

MECHANICAL BEHAVIOUR OF MoS_2 NANOSHEETS UNDER STRESS AND ASSOCIATED FUNCTIONAL PROPERTIES

Institute/Department: Pprime Institute; Dpt. of Physics and Mechanics of Materials

Research team: Groupe Nanoplast (nanoplast.pprime.fr)

Supervisor: Christophe Coupeau (christophe.coupeau@univ-poitiers.fr)

Co-supervisor: Loranne Vernisse (loranne.vernise@univ-poitiers.fr)

3-year contract: 1768 € raw monthly salary

Keywords: 2D materials, Dicalcogenides, Surface under stress, Plasticity, Buckling/Stretching, Atomic structure, Dislocations, Mechanical behavior

Framework and objectives.

Many international researches are now oriented toward 2D materials that present the interest of an ultimate thickness of only a few atomic layers. Among them, Transition Metal Dichalcogenide (TMDC) combine a graphene-like 2D morphology with semiconductive functional properties¹. They offer new ways for technological challenges in various domains^{2,3} like microelectronics, photovoltaic or catalytic chemistry. In addition, the development of flexible devices requires a high mechanical stability under severe operating conditions. Understanding how 2D materials will respond to external applied stresses and how the morphological changes may modify, or even control, their functional properties appears consequently of primary importance in a near future.

The scientific approach recently developed at the Pprime institute (University of Poitiers, France) consists in monitoring by UHV AFM/STM the in situ evolution of surface, down to the atomic scale, at increasing stress or strain (Nanoplast equipment⁴). In particular, it allows controlling deformations on crystalline substrates and hence locally modifying the morphology of the covering thin films or foils in interaction.

Work program and means.

This PhD work will be focused on molybdenum disulfur (MoS_2) of the dicalcogenur family exhibiting semiconductor properties. The elementary sheets consist of only 3 atomic layers and present the advantage to be compatible with flexible transparent substrates⁵. The aim is to have a better understanding of their mechanical behavior under stress and to identify how their catalytic or electronic properties may be modified or enhanced.

This PhD proposal will combine experimental and theoretical work. The experimental part includes the transfer of MoS_2 nanosheets from their growth substrate to single crystalline substrates of interest like Au or Cu⁶. Their observation will then be carried out by local

probe microscopies (STM and non-contact AFM). The role of key-parameters (such as substrate materials, adhesion properties, structure and thickness of the foil, deformation temperature) will be studied. Finally, atomistic simulations using interaction potentials (for mechanical behavior) and/or DFT ab initio calculations (for electronic band structures) will be considered (collaboration with CEA-Saclay, France).

Applicant profile, prerequisites.

Masters, Diploma or equivalent degree in Physics or Physical Chemistry.

Strong background and interest in material science, especially in surface science and plasticity.

Experience with SPM techniques (STM or AFM), preferentially under UHV, and Background in physical behavior of layered materials would be appreciated.

Application deadline : 15 april 2019

Bibliography.

¹X. Yin, Q. Wang, L. Cao, et al. *Nat. Commun.* 8, 486 (2017)

²S.-S. Ding, W.-Q. Huang, Y.-C. Yang, et al. *J. Appl. Phys.* 119, 205704 (2016).

³Y. K. Luo, J. Xu, T. Zhu, et al. *Nano Lett.* 17 (6), 3877 (2017).

⁴Y. Nahas, F. Berneau, J. Bonneville, et al. *Rev. Scientific Instrum.* 84, 105117 (2013).

⁵H. D. Phan, Y. Kim, J. Lee, et al. *Adv. Mater.* 29, 1603928 (2017).

⁶M. Donglin et al. *Nano Research* 8, 3662 (2015)

COMPORTEMENT MÉCANIQUE DE FEUILLETS DE MoS_2 SOUS CONTRAINTE MÉCANIQUE ET PROPRIÉTÉS FONCTIONNELLES ASSOCIÉES

Institut/Département: Institut Pprime, Département de Physique et Mécanique des Matériaux

Equipe: Groupe Nanoplast (nanoplast.pprime.fr)

Directeur de thèse: Christophe Coupeau (christophe.coupeau@univ-poitiers.fr)

Co-encadrant: Lorraine Vernisse (loranne.vernisse@univ-poitiers.fr)

Salaire mensuel: 1768 € brut, CDD 3 ans

Mots-clés: Matériaux 2D, Dichalcogénures, Surface sous contrainte, Plasticité, Cloquage, Structure atomique, Dislocations

Contexte et objectifs.

Privé de bande interdite, le graphène n'a pour l'instant pas tenu ses promesses de révolutionner l'électronique moderne. Ce constat a orienté les recherches vers de nouveaux types de matériaux bidimensionnels dont l'épaisseur n'excède pas quelques couches atomiques. Le bisulfure de molybdène, MoS_2 , est un matériau clé de la famille des dichalcogénures de métaux de transition. Il allie une morphologie 2D de type graphène à des propriétés fonctionnelles semi-conductrices¹. Sous forme de mono-feuillets, il est constitué de seulement trois couches atomiques successives et peut ainsi s'adapter à des substrats souples et transparents². Il ouvre la voie à de nouveaux enjeux technologiques dans des domaines variés^{3,4}, tels que la micro-électronique, le photovoltaïque, la catalyse,...

L'utilisation de systèmes flexibles nécessite une grande stabilité mécanique en conditions de service et une bonne tenue dans le temps. Il apparaît ainsi nécessaire, voire essentiel, d'appréhender les différents processus d'accommodations morphologiques des films sous contraintes et d'identifier leur impact sur les propriétés fonctionnelles associées. Dans ce contexte, l'Institut P' a développé récemment un dispositif expérimental original, intitulé Nanoplast. Unique à l'international, il permet de suivre in situ, par STM/AFM sous environnement ultra-vide (UHV), l'évolution à l'échelle atomique de surfaces de matériaux soumis à une déformation/contrainte croissante⁵. Il ouvre la perspective de contrôler la géométrie et la répartition des déformations en surface d'un substrat et d'étudier leurs effets sur le film en interaction.

Programme de l'étude, moyens mis en oeuvre.

L'objectif de cette mission doctorale sera non seulement d'approfondir la compréhension du comportement mécanique des feuillets de MoS_2 sous contrainte mécanique (par imagerie UHV-STM), mais aussi d'identifier et comprendre comment leurs propriétés fonctionnelles en sont modifiées, voire améliorées (spectroscopie tunnel SPS locale, caractérisation électrochimique

globale...). Ce volet expérimental comprendra en amont la préparation des échantillons par transferts des feuillets de MoS_2 de leur substrat de croissance (SiO_2/Si) à un substrat d'étude métallique monocristallin (Au, Cu...)⁶. L'influence de différents paramètres d'intérêt sera étudiée : nature du substrat, propriétés d'adhésion, structure et épaisseur des feuillets, température de sollicitation mécanique... Enfin, des simulations par potentiels atomiques en dynamique moléculaire (volet mécanique) et/ou par calculs DFT ab initio (volet électronique) pourront être envisagées et confrontées aux résultats expérimentaux (en coll. avec le CEA-Saclay, France).

Profil du candidat, prérequis.

Etudiant(e) de Master 2 Recherche ayant des compétences en science des matériaux, particulièrement en physique des surfaces et en plasticité.

Des compétences dans l'utilisation des microscopies à champ proche sous ultra vide, ainsi qu'une connaissance du comportement physique de matériaux 2D, seraient particulièrement indiquées.

Date limite de prise de contact : 15 avril 2019

Bibliographie.

- ¹ X. Yin, et al. Nat. Commun. 8, 486 (2017)
- ² H. D. Phan, et al. Adv. Mater. 29, 1603928 (2017).
- ³ S.-S. Ding, et al. J. Appl. Phys. 119, 205704 (2016).
- ⁴ Y. K. Luo, et al. Nano Lett. 17 (6), pp 3877–3883 (2017).
- ⁵ Y. Nahas, et al. Rev. Scientific Instrum. 84, 105117 (2013).
- ⁶ M. Donglin et al. Nano Research 8, 3662 (2015)