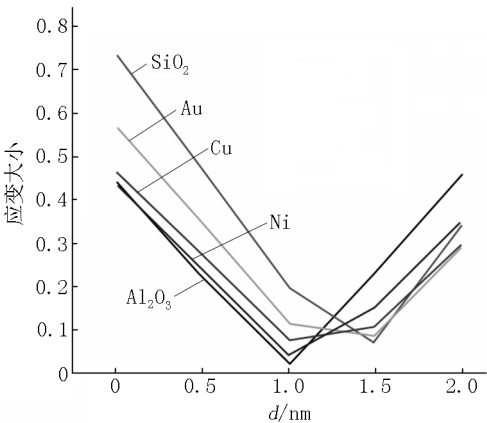


图 6 层状 MoS₂ 在 Al₂O₃、Ni、Cu、Au、SiO₂ 基底上施加 1% 的横向广义平面应变条件下的 Von Mises 应变分布数据合成图

如图 7 所示,比较 5 种不同的基底上的层状 MoS₂ 的应变曲线可知, SiO₂ 基底上的层状 MoS₂ 的应变在 $y = 1.0$ 时最大,在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中应变下降最快,在 $y = 1.5$ 时应变最小,在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中应变上升最快. Au 基底上的层状 MoS₂ 的应变在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中缓慢下降,在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中应变上升较快.在 $y = 2.0$ 时应变最小. Cu 基底上的层状 MoS₂ 的应变在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中缓慢上升,在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中应变上升较快. Ni 基底上的层状 MoS₂ 的应变在 $1.0 \leq y \leq 1.5$ 区间中

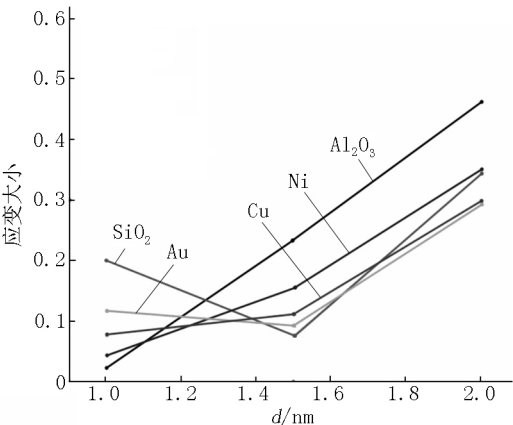


图 7 层状 MoS₂ 在 Al₂O₃、Ni、Cu、Au、SiO₂ 基底上施加 1% 的横向广义平面应变条件下的 3 个点的 Von Mises 应变分布图

上升较快,在 $1.5 \leq y \leq 2.0$ 区间中应变上升更快. Al₂O₃ 基底上的层状 MoS₂ 的应变在 $y = 1.0$ 时应变最小,在 $y = 2.0$ 时应变最大,在 $1.0 \leq y \leq 2.0$ 区间中一直上升最快.这是因为 5 种基底之间的杨氏模量和泊松比不同所导致的.

3 结论

本文通过有限元分析对各种不同基底上的层状 MoS₂ 所受到的应力进行模拟仿真,并对应变分布结果进行处理和分析.实验结果表明,各种基底上的 MoS₂ 在 y 方向上的形变均有所不同,这是因为 MoS₂ 顶端的形变突出与基底材料的泊松比有较大的关系.在一般情况下,基底材料的杨氏模量越小,基底所受的线性拉伸应变越大.不同的基底底部与 MoS₂ 顶部的应变差别不同,这是因为 5 种基底与 MoS₂ 之间的杨氏模量差的不同所导致的.一般情况下,基底的杨氏模量与 MoS₂ 的杨氏模量的差值越大,基底底部与 MoS₂ 顶部应变的差别越明显.所有基底在 y 从 0 到 1.0 这段区间上的应变直线下降,这是因为基底在膨胀过程中底端受到的拉伸应变大于中间位置的拉伸应变,而且这种应变的曲线是一种线性递减的.5 种基底的 MoS₂ 应变分布均有所不同,这是因为这些基底材料的杨氏模量和泊松比不同所导致的.研究基底材料的杨氏模量和泊松比与 MoS₂ 的应变分布之间的关系,分析这其中的内在关联对于器件的研究有着非常重要的意义,同时也为利用应变对器件的性能进行调控和改善提供了新的方式.

4 参考文献

[1] 何学侠,刘富才,曾庆圣,等.2 维材料双电层场晶体管的研究[J].化学学报,2015,73(9):924-935.
[2] 张旭.大面积石墨烯及其透明导电膜的制备与性能研

- 究 [D]. 兰州: 兰州交通大学 2013.
- [3] Radisavljevic B ,Radenovic A ,Brivio J ,et al. Single-layer MoS_2 transistors [J]. *Nature Nanotechnology* ,2011 ,6 (3) : 147-150.
- [4] Coleman J N ,Lotya M ,O'Neill A ,et al. Two-dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials [J]. *Science* 2011 331(6017) : 568-571.
- [5] Radisavljevic B ,Radenovic A ,Brivio J ,et al. Single-layer MoS_2 transistors [J]. *Nature Nanotechnology* ,2011 ,6 (3) : 147.
- [6] Zhang Xian ,Sun Dezheng ,Li Yilei ,et al. Measurement of lateral and interfacial thermal conductivity of single-and bilayer MoS_2 and MoSe_2 using refined optothermal Raman technique [J]. *ACS Applied Materials and Interfaces* , 2015 7(46) : 25923-25929.
- [7] Gourmelon E ,Lignier O ,Hadouda H ,et al. MS_2 (M = W , Mo) photosensitive thin films for solar cells [J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells* ,1997 46(2) : 115-121.
- [8] Yin Zongyou ,Li Hai ,Li Hong ,et al. Single-layer MoS_2 phototransistors [J]. *ACS Nano* 2011 6(1) : 74-80.
- [9] Wang Qinghua ,Kalantar-Zadeh K ,Kis A ,et al. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides [J]. *Nature Nanotechnology* ,2012 ,7 (11) : 699.
- [10] Hee Sung Lee ,Sung-Wook Min ,Youn-Gyung Chang ,et al. MoS_2 nanosheet phototransistors with thickness-modulated optical energy gap [J]. *Nano Letters* 2012 ,12(7) : 3695-3700.
- [11] Choi W ,Cho M Y ,Konar A ,et al. High-detectivity multi-layer MoS_2 phototransistors with spectral response from ultraviolet to infrared [J]. *Advanced Materials* ,2012 ,24 (43) : 5832-5836.
- [12] Voiry D ,Yamaguchi H ,Li Junwen ,et al. Enhanced catalytic activity in strained chemically exfoliated WS_2 nanosheets for hydrogen evolution [J]. *Nature Materials* 2013 ,12 (9) : 850.
- [13] Li Yanguang ,Wang Hailiang ,Xie Liming ,et al. MoS_2 nanoparticles grown on graphene: an advanced catalyst for the hydrogen evolution reaction [J]. *Journal of the American Chemical Society* 2011 ,133(19) : 7296-7299.
- [14] Li Dongjun ,Maiti U N ,Lim J ,et al. Molybdenum sulfide/ N-doped CNT forest hybrid catalysts for high-performance hydrogen evolution reaction [J]. *Nano Letters* ,2014 ,14 (3) : 1228-1233.
- [15] Yan Ya ,Ge Xiaoming ,Liu Zhaolin ,et al. Facile synthesis of low crystalline MoS_2 nanosheet-coated CNTs for enhanced hydrogen evolution reaction [J]. *Nanoscale* 2013 ,5(17) : 7768-7771.
- [16] Zeng Zhiyuan ,Tan Chaoliang ,Huang Xiao ,et al. Growth of noble metal nanoparticles on single-layer TiS_2 and TaS_2 nanosheets for hydrogen evolution reaction [J]. *Energy and Environmental Science* 2014 7(2) : 797-803.
- [17] Tan Yongwen ,Liu Pan ,Chen Luyang ,et al. Monolayer MoS_2 films supported by 3D nanoporous metals for high-efficiency electrocatalytic hydrogen production [J]. *Advanced Materials* 2014 26(47) : 8023-8028.
- [18] Yang Ya ,Fei Huilong ,Ruan Gedeng ,et al. Edge-oriented MoS_2 nanoporous films as flexible electrodes for hydrogen evolution reactions and supercapacitor devices [J]. *Advanced Materials* 2014 26(48) : 8163-8168.
- [19] Shi Jianping ,Ma Donglin ,Han Gaofeng ,et al. Controllable growth and transfer of monolayer MoS_2 on Au foils and its potential application in hydrogen evolution reaction [J]. *ACS Nano* 2014 8(10) : 10196-10204.
- [20] Ponraj J S ,Buffagni E ,Deivasigamani G ,et al. Studies of nanoindentation and residual stress analysis of Ge/GaAs epilayers [J]. *Semiconductor Science & Technology* , 2015 30(5) : 55004.
- [21] Jin Zuanming ,Xu Yue ,Zhang Zhengbing ,et al. Strain modulated transient photostriction in La and Nb codoped multiferroic BiFeO_3 thin films [J]. *Applied Physics Letters* 2012 ,101(24) : 242902.
- [22] Ren Wei ,Yang Yurong ,Diéguez O ,et al. Ferroelectric domains in multiferroic BiFeO_3 films under epitaxial strains [J]. *Physical Review Letters* 2013 ,110(18) : 187601.
- [23] Zingales M ,Failla G. The finite element method for fractional non-local thermal energy transfer in non-homogeneous rigid conductors [J]. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* ,2015 ,29 (1/2/3) : 116-127.
- [24] Liu G R ,Dai K Y ,Nguyen T T. A smoothed finite element method for mechanics problems [J]. *Computational Mechanics* 2007 39(6) : 859-877.
- [25] Levitas V I ,Idesman A V ,Palakala A K. Phase-field modeling of fracture in liquid [J]. *Journal of Applied Physics* , 2011 ,110(3) : 33531.
- [26] 江子雄 ,张求龙 ,袁彩雷. 不同生长环境下砷化镓纳米颗粒的应变场模拟 [J]. *光子学报* ,2013 42(2) : 186-190.
- [27] Baretin D ,Madsen S ,Lassen B ,et al. Comparison of wurtzite atomistic and piezoelectric continuum strain models: implications for the electronic band structure [J]. *Su-*

- perlattices and Microstructures 2010 ,47(1) : 134-138.
- [28] Yuan Cailei ,Jiang Zixiong ,Ye Shuangli. Strain-induced matrix-dependent deformation of GaAs nanoparticles [J]. Nanoscale 2014 ,6(2) : 1119-1123.
- [29] Yuan Cailei ,Cai Hui ,Lee Pooi See ,et al. Tuning photoluminescence of Ge/GeO₂ core/shell nanoparticles by strain [J]. The Journal of Physical Chemistry C ,2009 ,113 (46) : 19863-19866.
- [30] Yuan Cailei ,Ye Shuangli ,Xu Bo ,et al. Strain induced tetragonal SrTiO₃ nanoparticles at room temperature [J]. Applied Physics Letters 2012 ,101(7) : 71909.
- [31] Benabbas T ,Androussi Y ,Lefebvre A. A finite-element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs [J]. J Appl Phys ,1999 ,86(4) : 1945.
- [32] Pei Qingxiang ,Lu Chen ,Wang Y Y. Effect of elastic anisotropy on the elastic fields and vertical alignment of quantum dots [J]. J Appl Phys 2003 ,93(3) : 1487-1492.
- [33] Shin H ,Lee W ,Yoo Y H. Comparison of strain fields in truncated and un-truncated quantum dots in stacked InAs/GaAs nanostructures with varying stacking periods [J]. J Phys Condens Matter 2003 ,15: 3689.

The Effect of Substrate Material on Strain Field of MoS₂

WU Yajun¹ ,ZHOU Hang^{1,2*}

(1. College of Physics and Communication Electronics ,Jiangxi Normal University ,Nanchang Jiangxi 330022 ,China;

2. Laboratory of Micro Nano Materials and Sensors ,Jiangxi Normal University ,Nanchang Jiangxi 330022 ,China)

Abstract: The strain distribution of layered MoS₂ grown on Au ,Cu ,Al₂O₃ ,SiO₂ and Ni was simulated by finite element method. The results show that the deformation of base and MoS₂ in γ direction is different due to different Poisson's ratio of base materials. Due to different Young's modulus of the base ,the strain difference between the base bottom and the top of molybdenum disulfide is different. In the expansion process ,the tensile strain at the bottom of the γ direction is greater than the tensile strain at the middle ,which will cause the strain at the base and the top to be higher than that at the middle. Therefore ,Young's modulus and Poisson's ratio of base material are closely related to the strain distribution of MoS₂. According to the simulation results ,the strain of MoS₂ on the substrate of Au and SiO₂ is small. the strain difference between the top of MoS₂ and the bottom of the substrate is large ,so it was easy for MoS₂ to be peeled off. On the substrate of Al₂O₃ ,the substrate material has a high Young's modulus which is close to MoS₂. The strain difference from the top of MoS₂ is similar than the bottom of the substrate. Therefore ,among these materials ,Al₂O₃ is more suitable for MoS₂ substrate material. By studying the strain field distribution of the substrate material ,the nano materials can be better regulated and the related properties of the device can be improved.

Key words: base; MoS₂; Young's modulus; Poisson's ratio; strain; finite element method

(责任编辑: 冉小晓)