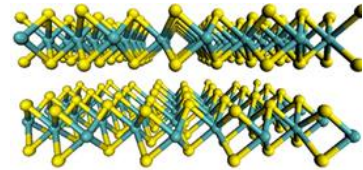


**Comportement mécanique de feuillets de MoS₂
sous contrainte et propriétés fonctionnelles associées**

Encadrants. Lorraine Vernisse (MdC), Michel Drouet (IR), Christophe Coupeau (PR)
loranne.vernisse@univ-poitiers.fr Bureau : 2E51 Tel : +33 (0)5 49 49 66 49

Mots-clés. Matériaux 2D, Surface sous contrainte, Structure atomique, Dislocations

Contexte. 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, MoS₂, est un matériau clé de la famille des dichalcogénures de métaux de transition (TMD). 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 l'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 le banc d'essai expérimental 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 ses effets sur le film en interaction.



Structure cristallographique des mono-feuillets de MoS₂ (Mo en vert, S en jaune).

Programme de travail. Les mono-feuillets de MoS₂ (d'origine commerciale et livrés sur wafers de Si) devront dans un premier temps être transférés sur substrats métalliques d'intérêt (monocristaux de Cu ou d'Au). Nous utiliserons un protocole expérimental dorénavant bien établi⁶, qui consiste à utiliser un substrat sacrificiel de PMMA élaboré par spin-coating. Les substrats revêtus seront caractérisés par AFM à l'air et spectroscopie RAMAN. Les premiers essais mécaniques sur le banc Nanoplast pourront alors être réalisés. Dans le cadre de la mission doctorale, il conviendra alors : (1) d'appréhender le comportement mécanique du feuillet en fonction de différents paramètres expérimentaux. On peut citer, entre autres, le nombre de dislocations émergentes, leur répartition, la température de sollicitation mécanique, le taux de déformation plastique imposé au substrat, l'orientation cristallographique des feuillets vis-à-vis, d'une part de la cristallographie du substrat et d'autre part, de l'axe de compression macroscopique... (2) d'identifier si les modifications morphologiques du feuillet de MoS₂, induites à l'échelle atomique lors de ces sollicitations mécaniques locales, modifient son activité fonctionnelle, telle que la prise d'oxygène ou la conductivité.

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