

Padrão de Fratura de Membranas de Janus-MoSSe: Um Estudo de Dinâmica Molecular Reativa

C. M. V. Araújo¹, M. L. Pereira Júnior², L. A. Ribeiro Júnior¹,

¹University of Brasília, Institute of Physics, Brasília, Brazil.

²Faculty of Technology, University of Brasília, Brasília, Brazil.

ciceravianafis@gmail.com

Keywords: Nanocamadas; Propriedades Mecânicas; Padrões de Fraturas; Janus; Dicalcogenetos de Metais de Transição

Os Dicalcogenetos de Metais de Transição (DMTs) são estruturas atômicas que se organizam em camadas com espessura inferior a 10 Å. Os DMTs apresentam um arranjo do tipo MX₂, onde M é um metal de transição, e X é um calcogênio (S, Se, Te) [1]. Além disso, recentemente foi sintetizado um novo tipo de DMT, o Janus de MoSSe [2]. Essa monocamada de DMT, é formada pelo empilhamento de camadas atômicas Se-Mo-S que, por sua vez, apresentam propriedades semicondutoras, e devido a sua assimetria na direção vertical, apresenta um momento de dipolo apontando da camada S para Se. Assim, estes materiais atraem considerável atenção devido a suas excelentes propriedades eletrônicas, ópticas e mecânicas, com aplicações em vários campos da tecnologia, tais como biomedicina, fabricação de dispositivos optoeletrônicos e conversão e armazenamento de energia. Dessa forma, para possíveis aplicações de nanocamadas de DMTs, uma investigação das suas propriedades mecânicas deve ser sistematicamente apresentada. Neste trabalho, simulações de dinâmica molecular totalmente atomísticas foram realizadas com o intuito de investigar as propriedades elásticas e o padrão de fratura de membranas de MoX₂ (X = S, Se e Te) e Janus-MoSSe, utilizando os potenciais reativos de Stillinger-Weber e ReaxFF. As simulações foram realizadas usando o Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS). No estudo desses sistemas bidimensionais, uma tensão uniaxial foi aplicada ao longo das direções x e y, separadamente. Os sistemas foram tratados com condição de contorno periódicas. Resultados mostram que o mecanismo de ruptura das membranas de MoX₂ ocorre através de uma rápida propagação da deformação na estrutura, seguida de uma ruptura abrupta do sistema. Os resultados também sugerem que as monocamadas apresentam alta estabilidade estrutural, com módulo de Young obtido para estes sistemas bidimensionais entre 100 e 160 GPa [3]. Com relação ao sistema MoSSe, o padrão de fratura também é avaliado. Pode-se perceber em nossos resultados que a uma deformação constante é aplicada ao sistema, o acúmulo de tensão na monocamada Janus-MoSSe apresenta um rompimento da do sistema em partes concisas, de forma que suas constantes elásticas são apresentados e demonstram alta estabilidade estrutural.

[1] CHHOWALLA, M. et al. *Nature Chemistry*, v. 5, 2013.

[2] Lu, Ang-Yu, et al. *Nature nanotechnology* 12.8 (2017): 744-749.

[2] PEREIRA JÚNIOR, M. L. et al. *Condensed Matter*, v. 5, n. 4, 2020.